



## 短距離秩序を持つ量体化クラスターの平均構造研究 II

片山 尚幸

名古屋大学大学院工学研究科

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。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<sup>1</sup>。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<sup>2,3</sup>、注目を集めている。本研究では、先行研究で三量体化を見出した  $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$  に対して EXAFS による局所構造研究を行い、高温常磁性相において短距離秩序発達の兆候が見られるか、明らかにすることを目的として研究を行った。

### 2. 実験内容

BL11S2 ビームラインにおいて、V K-edge の EXAFS 実験を行った。適量の BN と混合したペレット試料を用いて、ヒーターを用いて室温以上 700 K までの実験を行った。

### 3. 結果および考察

EXAFS 実験の結果、相転移温度となる 375 K 付近を境に、前後の温度域で擬動径分布関数に大きな差が現れた。構造相転移を反映して局所構造にも差が現れているものと考えられる。短距離秩序が現れる  $\text{LiVS}_2$  や  $\text{CrSe}_2$  などの系においては、相転移温度以上で V-V 間距離や Cr-Cr 間距離に相当するピークがフーリエ変換後の擬動径分布関数において消失するという異常が観測されている。これは、出現した短距離秩序が動的に揺らいでいることを反映していると考えられる。こうした異常は  $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$  では観測されず、 $\text{LiVS}_2$  や  $\text{CrSe}_2$  と  $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$  の間では違いがあることが明らかになった。

### 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).