



Pd_{80-x}Ni_xP₂₀ 金属ガラスの X 線吸収分光

曾田一雄^{1,2,3}, 吉田泰清¹, 太田俊二¹, 川北彬広¹, 加藤政彦¹,
長谷川正¹, 西山信行⁴, 岩住俊明⁵, 村井崇章³, 陰地宏^{2,3}
¹名大院工, ²名大 SR, ³あいち SR, ⁴RIMCOF, ⁵阪府大

1. 背景と研究目的

塊状の非晶質合金であるバルク金属ガラスは、結晶とは異なる優れた特性をもつ工業材料として期待される[1]。新しい金属ガラスの創製やその利用にあたって金属ガラスの安定化機構を理解することは重要である。金属ガラスの安定化機構として原子配列と遍歴電子波との干渉効果[2]や化学結合による擬ギャップ形成、つまり、電子系エネルギーの低下が考えられているが、詳細は未解明である。本研究では、優れたガラス形成能をもつPd-Ni-P系バルク金属ガラス[3]の非占有価電子帯電子構造をX線吸収分光XASで調べ、X線発光分光XESによって得た占有価電子帯電子構造の情報とともに検討した。

2. 実験

試料として急冷法[3]で作製したPd_{80-x}Ni_xP₂₀ ($x = 35, 40, 45$)バルク金属ガラスを用いた。ガラス形成能の指標の一つである結晶化温度 T_X とガラス転移温度 T_G の温度差 $\Delta T = T_X - T_G$ は、Ni組成 x に伴って $\sim 90, 102, 102$ Kである[3]。Pd L_3 およびP K 端におけるXAS測定は、あいちシンクロトロン光センターBL6N1の大気圧XAFSシステムを用いてSiドリフト検出器による部分蛍光収量PFY法あるいは転換電子収量CEY法で行った。光子エネルギーの校正にK₂SO₄標準試料のS K 吸収端ピーク(2481.7 eV)を用いた。

3. 結果および考察

図1にPFY法で得られたP K およびPd L_3 -XASスペクトルを、Photon Factory BL11Bで測定したXESスペクトルと比較した。ここで、XASスペクトルは、各吸収端ジャンプで規格化し、吸収端ピークの1/2の強度となる光子エネルギーがフェルミエネルギー E_F (縦線)に対応すると仮定してXASとXESスペクトルの強度を E_F で一致させた。図に見られるように、 E_F 位置に大きな組成依存はなかった。

Pd L_3 吸収端では、 $x = 40$ のXASスペクトルが他と比較してピークが高エネルギー側にシフトして E_F 付近における状態密度の低下を示し、XESスペクトルでは、 x の減少に伴って強度が増大するとともに低光子エネルギー側に肩構造が発達する。これらの変化は、Pd 価電子系のエネルギー低下を暗示する。一方、P K 吸収端ではXESスペクトルに E_F より ~ 2 eV低い位置に肩構造が見られ、 E_F 付近で状態密度の低下、つまり、擬ギャップが形成していると考えられる。また、 $x = 40$ のXESスペクトルは、低エネルギー側にわずかにシフトしている。

前回のPhoton Factoryにおける全電子収量法とともに、今回のCEY法によるP K 吸収端スペクトルには、酸化成分が見られ、試料表面層では、Pが酸化していることを示している。今回、PFY法によってバルク金属ガラスのバルク電子構造が明らかにできることが分かった。

今後、Ni $3d$ 状態に関する情報とともに、光電子分光による全状態密度分布を考慮し、これらの電子構造とガラス形成能との相関を明らかにする。

4. 参考文献

1. W. H. Wang *et al.*, *Mater. Sci. Eng. R.* **44** (2004) 45-89.
2. U. Mizutani & H. Sato, *Crystals* **7** (2017) 9.
3. Y. He *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **69** (1996) 1861-1863.

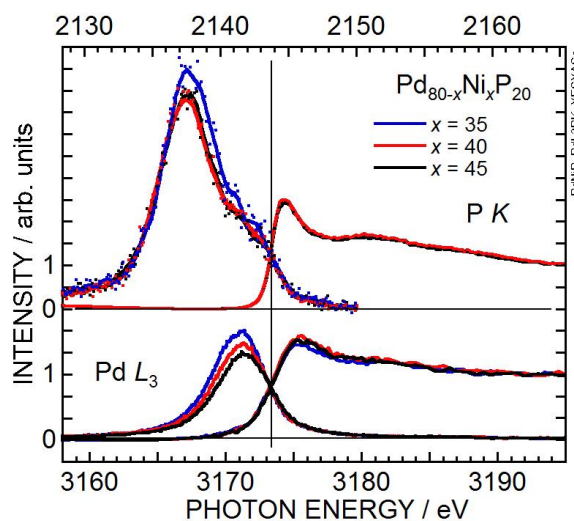


図1. P K およびPd L_3 XASとXESの比較。