

YAlO₃のテラヘルツ周波数帯における吸収スペクトル

Absorption Spectra at Terahertz Frequencies in YAlO₃

○黒田 康裕¹、森本 貴明¹、大木 義路^{1, 2} (早大¹先進理工・²材研)

○Yasuhiro Kuroda¹, Takaaki Morimoto¹, Yoshimichi Ohki^{1, 2} (¹GSASE and ²RIMST of Waseda Univ.)

E-mail: ys-krd.0726@asagi.waseda.jp

はじめに 格子振動などの分子間振動を調べられるTHz分光が近年注目を集めている。本研究では、高誘電率ゲート絶縁膜やシンチレーターとして有望な斜方晶系ペロブスカイト型YAlO₃ (YAP) 単結晶における吸収スペクトルを、時間領域分光測定した。

実験方法 厚さ0.1mmの上記単結晶の[100]軸をTHz光の進行方向に合わせ、[001]軸とTHz光電界方向とのなす角を、0°より180°まで5°ずつ変えながら吸収を室温にて測定した。

結果・考察 YAPと、比較のため測定したYAGの吸収スペクトルを図1に示す。YAPでは、40°~50°において2.0~4.0THz付近に小さな吸収が出現し、45°付近で3.75THzに鋭い吸収が現れる。仮に45°にのみ現れるとすれば、このとき、[010]軸がTHz光の電界と平行である。一方、YAGでは全ての角度で3.65THzに鋭い吸収が現れる。

多くの無機結晶において、格子振動に起因する吸収がTHz領域に現れる。10Kという低温ではあるが、YAGの3.65THz吸収は、TO・LOフォノンに起因すると報告されている⁽¹⁾。Alを含む希土類酸化物において、図2に示すように、格子振動周波数は、希土類元素同士の原子間距離⁽²⁻⁷⁾とともに線形に増加する。また、YAPと同様の結晶構造を有するYMnO₃については、3.75THzでY, Mn付近のフォノン状態密度 (PDOS) が全PDOSのそれぞれ約80, 20%を占めると、計算されている⁽⁸⁾。YAPでも同様にY付近のPDOSが高いとすれば、図1(a)の3.75THzピークはY原子間の振動に起因する可能性が考えられる。一方、斜方晶系ペロブスカイト型酸化物中の希土類原子には、希土類原子間の赤外活性な振動モードとして、[010]軸に垂直な B_{1u} と B_{3u} 、および[010]軸に平行な B_{2u} モードが存在する⁽⁹⁻¹¹⁾。3.75THz吸収は上記3つのモードのいずれかに関連する可能性が考えられる。なお、偏光特性の解明は、今後の課題としたい。

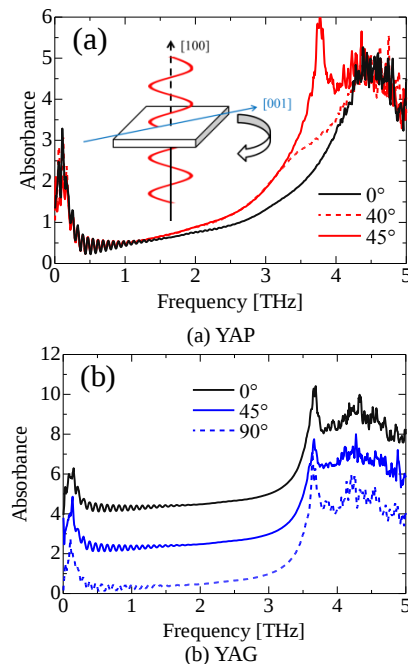


Fig. 1 Angle-resolved absorption spectra of YAP (a) and YAG (b) at THz frequencies.

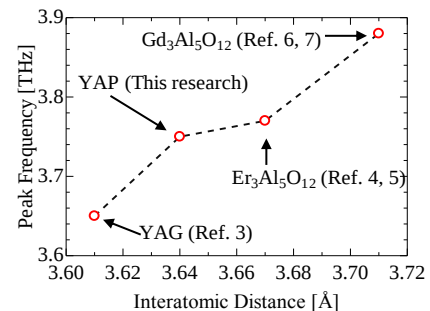


Fig. 2 Change in peak frequency as a function of interatomic distance between rare-earth elements in rare-earth aluminates. Note that structural parameters of YAP and YAG are taken from refs. 2 and 3.

- (1) A. M. Hofmeister, *et al.*, J. Appl. Phys. **72**, 638 (1992).
- (2) R. Diehl, *et al.*, Mater. Res. Bull. **10**, 85 (1975).
- (3) E. A. Kudrenko, *et al.*, Phys. Solid State **50**, 966 (2008).
- (4) K. Papagelis, *et al.*, J. Appl. Phys. **94**, 6491 (2003).
- (5) B. Eitschmann, *et al.*, Acta Crystallogr. B **57**, 136 (2001).
- (6) K. Papagelis, *et al.*, J. Phys. Chem. Solids **64**, 599 (2003).
- (7) A. C. S. Hamilton, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **26**, 116001 (2014).
- (8) M.N. Rao, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 355402 (2009).
- (9) M. N. Iliev, *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 2872 (1998).
- (10) H. C. Gupta, *et al.*, J. Solid State Chem. **146**, 287 (1999).
- (11) R. Sopracase, *et al.*, Physica B **405**, 45 (2010).