



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

2018L5001 利用においては、2018L2001, L3001, L4001 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 AHL ライン近傍を走査する $h\nu = 97.5$ 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 AHL 面におけるフェルミ面形状を示す。 Γ 点近傍 [3] と同様に A 点近傍において閉じたホール面が第一、第二ブリルアンゾーンにおいて 2 枚観測されていることがわかる。一方、H 点近傍においては DFT 計算から予測される、2 次元的な小さな円柱状のフェルミ面 (図 1 (a) 点線) で頂点近傍を貫かれた H 点における板状三角形電子面を見出した (図 1 (c))。このような電子面は、K 点近傍においては観測されない [3] ことから、 Ti_2SnC の KH ライン近傍における電子状態は 3 次元性が強いことが示唆される。さらに興味深いことに、三角形フェルミ面の頂点近傍における円状フェルミ面は 0.3 eV 近傍に交点を持つディラックコーン的な線形分散により形成されていることが明らかになった (図 2)。この結果は、 Ti_2SnC における優れた伝導特性が、ブリルアンゾーン中心のホール面とディラックコーン的な 2 次元フェルミ面の共存により担われていることを示唆している。

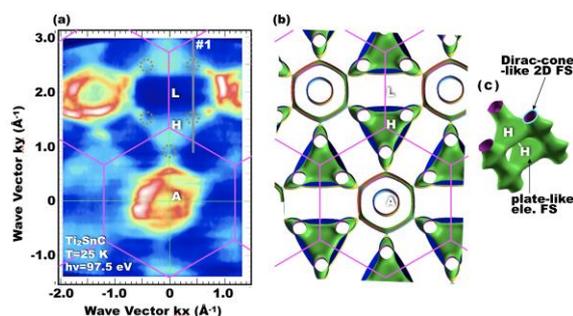


Fig.1 ARPES により得られた Ti_2SnC の AHL 面におけるフェルミ面イメージ (a) および DFT 計算から予測される AHL 面近傍におけるフェルミ面形状 (b, c)

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. 伊藤孝寛他, あいち SR 利用報告書 2018L4001 (2018).

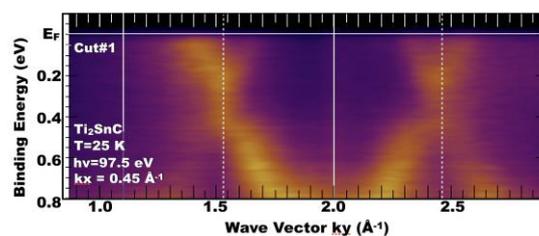


Fig.2 Ti_2SnC の図 1 (a) における CUT#1 ライン上のバンド分散形状