



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

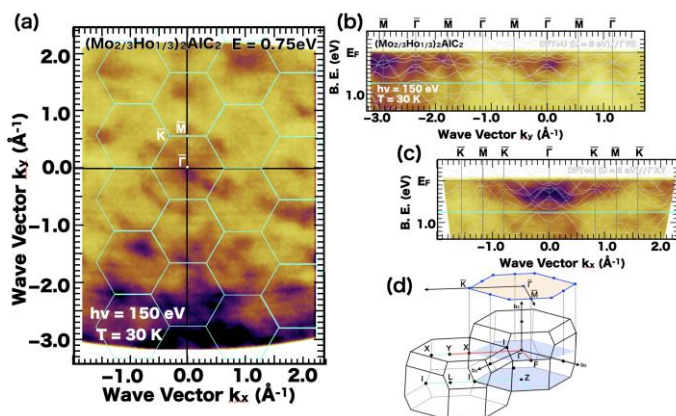
(Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC は、MAX 相[1]に希土類元素 RE を加えた新たな系である (Mo_{2/3}RE_{1/3})₂AlC の組成で表される i-MAX 相の一種であり、 $T_N = 7.8$ K で反強磁性を示すことから原子層系磁性体の母物質として注目されている[2]。そこで本研究では、i-MAX 相化合物 (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC における電子状態および磁性発現メカニズムを明らかにすることを目的とする。2020L4003 および 2020L5003 期に、この系における Ho 4f 状態が 4 ~ 12 eV で局在した多重項構造を形成し、伝導物性にほとんど寄与しないこと、および面間のバンド分散は全体的に DFT+U バンド計算により良く再現されることが見いだされたことを受け、2020L6003 期はフェルミ準位近傍における詳細な電子状態を得ることを目的として面内 ARPES 測定を行った。

2. 実験内容

面内 ARPES 測定は、2020L5003 期に得たインナーポテンシャル $V_0 = 19$ eV から、単斜晶ブリルアンゾーン (BZ) における ϕ XY および ϕ FZ ラインを含む面 (図 1 (d)) の走査に対応する、励起エネルギー $h\nu = 150$ eV を用いて行った。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 (a)に (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC の結合エネルギー750 meV 近傍における k_x - k_y 面内等エネルギー面 ARPES 強度イメージを示す。 Γ 点近傍において $\Gamma\bar{M}$ 方向に伸びた車輪状の状態が特徴的に現れていることがわかる。得られた電子状態の周期性について詳しく調べるために、 $\Gamma\bar{M}$ ($k_x = 0$ Å⁻¹) および $\Gamma\bar{K}\bar{M}$ ($k_y = 0$ Å⁻¹) 方向におけるフェルミ準位近傍のバンド構造を図 1 (b)および(c)にそれぞれ示す。得られたバンド構造と ϕ FZ および ϕ XY ラインにおける DFT+U バンド計算 ($U = 3$ eV) の比較から、面内において観測されたバンド分散は、面間 ϕ Z ラインと同様に、その分散幅、エネルギー位置および周期性が定性的にバンド計算によりよく再現されることを見出した。今後、この系における磁性発現メカニズムに対する知見を得るために、さらなる高分解能測定によりフェルミ面を形成するフェルミ準位直下の複雑なバンド構造を明らかにしていくことが必要であると考えている。



4. 参考文献

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

[2] Q. Tao, *et al.*, Chem. Mater. **31**, 2476 (2019).

Fig.1 (a) (Mo_{2/3}Ho_{1/3})₂AlC の結合エネルギー $E_B = 750$ meV における k_x - k_y 面内等エネルギー面 ARPES 強度イメージ。(b,c) ϕ M (b) および $\Gamma\bar{K}\bar{M}$ (c) ライン上のバンド構造。灰実線は $U = 3$ eV を用いて得られた ϕ FZ および ϕ XY ラインにおける DFT+U バンド計算の結果。(d) 単斜晶ブリルアンゾーンおよび表面射影 BZ (青線)。面内 ARPES 測定ラインを赤線で示してある。