

# Ni-rich Al-Co-Ni 準結晶の軟X線分光 Soft X-ray Spectroscopy of Ni-rich Al-Co-Ni Quasicrystal

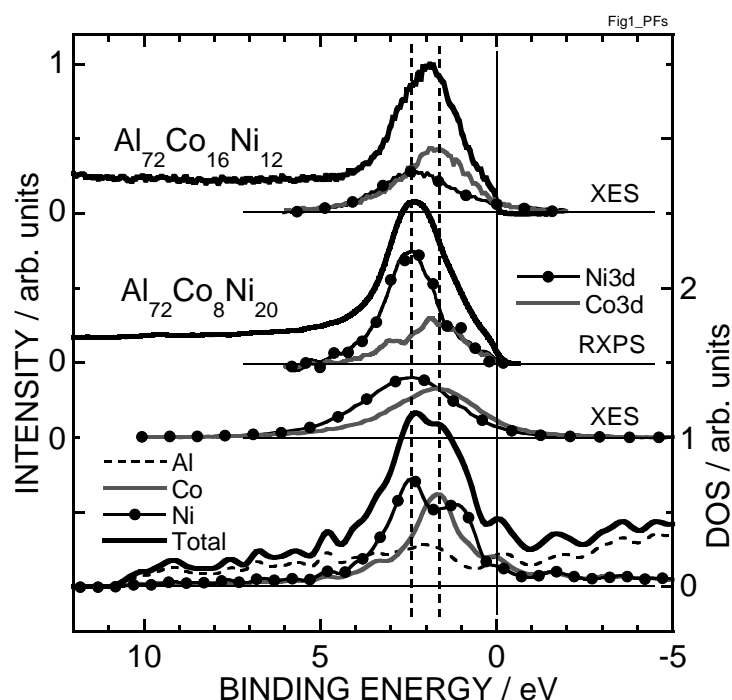
曾田一雄<sup>1</sup>、犬飼 学<sup>2,1</sup>、原田翔太<sup>1</sup>、近藤広基<sup>1</sup>、嶋田崇史<sup>1</sup>

肖 英紀<sup>3,4</sup>、枝川圭一<sup>3</sup>、手塚泰久<sup>5</sup>

1 名古屋大学、2 JASRI、3 東京大学、4 NIMS、5 弘前大学

準周期面が周期的に積層した構造をもつ正 10 角形相2次元準結晶 d-QC は、10 角形単位カラム様構造が準周期的に配置しているとみなせる。特に、Al-Co-Ni d-QC は、広い組成範囲で準結晶となり、Co/Ni 比によって異なる準周期構造をもつ[1]。理論計算[2]によると、強い Al-Co と Ni-Ni の相互作用により、Co-rich  $\text{Al}_{72}\text{Co}_{20}\text{Ni}_8$  では単位カラム中心に 10 角形 Al-TM(遷移金属)リング様配置が形成され、Ni-rich  $\text{Al}_{72}\text{Co}_8\text{Ni}_{20}$  では Ni-Ni 対形成を伴った Hexagon-Boat-Star タイリングを示す。しかし、電子顕微鏡観察では、遷移金属の区別が難しい。そこで我々は、準結晶形成機構解明に資するため、分光学的測定とクラスター計算とを用いて電子構造から原子配置を検討している。

図に Co-rich  $\text{Al}_{72}\text{Co}_{16}\text{Ni}_{12}$  と Ni-rich  $\text{Al}_{72}\text{Co}_8\text{Ni}_{20}$  の価電子帯の測定結果を比較する。黒い太線は軟X線光電子スペクトルであり、全状態密度を表す。灰色と●で示す部分状態密度は軟X線  $L_{2,3}$  発光分光 XES あるいは 2p-3d 共鳴光電子分光 RXPS によって得た。また、Ni-rich モデルクラスターに対する電子構造を最下段に示す。計算によると、Ni-rich 相では Ni-Ni 対のために Ni3d バンドが結合性と反結合性のバンドに分裂する。一方、測定結果では、組成によって d バンド全体の形状は変化するが、元素ごとの d 状態分布は大きく異ならず、Ni 相における反結合性 Ni バンドが存在するかどうか明瞭でない。今回のモデルクラスターは Ni-Ni 対を強調しているが、測定結果は Al-Ni 配置の優勢や強い Al-TM 相互作用を示唆しているかもしれない。



バンドが結合性と反結合性のバンドに分裂する。一方、測定結果では、組成によって d バンド全体の形状は変化するが、元素ごとの d 状態分布は大きく異ならず、Ni 相における反結合性 Ni バンドが存在するかどうか明瞭でない。今回のモデルクラスターは Ni-Ni 対を強調しているが、測定結果は Al-Ni 配置の優勢や強い Al-TM 相互作用を示唆しているかもしれない。

[1] S. Ritsch *et al.*, *Phil. Mag.* A71 (1995) 671.

[2] S. Hiramatsu and Y. Ishii, *J. Phys. Soc. Jpn.* 75 (2006) 054602.