

混晶系のポーリング結合長とベガード則はどこでつながっているのか？

： 蛍光X線ホログラフィーによる研究

細川伸也^A、八方直久^B、林好一^C

^A広島工大工、^B広島市大情報、^C東北大金研

混晶系は、機能性を持つさまざまな材料の分野で用いられている。その大きな利点は、濃度を変化させることにより容易にその性質を変化させ、用途にあった材料を作り出すことができることにある。古来、混晶系の原子配列、特に最近接原子間距離は、母結晶の値を平均した値、すなわちベガード則に従うと言われてきた。これは、X線散乱によって測定されるブラッグピークが鋭く、そこから求まる格子定数が濃度に比例する値となることから示唆された。ところが、XAFS測定により求まる最近接原子間距離はおおむねその元素本来の結合長（ポーリング結合長）を保持しており、2つの構造解析手段の結果に矛盾があった。本研究では、 $Zn_{1-x}Mn_xTe$ 希薄磁性半導体を対象として、 $ZnK\alpha$ 蛍光X線による蛍光X線ホログラフィー測定によって、Zn原子のまわりの3次元原子配列イメージを構築した。図は、閃亜鉛鉱構造を持つ試料のTe原子だけが存在する(001)面（図(c)参照）での(a) $Zn_{0.4}Mn_{0.6}Te$ および(b) $ZnTe$ の原子イメージを示す。いずれのイメージでもX線散乱で求まる結晶構造を再現しているように見えるが、 $ZnTe$ 母結晶と比較して、 $Zn_{0.4}Mn_{0.6}Te$ 混晶での第1、第5近接Teのイメージが非常に弱いが、第1-3近接以降では再び強くなっていることがわかった。これらの結果より、混晶系の格子ひずみは、およそ3結合長ほどまでが大きく、それ以降は再びしっかりとした格子を組んでいることが実験的に初めて見いだされた。原子位置のゆらぎは、イメージの強度によって得ることができ、それを再現できるモデル（機関車車輪モデル）を考案したのであわせて報告する。

この研究は、PF/BL6Cビームライン（課題番号：2005G127および2007G0567）において行われた。

