

## 充填スクッテルダイト化合物の EXAFS 温度因子解析

新田 清文<sup>1</sup>、大森悠佑<sup>1</sup>、菊地 大輔<sup>2</sup>、宮永 崇史<sup>1</sup>、竹ヶ原 克彦<sup>1</sup>、  
菅原 仁<sup>3</sup>、佐藤 英行<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 弘前大学理工学部、<sup>2</sup> 首都大学東京理学研究科、<sup>3</sup> 徳島大学総合科学部

[h05gs702@cc.hirosaki-u.ac.jp](mailto:h05gs702@cc.hirosaki-u.ac.jp)

充填スクッテルダイト化合物  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  の超伝導性は 12 個の Sb で構成される 20 面体のかごの中の Pr イオンの特異な挙動に起因することが示唆されている。一方広域 X 線吸収微細構造(EXAFS)は吸収原子の周囲の構造を調べるのに有効な手段であり、原子振動について有為な情報を得ることができる。

$\text{PrL}_{\text{III}}$ 、 $\text{LaL}_{\text{III}}$ 、 $\text{OsL}_{\text{III}}$  端 X 線吸収スペクトルは高エネルギー加速器研究機構(KEK)放射光実験施設(PF)の BL9C 及び BL12C(分光結晶 Si(111))にて得られた。測定した試料は  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  粉末と  $\text{LaOs}_4\text{Sb}_{12}$  粉末である。構造パラメーターを得るために実験データに非線形最小自乗フィッティングを適用した。

図 1(a)は 2 次の cumulant  $C_2$ (Debye-Waller 因子)の温度依存性である。 $C_2$  は熱的もしくは静的な原子の揺らぎを示す。Pr を含む原子対は全温度領域で La を含む原子対よりも大きく、0K 付近の値及び  $C_2$  の温度微分の値の大小により熱的にも静的にも大きな揺らぎを含んでいることが分かる。図 1(b)は Pr-Sb 原子対の 3 次の cumulant  $C_3$  の温度依存性を理論計算と比較したものである。理論的な考察から、有効原子間ポテンシャルが非対称な 2 重井戸型もしくは多重井戸型の場合、 $C_3$  はそのバリアの高さに依存した極値を持つことが分かっている[1]。温度因子の解析値と理論計算との比較により、我々は有効原子間ポテンシャルを導くことができた。

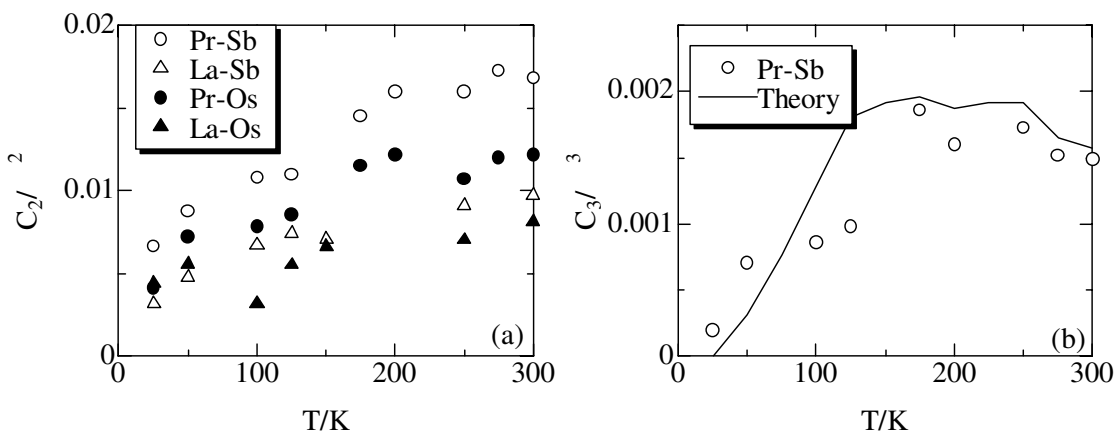


図 1 : (a)  $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$  と  $\text{LaOs}_4\text{Sb}_{12}$  の 2 次の cumulant(Debye-Waller 因子)の温度依存性。 (b) Pr-Sb 原子対の 3 次の cumulant の温度依存性と理論計算の比較。

本研究は科研費特定領域「充填スクッテルダイト構造に創出する新しい量子多電子状態の展開」の支援により行われました。また、放射光実験は高エネルギー加速器研究機構(KEK)放射光施設(PF)の課題研究(課題番号 2005G198)として実施されました。

### 参考文献

- [1] K.Nitta, T. Miyanaga and T. Fujikawa, J. Phys. Soc. Jpn. **75** 054603 (2006)