

「遷移金属酸化物の共鳴非弾性X線散乱」

National Synchrotron Radiation Research Center(NSRRC)

Taiwan Beamlines at SPring-8

石井啓文

X線非弾性散乱(RIXS)は物質の素励起を調べる有用な測定手法である。SPring-8 BL12XU に建設された台湾ビームラインは、主に入射光のエネルギー4keV~20keV、エネルギー分解能 ΔE =数十 meV~1eVで非弾性X線散乱実験を行うために建設された。現在では実験のセットアップの異なる非共鳴・共鳴非弾性X線散乱実験(NRIXS,RIXS)を行う事が可能である。本講演では、台湾ビームラインの現状を最近の研究結果とともに報告する予定である。

RIXSは、その遷移過程が吸収・発光という二次の光学過程である為、その信号強度は微弱であり、またエネルギー可変の光源を必要とする為、第三世代放射光の利用が不可欠であり、最近になって盛んになってきた分光法である。そのため、実験の蓄積も少なく、実験で観測される素励起の起源なども完全に理解されているとは言い難いのが現状である。このような状況から、我々は RIXS で観測される素励起の起源についての知見を得ることを目的に、電子状態の研究が進んでいる典型的な遷移金属酸化物 NiO 等の物質を選んで研究を行ってきた。

NiOはKaoら^[3]により初めてRIXSで観測されるNiOの6eV付近の構造は電荷移動遷移(CT遷移)によるものと同定された物質である。このときKao等は、他の実験から得られる電荷移動エネルギー($\Delta \sim 6\text{eV}$)と観測される構造とのエネルギー位置がほぼ等しいことを主な同定の根拠としていた。我々は、このCT遷移の構造をより詳しく実験的に検証するためNiOのk依存性RIXSを行った。

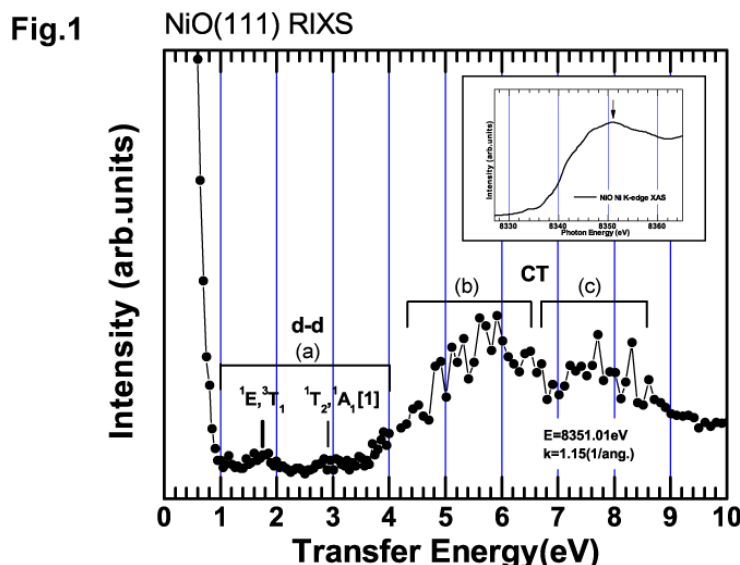


Fig.1 NiO(111)の RIXS 実験結果。構造(a)の d-d 遷移は藤森らによる。[1]

実験は、2mのローランド円配置上に試料、曲率半径 2mに湾曲したSi(551)結晶、検出器を配置して行った。試料は、NiOの[100], [110], [111]の単結晶を用いた。Fig.1 は $1s \rightarrow 4p$ 吸収端 peak (8351eV)でのNiO[111]面におけるRIXSスペクトルである。スペクトルは、主に $0 \sim 4\text{eV}$ の小さな構造 (a)と、 $4 \sim 8\text{eV}$ ((b),(c))の大きな構造に分けられる。(a)の構造はKao等のRIXS実験では観測されなかった新しい構造である。この構造はk依存性を示さず、また、そのエネルギー位置が光学吸収や軟X線共鳴非弾性散乱などで観測される構造にほぼエネルギー位置が等しい事からd-d遷移による構造であると解釈できる。次に、Fig.2(a)に $4 \sim 8\text{eV}$ に観測される構造のk依存性の実験結果を示す。(b)の構造が約 2eV 程分散し、(c)の構造はほとんど分散を示さない事がわかる。観測される構造の分散は結晶の周期性を反映している事から (Fig.2(b))、(b)は分散のある $O2p$ バンドに起因する遷移であることが推察される。これらの事から、構造 (b)は電荷移動(CT)遷移というKaoらによる同定の実験的確認を得る事が出来たと考えている。^{[1][2]}

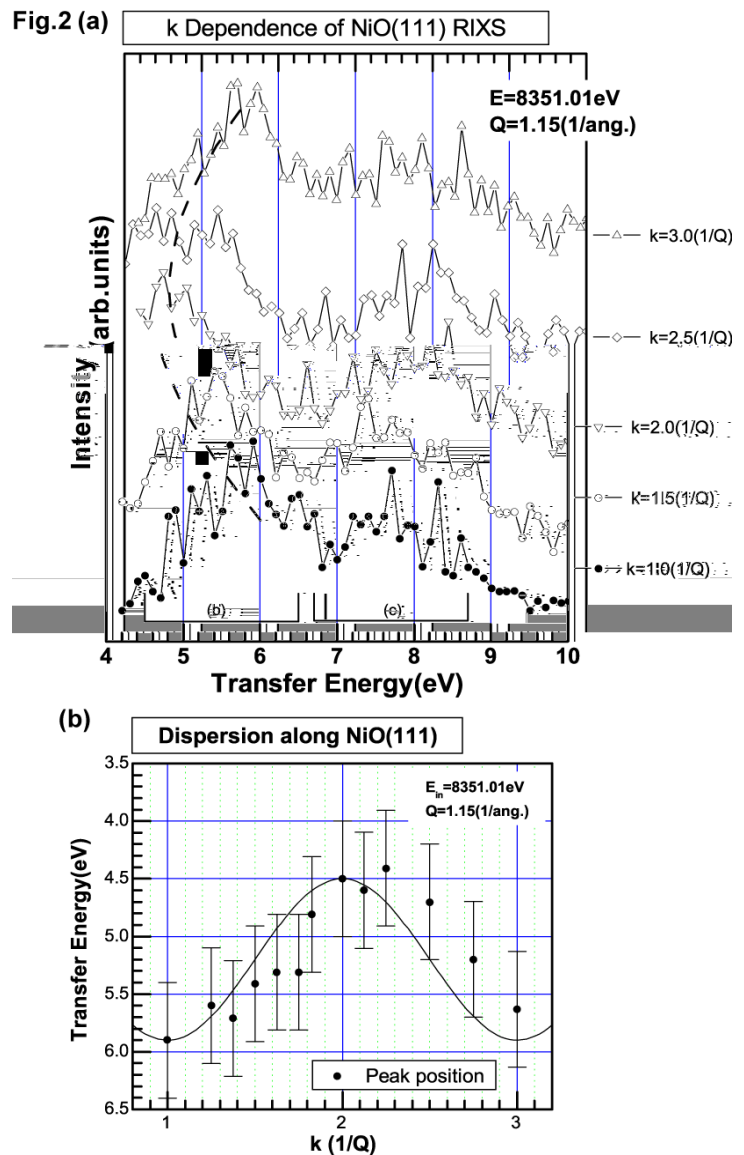


Fig.2(a):NiO(111)の RIXS の k 依存性実験結果。
 (b):構造 (b)のピーク位置の k 依存性 (k=1,2,3 はそれぞれ L,Γ',L'点)

[1]A. Fujimori and F.Minami,Phys. Rev. B **30**, 957(1984)
 [2]R.Newman and R. M. Chrenko, Phys.Rev, **114**,1507(1959)
 [3]C.-C. Kao, W. A. L. Caliebe, J. B. Hastings, and J.-M. Gillet, Phys. Rev. B **54**, 16361-16364 (1996)