

# かご状物質のフォノンダイナミクス

Phonon dynamics of cage compounds

李 哲虎<sup>1)</sup>、鬼丸孝博<sup>2)</sup>、吉澤 英樹<sup>3)</sup>、木方 邦宏<sup>1)</sup>、金子 耕士<sup>4)</sup>

Chul-Ho Lee<sup>1)</sup>, Hideki Yoshizawa<sup>2)</sup>, Kunihiro Kihou<sup>1)</sup>, Kouji Kaneko<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup>産総研、<sup>2)</sup>広島大、<sup>3)</sup>東大物性研、<sup>4)</sup>原子力機構

我々は  $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$  のゲストモードを中性子散乱により測定した。その結果、ラットリングフォノンに特徴的な低エネルギーに平らな分散が観測された。また、特定の波数においてキंकがあることを突き止めた。本結果は強い電子-格子相互作用の存在を示唆する。

キーワード：フォノン分散、ラットリング、かご状物質

## 1. 目的

近年、ラットリングと呼ばれる大きなかご型格子の中に充填されたゲスト原子の振動モードが局所電荷揺らぎを誘起し、様々な異常物性の原因となっているのではと考えられ注目を集めている。これまでの研究により、ラットリング振動が大振幅でかつ非調和的であること等が明らかとなっており、ラットリングの振動状態に関しては少しずつ大枠が見えて来た。しかし、電子系とのカップリングに関する知見は今のところほとんど得られていない。そこで、本研究では中性子散乱を用いてかご状物質のラットリング振動を調べ、電子-格子相互作用の存在を明らかにすることを目的とする。

## 2. 方法

かご状物質である type-I クラスレート  $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$  の大型単結晶を4つフラックス法により作製した。キャリアはホールであり、P型である。単結晶の総体積は1cc弱である。これら4つの単結晶の方位を揃えて同じ試料ホルダーに搭載した。このようにアSEMBルした単結晶を用い、中性子非弾性散乱によってフォノンを観測した。得られたフォノン分散はボルン・フォン・カルマン法によって解析し、原子間結合力を見積った。これらにより、電子-格子相互作用に由来する系統的な変化を明らかにした。測定は主に冷中性子源を用いて、エネルギー分解能の高い実験を行なう。

## 3. 研究成果

$\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$  において 2.5meV にてほぼ平らな分散をもつゲストモードを観測した。これはかごに充填された Ba 原子が大きく振動するゲストモードに対応する。このゲストモードは音響フォノンと anti-crossing しており、ゲストモードが音響フォノンと強くカップルすることを示している。また、特定の波数でゲストモードにキंकがあることも発見した。これは電子-格子相互作用の存在を示唆するものである。

## 4. 結論・考察

我々は中性子非弾性散乱により  $\text{Ba}_8\text{Ga}_{16}\text{Sn}_{30}$  において低エネルギーゲストモードが存在することを見いだした。また、強い電子-格子相互作用の存在を示唆するフォノン分散の異常も観測した。この電子-格子相互作用はかご状物質が示す異常物性の原因の一つであると考えられている。本研究ではその痕跡を捉えた可能性があり重要な意義を持つ。