

熱電半金属 Ta₂PdSe₆ の角度分解光電子分光 ARPES of Thermoelectric Semimetal Ta₂PdSe₆

大槻太毅^{1,*}, 石田達弘², 中埜彰俊³, 小澤健一⁴, 寺崎一郎³, 吉田鉄平²

¹岡山大学異分野基礎科学研究所, 〒700-8530 岡山県岡山市北区津島中 3-1-1

²京都大学大学院人間・環境学研究科, 〒606-8501 京都府京都市左京区吉田二本松町

³名古屋大学大学院理学研究科, 〒464-8602 愛知県名古屋市千種区不老町

⁴高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所, 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1

Daiki Ootsuki^{1,*}, Tatsuhiro Ishida², Akitoshi Nakano³, Kenichi Ozawa⁴,

Ichiro Terasaki³, and Teppei Yoshida²

¹Research Institute for Interdisciplinary Science, Okayama University, Okayama 700-8530, Japan

²Graduate School of Human and Environmental Studies, Kyoto University, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan

³Department of Physics, Nagoya University, Nagoya 464-8602, Japan

⁴Institute of Materials Structure Science, High Energy Accelerator Research Organization, 1-1 Oho, Tsukuba, Ibaraki 305-0801, Japan

1 はじめに

遷移金属カルコゲナイド Ta₂PdSe₆ は低温において非常に大きなペルチェ伝導率を示すことが近年報告され、熱電変換材料として注目を集めている[1,2]。本物質は半金属であり、電気伝導度の高さに加えてゼーベック係数が低温において顕著に増大することが知られており、これらの相乗効果により優れた熱電性能が実現していると考えられている。そこで本研究ではこの高い熱電特性の起源を明らかにするため、角度分解光電子分光 (ARPES) を用いて Ta₂PdSe₆ の電子構造を調べた。

2 実験

単結晶試料は Self-flux 法を用いて合成された。実験は Photon Factory BL-28A の可変偏光高分解能 ARPES 実験ステーションにて行った。入射光には $h\nu = 81$ eV の円偏光を用い、清浄表面は超高真空中で劈開することにより得た。測定温度は $T = 20$ K で、蒸着された Au を用いてエネルギー校正した。

3 結果および考察

図 1 は $h\nu = 81$ eV におけるフェルミ面とバンド分散である。図 1(a)より楕円型のフェルミ面と擬 1 次元的なフェルミ面から構成されていることがわかる。図 1(b)と(c)のバンド分散を見るとこれらに対応してホールバンドと電子バンドがフェルミ準位近傍を構成しており、半金属的な電子状態が実現していることがわかる。また、ホールバンドは電子バンドに比べて分散が非常に速くなっており、ホールバンドと電子バンドが質的に異なることを示唆している。

4 まとめ

本研究では熱電遷移金属カルコゲナイド半金属 Ta₂PdSe₆ の高い熱電特性を明らかにするために

ARPES を行い、電子状態の直接観測を行った。その結果、Ta₂PdSe₆ が半金属的な電子状態を有することを確認し、さらにフェルミ面をホールバンドと電子バンドの質的な違いを明らかにした。この電子とホールの非対称性は高い熱電性能に重要な役割を果たすことが考えられる。

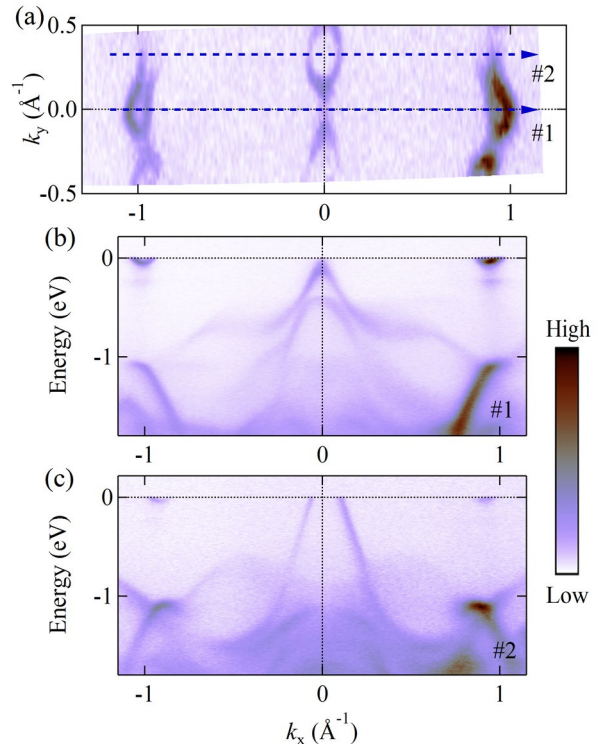


図 1 : Ta₂PdSe₆ の(a) フェルミ面と(b),(c) バンド分散

参考文献

- [1] A. Nakano *et al.*, J. Phys. Energy **3**, 044004 (2021).
[2] A. Nakano *et al.*, J. Phy. Soc. Jpn. **90**, 033702 (2021).

* ootsuki.daiki@okayama-u.ac.jp