



## 無秩序分子系の平均構造研究 2

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

### 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、あいちシンクロトロン BL5S2 ビームラインを活用したこれまでの研究により明らかにしてきた<sup>1</sup>。最近、我々のグループは  $\text{LiVS}_2$  の高温常磁性相において、① 200 nm 以上の相関長を持つジグザグ鎖の短距離秩序が出現すること、② ジグザグ鎖の配向は3種類が存在すること、③ ジグザグ鎖のパターンは sec のオーダーで時間・空間的に揺らいで出現すること、の三点を突き止めた。本研究の目的は、このジグザグ鎖のダイナミクスを EXAFS 測定でとらえることである。V K-edge の EXAFS 信号には V 周りの局所構造の情報が含まれており、ジグザグ鎖のパターンが時間・空間的に変動する場合、この EXAFS 信号も時間的に変動しているはずである。名古屋大学・田淵雅夫教授に行って頂いたシミュレーションによれば、ある特定のエネルギーにおけるスペクトルを連続的に観測すれば、ジグザグ鎖の揺らぎに相当するスペクトルの時間変化が観測できる可能性がある。

### 2. 実験内容

BL11S2 ビームラインにおいて、V の K-edge EXAFS 実験を行った。 $\text{LiVS}_2$  単結晶試料を用いて、相転移直上における EXAFS 実験を行い、特定のエネルギーにおけるスペクトルの時間依存性を調べた。相関長が 200 nm 以上であることは判明しているが、正確な値は不明である。本実験ではガラスキャピラリ集光を用いて、ビーム径を  $20 \mu\text{m}$  まで絞って単結晶試料に照射して実験を行った。

### 3. 結果および考察

図1に示しているのは、ジグザグ鎖の様々な配向と X 線の偏光方向に対してスペクトル形状が変化する様子をシミュレートしたものである。例えば、 $k=5.2$  程度の位置ではスペクトルの変化が大きいことがわかる。このように、大きな変化が期待されるエネルギーと変化がほとんど生じないと予想されるエネルギーの二点で、露光時間 0.5s, 1s, 2s の測定を連続して行ったが、本実験では有意と思われるスペクトルの振動は観測できなかつた。予想される相関長 200nm に対してビーム径  $20 \mu\text{m}$  が 100 倍程度に大きく、測定領域に複数ドメインが含まれてしまったことが原因と考えられる。

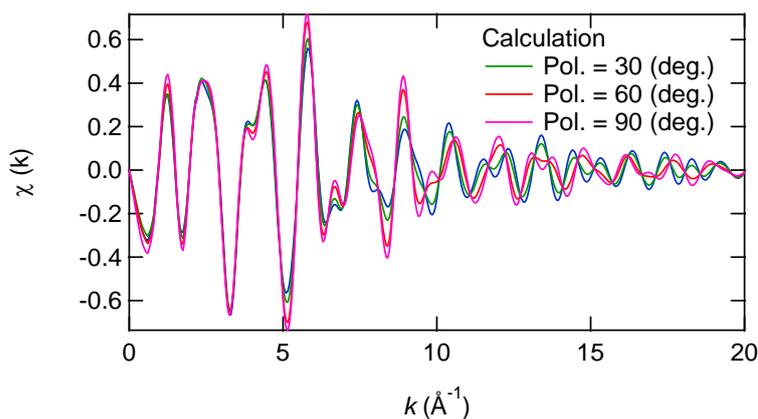


図1.  $\text{LiVS}_2$  の EXAFS スペクトルシミュレーション結果.

### 4. 参考文献

1. K. Kojima, N. Katayama *et al.*, Phys. Rev. B 100 (2019) 235120.