



遷移金属カルコゲナイドにおけるスピン軌道電荷複合物性と新奇基底状態の開拓

片山尚幸
名古屋大学 工学研究科

キーワード：三量体, 軌道, 三角格子, 幾何学的フラストレーション

1. 背景と研究目的

幾何学的フラストレート格子では、スピン・軌道・電荷等の自由度が複雑に絡み合い、新奇な自己組織化現象が現れる。中でも 1963 年に J.B. Goodenough によって存在が予言された^[1]層状 LiVO_2 の V 三量体クラスターは、古くから多くの実験・理論研究が行われてきた系であるが、実際には V 三量体の存在を回折実験で捉えた実験例は一件も存在しない”未確認の三量体”である。申請者はこれまでの研究で、 LiVS_2 が LiVO_2 と類似した結晶構造を持ち、 LiVO_2 と同じ”Goodenough の V 三量体”が実現している可能性を論文報告してきた^[2]。 LiVS_2 における V 三量体の実現を BL5S2 の回折実験で観測することが本研究の目的である。

2. 実験内容

LiVS_2 粉末試料は所属する研究室において作成した。リンデマンキャピラリ($\phi 0.1$)に封入し、BL5S2 における回折実験から、”Goodenough の V 三量体”の実現を明らかにすることを目指した。実験には 19keV ($\sim 0.6502 \text{ \AA}$)の X 線を用いた。

3. 結果および考察

相転移温度 314 K の前後で急激なスペクトルの変化を確認した。高温相と低温相の構造パラメータや温度因子等の情報を詳しく調べるため、高温吹き付け・低温吹き付けの両方の使用が必要となり、日を改めての 2 シフト実験を行っている。低温相構造は V 三量体の出現を念頭に、空間群 $P31m$ で構造モデルを構築し Rietveld 解析を行った結果、図 1 に示すように S 値 1.86%程度で構造を解くことに成功した。得られた構造から抽出した V の分布は図 1 のインセットのようになっており、V の三量体が発見されていることが明らかになった。 LiVO_2 と LiVS_2 で物質こそ異なるが、回折実験により”Goodenough の V 三量体”を確認した初めての実験例であり、フラストレート磁性体研究に大きなインパクトを与える成果であると考えている。現在は、低温相の空間群が $P31m$ であり、反転対称性が破れている点に注目している。反転対称性のない空間群で量体化現象が実現している例はほぼ皆無であることから、電子状態への特異な影響について考察を深めたい。

4. 参考文献

1. J.B. Goodenough
“Magnetism and the Chemical Bond”
Interscience and John Wiley, N.Y. 1963 p270.
2. N. Katayama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**
(2009) 146405.

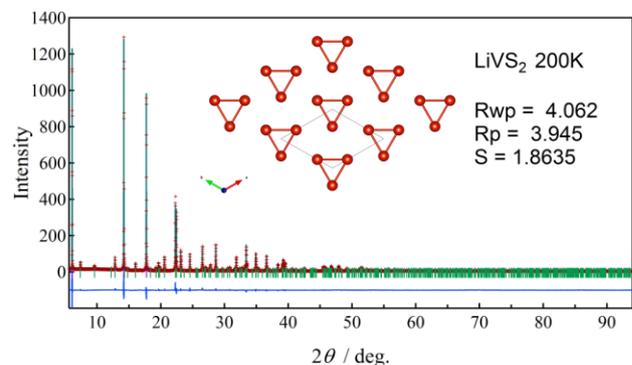


図 1 LiVS_2 の Rietveld 解析結果。
(inset) 明らかになった V 三量体。