

角度分解低エネルギー逆光電子分光法による HOPG の伝導帯バンド構造の実測

Conduction band structures of HOPG studied by angle-resolved low-energy inverse photoelectron spectroscopy

千葉大院工¹, 千葉大分子キ² ○(M2)折尾 響¹, (D)佐藤 晴輝¹, (D)Syed A. Abd Rahaman¹,
(M1)川村 啓太¹, 吉田 弘幸^{1,2}

Chiba Univ.^{1,2}, °Hibiki Orio¹, Haruki Sato¹, Syed A. Abd Rahaman¹, Keita Kawamura¹, Hiroyuki
Yoshida^{1,2}

E-mail: h.orio@chiba-u.jp

グラファイトは代表的な 2 次元層状物質であり、実験、理論の両方から多くの研究が行われてきた。近年注目されている 2 次元物質のベンチマークとしても重要である。伝導帯のバンド構造は、電子伝導機構と直接かかわること、2 次元層に制約された自由電子の挙動への興味から、重要である。このようなバンド構造の研究には、角度分解逆光電子分光法 (ARIPES) による直接観測と密度汎関数法によるバンド計算との比較が有効とされてきた。1990 年代までにいくつかのグループにより ARIPES 測定が行われたが測定精度が低く、また、バンド計算も局所密度近似であり信頼性に欠けた。このため、伝導帯のバンド構造についての研究は停滞していた。

空準位の測定法として、我々は試料に照射した低エネルギー電子が空準位に緩和する際の近紫外光を高精度で観測するという低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) を開発してきた[1]。最近、角度分解測定による伝導帯観測が可能になった[2]。本研究では、角度分解 LEIPS (ARLEIPS) を高配向熱分解グラファイト (HOPG) に適用した。また、一般化勾配近似 PBEsol によるバンド計算をおこない、多結晶スペクトルのシミュレーション法[3]を用いて、実験結果と比較した。

まず、測定した鏡像準位を先行 ARIPES 結果と比較し、分解能・信号対雑音比とも従来の ARIPES に比べて精度が高いことを確認した。図 1 にスペクトルの 2 次微分の極小値から求めたピークエネルギーと密度汎関数による計算、先行研究[4]と比較した。11 eV と 14 eV 付近に、従来の ARIPES 測定にはないバンドが観測された。これは、測定する光エネルギーが ARIPES (9.5 eV) と ARLEIPS (4.82 eV) で異なるためと考えられる。従来の測定と合わせると、15 eV まではバンド計算の結果とよく一致した。このことは、本研究の手法が 2 次元層状物質の伝導帯研究に有効であることを示している。

[1] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. 539, 180 (2012)

[2] 出田ほか, 第 65 回応用物理学会春季学術講演会

[3] S. Park et al, Commun Phys 2, 68 (2019)

[4] F. Maeda et al, Phys. Rev. B. 37, 4482 (1988)

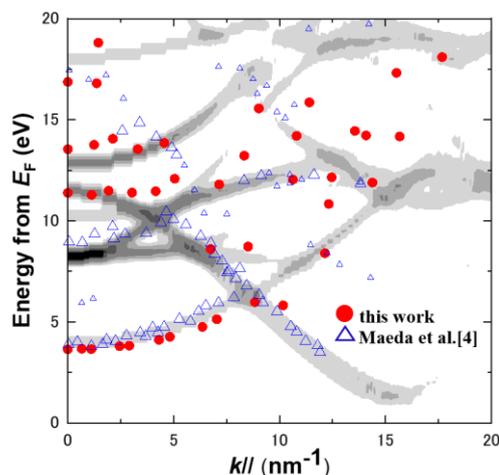


Fig.1 band dispersion of HOPG