



3 元化合物 Ce-Pt-Al 系の XAFS 測定

松本裕司¹, 太田玖吾¹, 渡部悠貴¹, 藤田研太¹, 大角将勝¹, 畑田圭介¹,
Iesari Fabio², 岡島敏浩²

1. 富山大学, 2. あいち SR

キーワード：価数揺動物質, 局所的反転中心の破れ, XAFS, 強相関電子系, 層状欠陥

1. 背景と研究目的

本研究では $\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$, $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Al}_{15}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ で XAFS 測定を行う。斜方晶 $\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$ は Ce サイトの局所的空間反転中心が破れておりそれに起因する電流磁気効果などの物性の発現が期待される¹⁾。XAFS スペクトルからその結晶構造を検証する。 $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$ は結晶に空間反転中心がない系である。 $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Al}_{15}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ は結晶構造が六方晶 $\text{Sc}_{0.67}\text{Fe}_2\text{Si}_{4.9}$ 型構造して報告され、Ce と Ga または Al のサイトに欠損がある構造になっている²⁾。しかし、X 線回折で散漫散乱が観測され、実際は原子サイトに欠損があるのではなくて層状欠陥の可能性が高いことがわかっている。この場合、斜方晶を取り希土類がハニカム構造を組んでいるモデルが提唱されている。本実験では、これらの物質の結晶構造の違いを検討するために、得られた XAFS スペクトルから、実空間において各注目元素の原子間距離を求める。

2. 実験内容

測定試料には $\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$, $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Al}_{15}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ を用いた。これらの試料を窒化硼素 (BN) 粉末で希釈し、10mmφ×1mm の板状のペレットを作製した。XAFS スペクトルの測定は、Ce L 端 (L_3 : 5,723eV、 L_2 : 6,164eV、 L_1 : 6,549eV)、Pt L 端 (L_3 : 11,563eV) Ga K 端 (10,367eV) に対して、あいち SR の BL11S2 で、透過法及び蛍光法を用いて行った。すべての測定は室温、大気圧下で行った。

3. 結果および考察

$\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$, $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Al}_{15}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ の XAFS 測定を行った。 $\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$, $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Al}_{15}$, $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ の吸収端近傍でのスペクトル形状は、価数が 3 価の参照物質である CeF_3 のものと類似し、4 価の参照物質である CeO_2 と似ていない。このことから、これらの物質に含まれる Ce の価数は 3 価に近いことがわかる。いずれのスペクトルにおいても吸収端から高エネルギー側にはっきりとした EXAFS 振動構造が観察された。

Figure 1 に $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ の Ce L_3 端の EXAFS 振動より求めた動径分布関数と希土類がハニカム構造を組んでいる構造モデルを用いて GnXAS をもちいてフィッティングを行った結果を示す。Ce の L_3 端以外にも Pt L_3 端、Ga の K 端の XAFS スペクトルより求めた動径分布関数とフィッティングの結果が良く一致していることから $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ は希土類がハニカム構造を組んでいるモデルを用いて説明することができる。今後、 $\text{Ce}_2\text{Pt}_9\text{Al}_{16}$ $\text{Ce}_{1-x}\text{Pt}_6\text{Al}_{16+2x}$ の Ce L 端、Pt L 端においても同様に解析を行い、結晶構造を明らかにしていく。

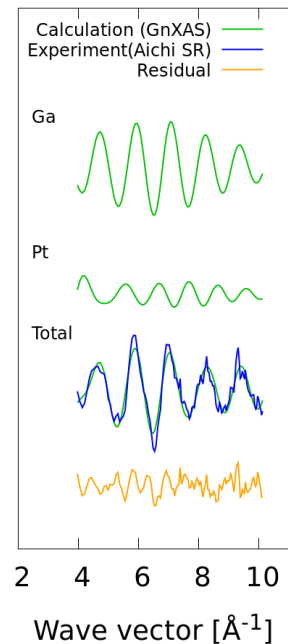


Fig. 1 $\text{Ce}_2\text{Pt}_6\text{Ga}_{15}$ の Ce L_3 端の動径分布関数の GnXAS によるフィッティングの結果。

4. 参考文献

1. A. I. Tursina, *et al.*, *Intermetallics* **17**, 780 (2009).
2. G. H. Kwei, *et al.*, *Acta. Cryst.* **B52**, 580 (1996).