

CuIr₂S₄ の価電子帯→S 2p 発光スペクトル

北本克征, 中島裕一, 三村功次郎, 野田辰則, 藤田幸宏, 市川公一, 会田修, 石橋広記^A
 阪府大院工, ^A 阪府大院理

構造をもつ CuIr₂S₄ は, 室温から温度を下げていくと, 約 230 K で同時に構造, 金属 絶縁
 生 反磁性転移を示す. また, この転移に伴って Ir イオンが電荷整列すると考えられてい
 計算[2]では, フェルミ準位 E_F 近傍の状態は Ir 5d-S 3p 混成バンドで, 約 1 eV に Ir 5d の大
 存在すると予想されているが, 価電子帯光電子スペクトルには, 対応する Ir 5d のピーク
 ない[3]. 今回, 我々は, S $L_{2,3}$ 軟 X 線発光スペクトルを測定し, 発光遷移の選択則を利
 帯における nd (ns)軌道と混成した S 3p 電子構造を調べた. 測定は BL-19B で行った. 試
 晶焼結体で, 真空槽内でやすりがけによって表面を清浄化し, 275 K で測定した.

の S $L_{2,3}$ 発光スペクトル(白丸)を示す. E_F で示したエネルギーは, S 2p 光電子スペクト
 $p_{1/2}$ 準位の結合エネルギーである. 以前測定された光電子スペクトル(図 2 の黒丸) と同
 V の位置に肩構造が見られる. 光電子スペクトルの励起光エネルギー依存性測定から,
 の寄与があることが示されている[4]の, 共通して見られる肩構造は, バンド計算から
 うに Ir 5d-S 3p 混成バンドによる構造と考えられる. この肩構造が S 2p 準位のスピン軌
 によるものでないことを確かめるため, 価電子帯から S $2p_{1/2}$ および $2p_{2/3}$ への遷移強度
 計的重みだけに依存し(強度比 1:2), スペクトル形状が数個の Voigt 函数の重ね合わせ
 して, L_2 および L_3 スペクトルに分解してみた結果も図 1 に示した. 図 2 で CuIr₂S₄
 (実線), 以前測定された光電子スペクトル(黒丸, Mg $K\alpha$ 励起, 液体窒素温度) およ
 とにした光電子理論スペクトル(破線) [3]を比較した. Ir 5d と混成した S 3p 電子構
 広がっており, バンド計算による S 3p 部分状態密度[2]と比較的良く合っている.

Phys. Soc. Jpn. **63**, 3333 (1994), S. Nagata *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 6844 (1998),

6, 155 (2002).

condens. Matter **7**, 4433 (1995).

Phys. Rev. B **55**, R15979 (1997).

Phys. Rev. B, to be published.

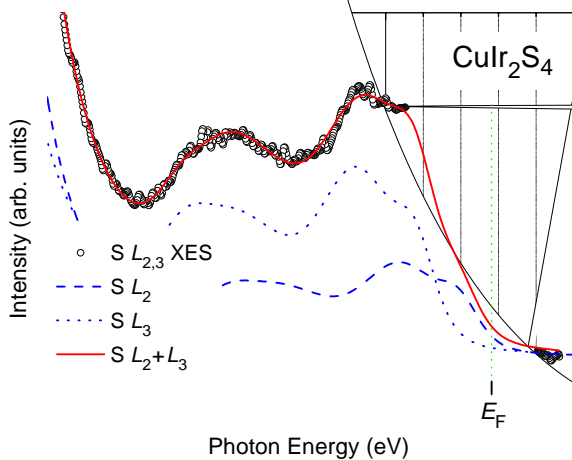


図 1. CuIr₂S₄ の S $L_{2,3}$ 発光スペクトル(白丸)と
 L_2 (破線), L_3 (点線)への分解結果.

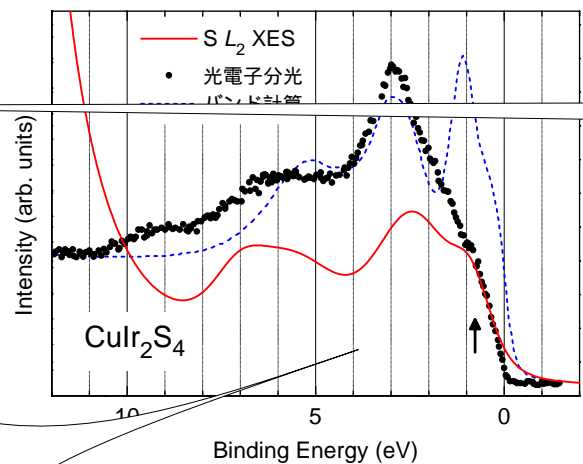


図 2. S L_2 発光スペクトル(実線), 光電子スペク
 トル(黒丸)および理論スペクトル(破線)の比較.