



回折法による量体化物質の局所構造解析

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。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]。今回我々は新しいターゲットとして、低温で直線型三量体を形成する RuP の構造解析に取り組んだ。RuX (X = P, As, Sb) は二元系の単純な組成でありながら、低温に下げると金属-絶縁体転移(X = P, As)や、超伝導転移(X = Sb)が生じるなど、多彩な電子物性を示すことが知られている。RuP においては約 260 K で構造相転移が生じ、低温相構造は長年謎とされていたが、最近の構造解析により Ru が直線型の三量体を形成していることが判明した。上述の LiVS_2 の例のように、高温常磁性相において三量体化に向かう短距離秩序の発達が観測されることを期待して、将来的に PDF 解析などを実施することを検討している。今回は、準備実験としてリートベルト解析可能な実験データを取得し、温度因子などに異常が現れないか確認することを目的とした。

2. 実験内容

実験は BL5S2 ビームラインにおいて、20 keV 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、純良な粉末試料が得られていることが確認された。相転移温度が 260 K であり、今回の高温吹き付けを用いた実験では相転移線にアプローチできないことから、基本的には相転移のない高温相の温度依存性を調べたことに相当するはずだが、ブラッグピークの幅が高温で細くなるなど、温度の効果と相反する振る舞いが現れることを見出した。この傾向は 300-700 K の範囲で連続的に生じており、より高温に続いているように思われる。また、700 K に上げた試料を再び 300 K に戻すと再びピークの半値幅はブロードニングすることから、温度上昇に伴う結晶の非本質的なアニール効果によるものではない。今後はより高温の実験を行い、この振る舞いの本質を解き明かしたい。

4. 参考文献

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