



PF研究会, Jan. 13 2008

「BL2Cユーザー研究会: PFの挿入光源における新しい研究の探究」

## 超伝導ボロンドープダイヤモンドの軟X線吸収発光

中村仁、黒木和彦

椛沢栄基

原田慈久

小口多美夫

高野義彦

入山慎吾、川原田洋

電気通信大学

東京都立産業技術高等専門学校

東京大学、JST-CREST、RIKEN/SPring-8

広島大学

NIMS

早稲田大学



HIROSHIMA UNIVERSITY



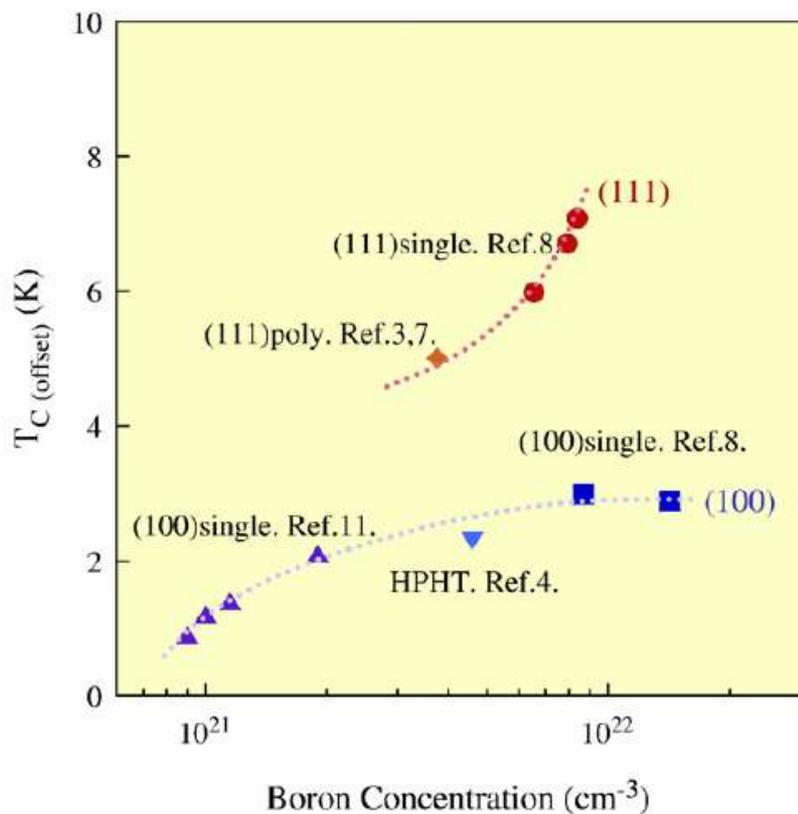
Center for X-Ray Optics

Materials Sciences Division  
E.O. Lawrence Berkeley National Lab





# ホモエピタキシャルBDDの超伝導転移温度



ホモエピタキシャル成長試料

T<sub>c</sub> @ (111) > @ (100)

⇒ キャリヤが有効に生成されない

- ・水素とのcomplex
- ・B-B対、クラスター
- ・格子間位置のB

⇒ 格子歪によるB-B対の生成

・共有結合半径: B(0.88Å), C(0.77Å)

ノドープダイヤモンド基板上にホモエピタキシャル成長させているために、成長方向によって格子歪が異なる

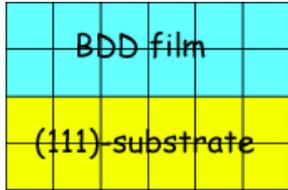
→ B-B対が選択的に成長?

Tanano et al., *Diamond and Related Materials* 16 (2007) 911.

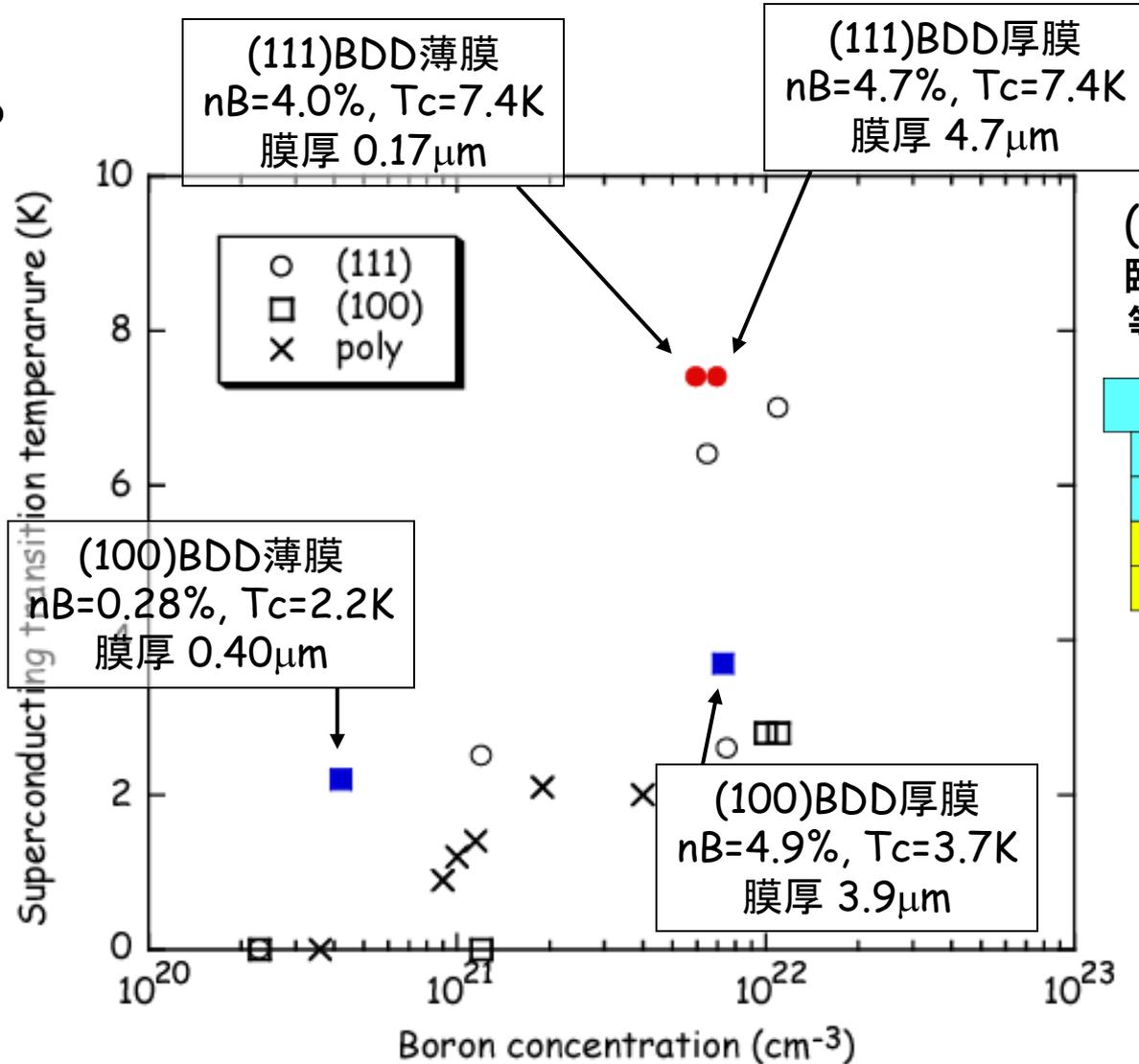
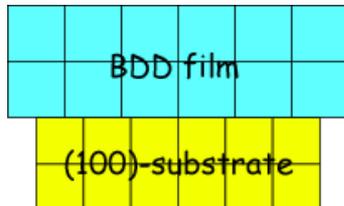


# 超伝導転移温度のボロン濃度依存性

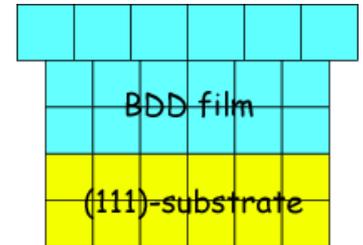
(111)BDD薄膜  
垂直方向に伸びる



(100)BDD  
等方的に伸びる



(111)BDD厚膜  
臨界膜厚以上で  
等方的に伸びる

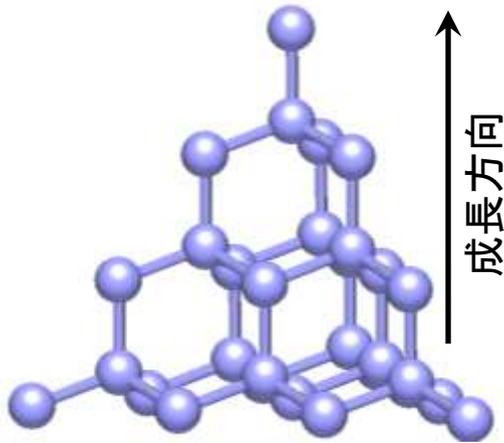




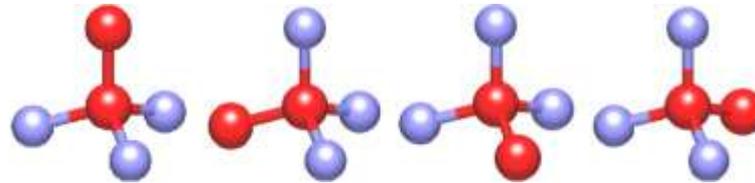
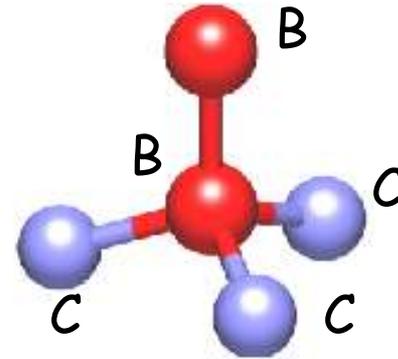
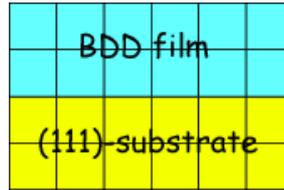
# 選択成長BB対のモデル~(111)

## (111)基板に成長させたBDD薄膜のBB対

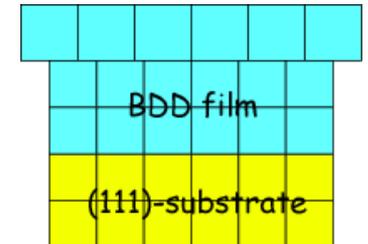
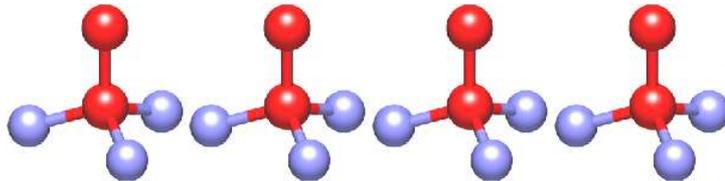
B-B ( $r_B \sim 0.88A$ )  
C-C ( $r_C \sim 0.77A$ )



(111)BDD薄膜  
垂直方向に伸びる



(111)BDD厚膜  
臨界膜厚以上で  
等方的に伸びる



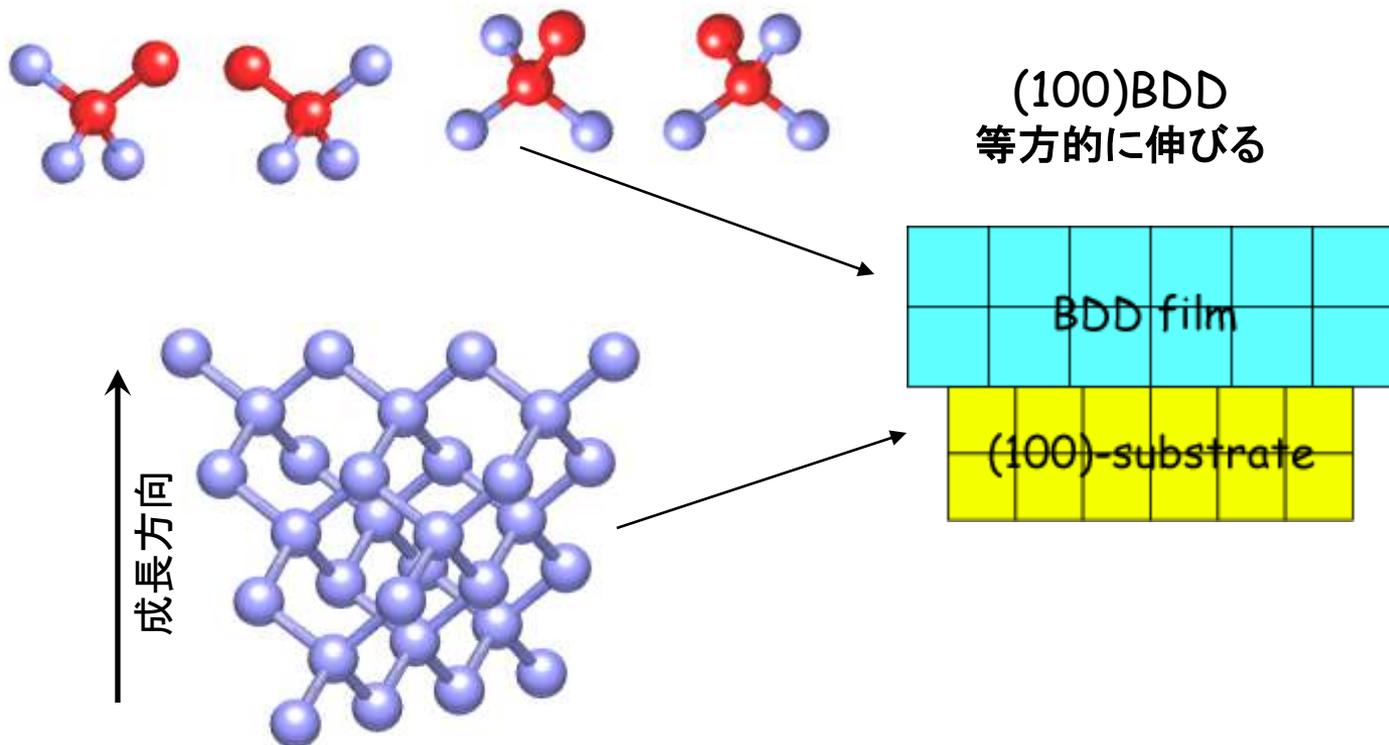


# 選択成長BB対のモデル~(100)

## (100)基板に成長させたBDD薄膜のBB対

B-B ( $r_B \sim 0.88 \text{ \AA}$ )

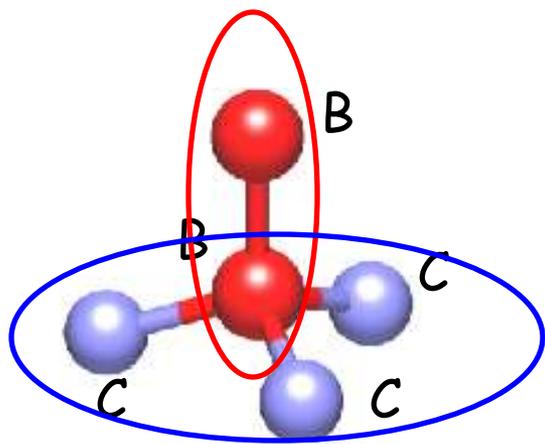
C-C ( $r_C \sim 0.77 \text{ \AA}$ )





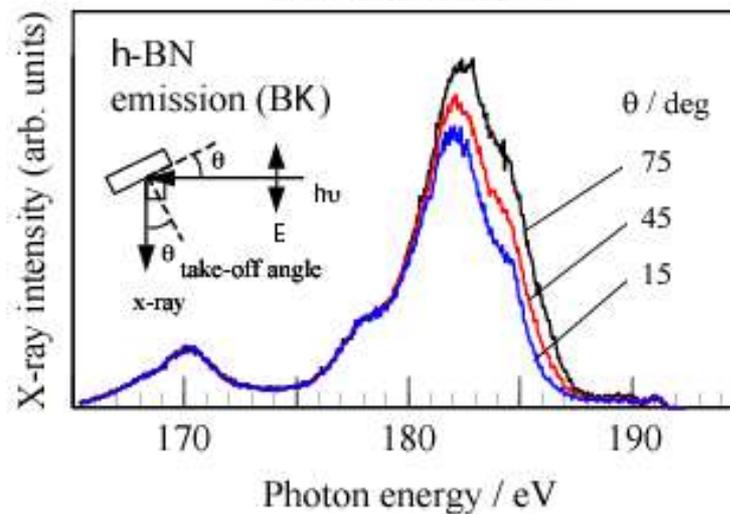
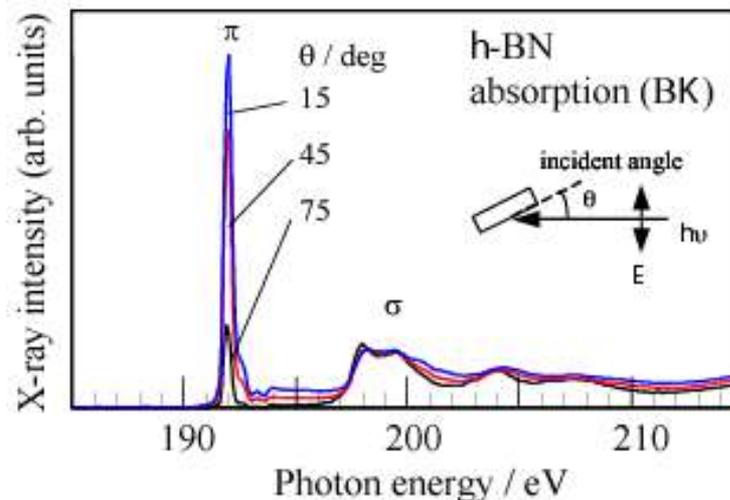
# BB対の電子状態

BB方向は非占有状態



占有状態の電子は  
BC<sub>3</sub>擬似面内にsp<sup>2</sup>的？

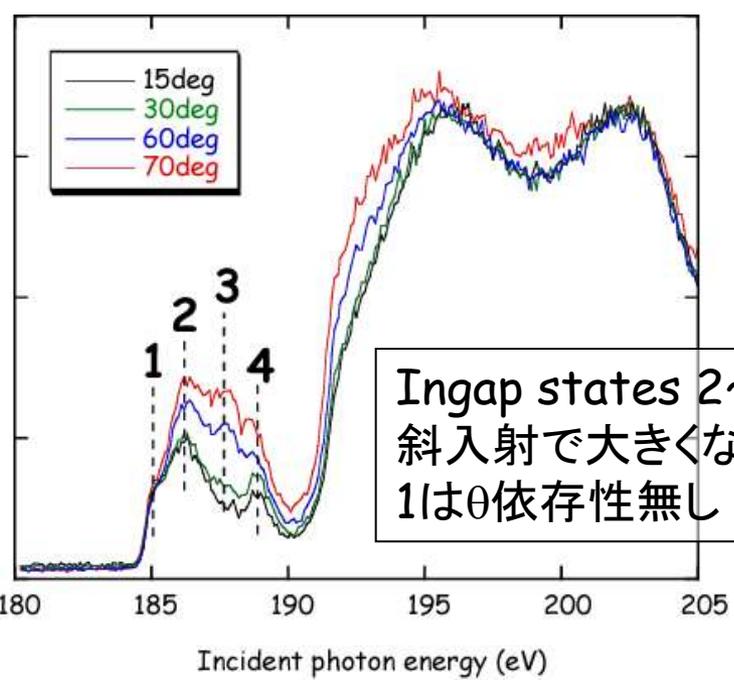
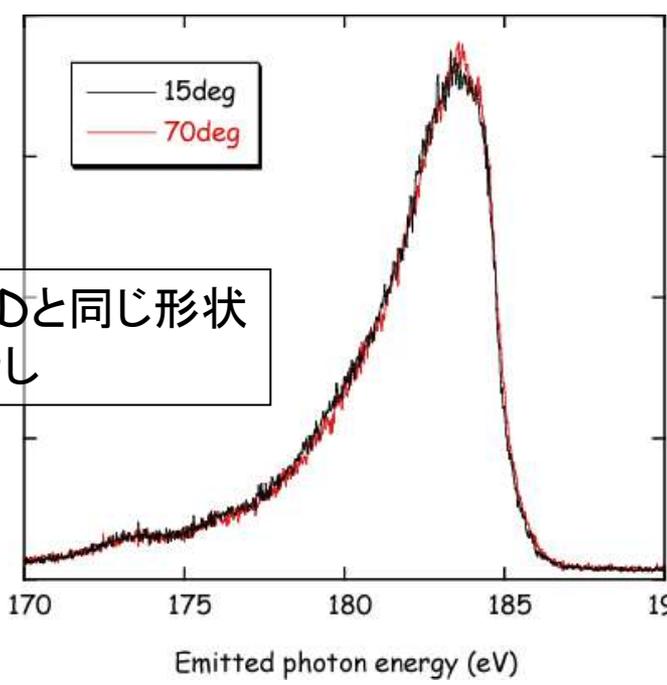
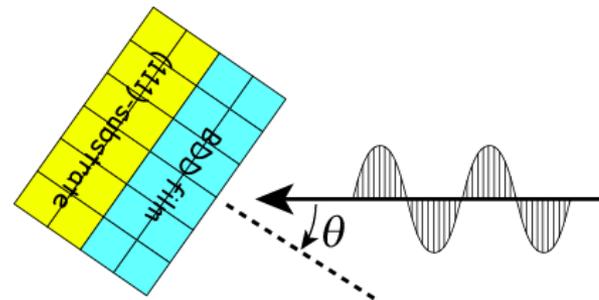
BB対が配向していれば  
hBN同様偏光依存性が観測される





# (111)BDD薄膜のB-K XES・XAS

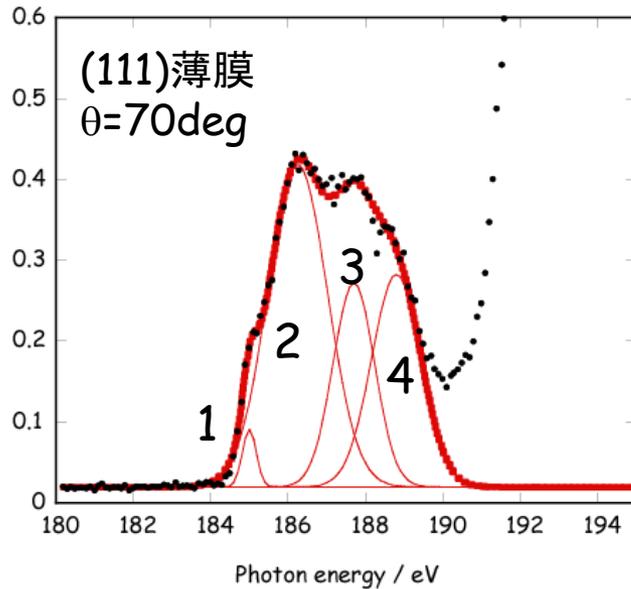
(111)BDD薄膜 (膜厚  $0.17\mu\text{m}$ )  
 $n_B=4.0\%$ ,  $T_c=7.4\text{K}$   
<111>方向に伸びる



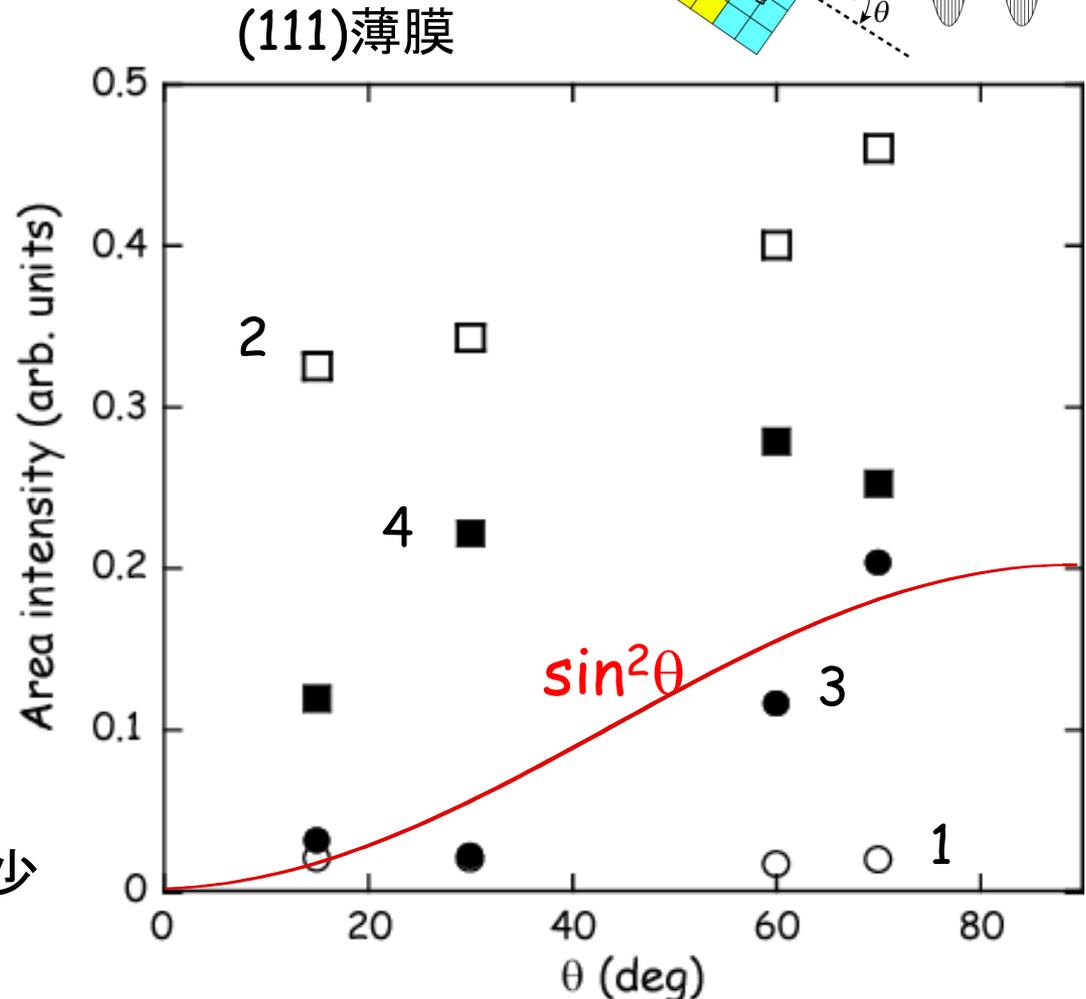
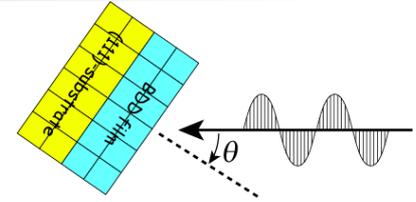


# B-K XASの偏光依存性 -(111)薄膜-

(111)BDD薄膜 (膜厚  $0.17\mu\text{m}$ )  
 $n_B=4.0\%$ ,  $T_c=7.4\text{K}$   
<111>方向に伸びる



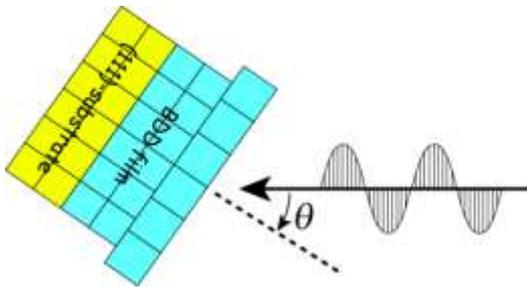
State-3:  $\sin^2\theta$ 依存性  
State-2,4: 低角度で強度減少  
State-1:  $\theta$ 依存性小



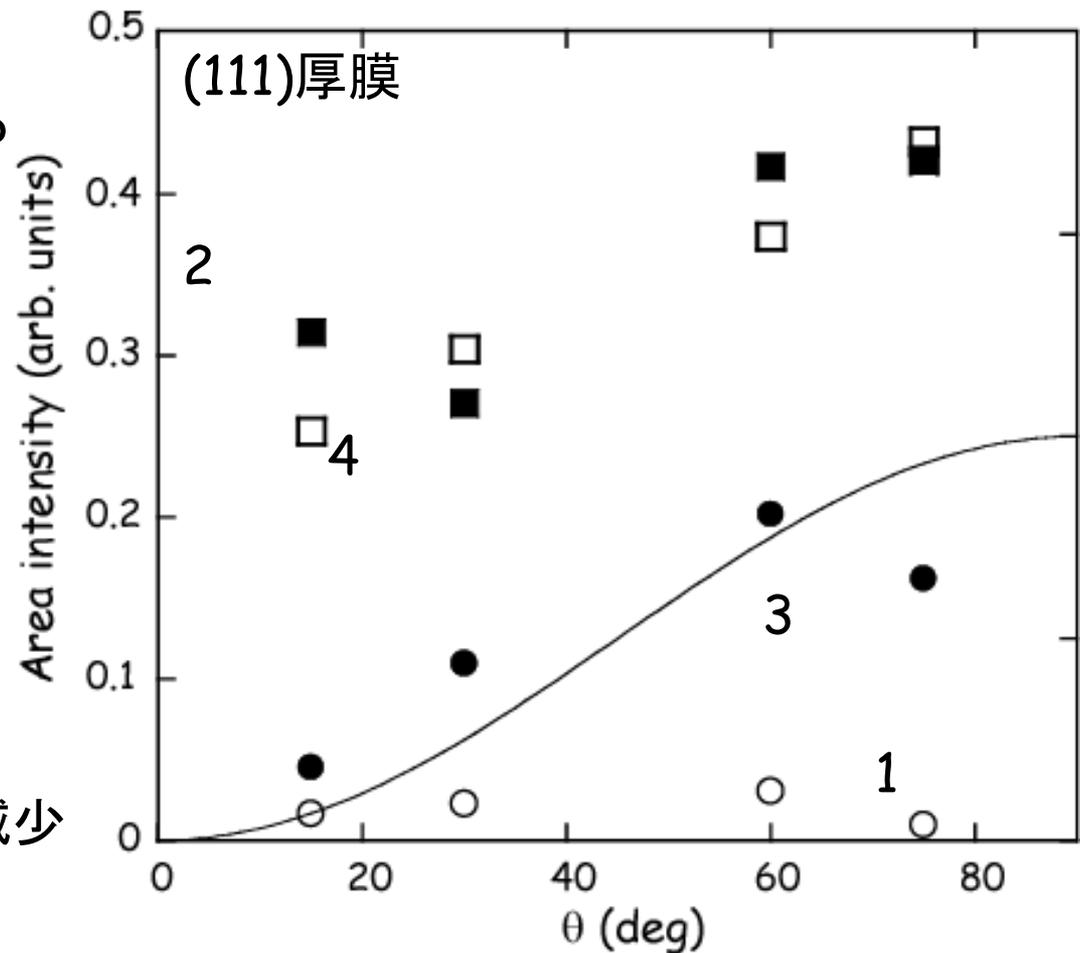


# B-K XASの偏光依存性 -(111)厚膜-

(111)BDD厚膜(膜厚  $4.7\mu\text{m}$ )  
 $n_B=4.7\%$ ,  $T_c=7.4\text{K}$   
臨界膜厚以上で等方的に伸びる

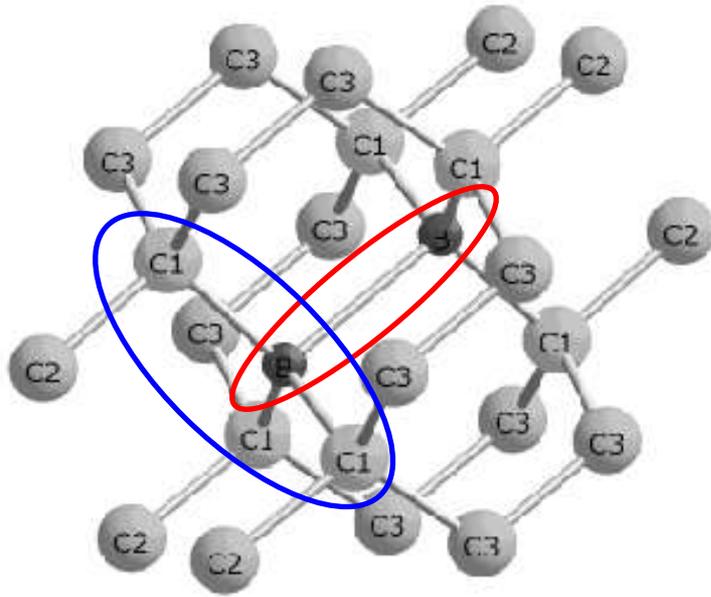


(111)薄膜と同様  
State-3:  $\sin^2\theta$ 依存性  
State-2,4: 低角度で強度減少  
State-1:  $\theta$ 依存性小

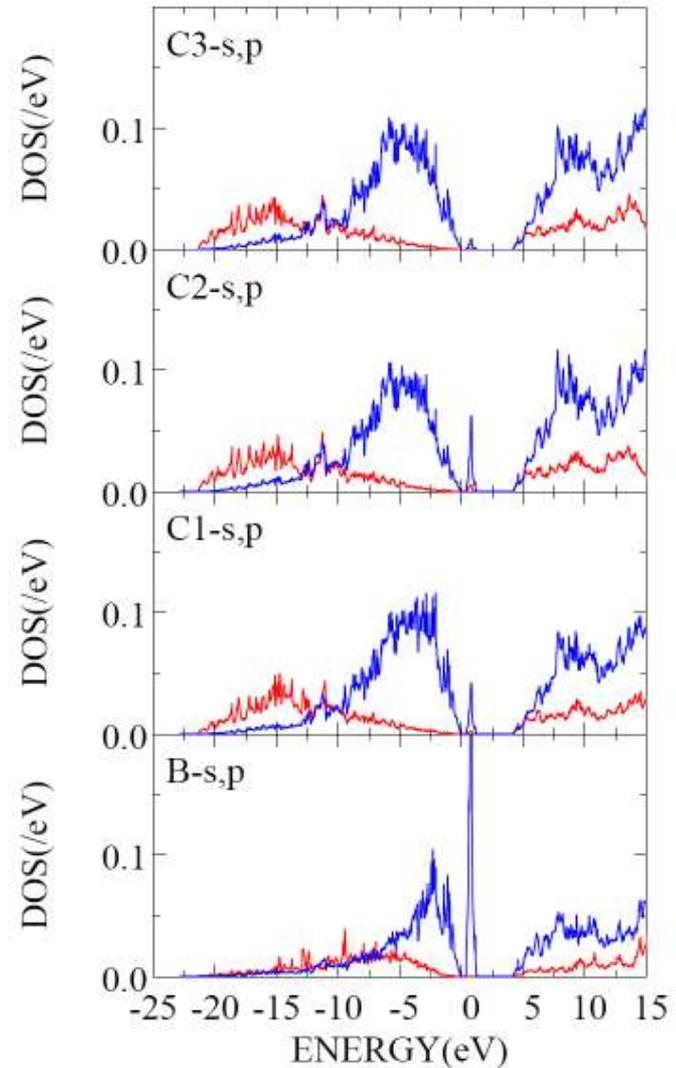




# $C_{62}B_2$ スーパーセルを用いた第一原理バンド計算

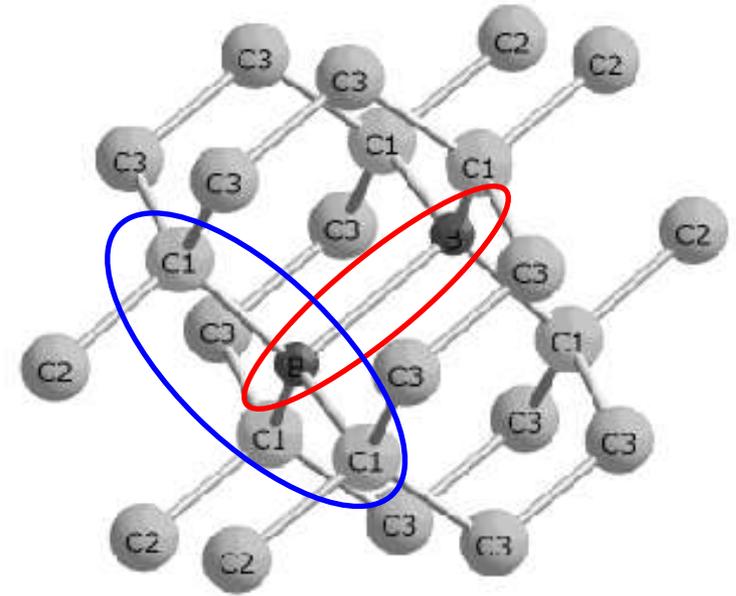
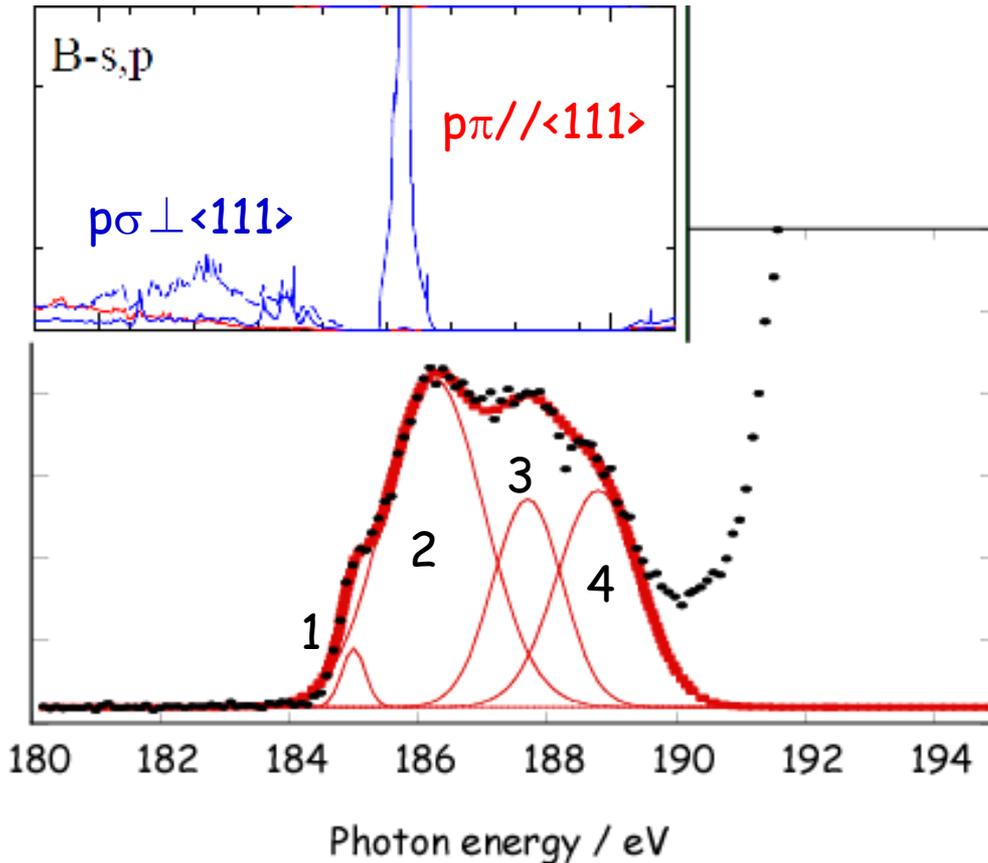


BB対形成に伴って、価電子帯近傍にピーク状のPDOSが現れる。  
→B-K XASのingap state ?





# $C_{62}B_2$ スーパーセルを用いた第一原理バンド計算



State-2:  $BB//\langle 111 \rangle$

State-1: 置換位置Bによって生じるホール状態

State-3,4: B-H, Bクラスター

バンド計算からは偏光依存性を示すのはstate-2

Ingap stateのエネルギーは格子長に敏感



# まとめ

## (111)BDD

- (111)試料では、成長方向に沿ってBB対が配向している事に起因するB-K XASスペクトルのingap状態強度の入射角度依存性が観測された。
- これらのingap状態の中で、187.7eVのstate-3は主としてBB対の<111>方向の非占有状態に起因すると考えられる。

## (100)BDD

- (100)試料では、B-K XASスペクトルに入射角度依存性は観測されず、等方的に格子伸長するモデルと矛盾しない。
- また、state-3が殆ど観測されず、この状態はB-B対がある特定の<111>方位に配向して格子が歪んだ際の電子状態と考えられる。

## バンド計算

- スーパーセルを仮定するとBBによるingap stateは価電子帯近傍に生じ、state-2とよく一致する。⇒格子緩和等に敏感なため要再検討
- BH状態を作るBの2p ingap stateは、Hの結晶学的位置により大きく変化する。state-2,4はBHやクラスター状態のBに対応していると考えられる。