

2 次元準結晶 Al-Co-Ni の電子構造と局所原子配置 Electronic Structure and Local Atomic Arrangement in 2-dimensional Quasicrystals Al-Co-Ni

曾田一雄¹、犬飼 学^{2,1}、肖 英紀^{3,4}、枝川圭一³、横山嘉彦⁵
篠谷剛志⁶、手塚泰久⁶、森本 理⁷

1 名古屋大学、2 豊田工大、3 東京大学、4 NIMS、5 東北大学
6 弘前大学、7 広島大学

正 10 角形相 2 次元準結晶 d-QC は、準周期配列した原子層が周期的に積層した構造をもつが、10 角形単位カラム状構造が準周期的に配置しているともみなせる。特に、Al-Co-Ni 系 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、電子構造から局所原子配置を明らかにするため、クラスター計算や光電子分光(XPS)測定とともに TM $L\alpha$ 軟X線発光分光(XES)測定を行った。

図 1 に Co-rich $\text{Al}_{72}\text{Co}_{16}\text{Ni}_{12}$ と Ni-rich $\text{Al}_{72}\text{Co}_8\text{Ni}_{20}$ について測定結果を比較する。灰色の実線は XPS スペクトルであり、全状態密度を表す。黒の実線および点線はそれぞれ Co および Ni の 3d 部分状態密度を表す Co および Ni の $L\alpha$ XES スペクトルである。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 対形成のために Ni 3d 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 3d バンド全体の形状は変化するが、元素ごとの 3d 状態分布は大きく異ならず、Ni 相における反結合性 Ni 3d バンドは認められない。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。したがって、TM を Al が取り囲んだ局所構造が主に形成されていると考えられる。

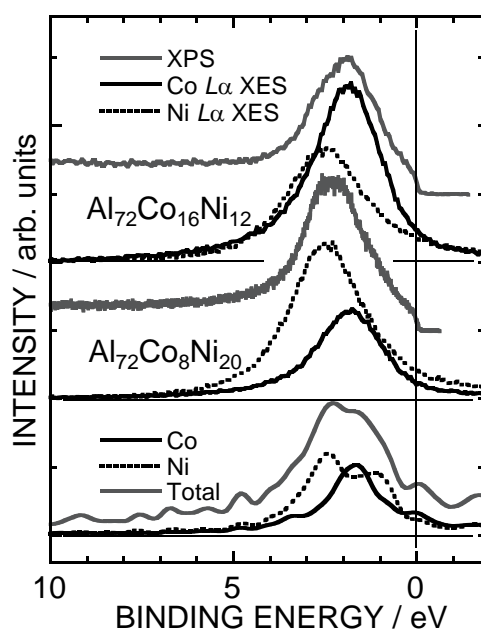


図 1. Al-Ni-Co の発光スペクトル

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

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

