



無秩序分子系の平均構造研究

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、 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、バナジウム酸化物 $\text{BaV}_{10}\text{O}_{15}$ に着目して、粉末回折実験を行った。 $\text{BaV}_{10}\text{O}_{15}$ は温度低下に伴って複数回の逐次相転移を生じ、最終的に LiVO_2 や LiVS_2 と同じバナジウム三量体を形成する。後日行われる予定の高エネルギーX線回折実験から得られるPDF(二体相関分布)解析データと比較するための各温度相における平均構造データの蓄積が本研究の目的である。最終的に、 $\text{BaV}_{10}\text{O}_{15}$ における短距離秩序の有無を明らかにしたい。

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。低温吹き付けを用い、100-400 K の範囲における温度変化を調べた。19keV における構成元素の吸収係数を念頭に、 $\phi 0.2$ 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

回折実験の結果、既報のとおり高温相では直方晶 Cmce の空間群で解析でき、最低温で三量体化に由来すると思われる回折パターンの変化を確認した。既報の構造を初期構造として構造解析を進めているが、低温相については誤差が大きく、単結晶を用いた放射光 X 線構造解析を後日行い、改めて構造の確認を行う予定である。中間温度相はインコメンシュレート結晶構造が提案されているが、超格子ピークの強度が弱く、十分な解析は出来ていない。今後は本実験結果を参考としながら、コメンシュレートな構造に対する解析結果を fix し、その後インコメンシュレートな構造を明らかにするという手順で実験・解析を進めたい。

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).