酸水素化物 $EuVO_2H$ における圧力誘起サイト間電荷移動

Pressure-induced intersite charge transfer in oxyhydride $EuVO_2H$

京大工 [1]　○(D) 難波 杜人 [1], 高津 浩 [1], 三木田 梨歩 [1], Haobo Li[1], (M1)村山 寛太郎 [1],
(B)寺田 凌 [1], 陰山 洋 [1]

Kyoto Univ. [1], ◦Morito Namba[1], Hiroshi Takatsu[1], Riho Mikita[1], Haobo Li[1], Kantaro Murayama[1],
Ryo Terada[1], Hiroshi Kageyama[1]

E-mail: kage@scl.kyoto-u.ac.jp

圧力や温度により、異なるサイトを占めるイオン間で電荷のやり取りが行われる現象をサイト間電荷移動と呼ぶ。いくつかのペロブスカイト型酸化物において、このサイト間電荷移動が巨大な負の熱膨張や金属絶縁体転移といった興味深い現象を伴うことが報告されており、大きな注目を集めている[1,2]。特に金属絶縁体転移近傍の探索や物性の理解は、超伝導の発現やメカニズムの解明という観点から非常に重要である。

酸水素化物 $SrVO_2H$ は約 50GPa の高圧下で金属絶縁体転移を起こすことが知られている[3]。$SrVO_2H$ 中のヒドリドイオン (H^-) は一次元に秩序配列し *trans*-VO_4H_2 八面体を形成している。σ対称な H 1s 軌道とπ対称な V t_{2g} 軌道が直交しているため V^{3+}における t_{2g} 軌道の縮退は一部解け、$(d_{xz/yz})^2(d_{xy})^0$ という電子配置を取る。強い電子相関は $d_{xz/yz}$ バンドをさらに分裂させ、$SrVO_2H$ は擬二次元 Mott 絶縁体となる[4]。しかしながら高圧下ではバンド幅が大きく広がり 3 つの t_{2g} 軌道が混合することによる金属化が起きてしまう。超伝導の発現にはバンドの次元性を制御することが望ましい。

我々は $EuVO_3$ の低温還元により $SrVO_2H$ の Sr サイトを Eu に全置換した $EuVO_2H$ を合成することに成功した。高圧下における XANES 測定により、約 15GPa 程度で Eu^{2+}から V^{3+}への電子移動(Fig 1a,b) とそれに伴った金属化が起きることがわかった。$SrVO_2H$ の問題点であった軌道混合を解消した、二次元的なバンド状態を保った金属絶縁体転移が期待できる。発表では構造や物性の変化も交えた議論を行う予定である。

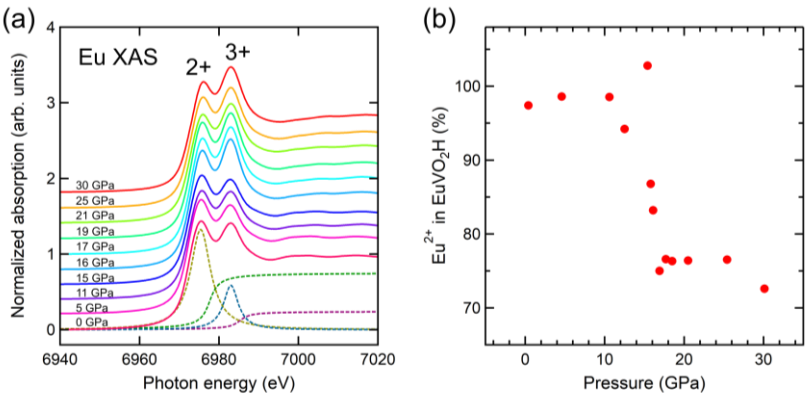

Fig 1. (a) XAS at Eu L_3-edge under various pressures. The dashed lines indicate the fitting functions. (b) Pressure dependence of the Eu^{2+} ratio in $EuVO_2H$.

[1] Long, Y. W. et al. *Nature* **2009**, *458*, 60–63.

[2] Azuma, M. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 14433–14436.

[3] Yamamoto, T. et al. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1217.

[4] Denis Romero, F. et al. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2014**, *53*, 7556–7559.

© 2022年 応用物理学会