



# Ru 化合物の 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化合物の中には、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。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]。こうした短距離秩序が期待できる遷移金属化合物は他にも存在する。例えば、*MnP* 型構造を持つ  $\text{RuP}$ ,  $\text{RuAs}$ ,  $\text{RuSb}$  では低温で金属-非磁性絶縁体転移を示し、絶縁体相では  $\text{Ru}$  の直線型三量体分子が現れる。低温相の分子は長距離の秩序の秩序を形成しており、高温でこれらの分子は消失すると思われていたが、最近の我々の PDF 解析により、短距離秩序として三量体分子が生き残っている様子が観測された。こうした分子の短距離秩序状態を EXAFS により観測し、これらの短距離秩序系に共通した特徴を見出したいというのが本研究のモチベーションである。

## 2. 実験内容

BL11S2 ビームラインにおいて、 $\text{Ru}$  K-edge の EXAFS 実験を行った。適量の  $\text{BN}$  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、 $\text{RuP}$ ,  $\text{RuAs}$ ,  $\text{RuSb}$  の三種の試料すべてにおいて、高温常磁性相において  $\text{Ru-Ru}$  間距離に相当するピークが観測されないという異常が観測されることを確認した。同様の現象は、 $\text{LiVS}_2$  の高温相における  $\text{V}$  の K-edge EXAFS 実験でも得られている。 $\text{LiVS}_2$  の場合、高温ではジグザグ鎖が液体のように揺らいでおり、揺らいたジグザグ鎖の複数のパターンの重ね合わせが EXAFS スペクトルで観測される。これが結果的に位相の打ち消しあいを生み出し、 $\text{V-V}$  間距離に由来したピークの消失という形で現れると議論されている。同様の現象が  $\text{RuP}$ ,  $\text{RuAs}$ ,  $\text{RuSb}$  でも見られたということは、高温相で  $\text{Ru-Ru}$  の三量体短距離秩序が揺らいで現れていることを意味しているように思われる。今後は、同様の実験を他の短距離秩序系に対しても適用し、この現象が普遍的なものであることを明らかにしたい。

## 4. 参考文献

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