



ハイレントロピー合金の XAFS 解析

渡部 孝, 渡辺 義夫, 加藤 隆彦
名古屋大学

キーワード：ハイレントロピー合金, 多元系合金, XAFS, 局所構造

1. 背景と研究目的

複数の元素を等濃度で混合したハイレントロピー合金はギブズエネルギーが小さくなり、金属元素がランダムに分布した固溶体を生成しやすい。格子歪みカクテル効果から新しい特性発現が期待される。我々は全固体二次電池用の電極材料開発の一環として、6 元素からなる多元系合金のバルク試料を溶解法により試作した。そのうち、比較的硬度の高い 2 つの試料（No. 1：CuAgFeNiCrAl、硬度 1461MPa、No. 9：CuAgFeNiCrLa、硬度 2149MPa）については、各々の試料に肉眼で明部と暗部に分類できる部位があり、XRD, SEM, TEM の結果から 3 層程度ずつ不明層が検出されている。本実験では SR-XAFS 測定により、各元素の局所構造を調べ、不明層の構造決定へ繋がる構造情報の取得を目指した。

2. 実験内容

測定には先述の No.1, No.9 試料の板材（W10×D15×H3mm）を用いた。Cu と Ag, Fe, Cr, Ni は K 吸収端を、La は L_{III} 端を測定した。基本的に 2 結晶分光器は Si(111)を採用したが、Ag のみはエネルギー分散値の関係で Si(311)に切り替えて測定した。各々の試料には肉眼で確認できる明部と暗部があり、領域を選択し、干渉しないように注意した。集光ミラーによりビーム径を $\phi 0.5\text{mm}$ にし、転換電子収量法にて各元素の吸収端を測定した。Ag のみは $0.5\text{mm} \times 4\text{mm}$ のビーム径となったが明部暗部の各々の領域内に収まるようにした。

3. 結果および考察

Fig.1 に試料 No.1 と No.9 の構成元素のうち、Ni K_{edge} と Fe K_{edge} を示す。標準試料と FEFF9 シミュレーションでは Ni 単体 fcc、Fe 単体 bcc の形状である。No.1 では明部と暗部共に Ni の XAFS は bcc の形状を呈している。また、No.9 では Ni と Fe 共に fcc と bcc が重なったような形状を呈し、暗部ではより fcc 的に、明部ではより bcc 的な形状を呈した。他構成元素の XAFS でも同様な傾向となっており、これらの情報を不明相の構造決定へ活用する。

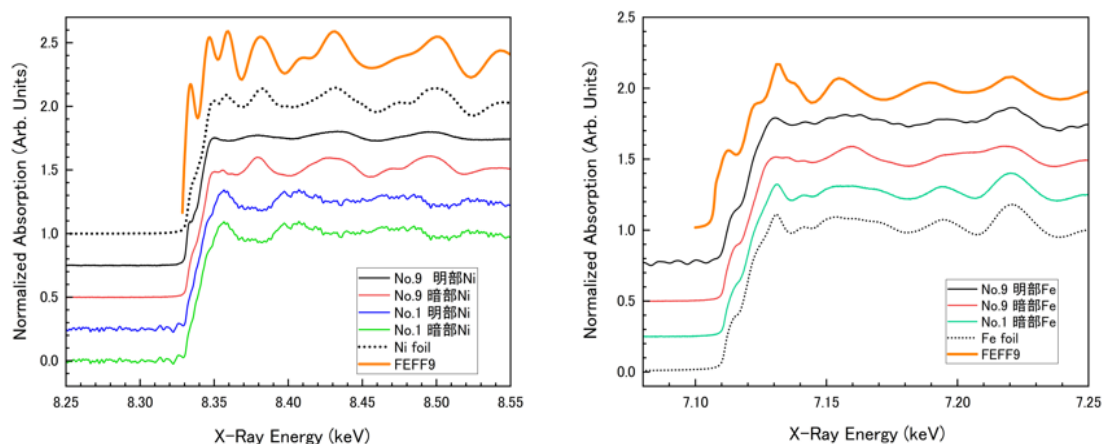


Fig. 1 多元系合金No. 1 (CuAgFeNiCrAl) とNo. 9 (CuAgFeNiCrLa) のNi K_{edge} XAFSとFe K_{edge} XAFS。点線はNi箔、Fe箔の標準試料。オレンジ線はFEFF9シミュレーション