



分子クラスター化合物の構造物性研究

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、 LiVO_2 や LiVS_2 では低温で隣り合うバナジウム原子が3つ集まって三角形の”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、三角格子系 $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$, VTe_2 , CrSe_2 に着目した。これらの化合物はいずれも低温で直線型の”三量体分子”が自発的に形成され、これらが結晶中に周期的に複数現れる。これらの組み合わせが形作るパターンにちなんで”ribbon chain”分子パターンと呼ばれている。この Ribbon chain 分子パターン形成前後における各温度点における構造パラメータを回折実験から明らかにすることが本研究の目的である。これらの物質に対しては、後日高エネルギー回折実験から PDF パターンを取得し、高温相に直線型三量体分子の短距離秩序が出現するか明らかにすることを目指している。本研究で得られる構造パターンは、この PDF 解析の初期構造データとして用いる予定である。

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。1 シフト実験を2度に分けて実施し、それぞれのマシンタイムで低温吹き付けと高温吹き付けを用い、100-400 K, 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、 $\phi 0.2$ のリンデマンキャピラリーを用いて実験を行った。

3. 結果および考察

回折実験の結果、 $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$, VTe_2 , CrSe_2 のすべての試料において、報告されている通りの温度で相転移に伴う大きな構造パラメータの変化を捉えることに成功した。 $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ では、若干量の $\text{Li}_{0.5}\text{VS}_2$ が不純物として含まれていることを確認した。 $\text{Li}_{0.5}\text{VS}_2$ は 345 K で構造相転移を示すことが報告されており、この相転移に伴う回折パターンの変化が観測されたことから、 $\text{Li}_{0.5}\text{VS}_2$ と同定された。得られたデータは PDF 解析の初期構造パラメータの取得に十分なクオリティであった。

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).