



層状 MAB 相化合物 MoAlB 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、強固な MB 層と 2 層の A 層が積層した層状の結晶構造をもつ。この系において、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、この系はグラフェンに代わる新たな原子層系としても興味深い系として近年注目されている。中でも MoAlB 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 MoAlB 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

測定は励起エネルギー $h\nu=50-150$ 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 MoAlB 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)および(b)に励起エネルギー依存 ARPES 測定により得られた MoAlB の面間フェルミ面イメージ(a)および ΓZ ライン上のバンド構造を示す。 ΓZ ライン近傍において 2 枚、ブリルアンゾーン境界において 1 枚の面間方向についてほとんど形状が変化しない 2 次元的なフェルミ面が観測されていることがわかる。さらに、 ΓZ ライン上においては 2.5 eV 近傍でバンド計算の周期性と類似した分散を示すバンドが観測されることを見出した。観測されたバンド分散の周期性からインナーポテンシャルを $V_0=27$ eV と見積もった。一方で、フェルミ準位 (E_F) 近傍においてはバンド計算では予測されないフェルミ面の存在を示唆するピーク構造が Z 点近傍で周期的に観測されることが明らかになった。

4. 参考文献

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

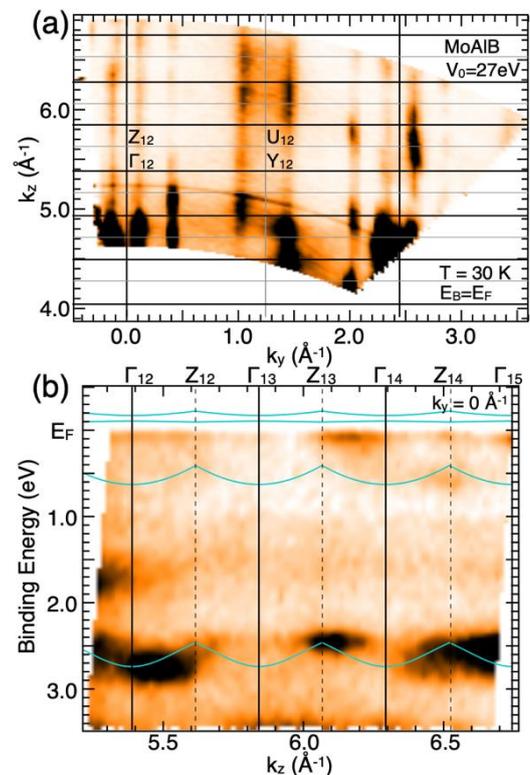


Fig.1 (a,b) MoAlB の面間フェルミ面イメージ (a)および面間バンドマッピング(b)。水色実線は SOC を考慮した ΓZ ライン上のバルク DFT バンド計算。