

放射光電子分光による Ti_2O_3 エピタキシャル薄膜の電子状態解析Synchrotron radiation spectroscopic study on Ti_2O_3 epitaxial thin films東北大多元研¹, KEK 物構研²○長谷川 直人¹, 吉松 公平¹, 志賀 大亮^{1,2}, 神田 龍彦¹, 徳永 凌佑¹,北村 未歩², 堀場 弘司², 組頭 広志^{1,2}IMRAM, Tohoku Univ.¹, IMSS, KEK²,°N. Hasegawa¹, K. Yoshimatsu¹, D. Shiga^{1,2}, T. Kanda¹, R. Tokunaga¹,
M. Kitamura², K. Horiba², and H. Kumigashira^{1,2}

E-mail: naoto.hasegawa.p4@dc.tohoku.ac.jp

【はじめに】酸化チタンの一種であるコランダム型 Ti_2O_3 は、約 450 K で金属-絶縁体転移 (MIT) を示す。この MIT 前後では、 c 軸方向に形成した Ti-Ti 結合間の距離の変化により、格子定数が大きく変調する[1]。さらに、 Ti_2O_3 バルク体における X 線吸収分光 (XAS) の線二色性 (LD) 実験の結果では、MIT 前後で Ti 3*d* 軌道の占有率が、 c 軸方向に伸びた a_{1g} 軌道から $a-b$ 平面に広がった e_g^π 軌道へ徐々に変化することが報告されている[2]。このように Ti_2O_3 バルク体では、MIT が Ti-Ti 間の結合距離や、それに伴った軌道の占有率と強く相関していることが知られている。対して近年、我々のグループでは Ti_2O_3 の薄膜化を実現し、 Ti_2O_3 薄膜がバルクとは異なる格子定数や MIT 温度を示すことを明らかにしてきた[3, 4]。そこで本研究では、 Ti_2O_3 薄膜における、MIT 前後での電子状態の変化を明らかにすることを目的として、放射光電子分光による電子状態の評価を行なった。

【実験方法】 Ti_2O_3 薄膜は、パルスレーザ堆積法により $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (0001) 基板上に合成した。一連の電子分光実験は、KEK-PF BL-2A MUSASHI において行なった。また、XAS-LD 測定は、 $E//c$ 及び $E\perp c$ (E は入射光の電場ベクトル) の条件で行なった。

【結果と考察】図 1 に、 Ti_2O_3 薄膜 (MIT 温度: 約 300 K) の MIT 前後における $T = 100$ K 及び 350 K で測定した Ti $L_{2,3}$ -edge XAS と、その LD スペクトルを示す。いずれの温度においても $E//c$ 及び $E\perp c$ のスペクトル間に顕著な LD が観測された。さらに、350 K においては、100 K よりも LD の抑制が見られた。これらの結果から、MIT 転移温度がバルク体と異なる Ti_2O_3 薄膜においても、低温で a_{1g} 軌道を占有していた Ti 3*d* 電子が徐々に e_g^π 軌道を占有するというバルク体と同様の電子状態変化を示していると考えられる。当日の発表では、光電子分光やクラスター計算の結果と併せて、 Ti_2O_3 薄膜の MIT とそれに伴う格子・電子状態の変化の相関について、より詳細な議論を行う予定である。

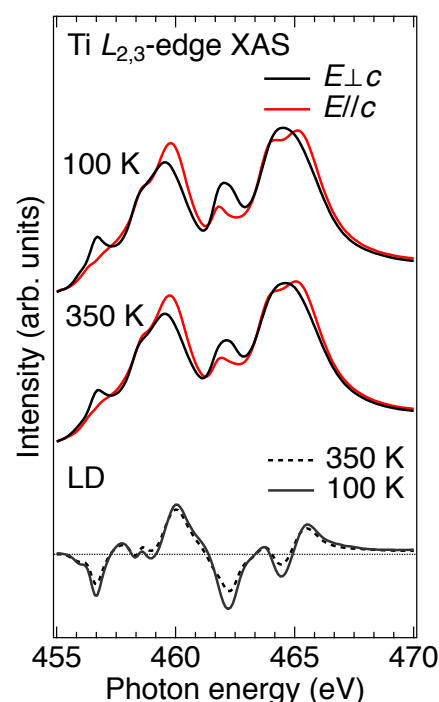


Fig. 1. Polarization dependent Ti $L_{2,3}$ -edge XAS spectra of Ti_2O_3 thin films taken at 100 and 350 K, together with their LD spectra.

[1] C. N. R. Rao, Phys. Lett. A **27**, 271 (1968).[2] C.F. Chang *et al.*, Phys. Rev. X **8**, 021004 (2018).[3] K. Yoshimatsu *et al.*, APL Mater. **6**, 101101 (2018).[4] K. Yoshimatsu *et al.*, Sci. Rep. **10**, 22109 (2020).