



複雑構造合金 γ -Mg₁₇Al₁₂ および β -Al₃Mg₂の角度分解光電子分光

曾田一雄^{1,2,3}, 川北彬広¹, 吉田泰清¹, 加藤政彦¹,
仲武昌史³, 水谷宇一郎⁴, M. Feuerbacher⁵
¹名大院工, ²名大 SR, ³AichiSR, ⁴名産研, ⁵FZJ

1. 背景と研究目的

2元単純金属合金の γ 相Mg₁₇Al₁₂および β 相Al₃Mg₂は、それぞれ単位胞あたり58個および1178個の原子から成る複雑な原子配列を持つ[1,2]。この構造は、フェルミ面とブリルアンゾーンとの相互作用に起因する電子系エネルギーの低下で安定化すると予想されている[2-4]。第一原理計算[2,3]によると、 γ 相Mg₁₇Al₁₂では、フェルミ準位 E_F 付近の遍歴電子波が{510}、{431}および{422}ブリルアンゾーン面群で干渉し、H点まわりの比較的大きなギャップとともに、電子状態密度分布に E_F を挟んだ浅い擬ギャップと束縛エネルギー $E_B \sim 1$ eVにピーク構造を形成する。同様に、 β 相Al₃Mg₂でも、多ゾーンとの干渉によって E_F 付近に浅い擬ギャップ構造が発生し、これらの相の構造安定性の起源であるとされる。

本研究では、これらの複雑構造合金についてその構造安定性の起源を実験的に解明するため、角度分解光電子分光ARPESによってその価電子帯構造を直接明らかにすることを目的とする。

2. 実験内容

ARPES測定は、あいちシンクロトロン光センターBL7Uにおいて低温 (~10 K) にて行った。[011]方向に切り出した単結晶 (大きさ0.5 x 0.5 x 3 mm³) を真空中低温下で破断して測定用(011)清浄表面を得た。ARPES測定は、[001]方向にオフノーマル放出および[011]方向に垂直放出の条件で行った。

3. 結果および考察

図1に測定したARPESスペクトルを角度積分した γ 相Mg₁₇Al₁₂の光電子スペクトル (赤実線) を第一原理計算による状態密度分布[4]と比べた。ここで、光電子スペクトルは2次電子によるバックグラウンドを繰り返し法[5]で評価して差し引いた。高束縛エネルギー側における正孔寿命の効果を検討すると、実験と計算との対応がよいことがわかる。特に、 $E_B \sim 1$ eVのピーク構造と E_F に向かう光電子強度の急激な低下 (擬ギャップ) は、計算とよく一致している。 $E_B \sim 5.7$ eVの小さなピークと7.5 eVの肩構造は、短い正孔寿命により不明瞭になったバンドと考えられる。ただし、表面の劣化によると考えられる構造が長時間測定によって $E_B \sim 6$ eV付近に成長する。

角度分解光電子分光測定の詳細な解析結果は別の機会に報告するが、オフノーマルARPESによると、逆格子空間のH点付近で $E_B \sim 1$ eVにあるバンドがH- Γ 方向 (Δ ライン、[001]方向) で E_F に向かって分散する様子が見られ、H点周りの占有状態側に ~ 1 eVのギャップが認められる。また、 Γ 点周りに電子ポケットが観測された。これらは、第一原理計算による予測と比較的よく一致する。

このように価電子帯光電子スペクトルは、提案された安定化機構を支持することがわかった。今後、さらに詳細な解析を進めるとともに、軟X線吸収・発光スペクトル測定によって非占有・占有状態ともに部分状態密度分布を評価し、安定化機構について実験的に解明したい。

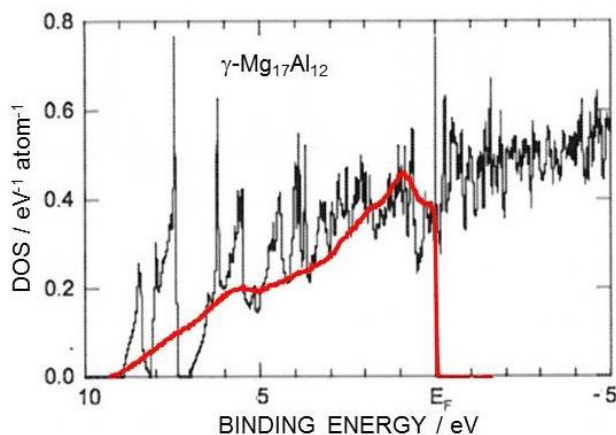


図1. 角度積分価電子帯光電子スペクトルと第一原理計算による状態密度分布[3]の比較。

4. 参考文献

1. P. Schobiner-Paramantellos and P. Fisher, *Naturewissenschaften* **57** (1970) 128.
2. U. Mizutani & H. Sato, *Crystals* **7** (2017) 9; in particular section 4.7 on pp.57-61.
3. U. Mizutani, *Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases*, (CRC Press, Boca Raton 2010).
4. U. Mizutani *et al.*, *J. Phys: Condes. Matter* **22** (2010) 485501.
5. K. Soda *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** (1991) 3059.