



# 短距離秩序を持つ量体化クラスターの平均構造研究 III

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、 $\text{LiVO}_2$  や  $\text{LiVS}_2$  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<sup>1</sup>。最近、我々のグループは  $\text{LiVS}_2$  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、 $\text{LiVS}_2$  と同じ  $d^2$  電子状態を有する  $\text{LiVSe}_2$  に着目した。 $\text{LiVSe}_2$  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。 $\text{LiVS}_2$  と  $\text{LiVSe}_2$  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。低温でのジグザグ鎖の安定性を明らかにすることを目的として、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、20 keV の波長を用いて実験を行った。低温吹き付けを用い、110-400 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ており、低温からジグザグ鎖が実現していることを確認した。 $\text{LiVS}_2$  におけるジグザグ鎖は温度上昇とともに短距離化することが明らかになっており、本実験では 110-400 K の範囲内での温度依存性を調べることに成功した。今後、Rietveld 解析をすすめ、 $\text{LiVSe}_2$  におけるジグザグ鎖の温度に対する安定性を格子パラメータや V-V 間距離の解析を通じて明らかにしていきたい。

## 4. 参考文献

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

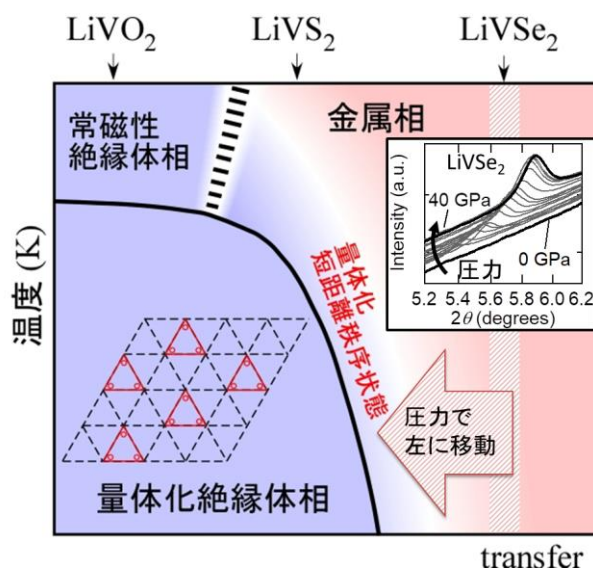


図1  $\text{LiVS}_2$  と  $\text{LiVSe}_2$  の関係。インセットは圧力下での量体化の発達を回折実験で観測した結果。