



複雑構造合金の構造安定機構の解明に向けて I — Al K吸収端 X線吸収スペクトル —

曾田一雄^{1,2,3}, 池戸航¹, 加藤政彦¹, 杉山陽栄³, 野本豊和³

1 名古屋大学工学研究科, 2 名古屋大学 SR 研究センター, 3 あいち SR センター

キーワード：Al K 吸収端 X 線吸収スペクトル, Al p 部分状態密度分布, 擬ギャップ

1. 背景と研究目的

単位胞に多数の金属原子を含む金属結晶、並進対称性のない金属準結晶、非晶質のバルク金属ガラスなど、等方的な相互作用が期待される金属元素にもかかわらず、複雑な構造をもつ合金や金属間化合物が多数存在する。その構造安定化の原因としてフェルミエネルギー E_F 近傍の金属内自由電子波と原子配置との相互作用による機構が提案されている^[1]。それによると、電子構造に擬ギャップが生じるとともに電子系のエネルギーが低下する。構造安定化機構について分光学的手法により実験的に検討するため、本報告では、面心立方 fcc の参照金属試料 Al の K 吸収端 X 線吸収スペクトル Al K-XAS を調べた。

2. 実験内容

試料は、Nilaco から購入したままの純度 99.999% の Al 箔 (厚さ 0.1 mm) を用い、帯電による測定スペクトルの劣化を避けるため、導電性接着剤 (室町ケミカル, ムロマックボンド H-220) によりサンプルキャリアに取り付けた。全電子収量 TEY 法および部分蛍光収量 PFY 法で X 線吸収スペクトルを BL1N2 で測定した。BL1N2 では、X 線検出器 SDD が X 線入射方向と垂直方向に設置されており、これで Al K 蛍光を測定して PFY を得た。試料表面法線に対する X 線入射角 θ が表面およびバルク敏感な PFY となるそれぞれ 5° および 22.5° に対して PFY と TEY を同時に測定した。光子エネルギー $h\nu$ は、1500 eV 付近における Au $4f_{7/2}$ 内殻準位線の光電子分光測定でその束縛エネルギーが 84.0 eV となるように較正した。

3. 結果および考察

Fig.1 に $\theta = 22.5^\circ$ で得た吸収スペクトルと第一原理計算によって得た状態密度 DOS 分布を比較した。PFY および TEY は、吸収端ジャンプ量 ($h\nu = 1550$ eV 以下と 1590 eV 以上とにおける平均強度の差) で規格化した。第一原理計算は、一般化勾配近似を用いて全ポテンシャル線型化補強平面波 FLAPW 法により WIEN2k コードで行った。図では、束縛エネルギーの原点 (E_F) を TEY の吸収端ジャンプ量の 1/2 となる $h\nu = 1559.0$ eV に合わせた。

PFY および TEY の構造は、ともに終状態の p 部分 DOS (茶色) とよく対応する (赤縦線)。しかし、PFY ではペクトル構造が顕著ではない。これは、自己吸収効果に起因するとされる。PFY と TEY との立ち上がりの違いなども含め、今後検討する必要がある。

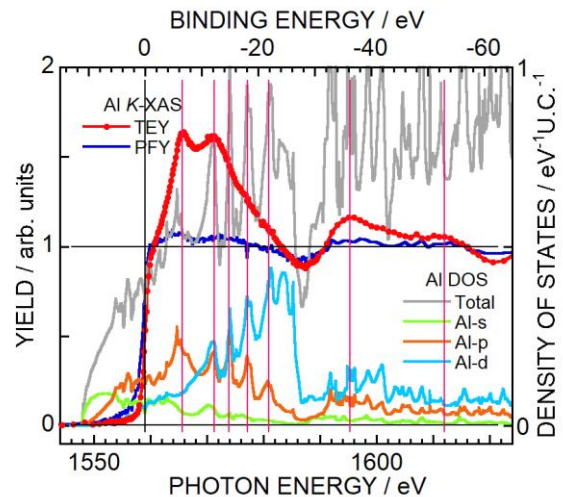


Fig.1 Al K 吸収端近傍 X 線吸収スペクトル Al K-XAS (全電子収率 TEY と部分蛍光収率 PFY) と状態密度 DOS 分布

4. 参考文献

1. U. Mizutani and H. Sato, *Crystals* **7** (2017) 9.