

卒業論文概要書  
Graduation Thesis Summary

Date of submission: 01 / 26 / 2026

所属学科 Departmen	応用物理学科	氏名 Name	荒井 理沙	学籍番号 Student	1Y21B004
研究題目 Title	トリルチル型 $\text{CrTa}_2\text{O}_6$ の作製と物性			指導教員 Advisor	勝藤 拓郎

## 1. 研究背景

ルチル構造 ( $\text{AO}_2$ ) は、正方晶で金属イオン Aが  $\text{O}_6$  八面体に囲まれている構造である。トリルチル構造 ( $\text{AB}_2\text{O}_6$ ) はルチル構造において金属イオン A, Bが c 軸方向に A-B-B と配列した構造である。

$\text{CrTa}_2\text{O}_6$  はトリルチル構造をとることが知られており、逆帯磁率はキュリー・ワイス則に従い、キュリ一定数は  $s=2$  である  $\text{Cr}^{2+}$  に近い値を示すことが報告されている。このとき、 $\text{Cr}^{2+}$  の電子配置は  $3d^4$  であり、二重縮退した  $e_g$  軌道に 1 電子が入るため、ヤーン・テラー効果が生じる可能性が示唆されている [1]。

本研究では  $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  における  $3d^4$  電子配置に起因する物性の解明を目的とした。

## 2. 実験方法

原料には  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Ta}_2\text{O}_5$ 、Ta を用い、化学量論比で秤量・混合後、ペレット成形し、真空封入した石英管中で  $1050^\circ\text{C}$ 、24 時間焼成した。また X 線回折で試料評価し、磁化率、歪、低温粉末 X 線回折の測定を行った。

## 3. 実験結果と考察

$\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の逆帯磁率の温度依存性を図 1 に示す。キュリ一定数は、200K 以上では  $s=2$  に近く、200K 以下では  $s=3/2$  に近いことが分かり、200K 付近で  $\text{Cr}^{2+}$  から  $\text{Cr}^{3+}$  に変化していることが示唆される。

$\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の歪の温度依存性を図 2 に示す。200K 付近で歪が変化し、ヒステリシスが存在するため、構造相転移の可能性が示唆される。

低温粉末 X 線回折から求めた  $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の格子定数の温度依存性を図 3 に示す。200K 以下で  $a$  軸は約 1%、 $c$  軸は約 3% 減少し、格子全体が収縮していることが分かった。

以上のことから、 $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  では温度を下げるに 200K 付近で  $\text{Cr}^{2+} \rightarrow \text{Cr}^{3+}$ 、 $\text{Ta}^{5+} \rightarrow \text{Ta}^{4.5+}$  という電荷移動が起こり、Cr のイオン半径が小さくなることで格子全体が収縮するという構造相転移が生じていると考えられる。

## 4. 参考文献

- [1] M. Saes et al., J. Solid State Chem. 140, 7 (1998)

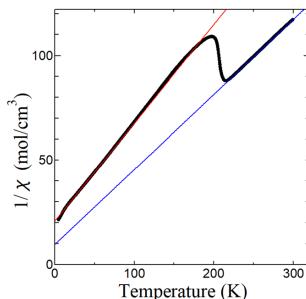


図 1  $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の逆帯磁率の温度依存性

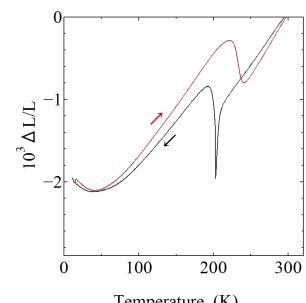


図 2  $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の歪の温度依存性

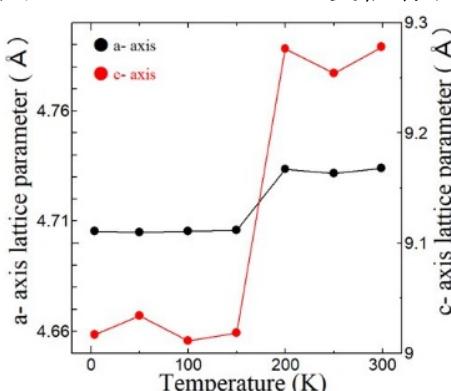


図 3  $\text{CrTa}_2\text{O}_6$  の格子定数の温度依存性