The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Mossbauer Spectroscopic Study of Iron-Boron Compounds and Iron-doped β-Rhombohedral Boron
Author(s)	世木, 隆
Citation	大阪大学, 2004, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/45046
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【7】

氏　　名	世木　隆（せぎ　たかし）
博士の専攻分野の名称	博　士（理　学）
学　位　記　番　号	第　18832　号
学位授与年月日	平成16年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学　位　論　文　名	Mössbauer Spectroscopic Study of Iron-Boron Compounds and Iron-doped β-Rhombohedral Boron （鉄ボロン化合物および鉄ドープβ菱面体ボロンのメスバウアー分光による研究）
論　文　審　査　委　員	（主査） 教　授　那須　三郎 （副査） 教　授　菅　滋正　教　授　北岡　良雄

論　文　内　容　の　要　旨

Fe-B化合物及びFe doped β-rhombohedral Bの物性、特にその磁気的性質はまだ明らかではなく、それらの物性を再検討する目的で、FeB、Fe_2B、*tetra*-Fe_3Bの^{57}Feメスバウアー分光測定を行った。また、Fe doped β-Bは X線回折と^{57}Feメスバウアー分光測定を併用する事によって行った。メスバウアー分光測定は300 Kから4.5 Kの間で行なった。得られた超微細パラメータ、アイソマーシフトと超微細磁場を理解する為に、FeB、Fe_2B、Fe doped β-Bのモデルクラスターを用いた第一原理スピン分極DV-Xα分子軌道計算を行った。この結果、以下のような事が判った。（I）FeBの6 Kにおけるメスバウアースペクトルは、13.1 Tの超微細磁場を持つ磁気分裂一成分で解析できる。（II）Fe_2Bのメスバウアースペクトルは、電気4極子相互作用と磁気相互作用が混合して存在することによって説明される事が判った。（III）*tetra*-Fe_3Bは三成分のスペクトルの重畳したモデルよりも4成分のスペクトルの重畳したモデルでスペクトル解析するほうが、χ^2値は減少した。（III）2 at.%Feと98 at.%Bの混合粉末をアーク溶融する事によって得られた試料は、FeBとFe doped β-B相を含むことがX線回折測定から確認された。（IV）Fe doped β-Bのスペクトルは三成分の二重線によって分解できるγ_0成分はA_1サイトのFe原子に由来し、一方γ_1とγ_2はDサイトから由来すると解釈される。（V）磁気転移点は11.8 Kである事が^{57}Feメスバウアーサーマルスキャン法によって明らかになった。（VI）そして温度降下とともに磁気分裂成分の分裂幅は大きくなり、4.5 Kにおいて得られる磁気分裂幅の値はFeBの値よりも大きい。また、クラスター計算から、次の様な事が明らかになった。（VII）FeB、Fe_2B、Fe（A_1）β-BとFe（D）β-Bの原子核位置における電子密度は、実験結果から得られるアイソマーシフト値の傾向と一致し、特にA_1サイトでの電荷密度はDサイトのそれよりも大きい。（VIII）計算されたFe原子あたりの磁気モーメントの値はDサイトのFe原子の方がA_1サイトのFe原子の値よりも大きい。したがって、γ_0はA_1サイトのFe原子に由来し、一方でγ_1とγ_2はDサイトのFe原子に由来する事が考えられる。

論文審査の結果の要旨

本論文は、Fe-B 化合物及び Fe doped β-rhombohedral B の物性を明らかにする目的で、FeB、Fe_2B、tetra-Fe_3B の ^{57}Fe メスバウアー分光測定を行い、得られた成果をまとめたものである。特に、Fe doped β-B については X 線回折と ^{57}Fe メスバウアー分光測定を併用する事によって行っている。メスバウアー分光測定は 300 K から 4.5 K の間で行い、得られた超微細構造パラメータ、アイソマーシフトと超微細磁場を理解する為に、FeB、Fe_2B、Fe doped β-B のモデルクラスターを用いた第一原理スピン分極 DV-Xα 分子軌道計算から電子状態を明らかにし、その電子状態から得られた各化合物のメスバウアー・パラメータの詳細を議論している。

得られた成果を以下にまとめると、

(1) FeB の 6 K におけるメスバウアースペクトルは、13.1 T の超微細磁場を持つ磁気分裂一成分である。

(2) Fe_2B のメスバウアースペクトルには、電気・磁気超微細相互作用が混在している。

(3) tetra-Fe_3B は四成分のスペクトルの重畳したモデルでスペクトル解析する方ができる。

(4) 2 at.%Fe-98 at.%B 混合粉末のアーク溶融試料の X 線回折から試料は FeB と Fe doped β-B 相を含む。

(5) Fe doped β-B のスペクトルは、三つの二重線によって分解でき γ_0 成分は A_1 サイトの Fe 原子、γ_1 と γ_2 は D サイトの Fe と同定できる。

(6) Fe-doped β-B の磁気転移点は 11.8 K である事が新しく明らかになった。

(7) 4.5 K において観測される超微細磁場の値は分布していて平均値は FeB の値よりも大きい。

(8) FeB、Fe_2B、β-B 中の Fe (A_1) と Fe (D) での原子核位置全電子密度は、実験結果から得られるアイソマーシフト値の傾向と一致し、特に A_1 サイトでの電荷密度は D サイトのそれよりも大きいことがクラスター計算から明らかになった。

(9) Fe 原子あたりの磁気モーメントの計算値から γ_0 は A_1 サイトの Fe 原子に由来し、γ_1 と γ_2 は D サイトの Fe 原子に由来する事が示唆された。

以上のように本論文は FeB 化合物および Fe doped β-B の物性に関して新しい知見を得、物性物理工学領域の進展に寄与しているので博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。