



量体化分子系の高温構造解析

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、 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]。このような短距離秩序状態が低温で量体化転移を示す様々な系で現れるか明らかにすることを目的として、 $\text{LiTiSi}_2\text{O}_6$ と V_2O_3 の構造解析を行うことを目的とした。前者は約 250 K で、後者は約 180 K で磁化率の急激な低下を伴う量体化転移を示す。今後、SPRING-8 において高温相の PDF 解析を行うことを予定しており、その下準備としての構造データの収集と相転移の確認、不純物の有無を調べるのが今回の実験の目的となる。

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。最初は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。その後、高温吹き付けの温度校正を行い、300-700 K における温度変化を調べた。実験には $\phi 0.1$ のリンデマンキャピラリを用いた。

3. 結果および考察

回折実験の結果、 $\text{LiTiSi}_2\text{O}_6$ では多くの不純物が見られたものの、相転移温度として報告されている約 250 K で構造相転移が観測された。これ以外にも、約 150 K と 300 K で相転移らしきピーク形状の変化が観測されており、本質的に複数回の相転移が現れている可能性がある。より純良な粉末試料を準備し、PDF 解析に備える必要がある。 V_2O_3 では約 180 K で明瞭な一次の構造相転移が確認された。不純物等はなく、PDF 解析を行うために適した粉末試料が準備できていることを確認した。両者ともに高温 700 K まで測定を行っており、今後は構造パラメータの解析を進め、今後行う予定の PDF 解析を目的とした高エネルギーX線回折実験に持ちいる基礎データとして活用したい。

4. 参考文献

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