SnS–SnSe 固溶体のホール有効質量の ARPES による直接評価

Direct evaluation of hole effective mass in SnS-SnSe solid solution by ARPES measurement

東北大 多元研 [1]，分子研 UVSOR[2]，京大工 [3]，大阪大 産研 [4]　°鈴木 一誓 [1]，リン タクシン [1]，川西 咲子 [1]，田中 清尚 [2]，野瀬 嘉太郎 [3]，小俣 孝久 [1]，田中 慎一郎 [4]

Tohoku Univ. [1], Institute for Molecular Science[2], Kyoto Univ.[3], Osaka Univ.[4]　°Issei Suzuki[1], Zexin Lin[1], Sakiko Kawanishi[1], Kiyohisa Tanaka[2], Yoshitaro Nose[3], Takahisa Omata[1], Shin-ichiro Tanaka[4]

E-mail: issei.suzuki@tohoku.ac.jp

【緒言】SnS や SnSe は高い熱電変換性能を示すことから新しい熱電変換材料として期待されている。最近、SnS–SnSe 固溶体が SnS や SnSe よりも優れた非常に高い熱電変換性能を示すことが報告され、大きな注目を集めている[1]。キャリアの有効質量は熱電変換性能を決定する重要なパラメーターの一つである。したがって、SnS–SnSe 固溶体の熱電特性を理解する上では、それらの有効質量が組成にどのように依存するかを評価することが重要となる。本研究では、半導体のバンド分散を実験的に観察する唯一の方法である角度分解光電子分光法（ARPES）を用いて、SnS-SnSe 固溶体の価電子帯の電子構造を調べ、有効質量を直接評価した。

【実験方法】$SnS_{1-x}Se_x$ 単結晶（x = 0, 0.26, 0. 51, 0.76, 1）をサンプルに用い、UVSOR（分子研）の BL5U にて、価電子帯の ARPES を観測した。測定前に単結晶を真空中でへき開することで清浄表面を得た。

【結果と考察】図 1 に、一例として、$SnS_{0.49}Se_{0.51}$ の価電子帯の k_z 方向のバンド分散を示す。価電子帯上端は（VBM）は Z—Γ 点間にあった。VBM 近傍について、放物線近似（図 1 中の緑線）から求めた有効質量は 0.28 m_0 であった。図 2 に、k_z および k_y 方向の有効質量の組成依存性を示す。いずれも Se が増えるにつれて減少する傾向であった。k_z 方向の有効質量は、Se が増えるにつれて減少の傾きが大きくなった。SnS は VBM の分散の異方性が大きく、SnSe と固溶するにつれて等方的になることが明らかとなった。当日は、SnS-SnSe 固溶体の熱電特性に大きな影響を与える Second VBM（VBM よりもわずかにエネルギーの低いバンド端）の有効質量についても報告する。

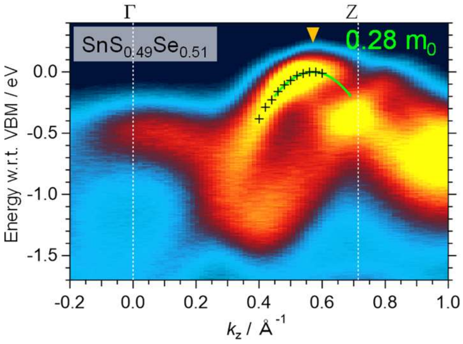

Fig. 1 ARPES dispersion image of $SnS_{0.49}Se_{0.51}$ along k_z direction. Orange triangle indicates the position of VBM.

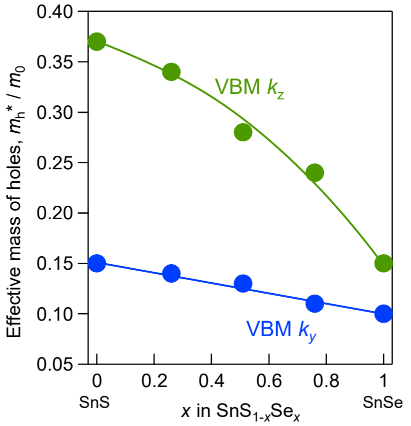

Fig. 2 Compositional dependence of effective mass of $SnS_{1-x}Se_x$ along k_z and k_y directions.

[1] He et al., *Science* **365** 1418-1424 (2019)