



層状 MAB 相化合物 MoAIB の角度分解光電子分光

河野健人¹、三田愛也¹、田中清尚²、仲武昌史³、Hanna Pazniak⁴、
Thierry Ouisse⁴、伊藤孝寛^{1,5}

¹名大院工、²分子研 UVSOR、³あいち SR、⁴LMGP, Grenoble INP, France、⁵名大 SR セ

キーワード：ARPES, MAB 相化合物, 電子状態

1. 背景と研究目的

MAB 相化合物は遷移金属 M、III-A (IV-A) 族元素 A と B 元素の組み合わせにより形成される層状化合物であり、MB 層と 2 層の A 層が積層した層状の結晶構造をもち (図 1 (f))、HF 処理や剥離法などにより A 原子を除去すると MX 層のみから形成される原子層系 MBenes となることが期待されている。そのため、この系は新たな原子層系の母物質としても興味深い系と考えられる。中でも MoAIB は、ボロン化合物の中でも比較的優れた加工性、高温酸化耐性、高熱伝導度、および高電気伝導度から、特に応用の観点において優れた系として知られている。一方で、その物性と電子状態の関わりについてはこれまでほとんど明らかになっていない現状にある。本研究では、ディラックもしくはノードライン半金属であることが DFT 計算 [1] から期待され、物性測定から面内異方性の有無についてその理解に矛盾が報告されている MAB 相化合物 MoAIB において、その電子状態、特にバンド構造およびフェルミ面を明らかにすることを目的として、角度分解光電子分光 (ARPES) を行なった。

2. 実験内容

測定は Γ 点近傍を垂直放出角度で走査する励起エネルギー $h\nu=124$ eV ($V_0=27$ eV) を用いて行った。測定温度は $T=30$ K に設定した。清浄試料表面は MoAIB 単結晶を超高真空中で劈開することにより得た。

3. 結果および考察

図 1 (a-c)および(d)に面内 ARPES 測定により得られた MoAIB の Γ X(a)、XS(b)、 Γ Y(c)ライン上のバンド構造および面内フェルミ面イメージ(d)をそれぞれ示す。比較のため、バルク DFT 計算によるバンド構造を赤色実線で重ねて示してある。

MoAIB の電子状態は、 Γ X(ZT)ライン上において複数のフェルミ面が複雑に重なり合った擬 1 次元的な鎖状フェルミ面とバルクバンド計算では再現されない X(T)、S(R)および Y(U)点における電子、ホールおよび電子面により形成されることを見出した。ここで、前者の擬一次元フェルミ面形状は計算(e)と類似しているものの、X 点 SS1 電子面の存在により表面における一次元性が增大する可能性を示唆していると考えている。

MoAIB

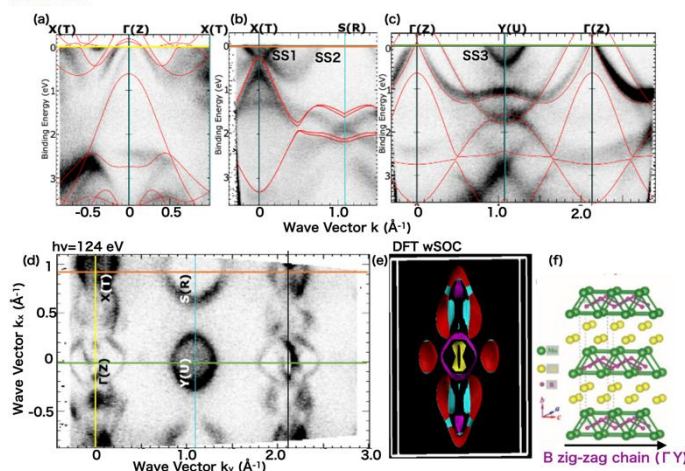


Fig.1 (a-d) MoAIB の Γ X(a)、XS(b)、 Γ Y(c)ライン上のバンド構造および面内フェルミ面イメージ(d)。赤色実線は SOC を考慮したバルク DFT バンド計算。(e)DFT 計算によるフェルミ面。(f)MoAIB の結晶構造[1]。

4. 参考文献

- [1] Yanan Huang *et al.*, Small **18** (2021) 2104460.