



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^{1,2}, 藤田大志¹, 池本昌史¹, Damir Pinek³, 仲武昌史⁴, Thierry Ouisse³
¹名大院工, ²名大 SR セ, ³Grenoble INP, LMGP, ⁴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

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 MAX 相化合物は 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ることから、グラフェンに代わる新たな原子層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

2017L2001 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知られる Cr_2AlC に対して、面内におけるフェルミ面形状およびバンド構造を明らかにすることを目的として、2次元面内 ARPES 測定を行った。励起エネルギーは垂直放出角度において Γ 点近傍を走査するために $h\nu = 100$ eV を用い、測定温度は $T = 8$ K、エネルギー分解能は $\Delta E \sim 35$ meV に設定した。

3. 結果および考察

図 1 に、得られた Cr_2AlC の Γ KM 面内におけるフェルミ面イメージ (a) を Γ K (b) および Γ M (c) 方向におけるフェルミ準位 (E_F) 近傍のバンド構造を合せて示す。比較のため、実線で DFT 計算の結果 [2] を重ねて示してある。 Cr_2AlC の E_F 近傍の電子状態は、 Γ 点近傍における 2 枚の電子面 (α , β) と M 点近傍における閉じたホール面 (γ) により形成されており、実験のフェルミ面形状、大きさは計算により非常によく再現されることを見出した。一方で、 E_F 直下におけるバンド分散形状については、実験と計算で定量的な食い違いが存在することが明らかになった。

4. 参考文献

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

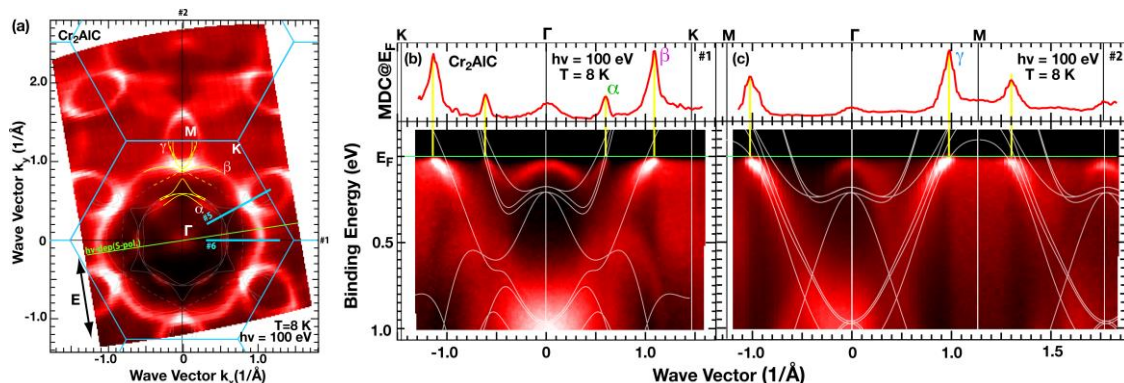


図 1 (a) Cr_2AlC の Γ KM 面内におけるフェルミ面イメージ。(b, c) Γ K (b) および Γ M (c) 方向における E_F 近傍のバンド構造。実線は DFT 計算の結果 [2]。