

2次元伝導を示す六方晶化合物の電子構造と熱電能

Thermoelectric properties of two-dimensional, hexagonal compounds

竹内 恒博¹⁾, 久野 修平¹⁾, 深牧 大介¹⁾, 新名 雅俊¹⁾, 斎藤祐児⁴⁾

Tsunehiro TAKEUCHI, Syuhei KUNO, Daisuke FUKAMAKI, Masatoshi SHINMEI, Yuji SAITO

¹⁾名古屋大学大学 ²⁾原子力機構

(要約 2 ~ 3 行) 層状 Co 酸化物 $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$ の電子構造を SPring-8 BL23SU に設置された軟 X 線角度分解光電子分光装置を用いて観測した。紫外線励起角度分解光電子分光実験と比較することで、電子構造の特徴を解明し、熱電物性に及ぼすその効果を調査する研究を行った。

キーワード：軟 X 線角度分解光電子分光、層状 Co 酸化物、熱電変換材料

1. 目的

Na_xCoO_2 に代表される層状 Co 酸化物は、(1) 層状銅酸化物と同様に超伝導を示すこと、(2) $100\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$ を越える大きな熱電能と金属的な電気伝導を示すこと、(3) 伝導電子の遍歴性と局在性が共存することから注目を集めている。我々のグループでは電子構造を解析することで、上記の特徴的な物性の支配因子を解明することを目的に研究を行っている。

これまでに、エネルギー分解能の高い紫外線を励起起源とした角度分解光電子分光を行ってきたが、紫外線を励起起源とした光電子分光は表面敏感であるため、表面電子状態のみを観測している可能性を排除しきれなかった。一方、軟 X 線を励起起源とした場合には、バルク敏感な測定は可能ではあるが、光源のエネルギー分解能が十分ではなく、物性を定量的に議論できる精度のスペクトルを得ることが困難であった。しかし、Spring-8 BL23SU に設置された高分解能軟 X 線ビームラインは軟 X 線領域の困難であった。しかし、Spring-8 BL23SU にて供給される軟 X 線を用いて角度分解光電子分光を行うことで、物性評価に利用できるスペクトルをバルクの情報として得ることが可能となる。そこで、本研究では、層状 Co 酸化物である Na_xCoO_2 ($x=0.8$) の電子構造を Spring-8 BL23SU に設置された軟 X 線角度分解光電子分光により観測し、バルクの電子構造（エネルギーと運動量の分散関係、E-k 関係）を決定する実験を行った。

2. 方法

測定に用いた単結晶試料は Na_2CO_3 と Co_3O_4 を出発原料としてフラックス法により作製した。超高真空中で試料を劈開することで清浄表面を用意し、軟 X 線を励起光とした角度分解光電子分光を測定した。軟 X 線領域では双極子励起に関わる散乱断面積が小さいために、一般的には、十分な光電子強度が得られない。しかし、共鳴を引き起こすエネルギーの軟 X 線を用いることで光電子強度が飛躍的に大きくなり限られた時間内での高分解能測定が可能になることから、実験には $\text{Co}2p-3d$ 共鳴 ($\hbar\nu = 781\text{eV}$) を利用した。

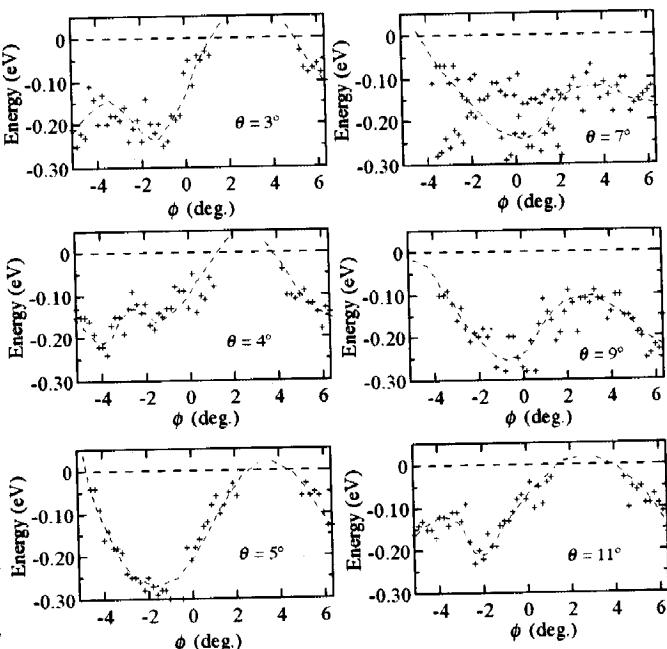


Figure 1 Energy-momentum dispersion of $\text{Na}_{0.8}\text{CoO}_2$ determined by the soft x-ray angle resolved photoemission spectroscopy.

3. 研究成果

図 1 に得られた光電子スペクトルから決定したエネルギー固有値を測定角度の関数として示す。測定された角度は運動量（波数ベクトル）に相当するために、図は E-k 関係を直接的に反映し、本研究によりフェルミ準位近傍の数百 eV の狭いエネルギー領域において、バンドが正確に決定できていることが確認できる。バンドがフェルミ準位を横切る運動量を 2

