課題番号　:2018B-E22

利用課題名（日本語）　:軟 X 線角度分解光電子分光による新規熱電物質 Mg_3Sb_2 のバンド構造

Program Title (English)　:Band structure of new thermoelectric material Mg_3Sb_2 studied by soft x-ray ARPES

利用者名（日本語）　:矢野 佑幸[1)], 寺嶋 健成[2)], 片岡 範行[1)], 細田 渉[1)], 藤原 弘和[1)], 谷口 拓海[1)], 藤森 伸一[3)], 横谷尚睦[1,2)]

Username (English)　:Y. Yano[1)], K. Terashima[2)], N. Kataoka[1)], W. Hosoda[1)], H. Fujiwara[1)], T. Taniguchi[1)], S.-i. Fujimori[3)], T. Yokoya[1,2)]

所属名（日本語）　:1) 岡山大学大学院自然科学研究科, 2) 岡山大学異分野基礎科学研究所, 3) 日本原子力研究開発機構

Affiliation (English)　:1) Graduate school of Natural Science and Technology, Okayama University, 2) Research Institute for Interdisciplinary Science, Okayama University, 3)JAEA

キーワード：熱電物質、バンド構造、軟 X 線角度分解光電子分光

1. 概要（Summary ）

Mg_3Sb_2 は毒性が弱く自然界に豊富に存在する元素からなり、作製コストが低いにもかかわらず極めて高い熱電性能を示す（温度 725K 程度において無次元性能指数 ZT = 1.65[1)]）ため、最近注目されている熱電物質である。本研本研究課題では、Mg_3Sb_2 系最大の ZT を持つ電子ドープ Mg_3Sb_2 の価電子帯バンド構造の詳細を実験的に明らかにすることを目的として軟 X 線角度分解光電子分光(ARPES)を行った。その結果、世界で初めて本物質のバンド構造を直接観測することに成功した。

2. 実験（目的,方法）（Experimental）

測定試料は電子ドープ Mg_3Sb_2 単結晶試料を用いた。バンド分散の測定は BL23SU の軟 X 線 ARPES 装置を用いて行った。清浄試料表面は破断によって得た。バンド分散の光エネルギー依存性を測定し、ブリルアンゾーン Γ 点を通る光エネルギーを決定した。その上で、複数の高対称性方向で S/N 比の高い測定を行った。

3. 結果と考察（Results and Discussion）

観測された価電子帯バンド分散は Γ 点に頂点と底を持ち、バンド幅が 5 eV であることがわかった。化学ポテンシャルは価電子帯頂上から 0.7 eV 上に位置する。このことは測定試料が n 型半導体であることと一致する。伝導帯の底が形成する電子ポケットは実験精度の範囲内で観測されなかった。バンド計算との比較から、実験的に得られたバンド構造がバンド計算の結果とよく対応することが分かった。これらの実験結果は、Mg_3Sb_2 系の高い熱電特性を理解し、さらには向上させるための基礎データとなる。

4. その他特記事項（Others）

参考文献

1) Jiawei Zhang et al., Nature 508, 373 (2014).

本研究は産業技術総合研究所の李哲虎主任研究員、木方邦宏研究員、國岡春乃氏との共同研究です。