

## ルチル型遷移金属酸化物の角度分解光電子分光測定 ARPES study of rutile-type transition metal oxides

村岡祐治\*、長尾浩樹、坪田幸士

岡山大学大学院自然科学研究科、〒700-8530 岡山市北区津島中 3-1-1

### 1 はじめに

VO<sub>2</sub>は 340Kで結晶構造の変化を伴う金属絶縁体転移を示す。この転移の起源を電子状態の立場から解明しようと、古くから角度分解光電子分光(ARPES)実験に興味を持たれている。しかし3次元物質であるVO<sub>2</sub>はへき開面が化学的に安定ではなく、また、転移の際に体積が大きく変化し結晶が割れやすい問題も加わり、これまでこの物質でのARPES測定は困難であった。ところが最近、パルスレーザー堆積法によりTiO<sub>2</sub>基板上に堆積したVO<sub>2</sub>エピタキシャル成長膜を用いると上記のような単結晶での問題が生じず、光電子分光(PES)測定ができることが報告された。VO<sub>2</sub>エピタキシャル成長薄膜が光電子分光測定に有効であることを示している。そこで我々はVO<sub>2</sub>エピタキシャル成長膜を用いてARPES測定を行うことによりVO<sub>2</sub>のバンド分散の観測を目指した。本研究では金属相Γ-X方向に注目した。この方向には、フェルミ準位を横切る複数のバンドの存在が理論計算より予想されている。また、この方向を含む金属相ΓXRZフェルミ面にはネステイングベクトルの存在が予想されている。金属相Γ-Xにおけるバンド分散の観測は、パイエルス転移説の検証につながる。

### 2 実験

VO<sub>2</sub>薄膜はTiO<sub>2</sub>基板(001)面上にKrFエキシマレーザー(波長248 nm)を用いたパルスレーザー堆積法(PLD法)により作製した。作製したVO<sub>2</sub>薄膜の物性評価は低速電子線回折観測(LEED)と光電子分光測定により行った。

金属相Γ-Z方向のARPES測定は、佐賀Light SourceのBL10軟X線角度分解光電子分光装置により行った。測定時の試料温度は380K(金属相)で、入射光のエネルギーは100eV~160eVまで変化させながら測定した。

### 3 結果および考察

図1に入射光エネルギー155 eVにおける光電子スペクトルの、フェルミ準位近傍の強度変化とその2階微分を示した。入射光エネルギー155eVは、フェルミ面における第4ブリルアンゾーン(Γ点)を与える。E<sub>B</sub> = 0.2 ~ 0.4 eVの構造はV 3dバンド、E<sub>B</sub> = 0.5 eV以上の構造はO 2pバンドによるものである。2階微分の図より、Γ-X方向にΓ点を中心とした下に凸の、フェルミ準位E<sub>F</sub>を横切るバンドが存在している

ことが分かる。現在、E<sub>F</sub>近傍のバンド構造を詳しく会席している最中である。

今後解析をすすめてバンドの本数やバンド幅などを明らかにし、Γ-X方向のバンド構造を示したい。また、得られた結果をもとに定量的な解析を行い、有効質量やフェルミ波数等の物理パラメータを導出したい。

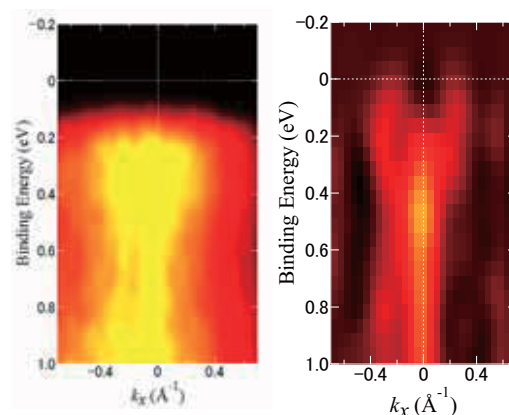


図1: Γ-X方向のE-kマップ(左)とその2階微分(右)

### 4 まとめ

実験により観測したΓ-X方向のバンド構造を解析することが当面の課題である。バンド構造を明らかにすること、さらにどのバンドがどの軌道由来であるかを明らかにすることがポイントである。課題の解決にはこれまでに方向のある理論計算の結果と実験結果を比較することが有効である。実験より求めたバンドの本数、バンド幅、フェルミ波数や有効質量を用いれば、理論との相違について定量的な議論ができる。比較により得られた知見はこれまでに報告されている理論の妥当性を検証する上でも、あるいは新たな理論モデルを作る上でも有用であり、金属絶縁体転移の起源解明に重要な役割を果たす。

### 謝辞

SLSで実験を進めるにあたり、PFスタッフに手続きでお世話になりました。また、実験ではSLSの吉村氏、瀬戸山氏、岡島氏に多大なる技術支援を受けました。ここに感謝致します。

\*ymuraoka@cc.okayama-u.ac.jp