



## 層状 MAX 相化合物 $T_2AlC$ ( $T = Cr, V$ ) の 3次元角度分解光電子分光

伊藤孝寛<sup>1,2</sup>, 藤田大志<sup>1</sup>, 池本昌史<sup>1</sup>, Damir Pinek<sup>3</sup>, 仲武昌史<sup>4</sup>, Thierry Ouisse<sup>3</sup>  
<sup>1</sup>名大院工, <sup>2</sup>名大 SR セ, <sup>3</sup>Grenoble INP, LMGP, <sup>4</sup>あいち SR

キーワード：ARPES, 電子状態, MAX 相化合物

### 1. 背景と研究目的

MAX 相は遷移金属 M、III-A (IV-A) 族元素 A と X 元素 (C もしくは N) の組み合わせにより形成される層状化合物  $M_{n+1}AX_n$  系の総称であり、MX 層と A 原子層が重なった結晶構造をもつ。この系において、HF 処理や剥離法などにより A 原子を除去すると MX 層のみから形成される原子層系 MXene となることが期待されている。そのため、この系はグラフェンに代わる新たな原子層系として興味深い系として最近注目を集めている [1]。しかしながら、MAX 相および MXene は焼結合成などによる多結晶試料における応用研究が先攻しており、機能性を支配する電子状態と物性の関係はほとんど明らかになっていない現状にある。そこで、本研究では単結晶試料作成に成功している層状 MAX 相化合物の電子状態を角度分解光電子分光法 (ARPES) により系統的に明らかにし、この系における機能性と電子状態の関わりに対する知見を得ることを目的とする。

### 2. 実験内容

2017L1001 利用においては、MAX 相化合物の中でも比較的大きな有効質量を持つことがしられる  $Cr_2AlC$  に対して、MX-A 層間方向の電子状態を明らかにすることを目的として、励起エネルギー依存 ARPES 測定を行った。測定温度は  $T = 8$  K に設定し、エネルギー分解能は  $\Delta E \sim 35$  meV ( $@h\nu = 100$  eV) で行った。

### 3. 結果および考察

図 1 に得られたフェルミ準位近傍における光電子強度の運動量分布 (MDC) スペクトル (a) および強度マッピングの結果 (b) を示す。比較のために、図 1 (c) に DFT 計算から予測される  $\Gamma$  KLA ( $\Gamma$  MHA) 面内のフェルミ面形状も合わせて示す。実験と計算の結果の比較から、 $Cr_2AlC$  の面間フェルミ面の平均的な大きさは計算によりよく再現されるものの、ARPES においては 2次元性が比較的強い直線的なフェルミ面のみが観測されることが明らかになった。ここで、観測されたフェルミ面 ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) における系統的な強度変化および微細な波数依存性から見積もられるインナーポテンシャルは  $V_0 = 19$  eV 程度と考えられる。

### 4. 参考文献

1. M. Barsoum, MAX phases (Wiley, Weinheim 2013).
2. T. Ito *et al.*, *Phys. Rev. B* **96**, 195168 (2017).

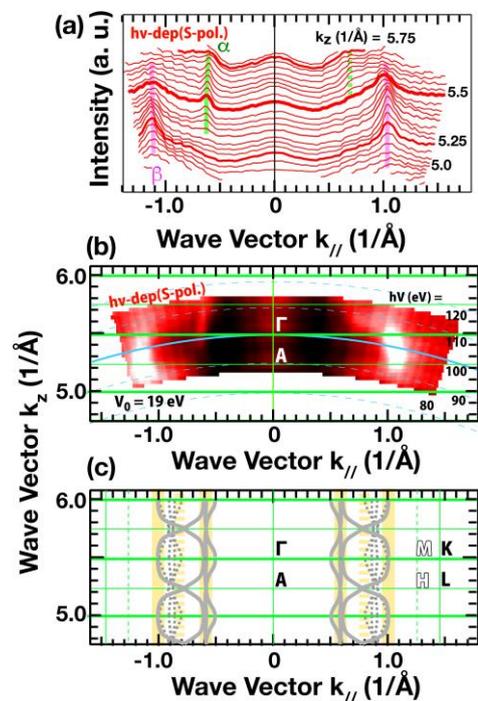


図 1  $Cr_2AlC$  のフェルミ準位近傍における MDC スペクトルの面間波数依存性 (a) および 面間フェルミ面マッピング (b)。 (c)  $\Gamma$  KLA (実線) および  $\Gamma$  MHA (点線) 面における DFT 計算のフェルミ面 [2]。