



ロジウムスピネルの高温構造

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。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、スピネル型ロジウム酸化物 LiRh_2O_4 に着目して、粉末回折実験を行った。 LiRh_2O_4 は温度低下に伴って二度の構造相転移を示す。最低温相は電荷秩序を伴う量体化相となり、高温相と中間温度相では量体化の短距離秩序の出現が期待される。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高温相における平均構造データの蓄積を行うとともに、温度因子等のパラメータから短距離秩序の発達を示唆する異常が観測できないか、調べることが本研究の目的である。

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。 $\phi 0.1$ 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、既報のとおり高温相構造はFd-3mの対称性を持つ立方晶で解析することができた。温度を上げて対称性に変化はなく、Rhの温度因子(B)は温度上昇と共に単調に増大する傾向を示した。この振る舞いは通常の結晶と同様であるが、RIETANによる構造解析で得られたRhの温度因子(B)の値は1.5程度と大きく、量体化の短距離秩序形成に伴う原子位置の変位を反映しているように思われる。今後は、対応する温度域における短距離秩序の有無をPDF解析から調べ、本実験で得られた構造パラメータとの比較を進めたい。

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).