



量体化物質の低温構造解析

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、低温でスピン多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、論文報告を行った[1]。新たなプロジェクトとして、スピネル格子系 LiRh_2O_4 に着目した。 LiRh_2O_4 は高温で金属となるが、温度低下に伴って2度の相転移を示し、最低温では非磁性絶縁体となる。最低温での非磁性絶縁体相では Rh の量体化分子が形成されていると予想されるが、合成時に生成される不純物が精度の高い構造解析を妨げてきた。今回、新しいバッチの試料を複数準備したため、110 K (低温量体化相)、175 K (中間温度相)、300 K (高温相)での回折実験を行った。

2. 実験内容

実験は BL2S1 ビームラインにおいて、17 keV の波長を用いて実験を行った。低温吹き付けを用い、110-300 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、試料中の不純物については完全に除去は出来ていないものの、低温相の構造解析に用いることが出来そうなデータを得ることに成功した。110, 170, 300 K での回折実験では、それぞれ異なる回折パターンを得ることができ、物性測定から期待されるような2度の相転移の存在を確認することができた。今後の解析から不純物量を見積もり、最も不純物の少ない試料に対して SPring-8 BL04B2 において高エネルギーX線回折実験を行い、PDF 解析を行うことを予定している。今回の BL2S1 測定から得られる平均構造と、BL04B2 での PDF 解析から得られる局所構造の情報を突き合わせることにより、 LiRh_2O_4 で現れる量体化パターンや、 LiVS_2 で得られたような短距離秩序についての情報を得ることができ、スピネル系における量体化の物理の解明に大きく寄与すると期待している。

4. 参考文献

1. N. Katayama et al., npj Quantum Materials **6**, 16 (2021).