



擬一次元コバルト酸化物 $\text{Ba}_3\text{Co}_2\text{O}_6(\text{CO}_3)_{0.7}$ の 三次元角度分解光電子分光

伊藤孝寛^{1,2}、河内章吾^{2,3}、羽尻哲也²、松波雅治^{3,4}、木村真一⁵、清水康弘⁶、小林義明⁶、伊藤正行⁶
¹名大SRセ、²名大院工、³分子研/UVSOR、⁴総研大物理、⁵阪大院生命・理、⁶名大院理

1. 背景と研究目的

Na_xCoO_2 を代表とする Co 酸化物は大きな熱起電力をもつことから熱電材料への応用の観点から注目を集めている [1]。Co 酸化物の中でも擬一次元 Co 酸化物 $\text{Ba}_3\text{Co}_2\text{O}_6(\text{CO}_3)_{0.7}$ は、比較的伝導度が良く、室温において Na_xCoO_2 に匹敵する大きな熱起電力および $T = 100 \text{ K}$ 以下において磁気異常 [2] を示すことから次世代熱電材料としての応用が期待されている。

2. 実験内容

本研究では擬一次元 Co 酸化物における熱電特性と電子状態の関係性を明らかにすることを目的として、 $\text{Ba}_3\text{Co}_2\text{O}_6(\text{CO}_3)_{0.7}$ において三次元角度分解光電子分光を行なった。

3. 結果および考察

図 1 (a) に $T = 20 \text{ K}$ における $\text{Ba}_3\text{Co}_2\text{O}_6(\text{CO}_3)_{0.7}$ の CoO_6 鎖方向 ($//c$ 軸) におけるバンド構造を示す。価電子帯を形成する Co $3d$ に由来する明確なバンド分散を観測することに成功していることが分かる。ここで、観測された分散形状が全体的に $2\pi/c$ 周期性を示していることは、 CO_3 鎖の影響が比較的小さいことに起因すると考えられる。さらに、観測された Co $3d$ 状態は、価電子帯上端 (VBM $\sim 430 \text{ meV}$) $k_c = 0 \text{ \AA}^{-1}$ 近傍において特徴的な擬一次元性を示していることを見出した (図 2)。このこ

とは、 CoO_6 鎖方向における擬一次元的な伝導特性 [2] と矛盾しない。一方、Co $3d$ バンド分散 (図 1 (a) 点線) の強度に着目すると、その強度は分散が A 点近傍を横切る 600 meV 近傍で急激に抑制されていることが分かる。このような強度抑制は分子鎖間の相互作用の影響を受けて現れる電子状態の π/c 周期性に帰結されるものと考えている。

4. 参考文献

- [1] T. Takeuchi *et al.*, Phys. Rev. B **69** (2004) 125410.
 [2] H. Igarashi *et al.*, Phys. Rev. B **89** (2014) 054431.

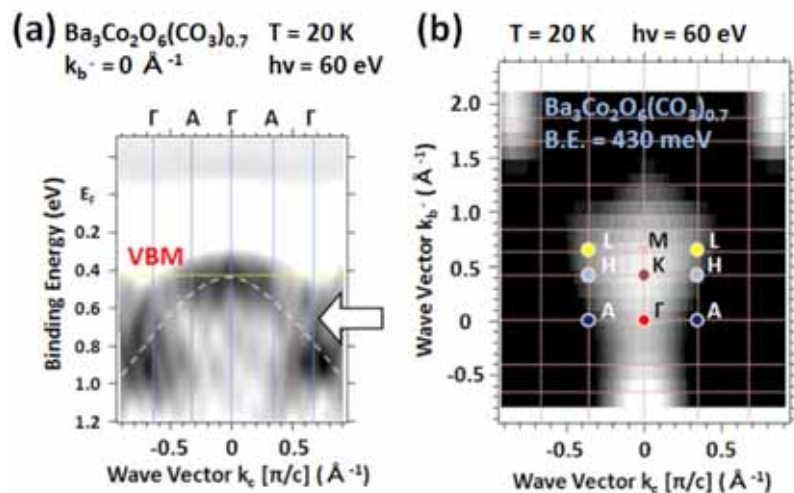


図 1 $\text{Ba}_3\text{Co}_2\text{O}_6(\text{CO}_3)_{0.7}$ の CoO_6 鎖方向におけるバンド構造 (a) および KM-LHA 面における VBM 近傍の二階微分 ARPES 強度プロット (b)。 b 方向は ab 面内の a 軸垂直方向として定義している。