



バナジウム硫化物の粉末構造解析

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、 LiVO_2 や 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^{1,2}、注目を集めている。本研究では、 LiVS_2 及びその S-Se 置換体、S 欠損体に着目し、量体化分子の短距離秩序形成を平均構造解析という観点から調べることを目的として研究を行った。本研究は同時期に BL5S1 で行った EXAFS 実験 [201901017 バナジウム硫化物の構造解析] と対をなす実験と位置付けられる。また、2018 年度に BL5S2 で行った粉末回折実験 [201801001 バナジウム硫化物のスピン軌道複合物性 II] の追加実験でもある。

2. 実験内容

実験は BL5S2 ビームラインにおいて、19 keV の波長を用いて実験を行った。高温吹き付けを用い、300-700 K の範囲における温度変化を調べた。19 keV における構成元素の吸収係数を念頭に、 $\phi 0.3$ のリンド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

2018 年度に BL5S2 で行った粉末回折実験[201801001 バナジウム硫化物のスピン軌道複合物性 II]で明らかになったように、S-Se 置換体では、低温相で現れる三量体由来の超格子ピークが高温常磁性相でもブロードニングしながら生き残っている様子が捉えられている。本研究では、S-Se 置換体の Se ドープ量を変化させて実験を行ったが、基本的なピーク形状や温度変化には変化が生じないことが明らかになった。また、S 欠損体についても合わせて実験を行ったが、S-Se 置換体と非常によく似た傾向を示した。以上のことは、 LiVS_2 の高温相においてのみ、特異的に高温常磁性相で三量体化の短距離秩序形成が抑制されており、S-Se 置換や S 欠損などを通じて刺激を与えることにより、容易に量体化の短距離秩序が形成されることを意味している。今後は、高エネルギー X 線回折実験から高温常磁性相で現れる短距離秩序状態の詳細を明らかにすることを計画している。

4. 参考文献

1. 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).
2. Browne, A.J., Kimber, S.A.J. & Attfield J.P. *Phys. Rev. Mater.* **1**, 052003(R) (2017).