

# 低温高圧下 X 線回折による $RVO_3$ ( $R=Y, Tb$ ) の軌道状態に対する圧力効果の研究

備前大輔<sup>A</sup>、中塚圭祐<sup>A</sup>、村田哲哉<sup>A</sup>、中尾裕則<sup>B</sup>、村上洋一<sup>A</sup>、  
宮坂茂樹<sup>C</sup>、十倉好紀<sup>D,E,F</sup>

<sup>A</sup> 東北大理、<sup>B</sup> KEK PF、<sup>C</sup> 大阪大理、<sup>D</sup> 東京大工、<sup>E</sup> ERATO MF、<sup>F</sup> 理研 CMRG

強相関電子系では、電子の持つ軌道自由度の振る舞いが物性発現に重要な役割を担っていることが、数多く報告されている。その中で  $t_{2g}$  に軌道自由度を持つ系の1つが、ペロブスカイト型バナジウム酸化物  $RVO_3$  ( $R$ :希土類) である。この系では  $R$  イオン半径の増大に伴い、軌道の基底状態が  $C$  型軌道秩序 ( $C$ -OO) 相から、 $G$  型軌道秩序 ( $G$ -OO) 相へと変化するとともに、この軌道秩序を反映し磁気状態が  $G$  型反強磁性相から  $C$  型反強磁性相へと変化することが知られている [1]。また一般に軌道は、結晶構造 (格子歪み) により決まる結晶場と強く結合している。従って、外場である「圧力」による結晶場の直接的な制御は、軌道状態を制御する意味で極めて有効な手段である。そこで、この  $C$ -OO/ $G$ -OO 相境界近傍に位置する  $YVO_3$ ,  $TbVO_3$  を用いて  $t_{2g}$  軌道状態に対する静水圧力効果を調べた。

$V^{3+}$  が持つ  $t_{2g}$  電子の軌道状態を X 線回折実験により決定するため、格子定数と  $G$ -OO 相でのみ観測される (401) 反射強度の温度-圧力依存性をダイヤモンドアンビルセルを用い精密に測定した [図 1 (a)]。格子定数と (401) 反射の結果を元に、 $YVO_3$ ,  $TbVO_3$  の軌道状態に対する温度-圧力相図を図 1 (b) のとおり決定した。図 1 (b) より、(1)  $TbVO_3$  について、常圧下で存在しない  $C$ -OO 相が加圧により  $T < T_{OO2}$  で出現すること、(2)  $YVO_3$ ,  $TbVO_3$  とともに  $C$ -OO 相転移温度 ( $T_{OO2}$ ) は加圧に対して大きく上昇し、一方、 $G$ -OO 相転移温度 ( $T_{OO1}$ ) は圧力依存性が小さいこと、(3)  $YVO_3$  では 6 GPa 以上で、 $G$ -OO 相は消失し、常圧下では報告例が無い軌道無秩序- $C$ -OO 転移を示すことを明らかにした [2]。

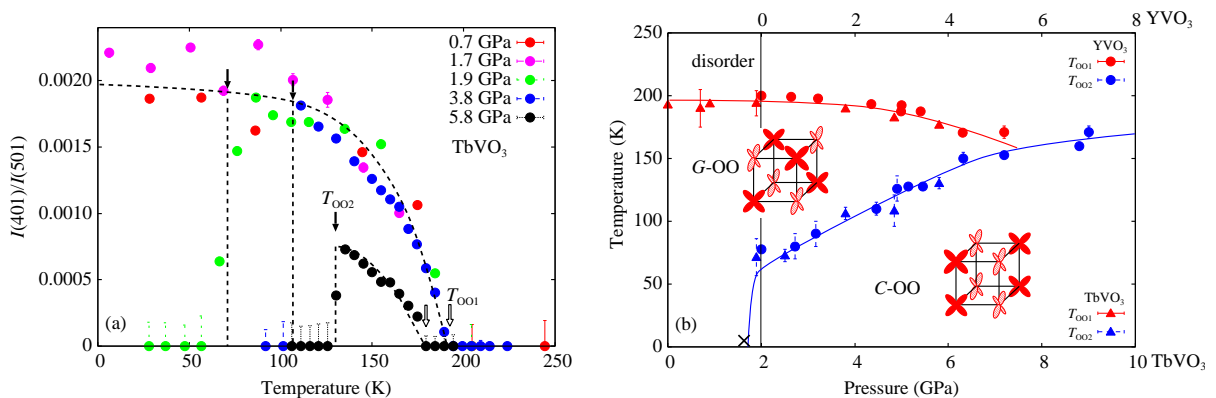


図 1: (a)  $TbVO_3$  の (401) 反射強度の温度-圧力依存性。(401) 反射強度は (501) 基本反射強度で規格化した。(b)  $YVO_3$ ,  $TbVO_3$  の軌道状態に対する温度-圧力相図。 $YVO_3$  の相図は  $TbVO_3$  の相図に対して 2 GPa シフトしてプロットしている。また、 $C$ -OO と  $G$ -OO の概略図も図中に示している。簡単のため、全てのバナジウムサイトで占有されている  $xy$  軌道は省略し、 $yz, zx$  軌道のみ描画している。

[1] S. Miyasaka *et al.*, PRB **68**, 100406(R) (2003). [2] D. Bizen *et al.*, PRB **78**, 224104 (2008).