



## 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>, 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

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、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

2017L5001 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もち、2次元性が強いことが予測される  $V_2AlC$  に対して、MX 面内の電子状態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。励起エネルギーは分散形状が最も鋭くなる  $h\nu = 100$  eV を用い、測定温度は  $T = 20$  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 (a) および (b) に ARPES により得られた  $V_2AlC$  の  $\Gamma$  K(AH) および  $\Gamma$  M(AL) 方向におけるバンド構造を示す。得られたバンド分散形状およびフェルミ波数は、全体的に  $\Gamma$  K および  $\Gamma$  M 対称軸の DFT 計算 (黒線) により、非常によく再現されていることが分かる。この結果は、物性測定から予測される有効質量の増大が  $E_F$  近傍におけるバンド幅の狭まりによって説明することができないことを示唆している。そのため、 $V_2AlC$  における伝導機能性は、有効質量の増大がバンド幅の狭まりとして観測されている  $Cr_2AlC$  [2] とは異なるメカニズムによる影響を受けていることが期待される。

### 4. 参考文献

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

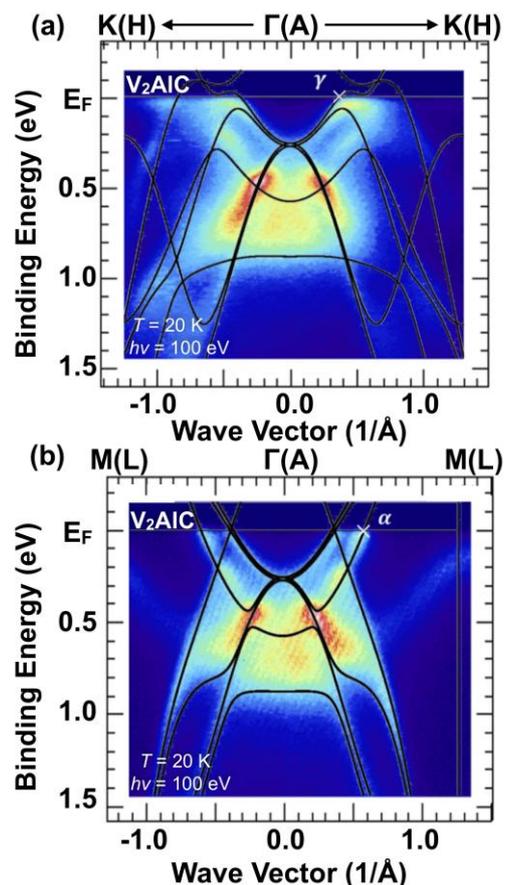


図 1  $V_2AlC$  の  $\Gamma$ K(AL) (a) および  $\Gamma$ M(AL) (b) 方向におけるバンド構造。実線は  $\Gamma$ K および  $\Gamma$ M 対称軸の DFT 計算の結果 [3]。