

ペロブスカイト型 V 酸化物の電子状態におけるエピタキシャル歪みの効果：フェルミ液体論とバンド計算による解析

Effects of epitaxial strain on the electronic states of perovskite-type vanadates: analyses based on Fermi-liquid theory and band calculation

東工大物質理工学院¹, 元素戦略² [○]相馬 拓人¹, 岡部 宏和¹, 大友 明^{1,2}

Tokyo Tech., Dept. Chem. Sci. Eng.¹, MCES², [○]Takuto Soma¹, Hirokazu Okabe¹, Akira Ohtomo^{1,2}

E-mail: soma.t.ab@m.titech.ac.jp

【背景】 $3d^1$ 電子系 AVO_3 ($A = \text{Sr, Ca}$) は強相関金属として知られ、フィリングやバンド幅の制御によってモット絶縁体に転移する。強相関電子系の典型の一つとして、古くからフェルミ液体論に基づく電子状態の評価・解析が行われてきた。しかしながら、 A カチオンが電子相関に及ぼす効果については評価法によって大きく異なり、その解釈については未だ議論が続いている [1,2]。一方で、エピタキシャル歪みを用いると A サイト組成を保ったままでも電子相関に影響を与えることができる。本研究では、種々の基板上に作製し異なる歪みを与えた SrVO_3 と CaVO_3 薄膜を用いて、フェルミ液体論と第一原理バンド計算に基づく解析結果から各々の電子状態を比較した。

【結果と考察】 Fig. 1 に各種基板上・各種成長条件下で成長した AVO_3 薄膜の輸送特性を示す。面内のエピタキシャル歪み ε は逆格子マッピング測定から決定した。 ε の増加（引張歪み）とともに抵抗値が増加し、Mott 転移に近づくことが示唆される。実際に、電子-電子散乱モデル ($\rho = \rho_0 + AT^2$) の係数 A は ε とともに増加し、キャリアの有効質量が増加することがわかる。また、実験で得られた面直・面内の格子定数を適用して第一原理計算 (GGA+U) を行ったところ、 ε に依存して大きく異なる電子状態がみられた (Fig. 2)。 SrVO_3 の Fermi 準位近傍を構成する V t_{2g} バンドに着目すると、対称性低下に伴うバンド分裂とバンド幅の減少が観測された。また、斜方晶歪みを有する CaVO_3 では、 ε の増加とともに V-O-V 結合角は 180° に近づくが、V-O 結合長が伸びることにより遍歴性を失っていくことが示唆された。発表では、 ε と有効質量やバンド分散との関係やパラメータ範囲を拡大した計算結果についても論じる。

[1] T. Yoshida *et al.*, *Phys. Rev. B* **82**, 085119 (2010). [2] Z. Wang *et al.*, *Phys. Rev. B* **103**, 165110 (2021).

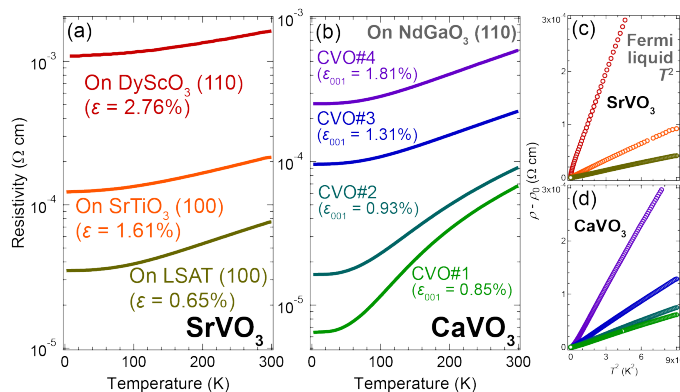


Fig. 1 | Transport properties. Temperature dependence of resistivity for (a) SrVO_3 and (b) CaVO_3 films with various strain. Fermi-liquid analysis for (c) SrVO_3 and (d) CaVO_3 .

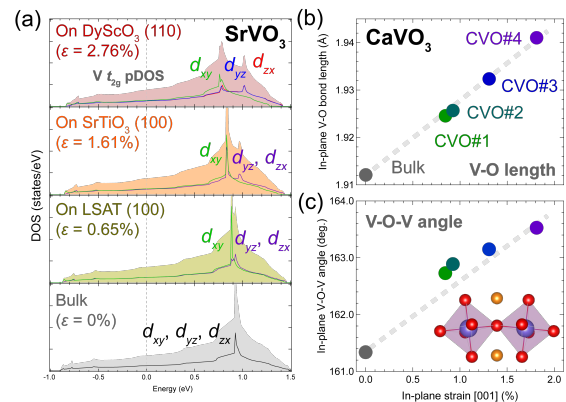


Fig. 2 | Ab initio calculation. (a) V t_{2g} projected density of states (pDOS) for SrVO_3 with various strain. (b) In-plane V-O bond length and (c) V-O-V angle for CaVO_3 .