



複雑構造合金の構造安定機構の解明に向けて II — Al K吸収端近傍 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 吸収端近傍 X 線吸収微細構造, Al *p* 部分状態密度分布, 擬ギャップ

1. 背景と研究目的

金属でありながら、非晶質のバルク金属ガラスや並進対称性を有さない金属準結晶、単位胞に多くの元素を含む金属結晶など、等方的な相互作用が期待されるにもかかわらず、複雑な構造を示す金属間化合物や合金がある。その構造安定化機構として、ある原子配置とフェルミエネルギー E_F 近傍の金属内自由電子波との相互作用が提案されている^[1]。この仮説では、この相互作用の結果、電子構造に擬ギャップが生じ、電子系のエネルギーが低下して構造が安定化する。そこで我々は、分光学的手法を用いてこの仮説を実験的に検討している。ここでは、課題合金の参照金属試料である面心立方型の Al の K 吸収端近傍 X 線吸収微細構造 Al K-NEXAFS を調べ、第一原理計算による電子構造と比較する。

2. 実験内容

測定は、BL1N2 にて全電子収量 TEY 法および部分蛍光収量 PFY 法にて行った。PFY は、X 線入射方向と 90°の方向に設置した X 線検出器 SDD で Al K 蛍光を測定して得た。試料として Al 箔 (Nilaco, 99.999%) を用い、導電性接着剤 (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、X 線を試料法線方向に対して 5°および 22.5°で入射させた。PFY スペクトルは、X 線入射角 $\theta=5^\circ$ および 22.5°に対してそれぞれ BL1N2 で標準的な表面敏感およびバルク敏感となる。光子エネルギー $h\nu$ は、1500 eV 付近の光電子分光測定で Au $4f_{7/2}$ 内殻準位線の束縛エネルギーが 84.0 eV となるように較正した。

第一原理計算は、WIEN2k コードを用いて一般化勾配近似 GGA-PBE による全ポテンシャル線型化補強平面波 FLAPW 法で行った。計算パラメータは、 $R_{MT}K_{max}=9$ 、 $R_{MT}=2.5$ 、 $l_{max}=5$ とした。

3. 結果および考察

バルク敏感な Al K-NEXAFS を第一原理計算による状態密度 DOS 分布とともに Fig.1 に示す。吸収強度は、吸収端ジャンプ量で規格化した。ここで、TEY の吸収端ジャンプ量の 1/2 となる $h\nu=1559.0$ eV に束縛エネルギーの原点 (E_F) を一致させた。全 DOS (灰色) は、フェルミ面と Brillouin Zone との相互作用によって自由電子状態と比べて E_F で 10 % の DOS の減少、すなわち、浅い擬ギャップを示し、*p* 部分 DOS も同程度の窪みを示す。しかし、実測の XAS スペクトルでは明瞭でない。また、PFY の立ち上がりが 0.5 eV だけ TEY より低エネルギー側にある。この原因として、自己吸収効果や検出深さの相違、検出系の線型性あるいは飽和が考えられるが、今後の課題である。

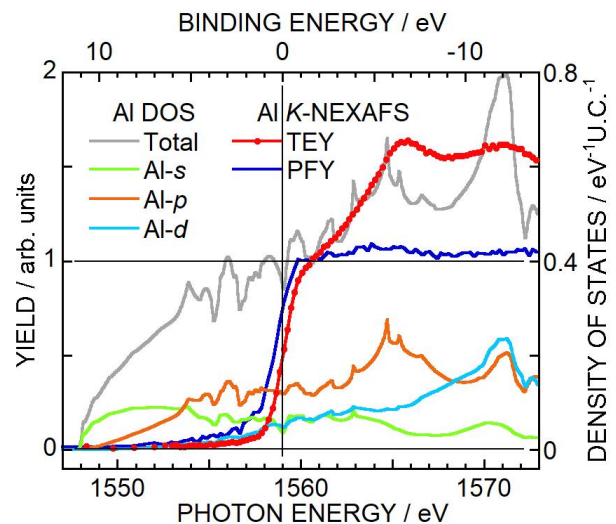


Fig.1 Al K 吸収端近傍 X 線吸収微細構造 Al K-NEXAFS と状態密度 DOS 分布の比較。

4. 参考文献

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