



LiVSe₂ の EXAFS 測定

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、LiVO₂やLiVS₂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LiVS₂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、LiVS₂と同じ *d²* 電子状態を有する LiVSe₂ に着目した。LiVSe₂ は常圧で金属となるが、低温で LiVS₂ の高温相と同じジグザグ鎖の秩序が長距離化して発達していることをこれまでの BL5S2 回折実験で突き止めている。これが LiVS₂ と同様に時間・空間的に揺らいで現れるかを明らかにするため、STEM 測定で観測を試みたところ、結晶性が極めて悪く、揺らぎの観察には至らなかった。短距離揺らぎの存在を間接的に確認するための別の手法として、EXAFS が挙げられる。上述の LiVS₂ の場合、揺らぎが現れる高温金属相における V の K-edge EXAFS データから得られる擬動径分布関数では、V-V 間距離に由来したスペクトルが観測されないという異常が現れる。これは、EXAFS 測定で得られる信号が短距離揺らぎに由来した様々な V-V 間距離の成分の足し合わせとなり、結果として位相の打ち消しあいが生じたためと理解される。同様の現象が LiVSe₂ の高温相においても現れるかどうかを確認することが、本研究の課題となる。

2. 実験内容

BL11S2 ビームラインにおいて、V K-edge の EXAFS 実験を行った。適量の BN と混合したペレット試料を用いて、ヒーターを用いて室温以上 700 K までの実験を行った。

3. 結果および考察

EXAFS 実験の結果、LiVSe₂ においても LiVS₂ の高温相と同様に、V の K-edge EXAFS データから得られる擬動径分布関数において、V-V 間距離に由来したスペクトルが観測されないという異常が現れた。このことは、LiVS₂ と LiVSe₂ で似通った異常金属相が現れていることを明確に示しており、揺らいだ短距離秩序形成の起源に迫る上で重要なデータとなる。既に成果は論文としてまとめて Physical Review B 誌に投稿中であり、現在は査読プロセスの途中にある。

4. 参考文献

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