



短距離秩序を持つ量体化クラスタの平均構造研究 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。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はなく、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、ニオブテルル化物 NbTe_2 に着目して、粉末回折実験を行った。 NbTe_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、全温度領域で $\text{Li}_{0.33}\text{VS}_2$ と同じ直線型ニオブ三量体を形成する。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。

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、既報のとおり単斜晶 C2/m の空間群で解析でき、直線型三量体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 600 K 以上に上げると、回折パターンに大きな変化が生じ、結晶構造が不安定化することを確認した。類縁物質の VTe_2 においても以前の BL5S2 実験で直線型三量体の実現を捉えている。 VTe_2 における回折実験からは、異常なほど大きい V の温度因子が観測されており、構造の局所的な乱れを反映していると考えている。重元素 Te の吸収が大きく、データの質の問題はあるものの、今回測定した NbTe_2 においても温度因子の観点から異常性が現れていないか、今後データを精査する予定である。

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).