

CoVMnAl 合金の原子配列と電子状態

梅津理恵、福島鉄也*、齊藤耕太郎**、小野寛太**、黒田文彬*、小口多美夫*、石垣徹***
(東北大、*阪大、**高エネ研、***茨城大)

Atomic configuration and electronic state for CoVMnAl alloy

R.Y. Umetsu, T. Fukushima*, K. Saito**, K. Ono**, F. Kuroda*, T. Oguchi*, T. Ishigaki***
(Tohoku Univ., *Osaka Univ., **KEK, ***Ibaraki Univ.)

はじめに

近年、様々な 4 元系ホイスラー合金がハーフメタル型電子状態やスピギャップ半導体 (SGS) 型電子状態を有することが第一原理計算において報告されている¹⁻³⁾。これらの合金の電子状態は原子配列や規則度に影響されると考えられるが、合金が電子散乱因子の近い元素から構成されている場合、粉末 X 線回折測定から結晶構造を精密に決めることは困難である。本研究では、CoVMnAl 合金の多結晶試料を作製して粉末中性子回折測定を行い、原子の配列を決定するとともに、その構造について電子状態の計算を行った。

実験方法

CoVMnAl 多結晶試料は高周波浮揚溶解 (レビテーション溶解) により作製し、1473 K にて 2 日間均一化熱処理を施した後、水中に急冷して得た。規則-不規則相変態温度を調べるために示差走査熱量 (DSC) 測定を行い、その結果を基に時効熱処理温度を決定した。磁化測定は SQUID 磁束計を用い、粉末中性子回折測定は、J-PARC の BL20 に設置されている茨城県材料構造解析装置 (iMATERIA) を用いて飛行時間法 (TOF) により行い、解析には Z-Code を用いた^{4,5)}。

実験結果

ICP 発光分光分析法により、得られた合金試料の組成は Co-26.7, V-26.1, Mn-22.1 and Al-25.1 at.% であることが確認された。Fig. 1 に 500 Oe の磁場中で測定した熱磁化曲線を示す。内挿図は 5 K における磁化曲線である。試料はそれぞれ 1323 K、または 873 K にて時効熱処理を施して急冷した。磁化曲線より得た自発磁化の値を単位砲当たりの磁気モーメントに換算すると、それぞれ 0.15、0.04 μ_B /f.u. と非常に小さく、高い温度から急冷して得た試料の方が値がやや大きい。熱磁化曲線の温度微分において極小値をキュリー温度と定義すると、それぞれ 48 K, 11 K であった。Fig. 2 は室温で測定を行った、873 K より急冷して得た CoVMnAl 合金の粉末中性子回折測定による回折パターンである。LiMgPdSn 型構造として解析を行うと、実験で得られた回折パターンは全く説明がつかず、空間群 225 の $L21_b$ 型構造とした場合に最も良く実験結果が再現された。この場合の電子状態は、ハーフメタル性は維持されるものの、8c サイトの Co と Mn の不規則化により SGS 型の電子状態の特徴は損なわれていた。

参考文献

- 1) X. Dai *et al.*, J. Appl. Phys. 105 (2009) 07E901.
- 2) G. Z. Xu *et al.*, Euro. Phys. Lett. 102 (2013) 17007.
- 3) K. Özdoğan *et al.* J. Appl. Phys., 113 (2013) 193903.
- 4) R. Oishi *et al.*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 600 (2009) 94.
- 5) R. Oishi-Tomiyasu *et al.*, J. Appl. Cryst. 45 (2012) 299.

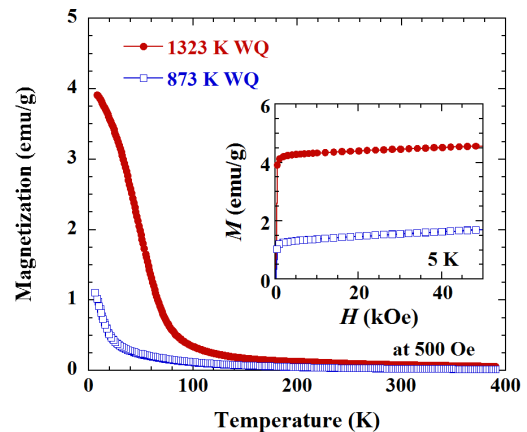


Fig. 1 Thermomagnetization and magnetization curves for the CoVMnAl specimens obtained by the annealing at 1323 K and 873 K.

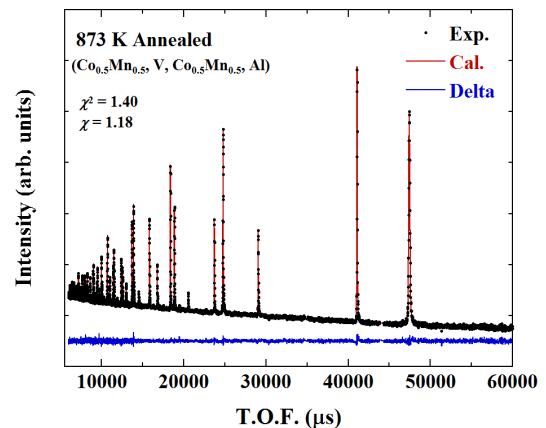


Fig. 2 Powder neutron diffraction pattern of the CoVMnAl specimen annealed at 873 K.