

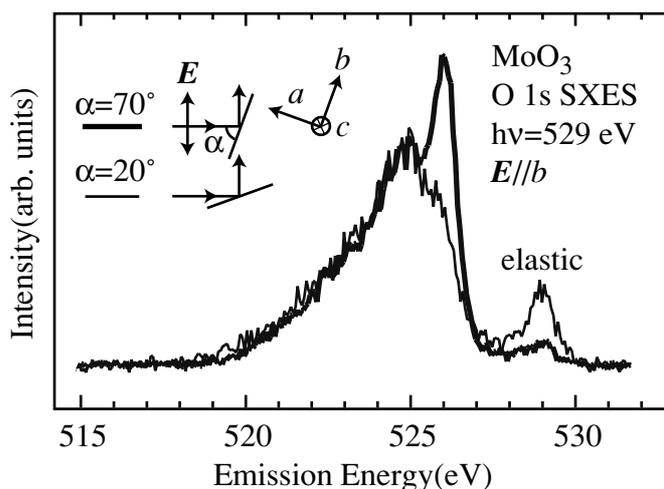
層状物質 MoO_3 の O 1s 軟 x 線発光分光

広大院理、広大放射光^A、広大理^B、広大先端研^C、弘前大理工^D、高エネ研^E
 迎川豊、佐藤仁^A、栗原秀直、間曾寛之^B、根岸寛^C、根岸彩子^A、
 手塚泰久^D、森本理^E、生天目博文^A、谷口雅樹

MoO_3 は、結晶学的に等価な Mo 原子と 3 つの非等価な O 原子からなる層状物質である。Mo-O 結合様式には O サイトによる顕著な違いがみられ [1]、O 電子状態は顕著な異方性をもつと期待される。本研究では、偏光保存・非保存 O 1s 軟 x 線発光分光 (SXES) により、 MoO_3 の O 2p 電子状態の異方性およびサイト依存性を調べた。実験は BL-2C において室温で行った。

O 1s 吸収スペクトルは、 $E//a$ 、 $E//b$ 、 $E//c$ (E は入射光の偏光ベクトル) の条件で形状が異なり、吸収強度および吸収ピークの位置の違いから、伝導帯の底は主に O 2p_b 成分が寄与していること、伝導帯全域にわたって O 2p_a 成分の寄与が少ないことが分かった。SXES スペクトルは、偏光保存・非保存条件ともに、吸収ピーク近傍で、顕著な励起エネルギー依存性および発光放出角依存性を示す。依存性は両者で異なっているが、励起エネルギーの増大とともに小さくなる。

例として、 $E//b$ の条件において、吸収の立ち上がりで測定した偏光非保存 SXES スペクトルを図に示す。横軸は発光エネルギーで、 ~ 527 eV が価電子帯頂上に相当し、低くなるにしたがって結合エネルギーが深くなる。実験条件は図に示したとおりだが、526 eV のピークは、 $E//b$ (あるいは $E\perp c$)、 $\alpha=70^\circ$ の条件でのみ観測される。この実験事実は偏光保存条件でも変わらない。このことは、伝導帯の底に主に寄与している O サイトの 2p_a 成分が、価電子帯頂上に寄与していることを示している。バンド計算の結果 [2] と比較すると、 c 軸方向に Mo と結合している O に帰属できる。また、弾性散乱ピークの形状にも、実験配置による顕著な違いが観測された。当日は偏光保存・非保存条件における励起エネルギー・発光放出角依存性と O 2p 電子状態の異方性、サイト依存性について更に詳細に議論する。



MoO₃ の偏光非保存 O 1s SXES スペクトル

[1] Y. Kuroiwa *et al.*, J. phys. Soc. Jpn. **72**, 2811 (2003).

[2] C. A. Rozzi *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 075106 (2003).