



層状 MAX 相化合物 $M_{n+1}AX_n$ の 3 次元角度分解光電子分光

伊藤孝寛^{1,2}, 池本昌史¹, Damir Pinek³, 仲武昌史⁴, Thierry Ouisse³

¹名大院工, ²名大 SR セ, ³Grenoble INP, LMGP, ⁴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 となることから、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

2018L3001 利用においては、2018L2001 課題に引き続き MAX 相化合物の中でも応用研究が盛んに進められている Ti_2SnC [2] に着目して、その特性と電子状態の関係を明らかにすることを目的として ARPES 測定を行った。励起エネルギーは ΓM ライン近傍を走査する $h\nu = 100$ eV ($V_0 = 10.7$ eV) を用いた。測定温度は $T = 25$ 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 に ARPES により得られた Ti_2SnC の ΓM ラインにおけるバンド構造をフェルミ準位 (E_F) における MDC スペクトルと合わせて示す。比較のため DFT 計算の結果を白実線で重ねて示してある。得られたバンド構造は Γ 点に対して対称的にフェルミ面を切るホールポケットにより形成されていることがわかる。MDC スペクトルから、ホールポケットは少なくとも α , β で示した 2 種類の成分から形成されており、 α (β) 成分の内 (外) 側には、それぞれの成分の分裂に伴うと考えられる肩構造 (α' , β') が観測されることを見出した。このような ARPES におけるバンド構造はバルクに対する DFT 計算によりよく再現されることから、この系における物性は、これまで我々が ARPES 研究を行ってきた 211 系 MAX 相化合物 (Cr_2AlC [3], V_2AlC [4]) とは異なり、電子相関の効果をほとんど受けない d 電子により理解されるものと考えられる。

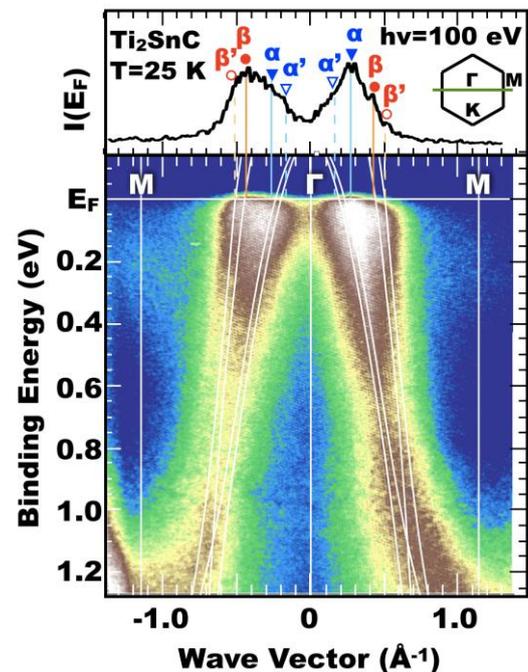


Fig.1 Ti_2SnC の ΓM ハイシンメトリーラインにおけるバンド構造 (下図)。 E_F における MDC スペクトル (上図)。白実線は DFT 計算の結果。

4. 参考文献

1. M. Barsoum, MAX phases (Wiley, Weinheim 2013).
2. J.Y. Wu, Y.C. Zhou, J.Y. Wang, Mat. Sci. Eng. A **422**, 266 (2006).
3. T. Ito *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 195168 (2017).
4. D. Pinek *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 035120 (2018).