

2001U001

超伝導体 2 ホウ化マグネシウムの光電子分光と X 線吸収による電子構造の研究

実験組織： 齋藤智彦、仲武昌史、柿崎明人*、北島義典、相浦義弘¹、中島秀樹²、森本理²
物質構造科学研究所、産業技術総合研究所¹、総合研究大学院大学²

実験期間： BL-11A：2001年4月24日 4月27日
BL-11D：2001年5月22日 5月27日

実験ステーション： BL-11A, BL-11D

研究目的

本研究では、新超伝導物質 MgB_2 の電子状態を解明するために光電子分光と X 線吸収分光スペクトルを測定した。まず光電子分光についてであるが、当初、 MgB_2 の単結晶作成は成功しておらず、また成功しても極めて小さい為に、角度分解光電子分光法は困難であることが解っていた。従って (1) 高分解能、あるいは(2) 共鳴の利用、の 2 つが方針として考えられる。すでに高分解能光電子分光によるフェルミ準位近傍のデータは発表され、BCS 理論の範囲内の可能性が高いことが報告されている。そこで我々は(2)の方針をとり、より大きなエネルギースケール(価電子帯全体)での電子状態の解明を目的として、 B_{1s} 共鳴光電子分光、X 線吸収分光を用いることにした。これらの手法により占有、非占有双方の電子状態のデータを集積し、バンド計算などの理論結果と比較検討する。

研究成果

まず占有状態側については、 B_{1s} $2p$ 吸収端近傍の 185 - 198 eV の励起光を用いて、 B_{1s} $2p$ 共鳴光電子分光測定を行ったところ、励起光エネルギー188 eV において、 B_{1s} $2p$ 吸収にともなう B $2p$ 軌道成分の共鳴増大が観測された。スペクトル形状は Vasquez らの XPS の結果に類似しており、6 eV 付近にピークを持った。しかしバンド計算では 4eV 付近に最大にピークがある。そこで、共鳴スペクトルを非共鳴スペクトルで規格化したところ、 B $2p$ 軌道成分を反映すると思われる 4 eV にピークを持つスペクトル形状が得られた。また、定始状態スペクトル(CIS)においても 4 eV 付近で最大の共鳴効果が得られ、規格化したスペクトル形状の 4 eV のピーク構造を裏付けた。

一方、非占有状態側については、 B_{1s} 吸収端付近の X 線吸収スペクトルを測定した結果、 MgB_2 由来と考えられるピークが観測されたが、ほかに h-BN とよく対応する構造も観測された。さらに、 B_2O_3 とよく対応する構造も観測され、これらの原因は、試料表面の窒化及び酸化であると考えられる。 MgB_2 由来と考えられるピークはバンド計算と比較的良好一致をみた。

以上のことから、XPS も今回の光電子分光でも、試料表面の不純物をシグナルとして拾っており、特に XPS の出版データは誤りであると結論した。一方、共鳴光電子分光と X 線吸収分光では、バンド計算に対応するスペクトル形状が得られることがわかった。但し、言うまでもなく試料の高純度化は今後の研究において不可欠である。

* 現：東京大学物性研究所