



高圧合成 RuN₂ の窒素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル

曾田一雄^{1,2,3}, 前口景祐¹, 加藤政彦¹, 丹羽健¹, 長谷川正¹, 高倉将一^{2,3}, 仲武昌史³

¹名古屋大学工学研究科, ²名古屋大学 SR 研究センター, ³あいち SR センター

キーワード：微小試料測定, 窒素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル, **marcasite 型 RuN₂**

1. 背景と研究目的

高温・高圧における後期遷移金属 T と超臨界窒素流体との直接反応で高い体積弾性率をもつ遷移金属多窒化物 TN_2 が合成できる^[1]。その電子構造と基礎物性について、我々は、光電子分光や X 線分光による分光学的手法と第一原理計算とを用いて調べるとともに、微小試料の測定法を開発している^[2]。

今回は、更新された計測プログラムと新しい試料接着法を用い、第一原理計算から金属と予測された **marcasite 型 RuN₂** の非占有電子構造について窒素 K 吸収端軟 X 線吸収分光で調べた。

2. 実験内容

レーザー加熱ダイヤモンドアンビルセルを用いて作製した試料（大きさ 0.1 mm 程度）を $\phi 0.05$ の金線に In を介して取り付け、これに分光した軟 X 線を集光し、全電子収率 TEY 法で窒素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトルを室温にて測定した。In 使用で、カーボンテープや導電性接着剤に含まれる窒素からの信号の混入を防いだ。また、試料位置での軟 X 線スポットサイズは、おおよそ水平方向 0.1 mm、垂直方向 0.18 mm であり^[3]、試料サイズより大きいですが、金線上に載せることでバックグラウンドを抑制できた^[4]。

3. 結果および考察

Fig.1 に窒素 K 吸収端軟 X 線吸収の測定結果を第一原理計算の結果と比較する。第一原理計算には、WIEN2k コードを用い、一般化勾配近似による全ポテンシャル線型化補強平面波法で行った^[1,2]。図では、N 1s 内殻準位線の束縛エネルギーに対応する光子エネルギーに束縛エネルギーの原点を一致させた。測定結果は、N 2p 部分非占有状態密度で定性的に説明できる。低光子エネルギー側から順に 2 つのピーク構造は、Ru 4d 状態との混成バンド、3 番目の幅広い構造は、反結合性 N 2p バンドと同定される。また、計算された窒素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル^[1]とも定性的に一致する。

今後、**marcasite 型 RuN₂** より高い体積弾性率をもつ **arsenopyrite 型 IrN₂** や **pyrite 型 PtN₂** と比較し、電子構造と体積弾性率や結晶構造との関係を明らかにしたい。

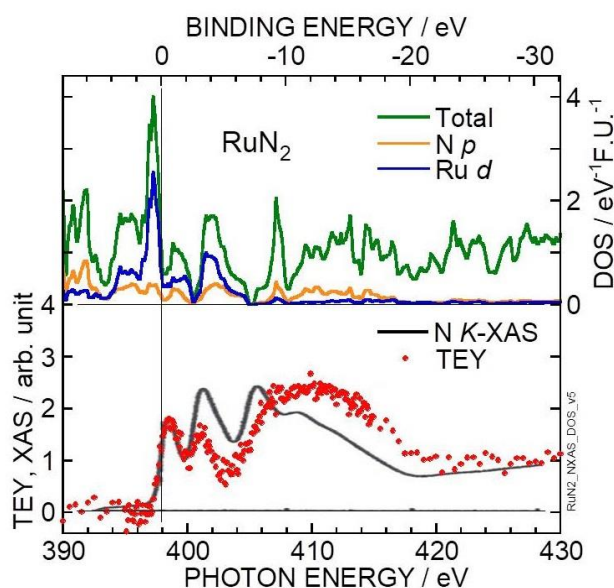


Fig.1 N K-edge X-ray absorption spectrum of **marcasite-type RuN₂**. Calculated density of states and absorption spectrum^[1] are presented for comparison.

4. 参考文献

1. K. Niwa *et al.*, Chem. Eur. J. **20** (2014) 13885.
2. K. Soda *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **86** (2017) 064804.
3. K. Soda *et al.*, Users' Report of Aichi Synchrotron Radiation Center 2018, 201802078.
4. K. Soda *et al.*, Annual Report of Aichi Synchrotron Radiation Center 2016 (2018) 137.