



パイライト型 $Ni_{1-x}Cu_xS_2$ 混晶の S K 吸収端スペクトル

曾田一雄^{1,2,3}, 稲垣貴大¹, 加藤政彦¹, 岩崎純也¹, 秋田貴弘¹,
白子雄一¹, 丹羽健¹, 長谷川正¹, 野本豊和⁴, 村井崇章³, 陰地宏^{2,3}
¹名大院工, ²名大SR, ³AichiSR, ⁴あいち産科技セ

1. 背景と研究目的

パイライト型化合物 MX_2 (後期遷移金属 M , カルコゲン X) は多様な磁気的電氣的性質を示す[1]。 NiS_2 は反強磁性Mott絶縁体であり[2]、 CuS_2 は常磁性で超電導を示す[3]。本研究では、これらの固溶体 $Ni_{1-x}Cu_xS_2$ のCu組成 x に対する電子構造と物性の変化について知見を得るため、S K 吸収端X線吸収スペクトルS K -XASのCu組成 x 依存を調べ、第一原理計算によるバンド構造と比較した。

2. 実験内容

XAS測定は、あいちシンクロトロン光センターBL6N1の大気圧XAFSシステムを用いてSiドリフト検出器による部分蛍光収量PFY法あるいは転換電子収量CEY法で行った。バンド構造計算はコヒーレントポテンシャルCPA近似を用いたAkai-KKR法[4]により格子定数の実験値に対して行った。

3. 結果および考察

図1にPFY法で得られたXASスペクトルを示す。太線および●付き細線は、それぞれ試料の破断面および鏡面研磨面に対して測定した結果である。測定した組成範囲は異なるが、同組成のスペクトルを比較すると、定性的には一致する一方、研磨面の方が鋭い吸収端ピーク構造と続く深い谷構造を示す。原因は破断面における散乱と推察される。

計算したS p 部分状態密度分布DOSと動的平均場近似DMFT 計算による NiS_2 のスペクトル強度[2]も図に比較する。XASスペクトルは、 CuS_2 の吸収端に2ピーク構造を示すが、 x が減少するにしたがって低光子エネルギー側のピークがシフトするとともに弱くなるように見え、 NiS_2 では単一ピーク構造となる。この単一ピーク構造はすでに動的平均場近似DMFT計算で反結合性S $2p$ 状態への遷移と説明されている[2]。一方、CPAバンド構造計算は、バンド金属である CuS_2 の2ピーク構造を説明するが、Mott絶縁体 NiS_2 の単一ピーク構造はもとよりスペクトル形状の組成 x 依存を説明できないようである。つまり、CPA計算では、Cu組成 x が変わっても非占有S p DOSは大きく変わっていない。

今後、全組成領域の鏡面研磨面についてXAS測定を行い、光電子スペクトルや電気伝導特性の組成依存とも比較しながら、電子構造と物性の相関を明らかにする。

4. 参考文献

1. J. Zaanen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 418.
2. J. Kunes *et al.*, *Phys. Rev. B* **81** (2010) 035122.
3. H. Ueda *et al.*, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 155104.
4. <http://kkkr.phys.sci.osaka-u.ac.jp/>

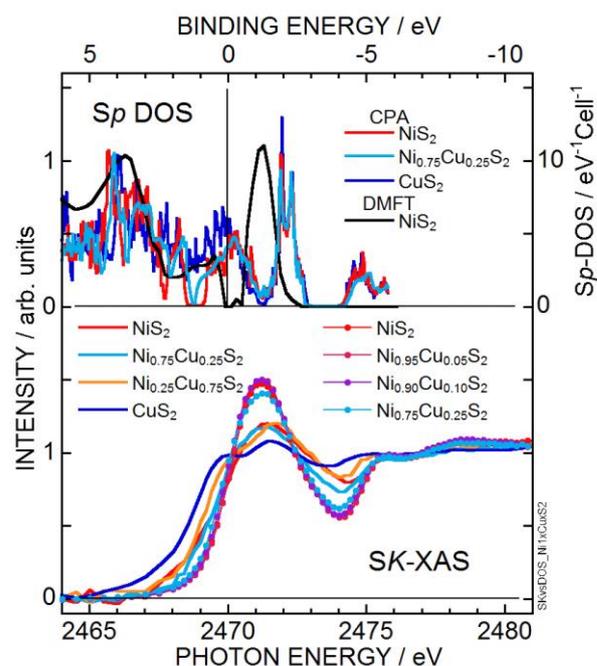


図1. S K -XAS と Sp DOS との比較