



無秩序分子系の平均構造研究 3

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、あいちシンクロトロン BL5S2 ビームラインを活用したこれまでの研究により明らかにしてきた¹。最近、我々のグループは LiVS_2 の高温常磁性相において、① 200 nm 以上の相関長を持つジグザグ鎖の短距離秩序が出現すること、② ジグザグ鎖の配向は3種類が存在すること、③ ジグザグ鎖のパターンは sec のオーダーで時間・空間的に揺らいで出現すること、の三点を突き止めた。このジグザグ鎖は温度低下に伴って相関長が伸びていき、314 K の三量体転移温度直上では平均構造においてもジグザグ鎖由来のブラッグピークが観測されるほどに相関長が長くなる特徴がある。しかし、相関長の伸びに由来したブラッグピークが観測され始める温度は試料の質によってまちまちであり、350 K 程度でブラッグピークが観測されはじめる試料もあれば、330 K 程度以下に下げなければ観測されない試料も存在する。この原因として、試料原料のクオリティが重要であると考えており、国内の試薬メーカーで購入した最高純度の試薬を用いて新たな試料を育成した。この試料を用いて相転移温度を求めめるため、BL5S2 での回折実験を行った。

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、300-600 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

LiVS_2 の回折実験を温度上昇過程、温度降下過程の両方について行った。低温相では三量体に由来したピークが綺麗に現れており、既報と同じ 314 K で綺麗な一次相転移を示した。十分なクオリティの試料が得られていることがわかる。しかしながら、ジグザグ鎖由来のピークは強度が強くはなく、温度上昇と共にすぐに弱まり、330 K 付近では完全に消失した。これは、純良試料であることがジグザグ鎖の長距離化に好ましいという当初の予想を覆す結果であり、現時点で原因は不明である。今後は、原料のバナジウムが酸化しており、劣化していた可能性などを検討するとともに、より高純度の試料を再度調製し、再度の回折実験を試みたい。

4. 参考文献

1. K. Kojima, N. Katayama *et al.*, Phys. Rev. B 100 (2019) 235120.