

## 結晶の構造相転移を NQR で見てみよう

NMR 物性研究室：中村克己 比嘉浩文 山田翔

指導教員：二木治雄 與儀護

核四重極共鳴(NQR) は核の電気四重極能率と核の周囲の電子やイオン等によって生じる電場勾配との相互作用によって生じる共鳴である。そのため、NQR は核スピン $I$  が1 以上の核で観測される。電場勾配の大きさは核の周囲の電子やイオンの配置に依存するため、結晶でのイオン性や共有性、分子運動や相転移の研究等に用いられてきた。また、超伝導等の研究にもNQR が用いられ多くの成果をもたらした。

今回、我々は、結晶の構造相転移の研究にNQR がどの様に寄与することができるかを見るために、測定試料に $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ を選び、 $^{81}\text{Br}$  NQR を行った。 $^{81}\text{Br}$  のスピンの3/2なので、共鳴線は1本出現する。これが  $n$ 本出現する場合は、 $^{81}\text{Br}$  が感じる周囲の電子やイオンの配置が  $n$ 通りあることを意味する。

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ の $^{81}\text{Br}$  NQR については、既に、寺尾博充 (徳島大 総合科学部) 達によって測定されている [1]。その結果によると、常温では、2本の共鳴線が観測されている。すなわち、結晶中でのBrには周囲の異なる2通りの状態があることがわかる。 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ を常温から窒素温度まで温度変化させるとその温度領域でいくつかの相転移が観測されたことが報告された。

今回は、常温で観測された2本の $^{81}\text{Br}$  NQR の共鳴線のうち、低い周波数のNQR 信号についてのみ研究することとした。このNQR信号は、常温で1本だった共鳴線が184K付近で2本になり、128K付近で再び1本になる。このことから、結晶中でBrの周囲の状態が温度によって変化していることがわかる。すなわち、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ に相転移が生じていることがわかる。通常、低温になる程、結晶の対称性が悪くなるので、温度が下がって相転移を起こす毎に共鳴線の数が増加する。しかし、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ の場合は、128K付近の相転移では、2本から再び1本に戻っている。いったい何が起きているのだろうか。これらの問題を検討するために、 $^{81}\text{Br}$  NQRの共鳴線の詳細な測定とスピン - 格子緩和時間 $T_1$ の測定を80K付近から300Kまで行った。

卒業研究発表では、 $^{81}\text{Br}$  NQR を通して $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgBr}_3$ に生じる構造相転移について明らかにされたことを報告する。

1) Hiromitu Terao and Tsutomu Okuda, Z. Naturforsch. 45a (1990) 343-348.