



## 白金族多窒化物の窒素 *K* 吸収端 X 線吸収スペクトル

曾田一雄<sup>1,2,3</sup>, 加藤大貴<sup>1</sup>, 前口景介<sup>1</sup>, 川田拓也<sup>1</sup>, 布川徳之<sup>1</sup>, 加藤政彦<sup>1</sup>,  
丹羽健<sup>3</sup>, 長谷川正<sup>4</sup>, 井波暢人<sup>2,3</sup>, 仲武昌史<sup>3</sup>

<sup>1</sup>名大院工, <sup>2</sup>名大 SR, <sup>3</sup>あいち SR

キーワード : 白金族多窒化物  $MN_2$ , 窒素 *K* 吸収端 X 線吸収スペクトル, 電子構造

### 1. 背景と研究目的

超高压高温下の超臨界窒素流体との直接反応により、これまで窒化しないとされていた白金族元素 *M* が多窒化物  $MN_2$  を形成することが分かった[1]。我々は、光電子分光 PES と X 線吸収分光 XAS によって高压合成多窒化物の化学状態と電子構造を評価している。本研究では、非占有電子構造、特に、窒素 *p* 状態密度分布の知見を得るため、窒素 *K* 吸収端 X 線吸収スペクトルを測定した。

### 2. 実験内容

XAS スペクトル測定は、試料としてレーザー加熱ダイヤモンドアンビルセルで作製した marcasite 型  $RuN_2$ 、arsenopyrite 型  $IrN_2$  および pyrite 型  $PtN_2$  を準備し、新規に開発した試料保持法[2]を用いてあいちシンクロトロン光センターBL7U で室温にて全電子収量 TPY 法とオージェ電子収量 AEY 法で行った。

### 3. 結果および考察

第一原理計算の結果とともに、測定された窒素 *K* 吸収端 XAS スペクトルを図 1 に示す。第一原理計算は、WIEN2k コード[3]を用いた一般化勾配近似 GGA-PBE によるフルポテンシャル線型化補強平面波 FLAPW 法で行った。N *p* 状態と Pt *d* 状態の部分状態密度分布 DOS を図に示した。また、スーパーセルを用いて窒素 *K* 吸収端スペクトルを求めた。測定したスペクトルは、光子エネルギー  $h\nu = 418$  eV 付近で規格化した。計算の XAS および DOS は、それぞれ吸収の立ち上がりおよび伝導帯の底を N 1*s* 内殻準位の束縛エネルギー[4]に対応する光子エネルギーに合わせた。TPY と AEY のいずれの手法でも、強度は異なるものの 4 つの主たる構造が見られ、おおよそ N *p* 部分状態密度分布と対応している。また、XAS の計算結果も、 $h\nu = 414$  eV の構造を除き、測定結果をよく再現している。

今後、他の多窒化物との構造の違いによる吸収スペクトルや電子構造の違いを明らかにするとともに、計算結果が測定結果と異なる部分の原因を明らかにし、物性評価を行う予定である。

### 4. 参考文献

1. K. Niwa *et al.*, Chem. Eur. J. **20** (2014) 13885.
2. K. Soda *et al.*, 2016 年度公共等利用成果報告書, 実験番号 201602070, 2016L2002, and 2016L3002.
3. P. Blaha *et al.*, *An Augmented plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Techn. Uni. Wien, Austria, ISBN 3-9501031-1-2, 2001).
4. K. Soda *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **86** (2017) 064804.

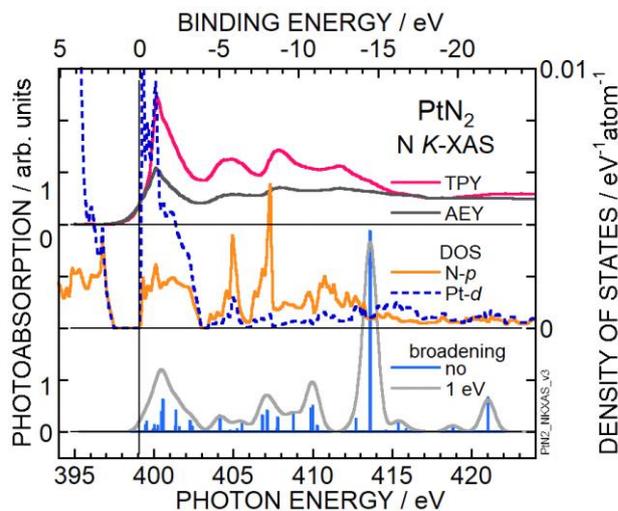


図 1.  $PtN_2$  の N *K* 吸収端 XAS と状態密度の比較。