

As 系充填スクッテルダイト化合物の高圧下 における X 線回折と電子物性

X-ray diffraction and physical properties of As-based filled skutterudite compounds under high Pressure

関根ちひろ¹, 山本慶一¹, 林 純一¹, 松井一樹¹, 堀祐輔¹
川村幸裕¹, 武田圭生¹, 八木健彦²
¹室蘭工大院工, ²東大物性研

充填スクッテルダイト化合物は体心立方晶系(空間群: $Im\bar{3}, T_h^5$)の結晶構造を有し, 一般形は MT_4X_{12} (M =希土類元素等, T =遷移金属元素, X =プニコゲン元素)で表され, 金属-絶縁体転移, 多極子転移など強相関電子系特有の異常物性を示すことが知られている。さらに, X イオンが形成するカゴの中で, M イオンがラットリング振動することにより, 格子熱伝導度が著しく低下し, 優れた熱電特性を示すことから, 次世代の高効率熱電材料への応用が期待されている物質群でもある。これまで, P, Sb を含む充填スクッテルダイト化合物を中心に多くの物性研究が行われているが, As を含む充填スクッテルダイト化合物は, As の取扱いの難しさや, 常圧における試料合成の困難さからほとんど研究が行われていない。

我々は高温高圧合成法により, 多くの As 系充填スクッテルダイト化合物の純良試料の合成に成功している[1]。本研究では, MT_4As_{12} ($M = Ba, La, Pr; T = Fe, Ru, Os$) の高圧下における結晶構造の安定性及び, 体積弾性率を調べる目的で, 10GPa までの高圧下粉末 X 線回折実験を行った。圧力発生には, ダイヤモンドアンビルセルを用いた。各圧力での X 線回折パターンから見積った格子定数から求めた体積-圧力曲線に, Birch の状態方程式をフィッティングさせることにより, 体積弾性率 B_0 を決定した。図 1 に MT_4X_{12} ($M = Ba, La, Pr; T = Fe, Ru, Os; X = P, As, Sb$) の体積弾性率 B_0 とデバイ温度 θ_D の関係を示す。Ba 化合物では, B_0 の増大に伴い θ_D の上昇が見られたのに対し, その他の化合物では逆の傾向を示した。

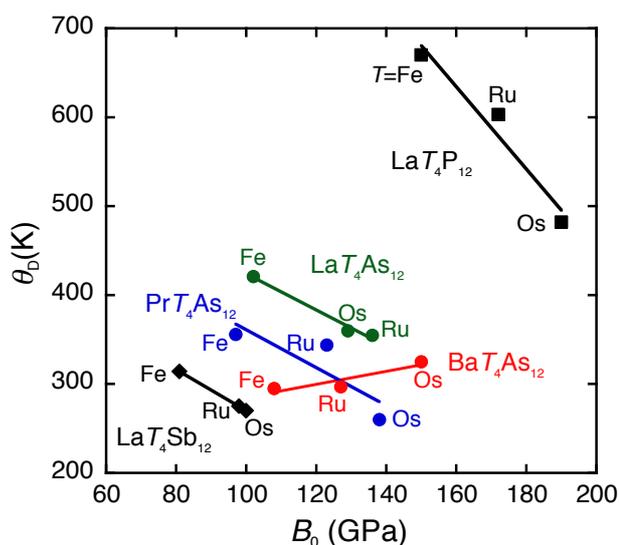


図 1 MT_4X_{12} ($M = Ba, La, Pr; T = Fe, Ru, Os; X = P, As, Sb$) の体積弾性率 B_0 とデバイ温度 θ_D の関係

[1] C.Sekine *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 093707.