

Al-Mn-Fe, Al-Si-Mn-Fe 準結晶のメスbauer分光

東大生研, 阪大基礎工*, 東大物性研**, 京大化研***
 枝川圭一, 井野博満, 那須三郎*, 木村 薫**, 竹内 伸**
 新庄輝也***, 藤田英一*

Al-Mn ベース準結晶の局所的な原子構造および磁性を調べる目的で、 $\text{Al}_{77}(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)_{23}$, $x=0.25, 0.5$ および $\text{Al}_{72}\text{Si}_6(\text{Mn}_{1-x}\text{Fe}_x)_{22}$, $x=0.01, 0.25$ のメスbauer分光を行なった。

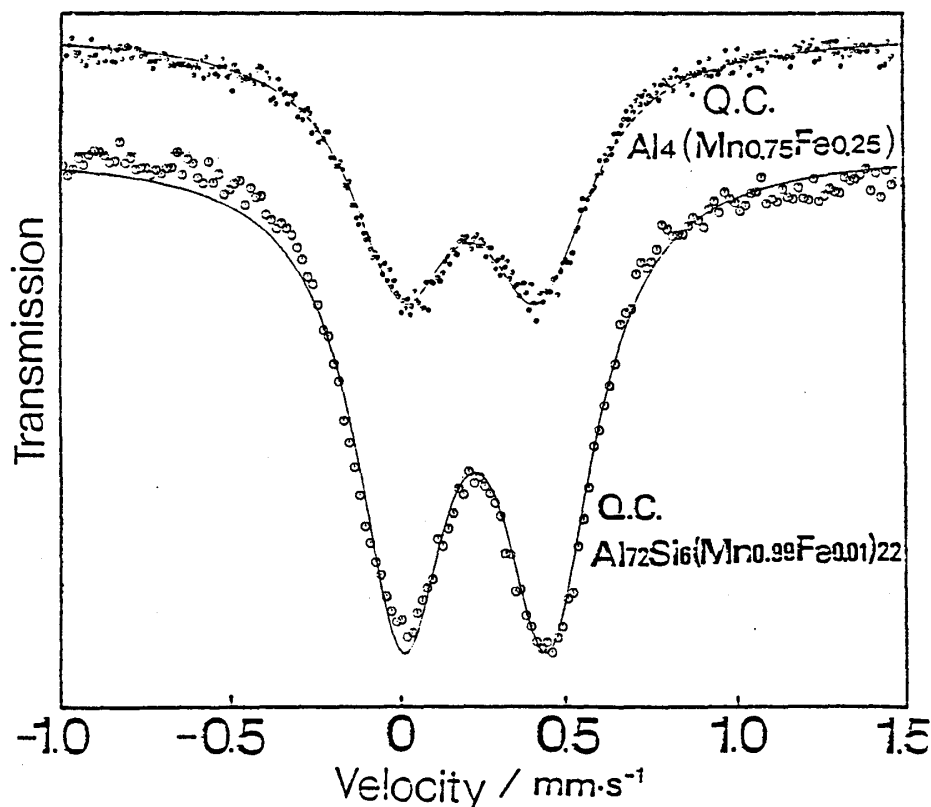


Fig 1

Fig 1 に常磁性 doublet で fit したときのスペクトルの例を示す。半値巾が純鉄 reference (0.22 mm/s) に比べて広く、四重極分裂 (Q.S.) に分布があり、Fe 原子がいくつかの異なる環境にあることを示している。一方、スペクトルの対称性がよいことから isomer shift (I.S.) は、各サイトではほぼ等しく、電子状態は似かよっている。I.S. の値は Al-Fe 金属間化合物と比べてそう違わない。

Table 1 は上記 4 つの試料についてのメスbauerパラメーターを示したもので、I.S.、Q.S. の値の組成による変化は大きくない。注目されるのは、Si を含んだ試料では、半値巾が狭くなっていることで、Si を添加することで格子全体の歪みが緩和されて、よりきれいな準結晶ができたものと思われる。

Fig 2 は、 $\text{Al}_{77}(\text{Mn}_{0.75}\text{Fe}_{0.25})_{23}$ 準結晶を 4.2 K でと線に平行な外磁場 $H=0, 3.0, 4.5 \text{ T}$ 中で測定したスペクトル

Table-1 Mössbauer parameters of Al-Mn base quasi-crystal.
(at 290K)

specimen	IS/mm·s ⁻¹	QS/mm·s ⁻¹	width/mm·s ⁻¹
Al ₇₂ Si ₆ (Mn _{0.99} Fe _{0.01}) ₂₂	0.231	0.434	0.325
Al ₇₂ Si ₆ (Mn _{0.75} Fe _{0.25}) ₂₂	0.229	0.402	0.319
Al ₇₉ (Mn _{0.75} Fe _{0.25}) ₂₁	0.214	0.402	0.364
Al ₇₉ (Mn _{0.5} Fe _{0.5}) ₂₁	0.218	0.377	0.364

である。実線は内部磁場ゼロとしたときの計算スペクトルであり、両者がよく一致することから、Fe原子は磁気モーメントを持たないと結論された。Al₇₂Si₆(Mn_{0.99}Fe_{0.01})₂₂でも同様な結果が得られ、Al-Mn 準結晶中のMnが磁気モーメントをもつとゆう磁化率測定やNMRの結果と比較して次の可能性が考えられる。(1) FeがMnと置換することで磁気モーメントが消える。(2) Mnに磁気モーメントをもつサイトともたないサイトがあり、Feは、磁気モーメントをもたないサイトと置き換わる。

このことを明らかにするために、Al₇₂Si₆(Mn_xFe_{1-x})₂₂ x=0, 0.01, 0.25 の準結晶において磁化率測定を行なった。その結果上記3組成で遷移金属一原子当たりの有効磁気モーメントの大きさは変わらなかった。このことは、上記(2)の解釈をサポートしている。またFig 2の解析の結果、結晶電場勾配テンソルの異方性定数は0.6、最大主軸方向成分V_{zz}は負の成分が80%正の成分が20%であることがわかった。

続いて、既存の原子構造モデルについて電場勾配の計算を行ない、それによってスペクトルを求め、実験スペクトルとの比較を試みた。計算を行なったのは、prolate とoblateの各vertexにMn、各edge-center とprolate の body-centerにAlを置いたモデルであり、準結晶格子中のMnサイトを整理し、各Al、Mn位置に点電荷を置き、各Mnサイトの電場勾配を計算した。Fig 3にAlとMnの電荷をいろいろ変えて求めた計算スペクトルを示す。今の場合、Fe原子は、各Mnサイトに均等

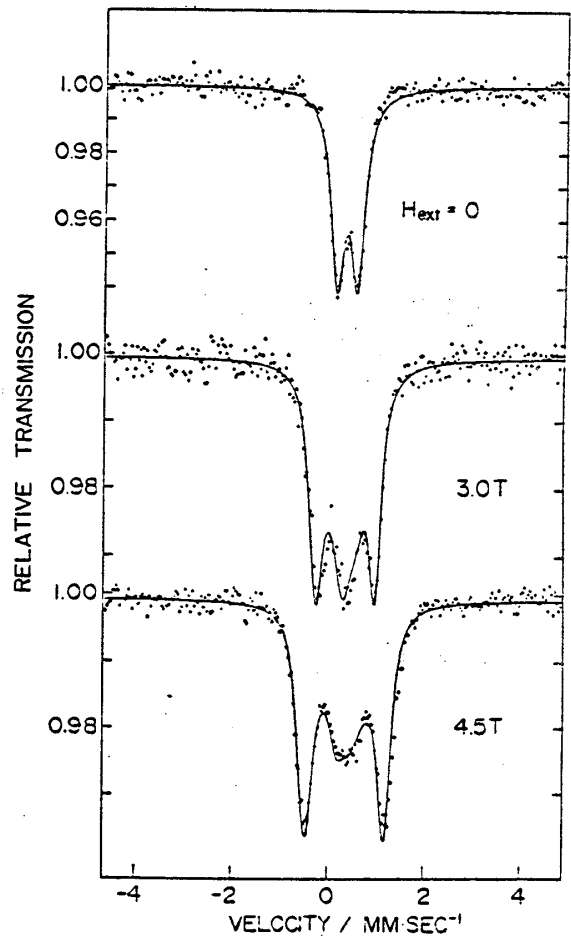


Fig 2

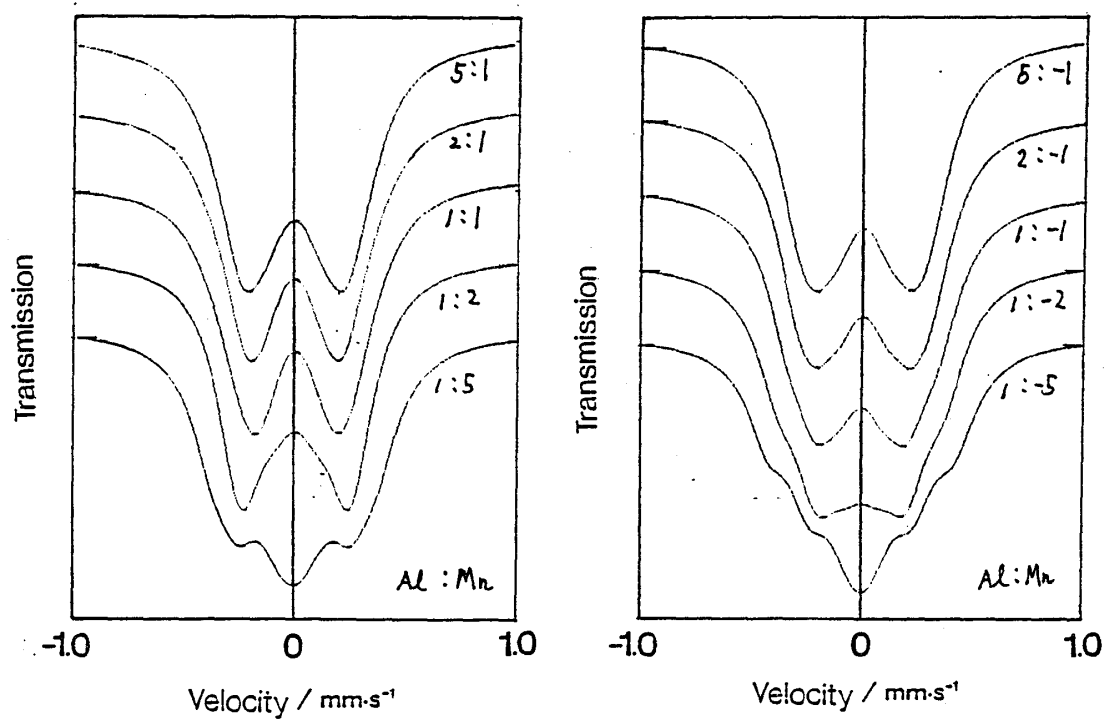


Fig 3 Al,Mn の電荷の比を色々変えて計算したAl-Mn 準結晶のメスバウアースペクトル

に入っているとして計算しており、Feがsite selectionをしているとなるとさらに検討が必要である。また、他のモデルについても計算を行なう予定である。

最後に、磁化率測定でご協力いただいた物性研の安岡弘先生、清水楨氏、試料作製に骨を折ってくださった井野研究室の永山勝久氏に深く感謝致します。