



三角格子系 Li_xVS_2 の低温構造相転移

片山尚幸
名古屋大学 工学研究科

キーワード：三角格子系，スピン，軌道，電荷，自己組織化，三量体

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。本研究に先駆けて BL5S2 ビームラインにて行われた回折実験（実験番号 201702049）から、層状 LiVS_2 において 314 K 以下でバナジウムイオンの三量体分子形成が生じることを突き止めている（物性については参考文献 1 で報告）。本研究は、三量体化相転移を引き起こす駆動力に関する情報を得るため、高温相（314 K 以上）の構造解析を行った。

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。リンデマンガラスキャピラリ（ $\phi 0.1$ ）に封入し、BL5S2 における回折実験を行った。実験には 19 keV（ $\sim 0.6502 \text{ \AA}$ ）の X 線を用いた。

3. 結果および考察

LiVS_2 については、低温三量体相の空間群は $P31m$ であり、高温相の空間群は $P\bar{3}m1$ と報告されていた。 $P\bar{3}m1$ の空間群の下では、すべてのバナジウムイオンは特殊位置を占めており、バナジウムは歪のない三角格子を形成する。ところが、回折実験の結果、転移温度直上に超格子ピークが出現し、温度上昇とともに弱まっていく様子が観測された。このことは、転移温度直上の空間群が $P\bar{3}m1$ よりも低対称化していることを示している。解析の結果、三量体転移直上の空間群は Pm であり、バナジウムサイトに変位があることが見いだされた。物性と合わせて、明らかになった V-V 間距離をまとめた結果を図 1 に示す。 Pm の空間群を持つ中間温度相では V-V 間距離は青、赤、緑で表した三種類に分裂しており、青で示した V-V 間に金属結合が発達している様子がうかがえる。このことは、低温の三量体と競合する一次元ジグザグ鎖が転移温度直上で発達していることを示している。

4. 参考文献

1. N. Katayama *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009) 146405.

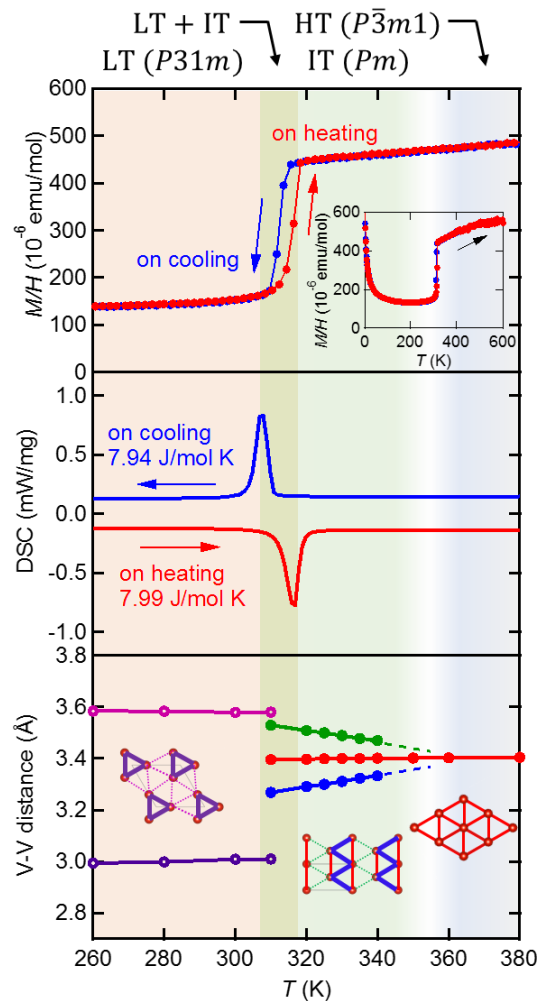


図 1 V-V 間距離の温度依存性と物性.