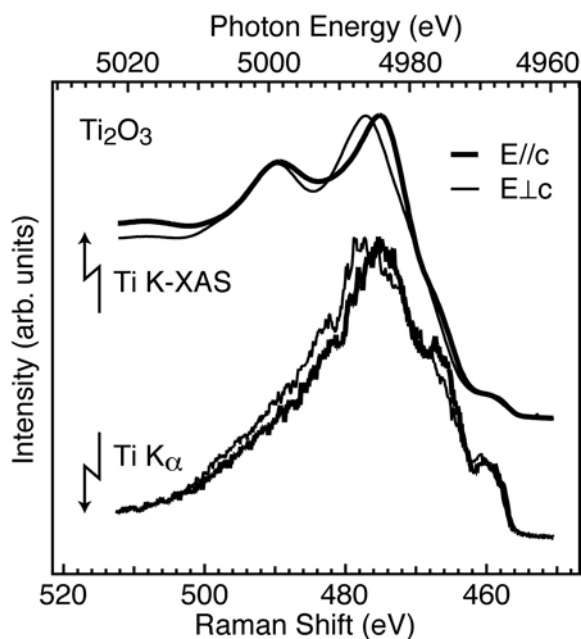


Ti₂O₃ 単結晶の偏光依存 Ti K 発光分光

広大院理^A、広放射光^B、弘大院理工^C、高工研^D、広大院先端研^E、広大院総科^F、
 間曾寛之^A、栗原秀直^A、佐藤仁^B、迎川豊^A、内海由希^A、手塚泰久^C
 岩住俊明^D、伊賀文俊^E、坪田雅己^F、高畠敏郎^E、生天目博文^B、谷口雅樹^{A,B}

Ti₂O₃ は約 450 K で非磁性半導体 (低温相) から常磁性金属 (高温相) に転移する。最近我々は Ti₂O₃ に対して Ti 2p 吸収線二色性 (XAS/LD) 実験を行い、LD 強度が高温相で 60 % に減少することを見いだした [1]。実験結果は、Ti イオン対の 3d 電子状態が ($a_{1g}\uparrow, a_{1g}\downarrow$: 低温相) から ($e_g\pi\uparrow, a_{1g}\uparrow$: 高温相) へ変化することを示しており、Tanaka によって提案された多電子描像に基づく金属 - 非金属転移モデルを支持する [2]。本研究では、Ti₂O₃ がもつ電子状態の異方性や、Ti 2p XAS/LD で得られた電子配置の変化が、Ti K 吸収および発光スペクトルにどのように現れるのかを調べた。今回は室温 (低温相) での結果を電子状態の異方性の観点から報告する。単結晶試料は浮遊帯域溶融法により育成し、実験は KEK-PF BL7C および BL15B1 において、 $E//c$ 、 $E\perp c$ (c は Ti 対の方向) の条件で、偏光保存および非保存配置の両方で行った。

得られた Ti-K XAS スペクトルを右図上部に示す。 $E//c$ 、 $E\perp c$ の間に違いが見られており、Ti 4p 非占有電子状態が顕著な異方性をもつことを示している。ただし c 軸に伸びている a_{1g} 軌道が占有されていることを考えると、むしろ逆の傾向を示している。下図は、 $h\nu=4958.3$ eV で測定した K_α 領域におけるラマンスペクトルである。スペクトルは、エネルギーシフトや肩構造に関して、XAS スペクトルを強く反映した構造を持つことがわかる。この傾向は TiO₂ 単結晶についても見られている [3]。当日は K_β 領域を含めて、励起エネルギー依存性や、配置依存性の詳細について考察を行う。



[1] H. Sato *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 53702 (2006).

[2] A. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 152 (2004).

[3] Y. Tezuka, private communication.