



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、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、バナジウムテルル化物 VTe_2 に着目して、粉末回折実験を行った。 VTe_2 は上述の $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ とは異なる d 電子状態をもつにもかかわらず、約 480 K 以下で $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ と同じ直線型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、 VTe_2 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。高温吹き付けを用い、300-600 K の範囲における温度変化を調べた。φ0.1 のリンデ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、既報のとおり低温相では単斜晶 $C2/m$ の空間群で解析でき、直線型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。温度を上げると、予想される相転移温度以上で対称性の高い $P-3m1$ の空間群へと変化することを確認した。高温相 600 K における V の温度因子 U は 0.03048 と異常なほど大きく、高温相において V の短距離秩序が形成されていることを反映していると思われる。奇妙なことには、低温相 400 K においても V の温度因子 U が 0.03824 という異常値を維持しており、これは類縁物質の $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ などとは異なる特徴である。本質であれば非常に興味深い性質と思われるが、重元素 Te の吸収が大きく、20 keV のキャピラリ環境で質の良いデータが取得できていない可能性を危惧している。こうした点も念頭に置きながら、今後は PDF 解析を通じて低温相、高温相の局所構造を調べ、 $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ と VTe_2 の構造の違いについて明らかにしていきたい。

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).