



## Gd<sub>2</sub>Seの結晶構造と磁性

メタデータ	言語: jpn 出版者: 応用物理学会北海道支部 公開日: 2016-05-24 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 木村, 昇矢, 開米, 望, 宮崎, 正範, 戎, 修二 メールアドレス: 所属:
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10258/00008903">http://hdl.handle.net/10258/00008903</a>

## Gd<sub>2</sub>Seの結晶構造と磁性

著者	木村 昇矢, 開米 望, 宮崎 正範, 戎 修二
雑誌名	応用物理学会北海道支部・日本光学会北海道地区合同学術講演会講演予稿集
巻	51/12
ページ	65-65
発行年	2016-01
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10258/00008903">http://hdl.handle.net/10258/00008903</a>

# Gd<sub>2</sub>Se の結晶構造と磁性

Crystal structure and magnetic properties of Gd<sub>2</sub>Se

事蘭工業大学 ○木村昇矢, 開米望, 宮崎正範, 戎修二

Muroran Institute of Technology; ○S. Kimura, N. Kaimai, M. Miyazaki, S. Ebisu

【序論】ガドリニウムのセレン化物 GdSe<sub>x</sub> に関して  $x \sim 1.0$ ,  $x = 1.5$ ,  $x \leq 2.0$  などの存在が知られており、これらの物性報告もなされている。しかし  $x = 0.5$  の場合、すなわち Gd<sub>2</sub>Se については PDF があるものの、その詳細な結晶構造や物性に関する報告が無い。Gd<sub>2</sub>Se を合成し、磁氣的性質や結晶構造を調べたので報告する。

【実験】フラックス(RbCl, LiCl)と原料粉末(Gd, Se)を石英管に真空封入し、650 °Cで50時間加熱後、100時間かけて540 °Cまで徐冷し、単結晶の育成を試みた。フラックスは質量比1:1で合計1gまたは2g使用し、原料試薬はモル比で1:1または2:1で合計1g使用した。得られた試料は粉末X線ディフラクトメータ(XRD)法で同定し、その磁化を SQUID 磁束計を用いて測定した。

【結果・考察】今回の方法で単結晶は得られず、全ての場合で赤褐色の粉末試料を得た。粉末 XRD 図の一例を図1に示す。PDF との比較により主要ピークの大半が Gd<sub>2</sub>Se によるものとして、六方晶系( $a = 3.8879 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.8714 \text{ \AA}$ )で指数付けできた。図から明らかなように若干の不純物も含まれているが、この同定には至らなかった。Gd<sub>2</sub>Se の PDF には空間群も記されていない。六方晶系の空間群は26種存在するが、図1に示した指数を各空間群における反射条件と照合することにより、 $P6$ ,  $P\bar{6}$ ,  $P6m$ ,  $P622$ ,  $P6mm$ ,  $P\bar{6}m2$ ,  $P\bar{6}2m$ ,  $P6/mmm$  の8種に絞り込むことができる。図2には现阶段での最良モデル(空間群:  $P6/mmm$ )による Rietveld シミュレーション結果を示す。PDF に記載された単位格子中の分子数は、 $Z = 2$  であるから、 $P6/mmm$  の  $4h$  位置( $z = 0.333$ )に Gd、 $2e$  位置( $z = 0.05$ )に Se を配して計算した結果である。図1と比較すると(110)ピークや(113)ピークが極端に高いと言う差異が見られ、十分に実験結果を再現できていない。一方で  $Z = 2$  から Gd<sub>2</sub>Se の密度を求めると  $14.8 \text{ g/cm}^3$  となり、Gd<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> や GdSe、さらには六方最密充填(hcp)構造をとる金属 Gd の2倍ほどにもなる。また剛体球原子を仮定して計算される充填率は hcp(空間群:  $P6_3/mmm$ ) の場合を超える81%となる。 $Z$  を信頼すると、Gd<sub>2</sub>Se は極めて高充填の化合物と言える。しかし、Gd<sub>2</sub>Se の PDF に記載された  $Z$  や化学式(組成)に誤りがある可能性も考慮し、現在色々なモデルを再構築してシミュレーションを継続している。磁化率測定は100 Oeの磁場を零磁場冷却(Z.F.C.)後に印加して行った。Gd 化合物は Gd<sup>3+</sup>( $4f^7$ ,  $S = 7/2$ )の半閉殻の特徴から結晶場による準位分裂がなく、一般的に低温までよく Curie-Weiss 則に従う。Gd<sup>3+</sup> の Curie-Weiss 則を仮定し、測定した磁気モーメントから不純物濃度を8 wt %と見積もった。この仮定の下で算出した Gd<sub>2</sub>Se のモル磁化率の温度依存性を図3に示す。磁化率は2.5 Kでカスプを示し、この点で反強磁性転移していると考えられる。

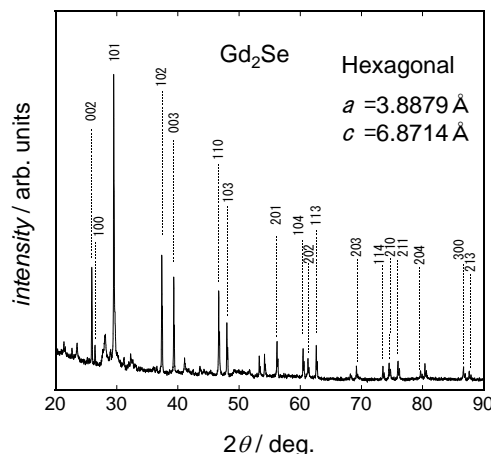


図1 Gd<sub>2</sub>Se の粉末 XRD 図

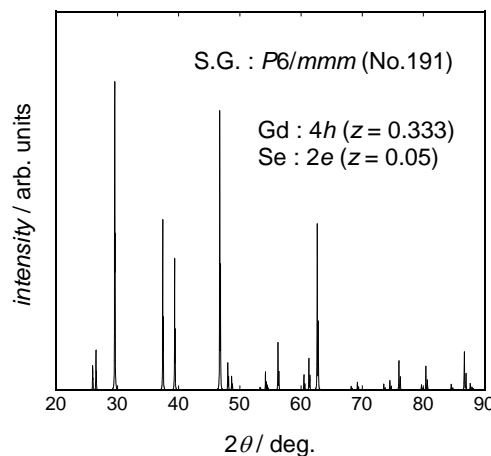


図2 Gd<sub>2</sub>Se の XRD パターンの Rietveld シミュレーション結果の一例

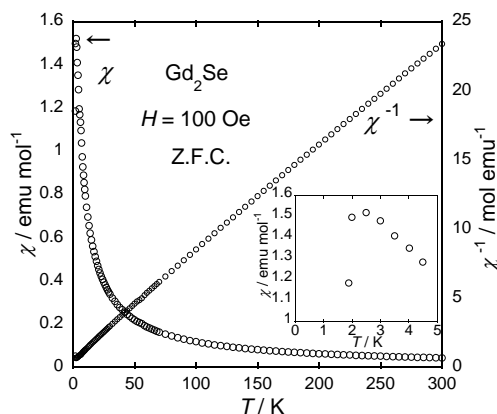


図3 Gd<sub>2</sub>Se の磁化率と逆磁化率