

金属—絶縁体転移を示す CuIr_2S_4 における電荷秩序の XAFS 分光研究

XAFS spectroscopic study on charge order of CuIr_2S_4 showing metal-insulator transition

平賀 晴弘¹⁾, 松村 大樹²⁾

Haruhiro HIRAKA and Daiju MATSUMURA

¹⁾ 東北大学 ²⁾ 原子力機構

キーワード : XAFS、電荷秩序、金属—絶縁体転移、スピндаイマー

1. 目的

電気輸送特性に劇的な変化をもたらす金属—絶縁体転移 (M-I 転移) は、固体物理学だけでなく実用材料への可能性という観点からも、たいへん興味深い現象である。本研究では、 $T_{\text{MI}}=230$ K にて M-I 転移を示し[1]、 T_{MI} 以下の絶縁体相で Ir^{3+} と Ir^{4+} の電荷秩序が形成される[2] 5d 遷移金属硫化物 CuIr_2S_4 (図 1) を取り上げ、局所結晶構造の観点から M-I 転移の特徴を明らかにする。

2. 方法

CuIr_2S_4 粉末試料 10mg と BN 粉末 30mg を良く混ぜ合わせ、プレス成形してサンプルホルダーにセット。冷凍機に取付け、M-I 転移温度の前後で XAFS 測定を行う。吸収端として、Ir-L3 と Cu-K を用いる。

3. 研究成果

Ir-L3 吸収端で調べた第 1 配位 Ir-S、及び、Cu-K 吸収端で調べた第 1 配位 Cu-S に対する C_2 の温度変化を図 1 (a) と図 1 (b) にそれぞれ示す。

4. 考察

Ir-S 原子間の C_2 に見られる T_{MI} 直下での急激な跳びは、これまで推測されている T_{MI} 以下における Ir^{3+} と Ir^{4+} の電荷秩序と矛盾しない。ただし、同様の C_2 の変化が Cu-S 原子間にも観測された。これまで詳細に議論されていない Cu イオンだが、M-I 転移に果たす役割を再吟味する必要がある。ただし今回の測定試料には、Ir 金属がまだ 10% 以上残っており、Ir 金属を極力抑えた試料での再実験が必要であろう。またデータ解析を更に進め、より高配位である Ir-Ir 結合の情報を抽出し、第 1 配位の結果と併せ考えることで、Ir 周りの局所構造から M-I 転移をより明らかにする必要がある。

5. 引用(参照)文献等

[1] S. Nagata *et al.*, Physica B **194-196**, 1077 (1994).

[2] P. Radaelli *et al.*, Nature **416**, 155 (2002).

[3] N. Kijima *et al.*, J. Alloys Compd. **480**, 120 (2009).

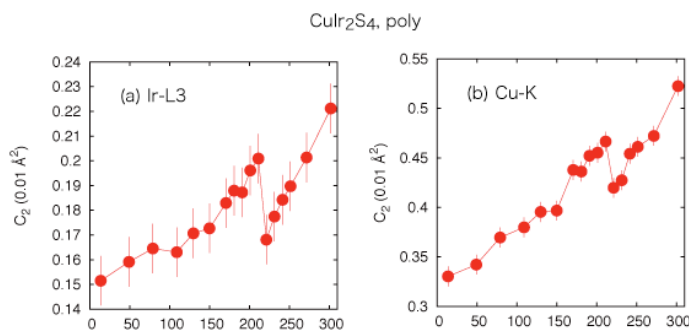


図 1. 第 1 配位に対する C_2 の温度変化。(a) Ir-S, (b) Cu-S。