



## バナジウム硫化物のスピン軌道電荷複合物性 II

片山尚幸

名古屋大学大学院工学研究科 応用物理学専攻

キーワード : 量体化 短距離秩序 バナジウムカルコゲナイド

### 1. 背景と研究目的

軌道や格子に自由度を持つ遷移金属カルコゲナイドの中には、低温でスピン一重項状態をもつ遷移金属の”分子”を形成する物質が多数存在する。例えば、 $\text{LiVO}_2$  や  $\text{LiVS}_2$  では低温で隣り合うバナジウム原子が3つ集まって”三量体分子”を形成することを、これまでの研究により明らかにしてきた。こうした量体化分子は多自由度絡み合いの物理として面白いだけではなく、近年ではこれら量体化分子を抑制して現れる常磁性相においても量体化分子が短距離秩序として生き残る奇妙な電子相が実現することが報告されており<sup>1,2</sup>、注目を集めている。本研究では、 $\text{LiVS}_2$  及びその S-Se 置換体に着目し、平均構造の観点から構造に異常が見られないか明らかにすることを旨として研究を行った。

### 2. 実験内容

実験は BL5S2 ビームラインにおいて、19keV の波長を用いて実験を行った。低温吹き付けと高温吹き付けの両方を、日を改めて用いることにより、低温から高温までの回折実験を行っている。19keV における構成元素の吸収係数を念頭に、 $\phi 0.3$  のリンデマンキャピラリを用いて実験を行った。

### 3. 結果および考察

実験の結果、 $\text{LiVS}_2$  においては三量体転移温度である 314 K を超えると、三量体由来の超格子ピークが消失し、代わりにジグザグ鎖の形成を示す超格子ピークが現れた(図 1)。この超格子ピークは温度上昇と共に抑制され、345 K 以上では完全に消失した。345 K 以上の構造は歪のないレギュラーな三角格子が期待される空間群  $P-3m1$  でリファインできる。一方で、2.5%程度の S-Se 置換を行ったところ、相転移温度には大きな差がないものの、高温相におけるジグザグ鎖由来のピークは出現しなかった。代わりに、三量体化に由来して低温で現れる超格子ピークがブロードに変化し、高温まで生き残る様子が観測された(図 1)。このブロードな超格子ピークはおよそ 600 K まで維持されており、それ以上の温度では消失した。おそらくは試料に含まれるリチウムイオンが欠損し、別の電子状態に変化したことが原因と考えられる。今後は僅かな S-Se 置換によって誘起されるこの新しい電子相の正体を EXAFS や PDF 解析を通じて明らかにしていく予定である。

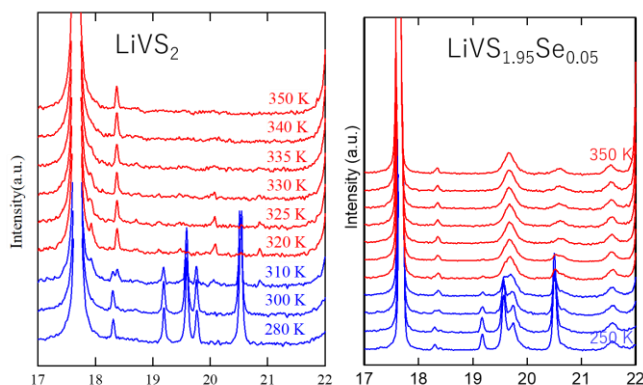


図 1  $\text{LiVS}_2$  と  $\text{LiVS}_{1.95}\text{Se}_{0.05}$  の回折パターン

### 4. 参考文献

- Kimber, S.A., Mazin, I.I., Shen, J., Jeschke, H.O., Streltsov, S.V., Argyriou, D.N., Valentí & Khomskii, D.I. Phys. Rev. B **89**, 081408(R) (2014).
- Browne, A.J., Kimber, S.A.J. & Attfield J.P. Phys. Rev. Mater. **1**, 052003(R) (2017).