

2009/1/13 PF研究会

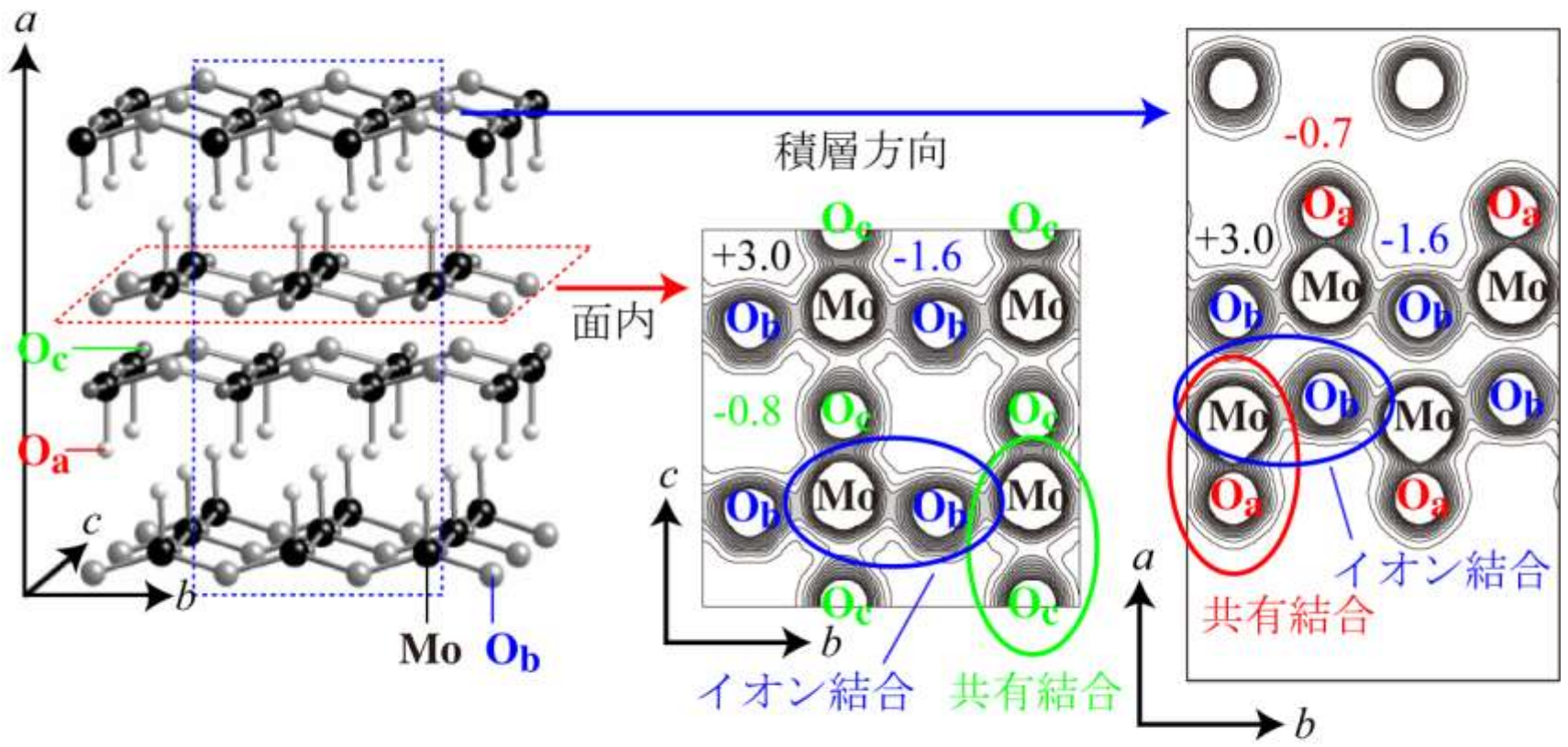
MoO₃ の電子状態の異方性と O 1s 発光スペクトル

広島大学放射光科学研究センター

佐藤 仁

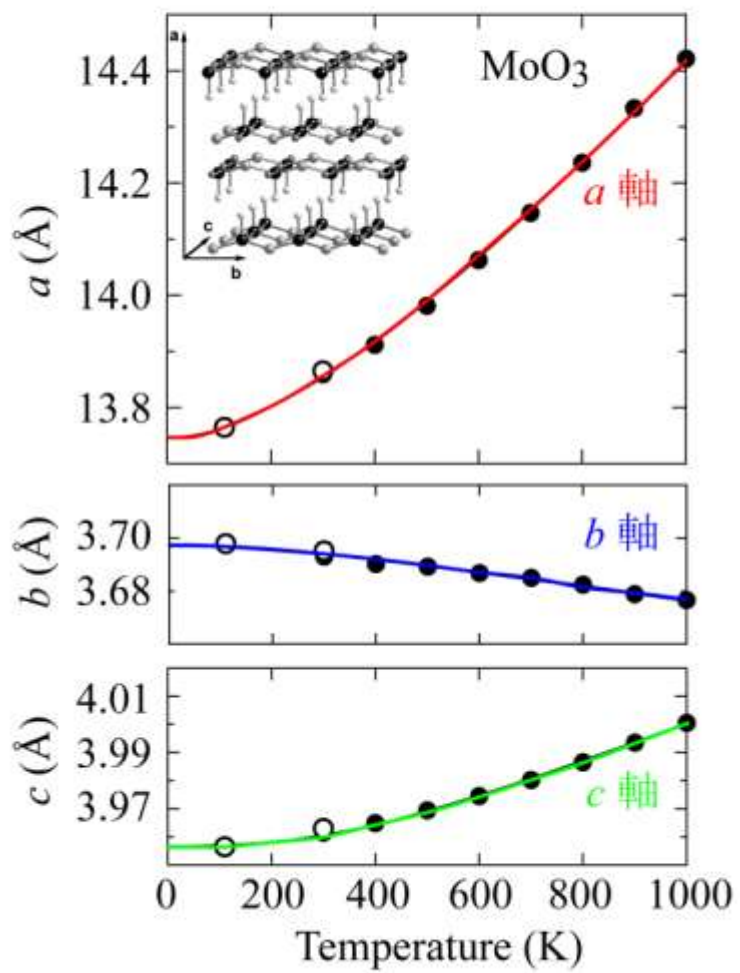
広島大学 根岸寛、迎川豊、間曾寛之、栗原秀直、内海有希
森本理、生天目博文、谷口雅樹
弘前大学 手塚泰久

MoO₃ の結晶構造



○サイトにより、価数・結合様式が異なる

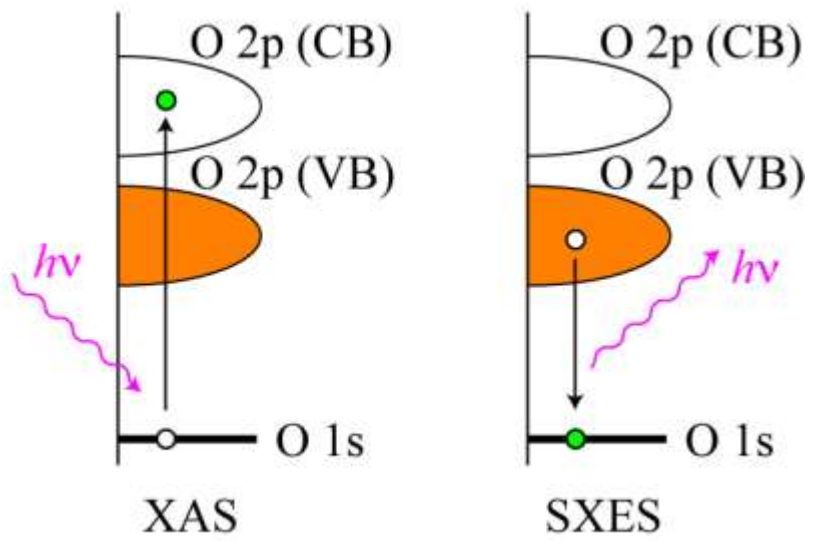
MoO₃ の格子定数



$\hbar\omega(\text{Mo-O}_a) \sim 1000 \text{ cm}^{-1}$
 $\hbar\omega(\text{Mo-O}_b) \sim 670 \text{ cm}^{-1}$
 $\hbar\omega(\text{Mo-O}_c) \sim 820 \text{ cm}^{-1}$

目的

O 1s XAS, SXESにより、
MoO₃の価電子帯、伝導帯の
O 2p DOSの異方性を観測する



H. Negishi *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 64111 (2004).

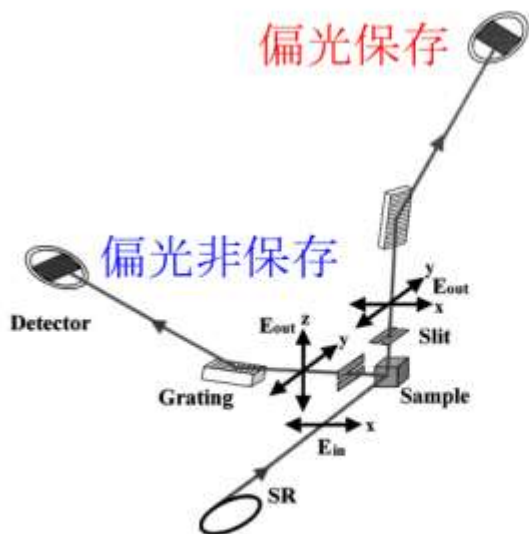
実験

BL2C@KEK-PF

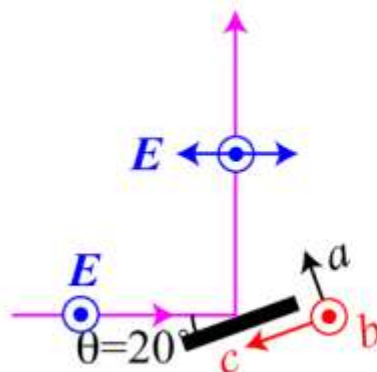
試料：化学輸送法

測定温度：300 K

XAS : TEY, O 1s PFY

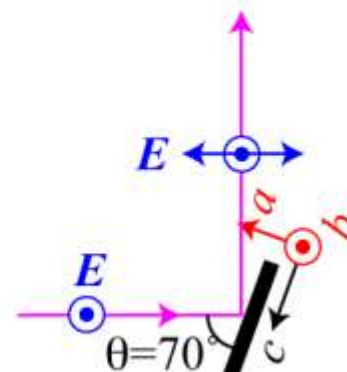


偏光保存配置 ($E//b$)



XAS : $2p_b$ (CB)
 SXES : $2p_b, 2p_c$ (VB)

$(b,c) E//b$

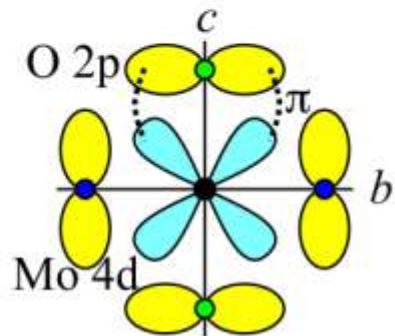
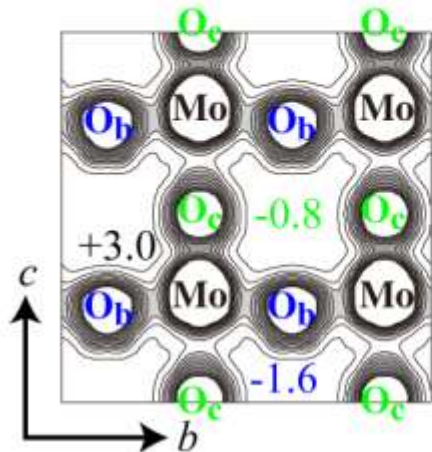
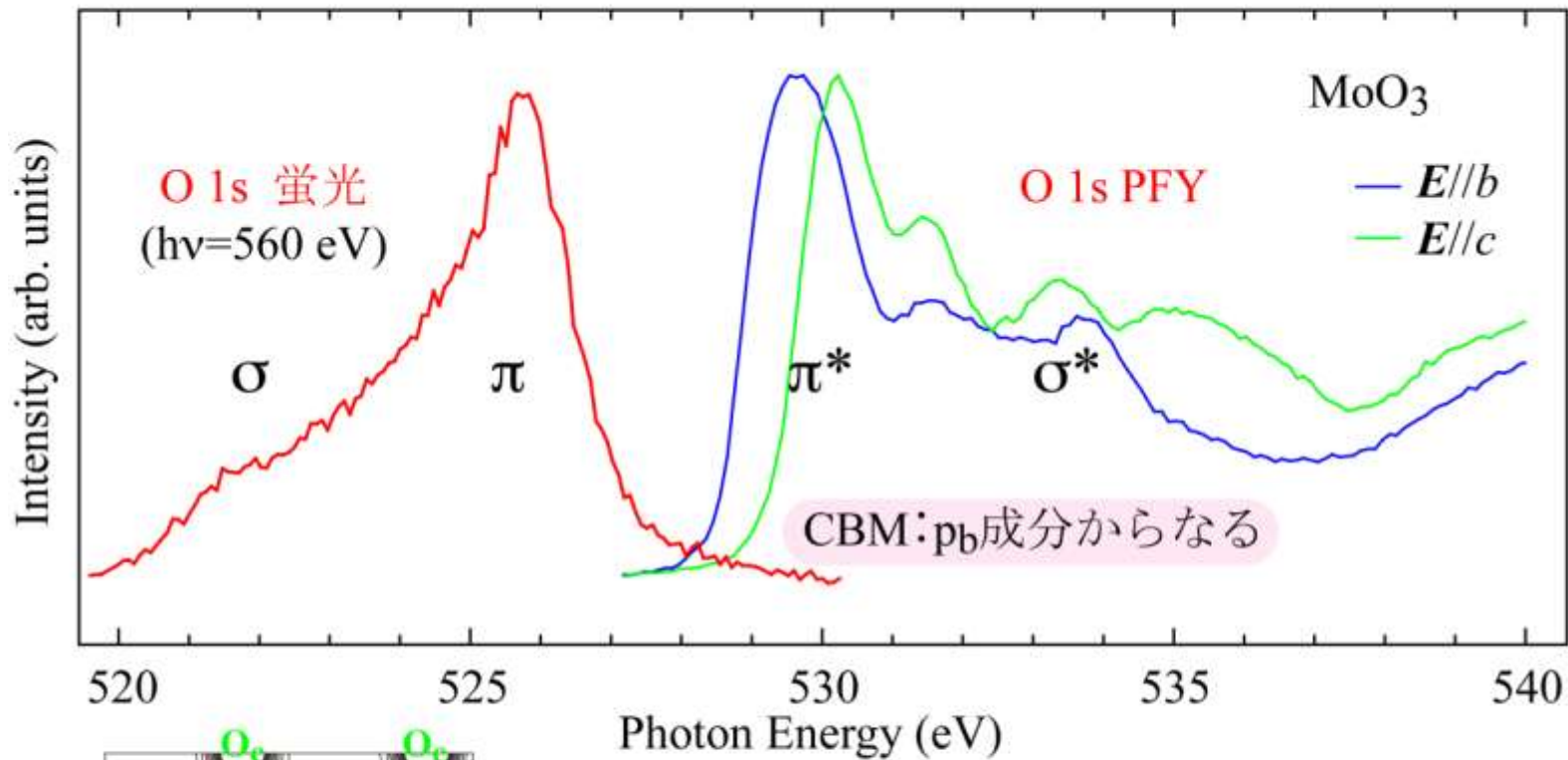


XAS : $2p_b$ (CB)
 SXES : $2p_a, 2p_b$ (VB)

$(a,b) E//b$

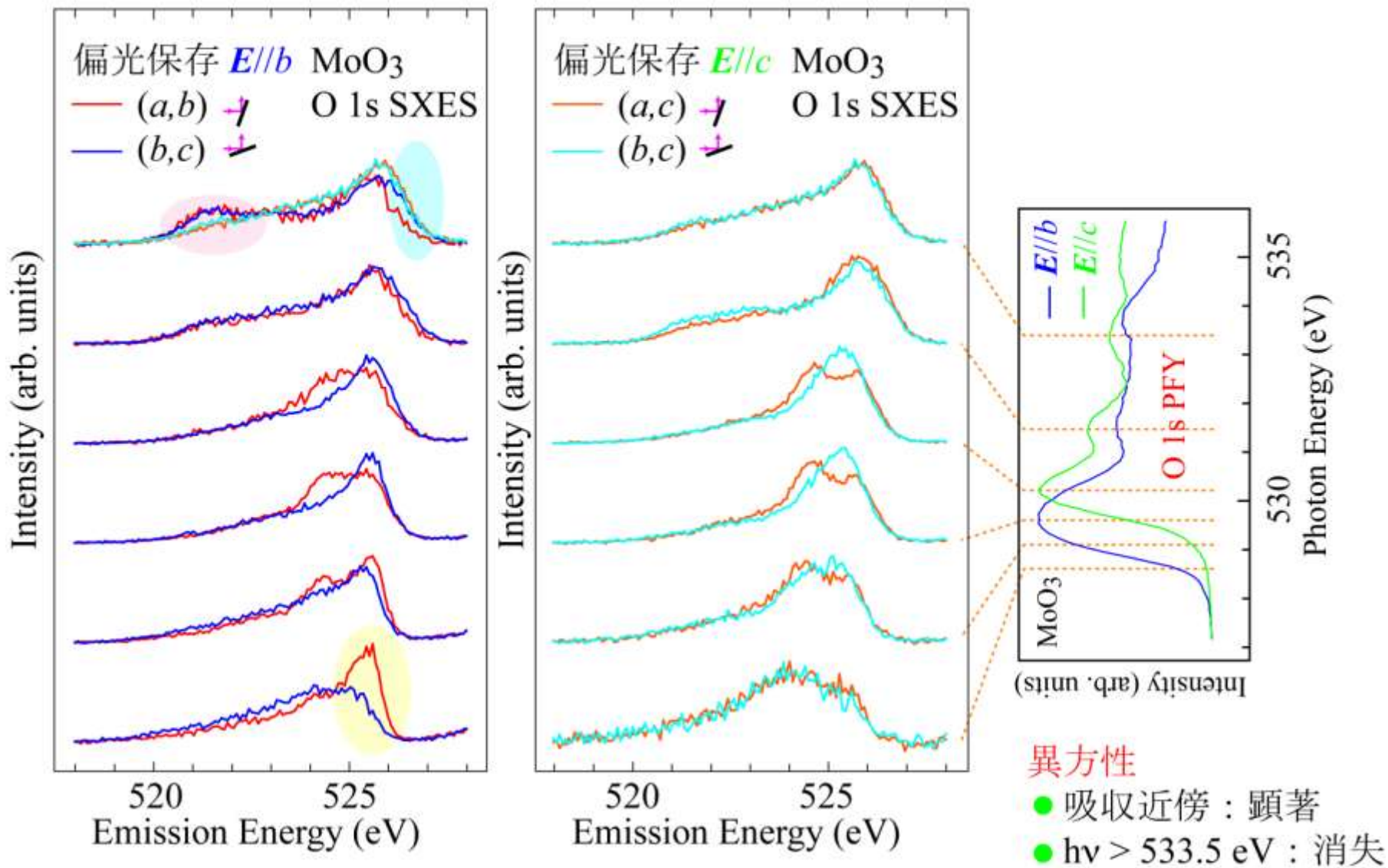
偏光保存配置 ($E//c$)
 偏光非保存配置 ($E//b,c$) についても同様

O 1s XAS & O 1s 蛍光

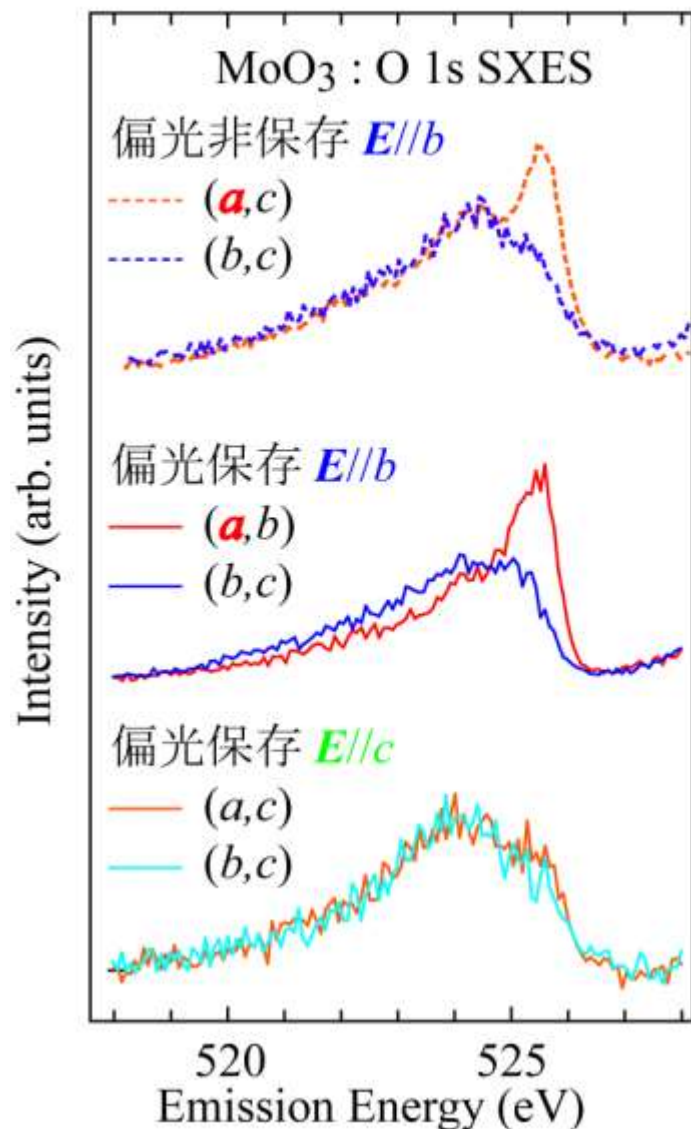


CBM:
 $\pi^*(\text{Mo-O})$
 O_c の p_b 成分からなる

SXES スペクトルの $h\nu$ 依存性



SXES スペクトルの配置依存性 I



偏光非保存 $E//b$

偏光保存 $E//b$

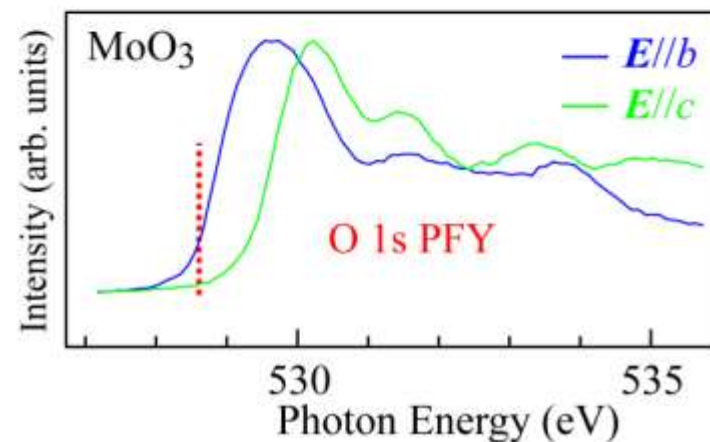
- **a**-active の配置で観測される

偏光保存 $E//c$ 、偏光非保存 $E//c$

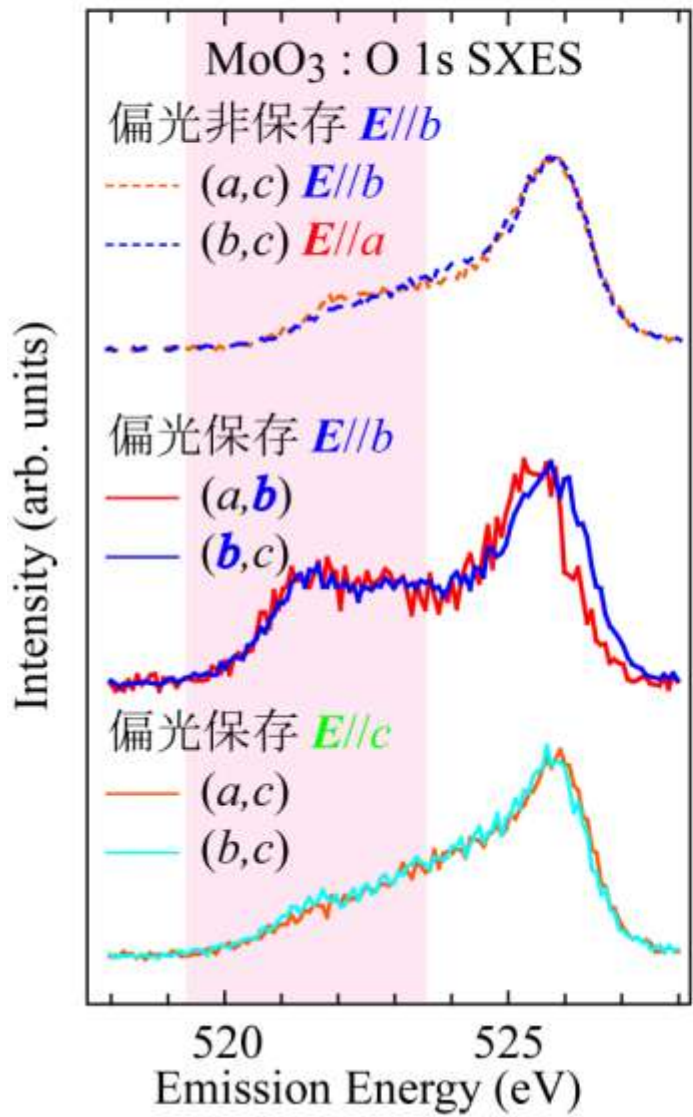
- 観測されない



VBM : O_c 2p_a



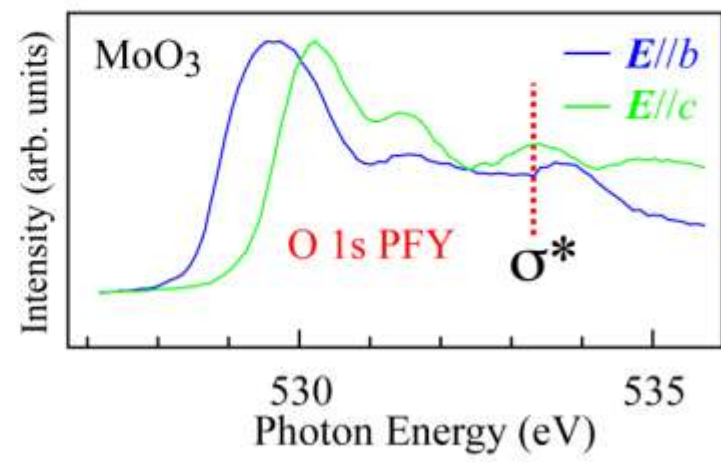
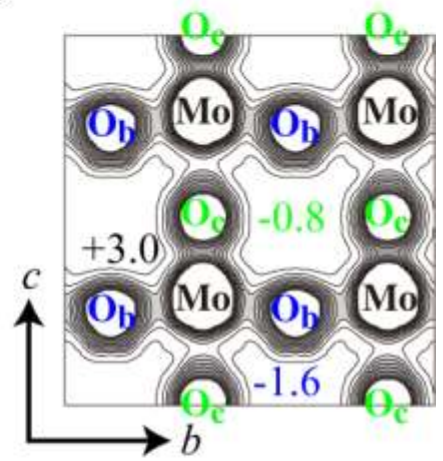
SXES スペクトルの配置依存性 II



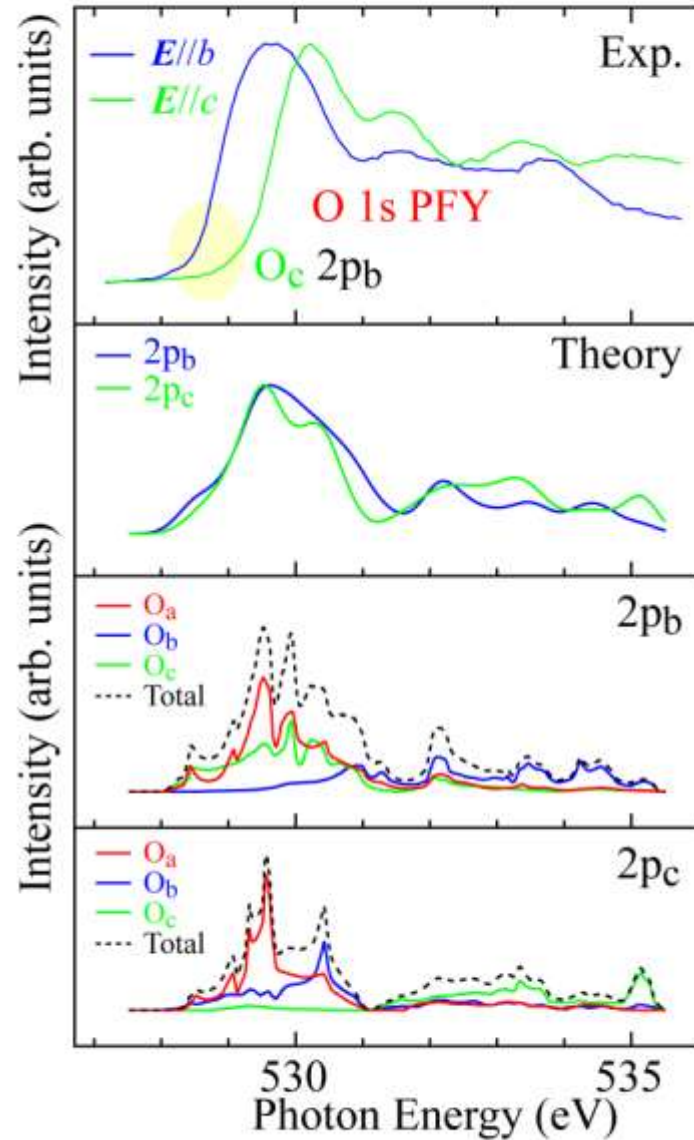
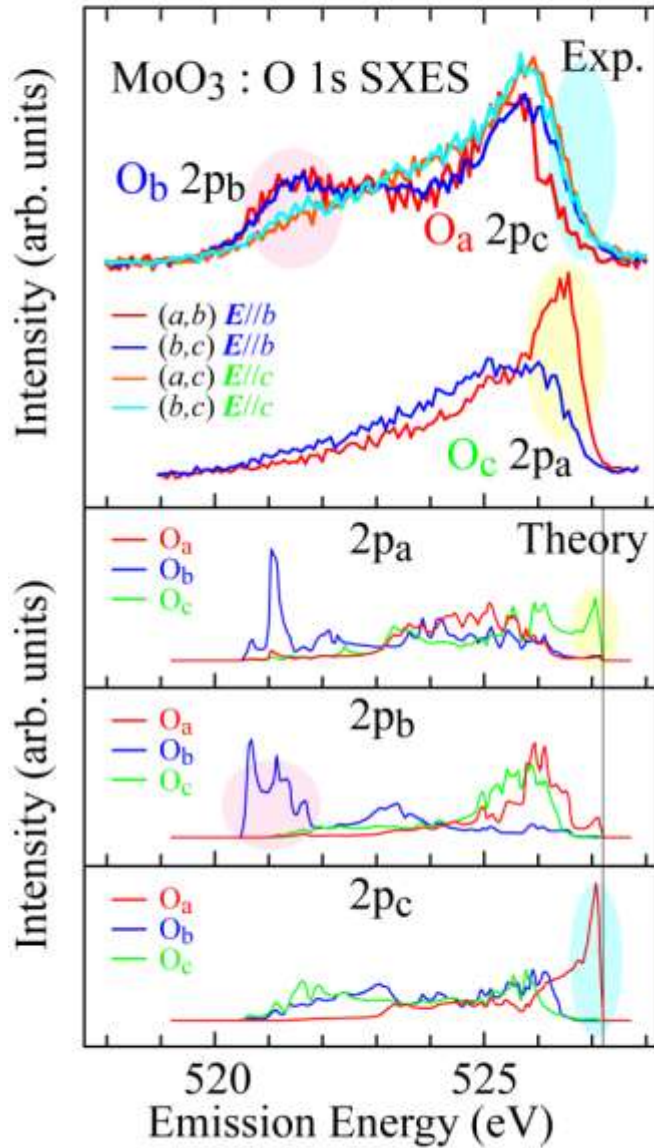
偏光保存、偏光非保存
 b -軸励起で観測される
 励起エネルギー： σ^*

↓

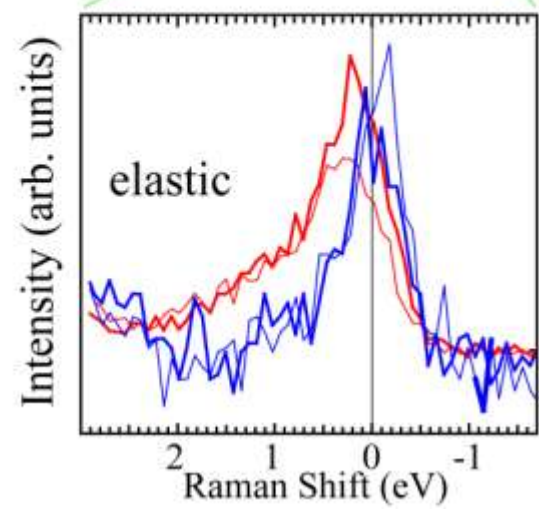
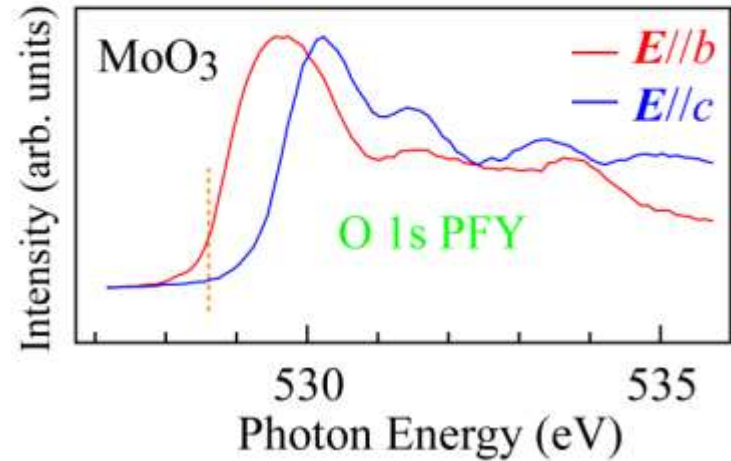
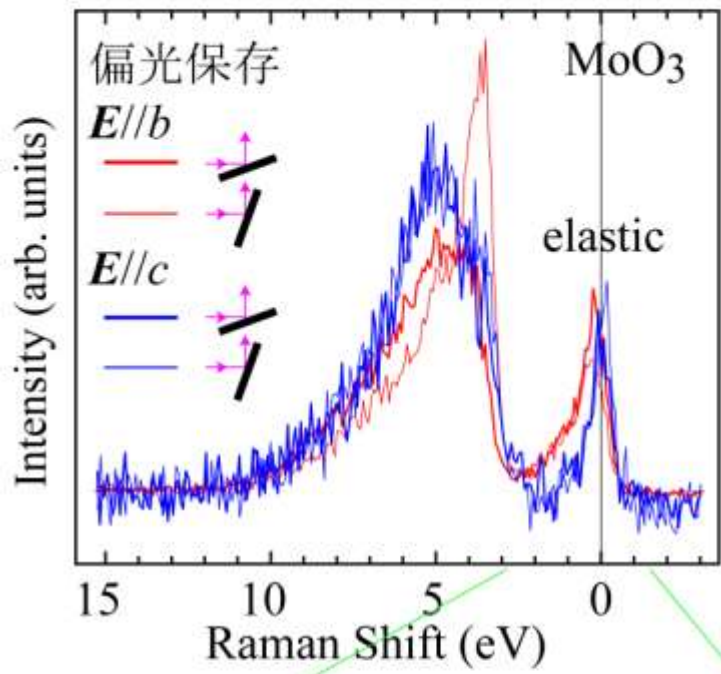
O_b 2p_b 成分



バンド計算との比較



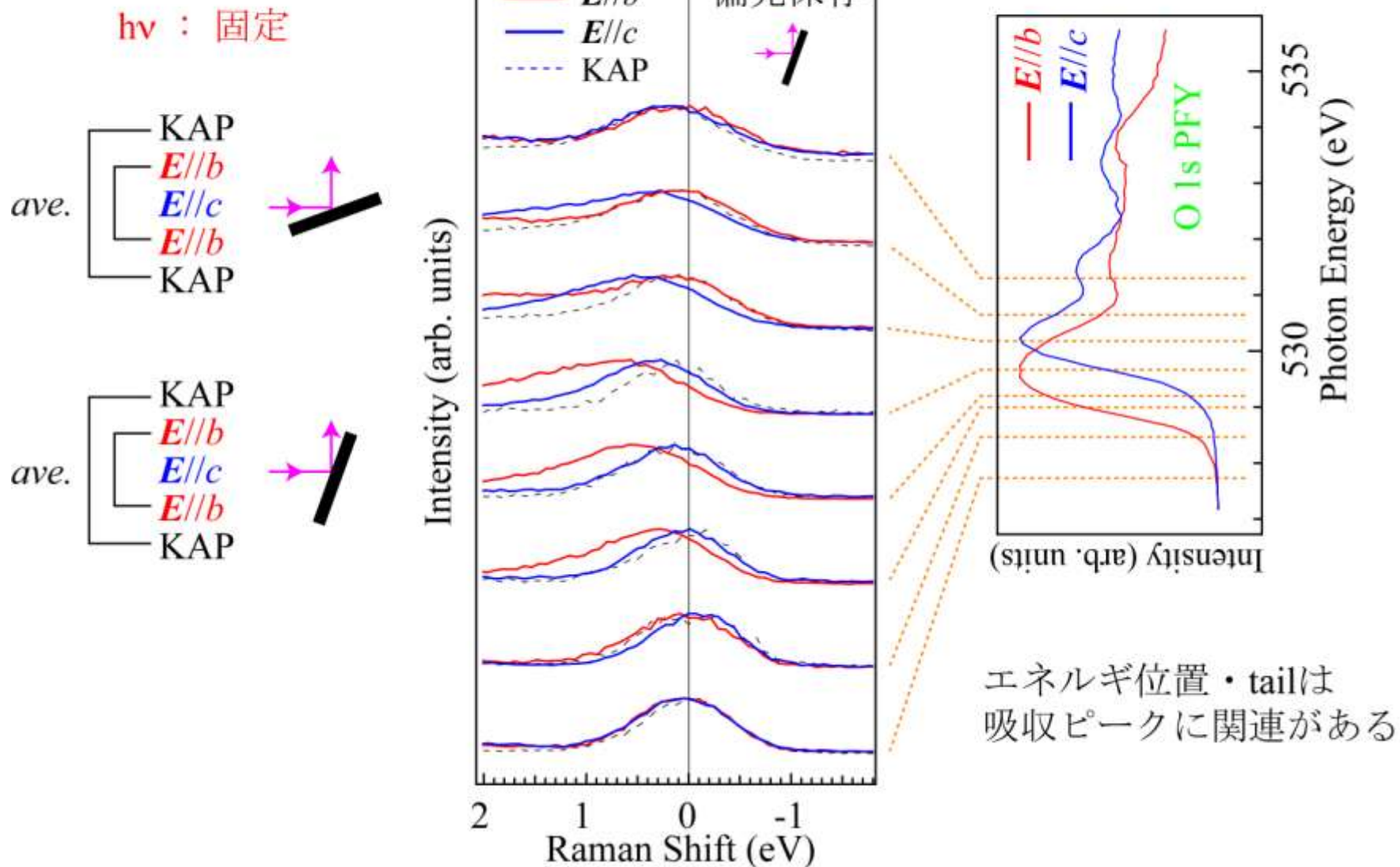
Elastic Peak



elastic peak

- E//b*
- tailが大きい
- 低エネルギー側にシフト?

Elastic Peak の励起光依存性

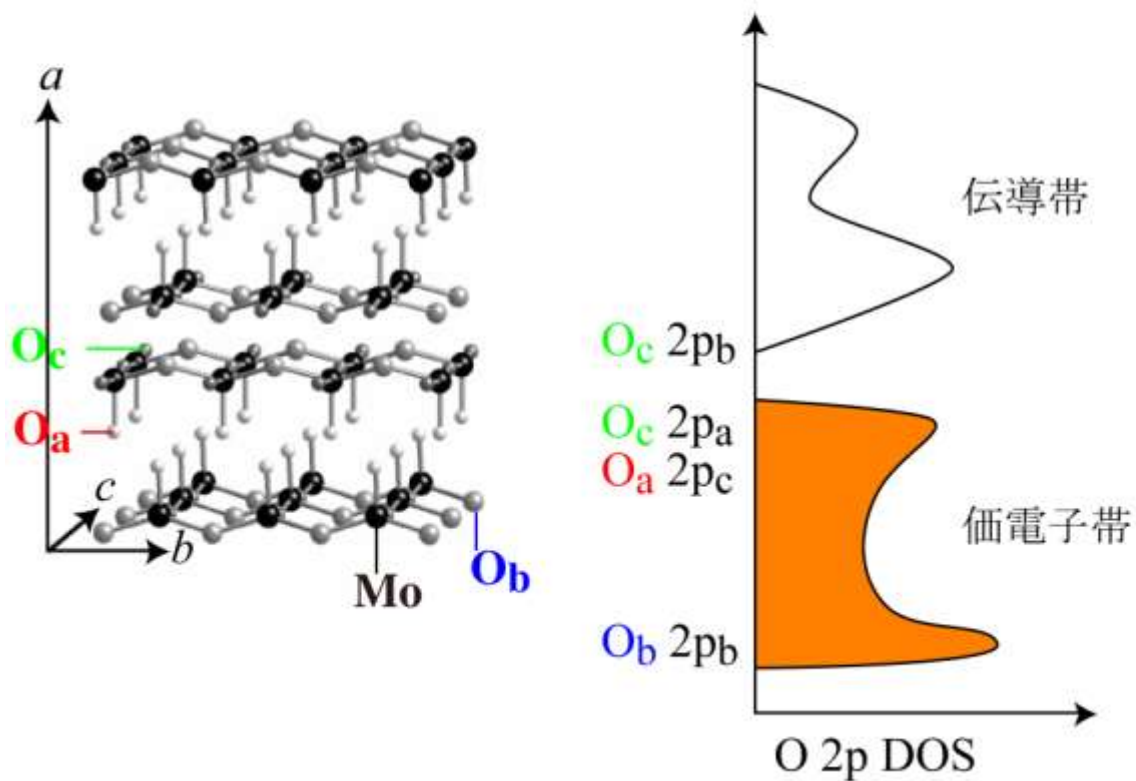


まとめ

MoO₃
O 1s XAS/XES



電子状態の異方性を反映して
スペクトルに顕著な違いが観測された



定性的にバンド計算
の結果を反映する

elastic peak
tail, energy
O 1s XAS と強く関連