



## 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<sup>1,2</sup>, 池本昌史<sup>1</sup>, Damir Pinek<sup>3</sup>, 仲武昌史<sup>4</sup>, Thierry Ouisse<sup>3</sup>

<sup>1</sup>名大院工, <sup>2</sup>名大 SR セ, <sup>3</sup>Grenoble INP, LMGP, <sup>4</sup>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 となることが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

2018L4001 利用においては、2018L2001, L3001 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  $\Gamma M$  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  $\Gamma KM$  面におけるフェルミ面形状を示す。 $\Gamma$  点近傍における閉じたホール面がバルクの周期性と同様に明確な六回対称性を示していることが分かる。 $\Gamma KM$  ライン上のバンド構造を DFT 計算と比較した結果 (図 2)、ARPES により得られた電子状態は定性的に計算によりよく再現されることを見出した。具体的には、 $\Gamma$  および  $M$  点近傍におけるホールポケットについてはその分散形状およびフェルミ面が両者でよく対応することが分かる。一方で、 $K$  点近傍のフェルミ準位直下においては実験でバンド計算では対応がつかない微細な構造が観測されることが明らかになった。バンド計算では  $KH$  ライン近傍において 3 次元的なフェルミ面形状が予測されていることから、今後  $KH$  ライン近傍において面間 3 次元 ARPES による詳細測定を行う必要があると考えている。

### 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).

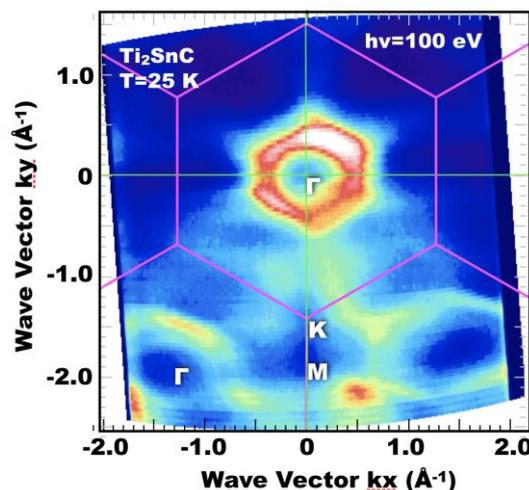


Fig.1  $Ti_2SnC$  の  $\Gamma KM$  面におけるフェルミ面イメージ。

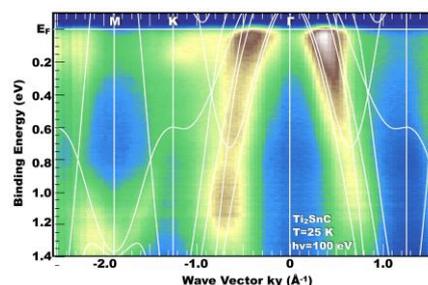


Fig.2  $Ti_2SnC$  の  $\Gamma KM$  ライン上のバンド構造。白線は DFT 計算の結果。