

課題番号 : 2021A-E23
利用課題名 (日本語) : 層状塩化窒化物 TiNCl の電子構造
Program Title (English) : Electronic structure of layered nitride chloride TiNCl
利用者名 (日本語) : 片岡範行^{1,2)}, 横谷尚睦^{1,2)}, Li Yajun^{1,2)}, 瀬戸口太朗²⁾, 脇田高德^{1,2)}
Username (English) : N. Kataoka, T. Yokoya, Y. J. Li, T. Setoguchi, T. Wakita
所属名 (日本語) : 1) 岡山大学 異分野基礎科学研究所 2) 岡山大学 大学院自然科学研究科
Affiliation (English) : 1) RIIS, Okayama Univ. 2) Grad. Sch. Nat. Sci. Technol. Okayama Univ.

キーワード :

1. 概要 (Summary)

非従来型超伝導候補物質である層状窒化塩化物 TiNCl の電子構造を調べるために、SPring-8 BL23SU に設置されている軟 X 線角度分解光電子分光装置を用いて、TiNCl、Na_xTiNCl、(CH₅N)_{0.25}TiNCl に対して、軟 X 線吸収/光電子分光測定を行った。その結果、CH₅N から TiNCl への電荷移動を観測した。また、金属的な TiNCl では、フェルミ準位の電子軌道が Ti3d であることを見出した。

2. 実験 (目的,方法) (Experimental)

層状窒化塩化物 TiNCl はアルカリ金属や有機分子などを層間に挿入することで超伝導を示す。アルカリ金属と有機分子のそれぞれを挿入した場合で、超伝導転移温度が大きく異なるため、超伝導機構に深く関わるパラメータが異なることが予想される。本課題では、TiNCl、Na_{0.3}TiNCl、(CH₅N)_{0.25}TiNCl に対して、内殻及び価電子帯光電子分光、X 線吸収分光(XAS)、Ti2p-3d 共鳴光電子分光測定を行い、電子状態の比較から、TiNCl における超伝導機構に関する知見を得ることを目的とする。

測定は TiNCl、Na_{0.3}TiNCl、(CH₅N)_{0.25}TiNCl の多結晶試料を用いた。TiNCl は大気中での反応性が高いため、試料の準備は全て、Ar 雰囲気グローブボックス内で調整した。調整した試料をトランスファーベッセルに封じ切り、BL23SU の軟 X 線角度分解光電子分光装置に取り付けることで、大気に晒すことなく試料導入を行なった。試料を真空中で破断することで清浄表面を作成した。試料温度は 40K、エネルギー分解能は 100-300meV、光エネルギーは 450-470、1400eV に設定した。実験は、Ti2p,N1s、Cl2p、C1s 内殻準位及び価電子帯の光電子分光測定、Ti2p-3d 共鳴光電子分光測定、Ti2p XAS 測定を行ない、各試料の比較を行なった。

3. 結果と考察 (Results and Discussion)

(CH₅N)_{0.25}TiNCl は X 線の照射によるダメージが観測されたため、C1s 内殻準位光電子スペクトルの照射時間依存性を計測することで、照射ダメージの少ない照射時間が照射後 20 分程度であることを見積もった。各試料の比較の結果、(CH₅N)_{0.25}TiNCl は Na_{0.3}TiNCl とよく似たスペクトル形状を示したため、(CH₅N)_{0.25}TiNCl にインターカレートした Pyridine は電子ドープとして働くことが明らかになった。また、(CH₅N)_{0.25}TiNCl における Ti2p-3d 共鳴光電子分光測定の結果、フェルミ準位近傍の構造に光電子強度の明瞭な共鳴増大が観測され、状態は小さいがフェルミ端を Ti3d 軌道が担っていることが明らかになった。今後は、解析を進め Na_{0.3}TiNCl との比較を行う。

4. その他・特記事項 (Others)

実験にご協力いただきました原子力研究機構の藤森伸一氏及び川崎郁斗氏に感謝いたします。