

蛍光 X 線ホログラフィーによる TlInSe_2 の 3 次元原子像

Three Dimensional Atomic Image of TlInSe_2 by X-ray Fluorescence Holography

阪府大院工/広大放射光 三村 功次郎

Osaka Pref. Univ. / HSRC, Hiroshima Univ., Kojiro Mimura

E-mail: mimura@ms.osakafu-u.ac.jp

体心正方晶擬 1 次元構造 (空間群: $I4/mcm$) をとる TlInSe_2 が 413 K 以下で示す $10^6 \mu\text{V/K}$ もの巨大ゼーベック係数は、Tl の 1 次元鎖がインコメンシュレート (IC) 相へ転移し変調構造を有することに起因すると考えられている¹⁾。我々は角度分解光電子分光により格子の変調に起因したエネルギーバンドのキック、ギャップ構造を観測した²⁾が、IC 相での詳細な原子位置に関する情報は未だ得られていない。本研究では蛍光 X 線ホログラフィーにより TlInSe_2 の室温における原子位置ならびに原子揺らぎを視覚化し、IC 相との相関関係を議論した。実験は SPring-8 BL12B2 および KEK PF BL-6C において Tl L_{III} 吸収端 (12.66 keV) より高エネルギー励起光を入射した際に放出される Tl L_{α} 蛍光をインバースモードで観測した。

Fig. 1 に Barton のアルゴリズム³⁾に従ってホログラム像を解析することで再生された TlInSe_2 (001) 面上 ($z=0$) の原子像を示す。Fig. 1 中に X 線回折から予想されるノーマル相での原子位置を○印で示した。この面では Tl および In 原子のみが観測される。原子像中には虚像もあるが、In 原子は予想される位置に明瞭に観測される。一方、Tl はほぼ適切な位置に観測されてはいるが強度は非常に弱い。そこで、この現象が本質的かどうかを確認するため、ノーマル相の TlInSe_2 結晶格子から半径 60 Å のクラスターを抜き出し、実験と同一条件で算出したホログラム像から $z=0$ での再生像をシミュレートした。Tl 原子 ($Z=81$) による X 線散乱は In 原子 ($Z=49$) よりも非常に強いので、再生像における強度は非常に強いと期待されるが、シミュレーション再生像は (110) 配置でホログラムを測定する際の立体配置が影響して Tl の強度は In と同程度となる。しかし、Fig. 1 のように Tl の原子像が非常に弱くなることはない。この結果は、フォノンバンド計算から示唆されるように⁴⁾、 TlInSe_2 の IC 相において Tl 原子が空間的に揺らいでいることと密接に関連しているものと示唆される。

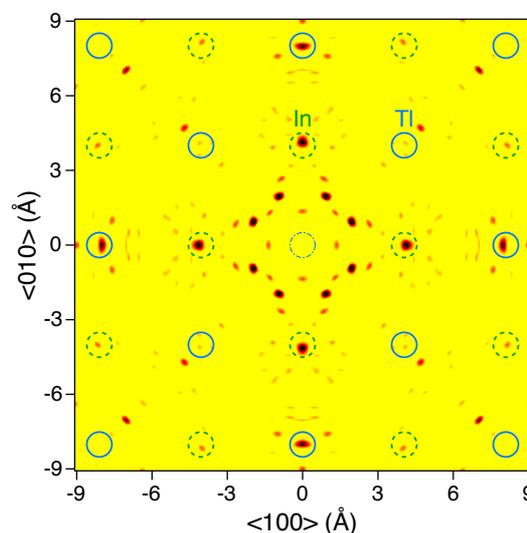


Fig.1. The obtained atomic image on the (001) plane, $z=0$ from the central Tl atom of TlInSe_2 .

1) N. Mamedov, K. Wakita, A. Ashida, T. Matsui, and K. Morii: Thin Solid Films **499**, 275 (2006).

2) K. Mimura, T. Nogami, K. Abe, K. Wakita, M. Arita, N. Mamedov *et al.*: Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 8188 (2008).

3) J. J. Barton: Phys. Rev. Lett. **67**, 3106 (1991).

4) N. Mamedov, G. Orudzhev, K. Mimura, K. Wakita, Y. Shim, S. Schorr *et al.*: Fizika **16**, 79 (2010).