



高温超伝導候補物質イリジウム酸化物の XAFS 測定

堀江 理恵¹, 大門 寛²

1 岡山大学, 2 豊田理化学研究所

キーワード：イリジウム酸化物, XAFS, 偏光依存性, 酸素の結合方向, 酸素の結合サイト

1. 背景と研究目的

イリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 は、銅酸化物高温超伝導体の母物質の一つである La_2CuO_4 と結晶構造や電子状態など複数の類似点をもつ。また、Ir 5d 軌道が大きなスピン軌道相互作用をもち伝導に寄与することから、約 20% のキャリアドーピングで新規メカニズムの高温超伝導体になる可能性が期待されている^[1]。我々が SPring-8 や NewSUBARU で光電子分光の実験を行ったところ、ドーピングのない単結晶試料でもイリジウムと酸素の価数が複数あることを示唆するデータを得た。そこで、イリジウムの価数決定と、酸素とイリジウムの結合方向の決定を行うことを目的として、あいちシンクロトロン光センターの BL7U にてイリジウムと酸素の吸収分光 XAFS 実験を行った。O1s の光電子分光で見られた 2 成分については、 IrO_2 面の酸素由来か、SrO 面の酸素由来かを明らかにするため、異なる結合エネルギーの酸素についての K 端 XAFS の偏光依存性を測定した。酸素は Ir の周りに正 8 面体で結合しており、 IrO_2 面の酸素は Ir と面内結合しており、SrO 面の酸素は頂点酸素であり、Ir と面直に結合しているため区別できる。

2. 実験内容

BL7U にて、偏光依存性 XAFS, 光電子分光を測定した。光のエネルギーは測定の前後で Au にてエネルギー較正を行った。 Sr_2IrO_4 単結晶試料は、銀ペーストにて無酸素銅板に付け、その上に真空中で劈開できるように無酸素銅の棒を銀ペーストにて付けたものをチャンバーへ導入し、真空劈開を行って清浄面を出して測定を行った。Ir 4p の XAFS 測定は、Ir 4p の吸収端の光のエネルギー (4p1/2 が 578 eV, 4p3/2 が 496 eV) 付近で、酸素の XAFS 測定は、K 端 (531 eV) 付近で偏光依存性を測定した。

3. 結果および考察

Ir4p の XAFS 測定においては、Ir 4p の吸収端の光のエネルギー (4p1/2 が 578 eV, 4p3/2 が 496 eV) 付近に弱い吸収しか観測されなかったため、価数の決定には至らなかった。

酸素の XAFS 測定については、Fig. 1 に示すように、解析に十分なデータが得られた。Fig.1 は、 Sr_2IrO_4 の O 1s XAFS であり、赤線は直入射、青線は斜入射のスペクトルを示しており、文献^[2]と同様の結果であった。直入射で 528 eV 付近に見られる 2 本のピークが光電子分光で見られた二つの成分に対応しており、斜入射では低エネルギーのピークが消えていることから、低エネルギーの成分が SrO 面内の酸素で、高エネルギーの成分が IrO_2 面内の酸素であることを明らかにすることができた。

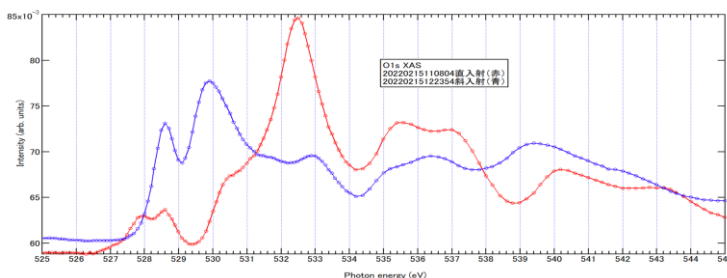


Fig.1 Sr_2IrO_4 の O1s XAFS. 赤線は直入射、青線は斜入射のスペクトル。

4. 参考文献

1. H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki: Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 027002.
2. V. Ilakovac, *et al.*, Phys. Rev. B **99** (2019) 035149.