

黄鉄鉱型 PdSb₂ の合成と単結晶構造解析

吉朝 朗* (熊大), 徳田 誠 (東北大), 北原銀河 (熊大), 鶴木康平 (熊大),
中塚晃彦 (山口大), 杉山和正 (東北大)

Synthesis and single crystal structure analysis of pyrite-type PdSb₂.

Akira Yoshiasa (Kumamoto Univ), Makoto Tokuda (Tohoku Univ), Ginga Kitahara (Kumamoto Univ),
Kohei Unoki (Kumamoto Univ), Akihiko Nakatsuka (Yamaguchi Univ.),
and Kazumasa Sugiyama (Tohoku Univ)

Single crystals of PdSb₂ with several tens of microns in size were synthesized in evacuated silica glass tubes. The crystal structures of PdSb₂ [space group $Pa\bar{3}$, $a = 6.4659(2)$ Å, $u=0.37331(3)$ $z=4$] were refined to $R1=0.028$ for 234 unique reflections. The obtained Debye temperature θ_D values for Pd and Sb are 258 K and 214 K, respectively.

鉄・金・白金族遷移金属のニクトゲン(第15族元素)およびカルコゲン(第16族元素)化合物の多くが黄鉄鉱型をとる。pyrite (硬度6.5)や laurite (硬度7.5)は硫化物としては極めて高い硬度を持っている。黄鉄鉱型化合物は、対称性の高さに起因した系統的でユニークな結合距離変化やスピン状態が観測される[1]。単結晶構造解析では Debye-Waller 因子から各サイトの Debye 温度 θ_D を観測することができる[2]。Debye 温度は硬度や融点に関連した物質の固有値である。

今回 geversite 端成分の単結晶を封入管法により作製した。リガク社製 R-AXIS RAPID による単結晶構造解析を行い、Debye-Waller 因子を測定した。Pd と Sb の θ_D 値は、それぞれ 258K と 214K であった。これらは、金属 Pd と半金属 Sb 元素固体の θ_D 値(271K と 220K) と大きくは変わらない。これまでに報告されている単結晶構造解析法により得られた Debye-Waller 因子から、静的成分を仮定した

Debye 近似から各黄鉄鉱型鉱物の Debye 温度 θ_D を見積もり、原子間距離を指標に比較した(図1)。ニクトゲンとカルコゲンを問わず黄鉄鉱型化合物には大きな規則性があることが判明した。

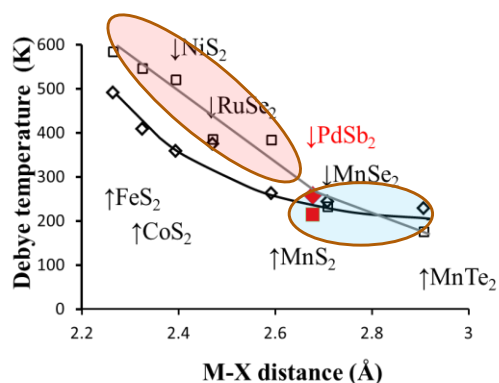


Fig. 1. Relationship between the bond distance and θ_D (\square : anion, \diamond : cation) found in pyrite-type compounds

[1] M. Tokuda et al. Zeit. Krist., 234 371 (2019)

[2] A. Nakatsuka et al. Am. Mineral. 96, 1593

Keywords: PdSb₂, pyrite-type compounds, single crystal diffraction, Debye temperature, hardness

*Corresponding author: yoshiasa@kumamoto-u.ac.jp