



Title	Neutron Scattering Study on Soft Phonon Modes in CsPbCl <sub>3</sub>
Author(s)	藤井, 保彦
Citation	大阪大学, 1973, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/1256">https://hdl.handle.net/11094/1256</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

[29]

氏名・(本籍)	藤	井	保	彦
学位の種類	理	学	博	士
学位記番号	第	2922	号	
学位授与の日付	昭和	48	年	9月20日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当			
学位論文題目	中性子散乱による $\text{CsPbCl}_3$ のソフトフォノンモードの研究			
論文審査委員	(主査) 教 授	山田 安定		
	(副査) 教 授	國富 信彦	教 授	金森順次郎
	教 授	大塚 順三	教 授	三井 利夫

論 文 内 容 の 要 旨

ペロヴスカイト型化合物の一つである $\text{CsPbCl}_3$ の連続的相転移の転移機構を調べるために、中性子散乱の実験を行なった。 $\text{CsPbCl}_3$ は、47°C, 42°C, 37°Cにおいて相転移を行なうが、これら3つの転移はいずれも、 $\text{PbCl}_6$ の作る八面体の結晶主軸のまわりの回転振動のフォノンモードの凍結によって引き起こされることが、明らかにされた。すなわち、(1)47°Cの転移は、cubic格子の[110]方向のzone boundaryモード $M_3$ の凍結によって引き起こされる。この場合、 $\text{PbCl}_6$ 八面体の回転軸は[001]である。

(2)42°Cの転移は[111]方向のzone boundaryモード $R_{2\bar{5}}$ から派生したtetragonal格子での2重縮退のモード $Z_5^x$ ,  $Z_5^y$ のうちの1つによって引き起こされる。 $\text{PbCl}_6$ 八面体の回転軸を[100]にとって、 $Z_5^x$ を凍結するモードとする。

(3)37°Cの転移は、残り1つのモード $Z_5^z$ の凍結によって引き起こされる。

(4) $M_3$ ,  $R_{2\bar{5}}$ のモードは、両方とも80°Cではまだ強くoverdampしている。

これらの凍結するモードから推定される各相での空間群は次の通りである。

相II (42°C < T < 47°C) tetragonal  $D_{4h}^5 - P4/mbm$

相III (37°C < T < 42°C) orthorhombic  $D_{2h}^7 - Cmcm$

相IV (T < 37°C) monoclinic  $C_{2h}^2 - P2/m$

これらの空間群によって、 $^{35}\text{Cl}$ のNQRの観測結果をよく説明することができる。

$M_3$ や $R_{2\bar{5}}$ のzone boundaryフォノンの凍結による連続相転移を説明するため、現象論的取扱いを行なった。その結果、 $\text{PbCl}_6$ 八面体の回転角について6次まで展開した自由エネルギーの展関係数の適当な選び方によって、観測された $\text{CsPbCl}_3$ の連続転移の様子が、定性的に説明できる。

## 論文の審査結果の要旨

固体中で原子の微少変位を生ずる相転移に関してこのような相転移を生ずる機構が固体中の格子振動の不安定性と関係があることが近年分ってきている。特にペロヴスカイト型に属する結晶では本来の構造が簡単な単純立方相であるにも拘らず非常に多様なこの種の相転移を示すことが知られており強誘電性などともからんで固体相転移機構の研究上、一つの重要なポイントとなっている。

藤井君の研究はこの点に関するもので、ペロヴスカイト構造をもつ3塩化セシウム鉛につき、この物質に狭い温度範囲で次々と3回ひきつき生起する相転移があることに着目し、この複雑な相転移を、ペロヴスカイト格子の一般的特徴と関連させつゝ格子力学的立場から統一的に解明することを目的として、中性子非弾性散乱の実験的研究を行ったものである。この結果、この物質の相転移が(i)ペロヴスカイト格子の特徴としてある特定の2つの振動モードが殆んど同時に不安定となること(ii)そのうちの1つが3重縮退モードであること、に原因することが認められた。又この結果は直ちに他のペロヴスカイト型結晶に拡張が可能な一般的結論であることが示された。

以上のように、藤井君の本研究は、固体相転移と格子の不安定性に関する従来の研究に一つの統一的見解をもたらしたものであり、理学博士の学位論文として充分価値のあるものとみとめる。