

論文の内容の要旨

論文題目 準結晶の電子構造に関する研究

岡田 純平

準結晶は 5 回対称、10 回対称など結晶に許されない回転対称性をもった秩序構造物質である。1984 年に準結晶が発見されて以来、数々の手法を用いて準結晶の研究が行われてきた。その大きな研究目標は「準結晶の本質とは何か」を明らかにすることである。準結晶はアモルファスでも結晶でもない準周期性で特徴付けられる原子構造を持つ。では準結晶の電子構造の特徴は何か、すなわち準周期性は電子構造にどのように反映されるのか、という問題は極めて重要な問題でありながら、未だに本質的な答えは得られていない。本研究の目的は、この問題に対して実験的に手がかりを得ることである。

本研究では、Break Junction Spectroscopy (BJS) 測定および高分解能コンプトン散乱測定を用いて準結晶の電子構造を研究した。これらの測定手法は、物性研究の有力な研究手段であるが、準結晶研究に用いられたことは殆どない。本研究ではチョクラルスキー法により作製した極めて良質な単準結晶を用いた。このような極めて良質な単準結晶を用いた測定は本研究が初めてである。そこでこれらの新しい測定法と良質な試料を組み合わせ、まだ発見されていない新しい準結晶の電子構造を観測することを試みた。

まず準結晶の BJS 測定結果についてまとめる。

(1) i -AlPdMn (単準結晶)

- ・幅 25meV の擬ギャップ端を明瞭に観測した。
- ・ E_F (フェルミエネルギー) に微細な dip 構造を観測した。
- ・他の手法 (STM, Point Contact) のトンネル分光測定で報告されている \sqrt{V} 依存性を示すスペクトルを観測した。

(2) α -AlMnSi (単準結晶)

- ・幅 25meV の擬ギャップを直接観測した。
- ・ \sqrt{V} 依存性を示すスペクトルを観測した。近似結晶で \sqrt{V} 依存性を示すスペクトルが観測されたのは初めてである。

(3) i -AlCuFe (単準結晶)

- ・ E_F に幅 3.3~6.5meV の微細な擬ギャップを非常に明瞭に観測した (図 1)。
- ・ E_F に幅 140~145meV の擬ギャップを観測した (図 2)。

(4) d -AlCuCo (単準結晶)

- ・ E_F にまたがって存在する幅 6~12meV の微細な擬ギャップを非常に明瞭に観測した。
- 次に準結晶の高分解能コンプトン散乱測定結果をまとめる。

(5) ***d*-AlNiCo** (単準結晶)

- ・2次元準結晶の電子運動量密度分布の異方性を観測した。この異方性はフェルミ面と擬ブリルアンゾーンの相互作用が方位によって異なることを反映している。
- ・コンプトンプロファイルから *d*-AlNiCo の自由電子的な電子数を定量的に求められることを明確にした。
- ・自由電子近似に基づいてフェルミ面と擬ブリルアンゾーンの位置関係を明らかにし、*d*-AlNiCo では Hume-Rothery 機構が有効に働いていないことを実験的に確認した。

(6) ***i*-CdYb**

- ・*i*-CdYb のコンプトンプロファイルが、Al 系準結晶と同様に放物線状の部分を持つことを明らかにした。
- ・*i*-CdYb の自由電子的な電子が寄与しているコンプトンプロファイルに放物線状とは全く異なるプロファイルを観測した。これは Yb(5*d*)-*sp* 混成を反映している可能性がある。
- ・*i*-CdYb の電子状態密度の擬ギャップ形成に *sp-d* 混成と Hume-Rothery 機構が共に有効に働いている可能性を指摘した。

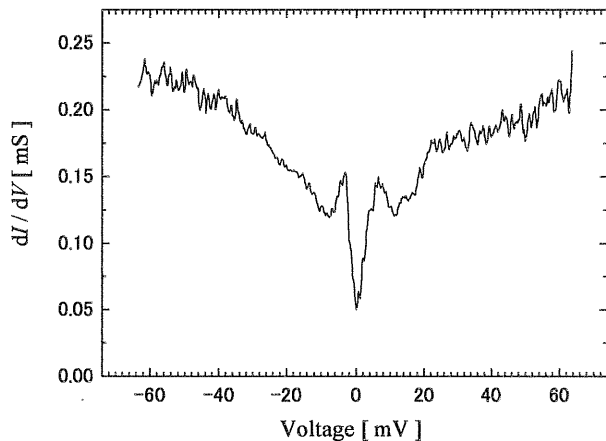


図1 *i*-AlCuFe のトンネル分光スペクトル

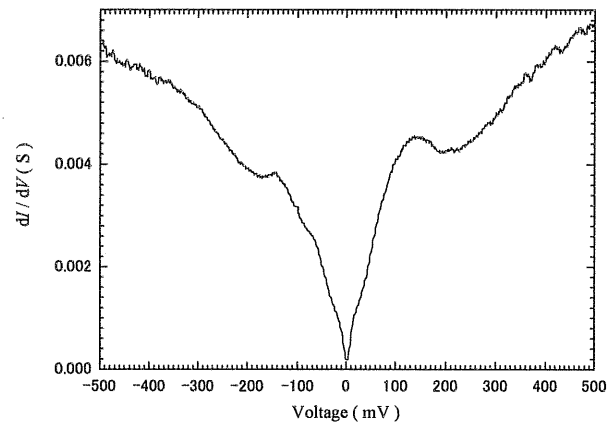


図2 *i*-AlCuFe のトンネル分光スペクトル

本研究の成果とその意義を述べる。本研究の第一の成果は、BJS 測定によって *i*-AlCuFe 準結晶の電子状態密度の E_F に幅 3.3~6.5meV の微細な擬ギャップが存在することを明確にしたことである (図1)。

本研究の第二の成果は、*i*-AlCuFe 準結晶の電子状態密度の E_F に幅 140~145meV の擬ギャップを観測したことである (図2)。幅数百 meV の擬ギャップの存在は理論的に確立しており、また光電子分光測定から擬ギャップの存在が強く示唆されている。しかし、 E_F 近傍の電子構造の直接観測を最も得意とするトンネル分光測定で観測されていないことが問題となっていた。本研究の結果はこの問題点を解決するものである。

本研究の第三の成果は、電子について定量的な情報を得ることができるというコンプトン散乱の特徴を活かし、準結晶の自由電子的な電子数を初めて定量的に求めたことである。これに基づいて準結晶の安定性と Hume-Rothery 機構のかかわりについて定量的な議論を行うことができた。

本研究の第四の成果は、*i*-CdYb のコンプトン散乱測定で *sp-d* 混成を反映する可能性のあるコンプト

ンプロファイルを観測したことである。もし混成を捉えているのであれば、このプロファイルから混成状態にある電子数を定量的に決定することができる。

今後の課題・展望を述べる。まず BJS 測定について述べる。本研究で明らかになった BJS 測定の課題は、準結晶のような複雑な電子構造を持つ物質がどのようなスペクトル形状を示すのか理論的に明らかにする必要性である。これまでに行われたトンネル分光測定は大多数が STM を用いたものであるため、スペクトルの理論研究も STM を対象にしたものが大多数である。BJS 測定で得られるスペクトルは両電極の電子構造の畳み込みを反映したものであるため、直感的に理解することが難しい。したがって、例えばスペクトルの形状から物性情報を読み取ることが困難である。BJS 測定は、清浄で新鮮なトンネル接合が作製可能であり、安定なトンネル接合が得やすいことからエネルギー分解能を 0.01meV 以上に向上させられる。またトンネル接合間距離を非常に小さく保つことが可能なので、様々な情報を含んだ微細なトンネル電流の検知が可能である。このように潜在能力が豊かな測定法であるので、今後 BJS 測定はトンネル分光の有力な手段として広がるであろう。そのためには、BJS 測定で得られるスペクトルの理論的研究が必要である。次に BJS 測定の今後の展望について述べる。本研究では、準結晶の E_F 近傍の微細な電子構造を BJS 測定により観測できることを示した。本研究の結果のみでは断言できないが、すべての準結晶が E_F に微細な擬ギャップを持つと予想される。その場合当然、合金系によって擬ギャップ幅・深さが異なるであろう。例えば E_F の擬ギャップは熱電材料の性能と密接に関係する。したがって、BJS 測定による擬ギャップ観測とこれまでの熱電材料研究の比較、またこれらの情報に基づく新たな熱電材料開発が今後の展開として期待できる。

次にコンプトン散乱測定について述べる。本研究では、準結晶合金の自由電子的な電子数をコンプトン散乱測定により定量的に求められることを明らかにした。電子数について定量的な情報を得ることは非常に重要であるが、これが可能なのは現段階でコンプトン散乱測定のみである。ところで、本研究では準結晶合金を対象にしたが、そもそも自由電子的な電子数が問題になったのは 1930 年代の Hume-Rothery にまでさかのぼる。しかしながら自由電子的な電子数を実験的に決定しようとする研究はこれまで行われてこなかった。その意味で典型的な Hume-Rothery 型電子化合物など古典的な合金系のコンプトン散乱測定が必要である。このような合金系はこれまでの物性測定の蓄積があるので、コンプトン散乱測定結果を多面的に考察することが可能である。例えば、*sp-d* 混成がコンプトンプロファイルの形状にどのように反映されるのかを明確にできるであろう。今後のコンプトン散乱測定の展開として期待できる。