



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}, 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

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 となることから、期待されることから、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、この系の研究は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 (ARPES) 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

2017L4001 利用においては、MAX 相化合物の中でも最も大きな電気伝導度を持ち、2次元性が強いことが予測される V_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 $T = 20$ 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(b) に垂直放出角度において得られた ΓA 方向のバンド構造を示す。0.5 ~ 0.8 eV において周期的な分散を示す構造が観測されていることが分かる。観測された周期性からインナーポテンシャルは $V_0 = 22.5$ eV と見積もられる。得られたバンド分散は層状化合物に特徴的な $4\pi/c$ 周期性 [2] を示しているものの、その分散形状は DFT 計算によりよく再現されることが明らかになった。一方で、フェルミ面形状については、計算では ΓK 方向において3次元的なフェルミ面が予測されるのに対して、実験においては強度依存性は観測されるものの、明確な3次元フェルミ面は観測されないことを見出した [3]。

4. 参考文献

1. M. Barsoum, MAX phases (Wiley, Weinheim 2013).
2. F. Matsuda *et al.*, *Phys. Rev. B* **97**, 045430 (2018).
3. D. Pinek *et al.*, Submitted.

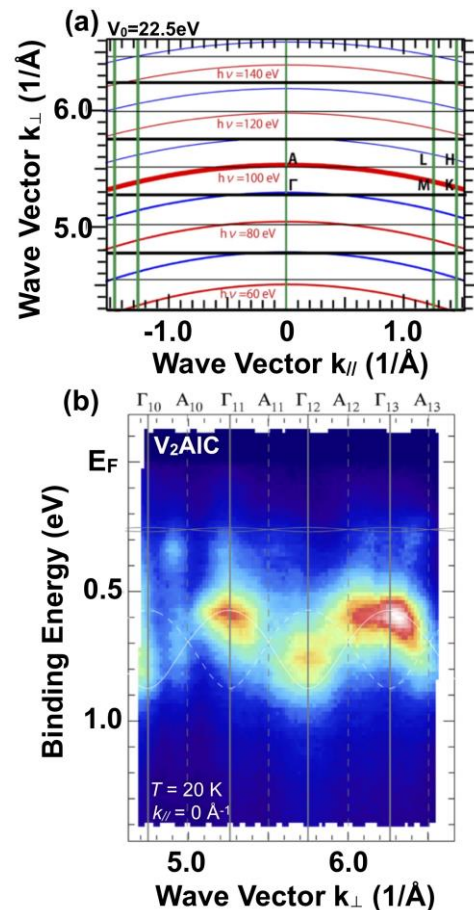


図 1 (a) $V_0=22.5$ eV における ARPES 測定点の励起エネルギー依存性。(b) V_2AlC の ΓA 方向におけるバンド構造。実線および点線は $4\pi/c$ 周期で示した DFT 計算の結果 [3]。