

2006U001

「内殻励起MCDによる、充填スクッテルダイトの磁性と電子状態の研究」

大熊隼人、藤木伸一郎、中山裕二、石川 淳、平戸康晴、上窪雅清、高山泰弘
石井廣義、宮原恒晃、田中謙弥、佐藤英行、¹朝倉大輔、¹小出常晴
首都大学東京・理工学研究科、¹物構研・P F

充填スクッテルダイトの特徴の一つは、12個のプニクトゲン原子のカゴの内部で、希土類原子が「ラットリング」という振動を行う可能性である。これにより有限温度では、希土類原子はカゴの中心を外れている確率が大きくなり、4f電子に様々な異常を引き起こす。われわれは、 $\text{PrFe}_4\text{Sb}_{12}$ および $\text{SmFe}_4\text{Sb}_{12}$ の単結晶試料について内殻励起MCDを測定した。

$\text{PrFe}_4\text{Sb}_{12}$ は Pr だけでなく Fe も MCD を示したが、このことは Fe の 3d 電子が6個でスピンを消している状態ではなく、そのうち1個の3d電子は遍歴的になっているというバンド計算結果と対応する。また、バルクの磁化測定(SQUID)と比較すると、Fe と Pr の磁気モーメントが同一向きであることを考慮すると、それほど大きな矛盾はない。

しかし $\text{SmFe}_4\text{Sb}_{12}$ では、バルクの磁化測定と比較して磁化が小さく、また吸収スペクトルに、混成の影響と見られるサテライトが観測された。バルクの物性測定では Sm は $4f^5$ の3価と考えられているが、今回測定された小さい磁気モーメントは $4f^6$ の2価の状態の存在を示唆する。後者の場合、 $J=0$ と $J=1$ のエネルギー差が小さく、今回測定した温度では両者が混ざり合い、小さな磁気モーメント(下図の左を参照)を構成していると考えられる。

また、下図の右は総和則を適用して Sm の軌道およびスピンモーメントを評価した結果である。一看すると $4f^5$ の Hund 基底状態から大きくはずれており、むしろ $4f^6$ に近い。またモーメントの大きさは著しく低減されている。

