



無秩序分子系の局所構造研究

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、層状三角格子系 $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ では、低温で隣り合うバナジウム原子が3つ集まって”直線型三量体分子”を形成することを、あいち SR BL5S2 ビームラインを利用したこれまでの研究により明らかにしてきた¹。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^{2,3}、注目を集めている。本研究ではバナジウム酸化物 VO_2 に着目して、V-K edge の EXAFS 実験を行った。 VO_2 はルチル型酸化物であり、約 340 K で二量体を形成して非磁性絶縁体化する。高温相では量体化の短距離秩序が現れているという報告がなく、高温相の EXAFS 測定から短距離秩序形成に係る知見を得ることが目的である。

2. 実験内容

BL11S2 ビームラインにおいて、V K-edge の EXAFS 実験を行った。適量の BN と混合したペレット試料を用いて、ヒーターを用いて室温以上 700 K までの実験を行った。

3. 結果および考察

EXAFS 実験の結果、相転移温度となる 340 K 付近を境に、前後の温度域で擬動径分布関数に大きな差が現れた。構造相転移を反映して局所構造にも差が現れているものと考えられる。短距離秩序が現れる LiVS_2 や CrSe_2 などの系においては、相転移温度以上で V-V 間距離や Cr-Cr 間距離に相当するピークがフーリエ変換後の擬動径分布関数において消失するという異常が観測されている。これは、出現した短距離秩序が動的に揺らいでいることを反映していると考えられる。一方で、 VO_2 の高温相においては、高温でも V-V 間距離に由来したピークがはっきりと観測され、高温相において明確な温度依存性は観測されなかった。このことは、 VO_2 においては LiVS_2 や CrSe_2 にみられるような動的な短距離秩序の形成が起きていないことを示しているように思われる。

4. 参考文献

1. N. Katayama et al., Phys. Rev. B **98**, 081104(R) (2018).
2. 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).
3. Browne, A.J., Kimber, S.A.J. & Attfield J.P. Phys. Rev. Mater. **1**, 052003(R) (2017).