

放射光で見えた遷移金属元素の「隠れた秩序」 —重い元素の示す奇妙な振る舞いの理解に向けて— “Hidden order” in transition metal compounds detected by synchrotron diffraction —Toward understanding of exotic properties of heavy elements—

平井 大悟郎・東大物性研

電子はスピンと軌道の自由度を持おり、スピン軌道相互作用という相対論的な効果によって両者は結びつく。しかし電子が物質中に入ると軌道運動が阻害され、軌道自由度が失われる。特に、遷移金属イオンの最外殻にある d 軌道は空間的に広がっているため、周りのイオンからの影響を強く受ける。このため、d 電子はほとんど軌道自由度を失い、スピンの自由度だけを考えるのが普通だった。しかし近年、原子番号の大きな第 6 周期の元素では、スピン軌道相互作用が強くなり、スピンと軌道の自由度が結合していることが明らかになってきた。スピンと軌道の自由度が結合すると、「多極子」と呼ばれる複雑な電子の秩序状態が実現することが理論的に予想される[1]。しかし、この複雑な秩序は「隠れた秩序」と呼ばれることがあり、観測が困難であるため理論予想から 10 年近く観測されていなかった。

私たちは「隠れた秩序」の一種である四極子秩序の観測を目指し、放射光を利用した極めて精密な構造解析を行った。四極子秩序が起こると、原子の周りの電荷分布があるパターンを持って自己組織的に偏る。電荷の偏りは電子格子相互を通して結晶構造を変化させるため、精密に結晶構造の変形をしらべることで四極子秩序を観測することができると考えた。測定の結果、四極子秩序によって引き起こされた極めて小さな構造の変化をとらえることに成功した[2]。観測された回折パターンの変化は、最も強いピークの 0.005%以下の強度しかない超格子反射や格子が 0.09%だけ変形することで現れるピーク分裂など、放射光を利用しなければ決して観測できないほど小さなものだった。本研究で初めて d 電子の多極子秩序が観測され、今後、スピンと軌道が結合した電子がどのように相互作用しているかなどの理解が進むと考えられる。スピンと軌道の結合状態は原子番号の大きな遷移金属化合物の普遍的な性質であり、スピントロニクスなどの分野でも機能の根幹に関わっている。このため、重い元素を含む物質での新たな電子相の発見や高機能のスピントロニクス材料開発への寄与が期待される。

[1] G. Chen *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 174440 (2010).

[2] D. Hirai *et al.*, Phys. Rev. Research **2**, 022063(R) (2020).