



強磁性層状 RE-i-MAX 相化合物の角度分解光電子分光

古田貫志¹, Damir Pinek², 仲武昌史³, 出田真一郎⁴, 田中清尚⁴, Patrick Le Fèvre⁵,
Francois Bertran⁵, Thierry Ouisse², 伊藤孝寛^{1,6}

¹名大院工, ²LMGP, Grenoble INP, France, ³あいち SR^C,

⁴分子研 UVSOR, ⁵SOLEIL, France, ⁶名大 SR セ

キーワード：電子状態, MAX 相化合物, 層状磁性体

1. 背景と研究目的

(Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC は、MAX 相[1]に希土類元素 RE を加えた新たな系である (Mo_{2/3}RE_{1/3})₂AlC の組成で表される *i*-MAX 相の一種であり、 $T_N = 7.8$ K で反強磁性を示すことから原子層系磁性体の母物質として注目されている[2]。そこで本研究では、*i*-MAX 相化合物 (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC における電子状態および磁性発現メカニズムを明らかにすることを目的とする。目的を達成するために、2020L4003 期にこの系における Ho 4*f* 状態が 4 ~ 12 eV で局在した多重項構造を形成し、伝導物性にほとんど寄与しないことを示唆する結果が得られたことを受け、2020L5003 期はフェルミ準位近傍における詳細な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面間角度分解光電子分光 (ARPES) 測定を行った。

2. 実験内容

面間 ARPES 測定は、励起エネルギー $h\nu = 72 \sim 150$ eV を用いて、単斜晶ブリルアンゾーン (BZ) における ϕ XYLIZ 面 (図 1 (a)) について行った。測定時の試料温度は $T = 30$ K に設定した。清浄試料表面は、(Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC 単結晶を(001)面について劈開することで得た。

3. 結果および考察

図 1 (b) に垂直放出角度 ($\theta = 0^\circ$) において得られた (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC の面間 ϕ Z ライン上のバンド構造を示す。得られた結果から、この系のフェルミ準位近傍におけるバンド構造は、 $E_F \sim 0.5$ eV で明確な分散を示す状態と 0.6 ~ 0.7 eV で周期的な強度依存を示すほとんど分散を示さない状態などにより形成されることを見出した。DFT+U バンド計算 ($U = 3$ eV) との比較から、観測されたバンド分散は、インナーポテンシャル $V_0 = 19$ eV とすることで、その分散幅、エネルギー位置および周期性が全体的にバンド計算によりよく再現されることを見出した。

さらに、 k_x - k_z 面間等エネルギー面 ARPES イメージ (図 1 (c-e)) から、この系における面間の電子状態は Γ Z ライン近傍において明確な周期性を示すのに対して、BZ 境界 (IX ライン) 近傍においては kz 方向依存性が比較的弱いことを見出した。この結果は、この系の 2 次元性を反映した状態が BZ 境界に存在することを示唆している。

4. 参考文献

[1] M. Basoum, MAX phases (Wiley, Weinheim 2013).

[2] Q. Tao, *et al.*, Chem. Mater. **31**, 2476 (2019). [3] A. Champagne *et al.*, Phys. Rev. Mat. **4**, 013604 (2020).

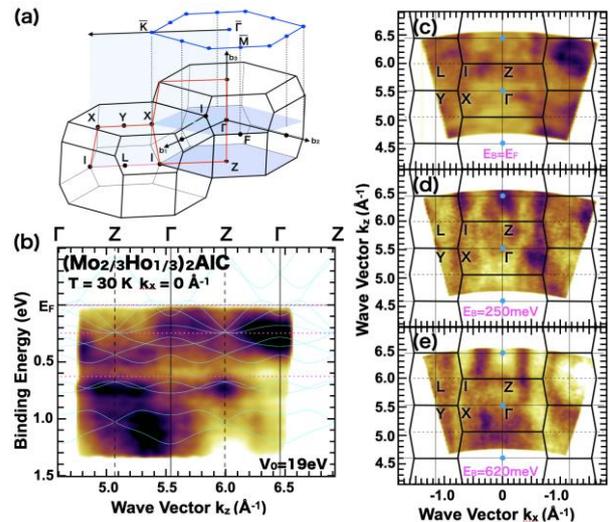


Fig.1 (a) (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC の単斜晶ブリルアンゾーン。面間 ARPES 測定面 ϕ XYLIZ 面を赤線で示してある。(b) $k_x = 0 \text{ \AA}^{-1}$ において得られた ϕ Z ライン上のバンド構造。青実線は $U = 3$ eV を用いて得られた DFT+U バンド計算の結果。(c-e) k_x - k_z 面間等エネルギー面 ARPES 強度イメージ(結合エネルギー $E_B = E_F$ (c), 250 meV (d), 620 meV (e))。