単結晶 Li_xCoO₂ の光電子および X 線吸収分光 Photoemission and X-ray Absorption Spectroscopy of Li_xCoO₂

脇坂祐輝¹、池戸一通¹、大槻太毅¹、溝川貴司¹、岩井千佳²、三好清貴²、 竹内潤²、安齋太陽³、有田将司³、生天目博文³、谷口雅樹^{3,4}、和達大樹⁵、 G. A. Sawatzky⁵、D. G. Hawthorn⁶、T. Z. Regier⁷

¹東大理・新領域、²島根大総合理工、³広島放射光セ、⁴広大理、 ⁵ブリティッシュコロンビア大、Ĝウォータールー大、プカナディアンライトソース

層状コバルト酸化物である Li_xCoO₂ は応用面において電池正極材料として広く用いられている物質である[1]。一方で物理的にはスピンや電荷に関連する秩序が予想されており[2]、スピン密度波相転移や電荷秩序を伴った金属絶縁体転移、水和による超伝導など豊かな物性を示す Na_xCoO₂ との比較という観点からも大変興味深い。今回われわれは Li_xCoO₂、x=0.25 の単結晶試料を用いてこの物質のバンド分散やフェルミ面といった電子構造を解明するために、広島放射光施設 BL-9A において 21 eV の励起光を用いて角度分解光電子分光(ARPES)を行った。また x=0.46, 0.71, 0.99 の試料に関し、カナディアンライトソース 11ID-1 にて全電子収量法により軟 X 線吸収分光を行った。

図に 20 K にて測定した $Li_{0.25}CoO_2$ の価電子帯バンドの Γ -M ライン付近の強度プロットを示す。 0.7 eV 付近で非常にブロードな e_a ' バンドに対応すると思わ

れる強度と、フェルミ準位付近に a_{1g} バンドが観測され、これまでの Na_xCoO_2 における ARPES 実験や LDA バンド計算と同様の結果が観測された[3]。フェルミ面マッピングを行ったところ、x=0.25 のドープ領域において、 a_{1g} バンド由来である大きなホール面が観測される一方で、K 点付近にその存在がバンド計算から予想されている e_g バンド由来の小さなホール面は観測されなかった。これらの内容について当日はより詳細に議論する予定である。

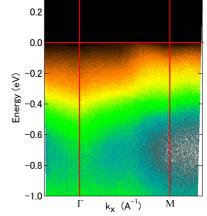


図: Li_{0.25}CoO₂ の強度プロット によるバンド分散

- [1] K. Mizushima et al., Matter. Res. Bull. 15, 783 (1980)
- [2] K. Miyoshi et al., Phys. Rev. B 82, 075113 (2010)
- [3] M. Z. Hasan et al., Phys. Rev. Lett. 92, 246402 (2004)