



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 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-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、 LiVS_2 と同じ d^2 電子状態を有する LiVSe_2 に着目した。 LiVSe_2 は常圧で金属となるが、図に示すように圧力下で量体化の秩序を発達させる。 LiVS_2 と LiVSe_2 の関係性を詳細な構造解析から掴むことを最終目的としているが、層間の Li が乱れるために純良な LiVSe_2 を得ることが難しい。高温でのアニール効果を調べることを目的として、高温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、20keV の波長を用いて実験を行った。高温吹き付けを用い、300-700 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、不純物のない単相試料がえられたものの、一部ピークに特徴的なブロードニングが現れており、試料の質の悪さを反映していると考えた。構造乱れの原因と思われる Li イオンは高温で動けるようになることを念頭に、温度を上昇させると、約 600 K でピークがシャープに変化し、温度を下げててもピークのシャープネスは保たれていた。ただし、650 K 付近で不純物ピークが出現することも合わせて明らかになり、微妙な温度調整による試料アニールが結晶の質を高めるために必要であると結論づけられた。今後は、今回の結果から得られたアニール条件に基づいて質を高めた試料を準備し、低温での構造パラメータを収集したい。

4. 参考文献

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

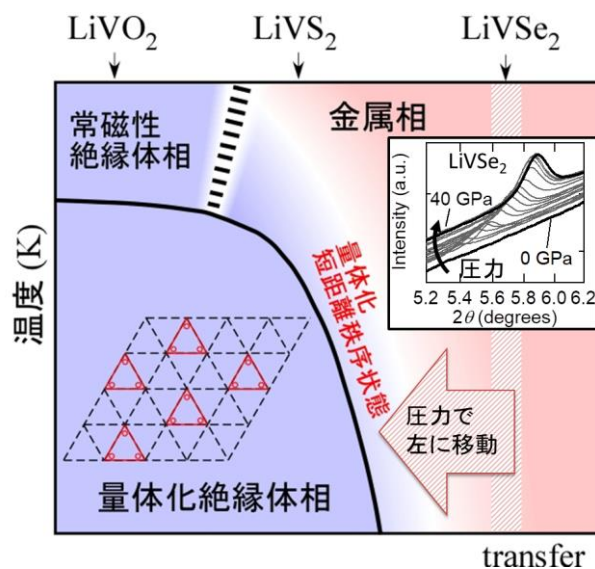


図1 LiVS_2 と LiVSe_2 の関係。インセットは圧力下での量体化の発達を回折実験で観測した結果。