



複雑構造合金 β - Al_3Mg_2 の構造安定性の起源

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, 井波暢人^{2,3}, 水谷宇一郎⁴, M. Feuerbacher⁵
¹名大院工, ²名大 SR, ³あいち SR, ⁴名産研, ⁵FZJ

キーワード： β - Al_3Mg_2 , 角度分解光電子分光, フェルミ面・ブリルアンゾーン相互作用, 相安定性

1. 背景と研究目的

β 相 Al_3Mg_2 および γ 相 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ は、各々単位胞に 1178 個および 58 個の原子をもつ複雑な原子配列を示す[1]。この複雑な原子構造の起源は、フェルミ面とブリルアンゾーンとの相互作用による電子系エネルギーの低下と予想されている[1-3]。第一原理計算[1,3]によると、 β 相 Al_3Mg_2 では、フェルミ準位 E_F 付近の遍歴電子波が $\{10\ 10\ 0\}$ 、 $\{10\ 8\ 6\}$ および $\{14\ 2\ 0\}$ ブリルアンゾーン面群で干渉し、電子状態密度分布に E_F を挟んだ浅い擬ギャップ構造を形成する。

本研究では、複雑構造合金 β 相 Al_3Mg_2 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した。

2. 実験内容

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 ARPES 測定を行った。測定には、 $[011]$ 方向に切り出した単結晶(大きさ $0.5 \times 0.5 \times 3 \text{ mm}^3$)を用い、真空中低温下で破断して (011) 清浄表面を得た。また、 $[001]$ 方向にオフノーマル放出 ARPES 測定ができるように試料をセットした。

3. 結果および考察

図 1 に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を比較する。ここで、光電子スペクトルは、実測値から 2 次電子のバックグラウンドを繰り返し法[4]で差し引いてあり、自由電子モデルの状態密度分布も示した。 β 相 Al_3Mg_2 は、試料表面の劣化(酸化)が激しく、角度分解スペクトルを十分な強度で測定できなかったが、角度積分スペクトルには、予測された E_F における強度の減少が見られる。6 eV 付近に酸化による構造が成長するため、実測の価電子帯バンド幅が予測より狭くなっていると思われる。

表面劣化に対する課題を解決し、再測定の必要があるが、既に報告した γ 相 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 同様[5]、 β 相

Al_3Mg_2 でも E_F 付近に強度の減少が見られ、これらの複雑構造合金のフェルミ面・ブリルアン相互作用による安定化機構に対する実験的証拠が得られたと考えられる。

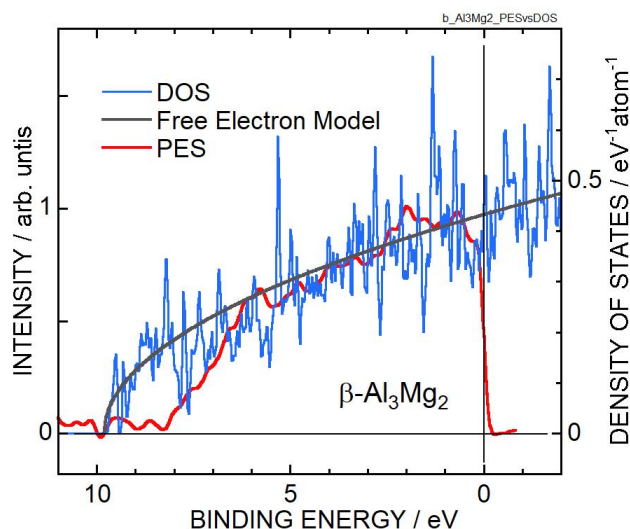


図 1. 角度積分価電子帯スペクトルと状態密度。

4. 参考文献

1. U. Mizutani & H. Sato, Crystals **7** (2017) 9; in particular section 4.7 on pp.57-61.
2. U. Mizutani, *Hume-Rothery Rules for Structurally Complex Alloy Phases*, (CRC Press, Boca Raton 2010).
3. U. Mizutani *et al.*, *J. Phys: Condes. Matter* **22** (2010) 485501.
4. K. Soda *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** (1991) 3059.
5. K. Soda *et al.*, Annual Report of Aichi Synchrotron Radiation Center 2016.