

層状オキシプニクタイト (LaO)TAs (T=Mn, Fe, Ni, Zn) の構造的な研究

Structural study of the layered oxypnictides (LaO)TAs (T=Mn, Fe, Ni, Zn)

日大理工¹, 広大院理² [○]高瀬 浩一¹, 森吉千佳子¹, 黒岩芳弘²

Nihon Univ.¹, Hiroshima Univ.², [○]Kouichi Takase¹, Chikako Moriyoshi¹, Yoshihiro Kuroiwa²

E-mail: takase.kouichi@nihon-u.ac.jp

2008 年に層状オキシプニクタイト (LaO)FeAs を母体とする物質で超伝導が発見されて以来、同一構造や類似構造をもつ様々な物質に関する研究が世界中で繰り広げられ、超伝導転移温度が更新されるだけでなく、新しい熱電半導体なども発見された。

このようにこの物質群は、固体物理と機能材料との両面から大変魅力的であり、我々のグループでは、オキシプニクタイトの物性評価とその物理を理解するために様々な角度から研究を行っている。試料合成の際に必ず行われる結晶構造評価である粉末 X 線回折測定は、基本的に結晶構造の対称性の情報をもっているが、X 線は固体中の電子と相互作用をするため電子数の情報を持ち合わせている。このため、統計精度の高い回折プロファイルを得ることができるのであれば、これを逆フーリエ変換することで電荷密度の実空間における分布に関する情報が得られる。

そこで、今回、我々は、代表的な層状オキシプニクタイトで、反強磁性絶縁体の (LaO)MnAs、超伝導体の母物質 (LaO)FeAs、同じく超伝導を示す (LaO)NiAs、非磁性絶縁体の (LaO)ZnAs に対して、高輝度放射光 X 線を用いた粉末 X 線回折測定を行い、この情報をもとに電荷密度分布を得たのでその結果について報告する。

測定に用いた試料は、全て、固相反応法で作成した多結晶焼結体である。放射光 X 線粉末 X 線回折測定は、SPRING8 BL02B2 ビームラインにおいて 25 keV (波長 0.49 Å) の X 線を用いて室温で行われた。得られた回折プロファイルの解析には、Rietveld/MEM 法を用いた。

図 1 に、回折プロファイルの解析後、得られた (LaO)FeAs と (LaO)NiAs の電荷密度分布を示す。La と O の間には、有限な電荷密度が観測されることから La-O の結合は共有結合的であることがわかる。Fe(Ni)-As 間も同様、2つの原子の間には有限な電荷密度があり、共有結合的であることがわかる。また、LaO 層と FeAs (NiAs)層の間には、有効な電荷密度が存在せず、この物質が層状物質であることがわかる。各原子の大きさをマリケンの方法で決定し、電子数を数えた結果、LaO 層のチャージは、ほぼ±ゼロ、FeAs (NiAs)層もほぼ±ゼロとなっており、各層が電氣的に中性になっていることが初めて分かった。発表当日は、絶縁体の結果についても報告する。

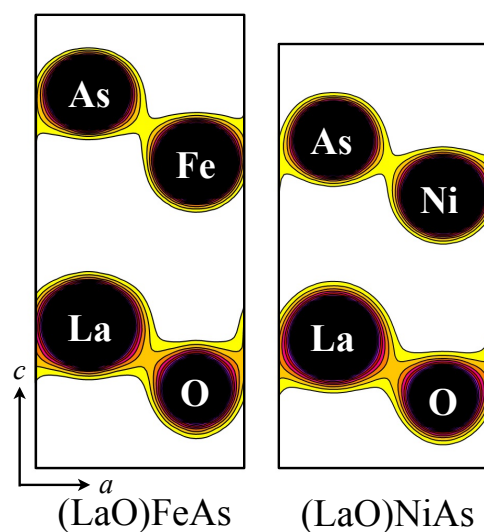


Figure 1 Charge density distributions