



角度分解光電子分光による MXenes 単結晶の電子状態の研究

與田康人¹, 倪遠地¹, 河野健人¹, 仲武昌史², 高倉将一³,

Hanna Pazniak⁴, Thierry Ouisse⁴, 伊藤孝寛^{3,1}

¹名大院工,²あいち SR,³名大 SR セ,⁴LMGP, Grenoble INP, France

キーワード : 電子状態, MXenes, 原子層系

1. 背景と研究目的

MAX 相は遷移金属 M、III-A (IV-A) 族元素 A と X 元素 (C もしくは N) の組み合わせにより形成される層状化合物 $M_{n+1}AX_n$ 系の総称であり、MX 層と A 原子層が重なった結晶構造をもつ [1]。さらに、MAX 相から A 相を除去することにより得られる”MXenes” [2]は、MX 層のみにより形成される系であり、新たな機能性付加型原子層系としてその応用、物性が特に注目されている。本研究では、MAX 相化合物 V_2AlC を Ar^+ イオン注入により剥離した後に $ZnCl_2$ 熔融塩エッジング処理をすることで作成した、 V_2CT_z MXenes ($T = Cl, O$ 終端) 単結晶薄膜 [3] に着目し、MXenes における特異な物性の発現メカニズムについて知見を得ることを目的として、X 線吸収分光 (XAS)、共鳴光電子分光 (RESPES) および真空紫外角度分解光電子分光 (ARPES) による電子状態の直接観測を行った。

2. 実験内容

XAS 測定は $V-L_{2,3}$ および O-K 吸収端において行った。 $V 2p-3d$ 吸収端近傍における RESPES 測定は励起エネルギー $h\nu = 516.6$ eV (ON) および 510 eV (OFF) を用いて行った。測定温度および測定配置は $T = 40$ K および垂直放出配置 ($\theta = 0^\circ$) に設定した。試料表面清浄化は、 V_2CT_z MXenes 単結晶試料を、 Ar^+ イオンスパッタリング (0.5 kV, 10 分) とアニール ($400^\circ C$, 10 分) を繰り返すことにより行った。

3. 結果および考察

図 1 (a) および (b) にスパッターアニール処理により表面清浄化した V_2CT_z MXenes 単結晶の $V L_{2,3} - O K$ XAS スペクトル (a) および $V 2p-3d$ RESPES スペクトル (b) をそれぞれ示す。得られた XAS スペクトルにおける O 成分は TEM EELS 法により得られた吸収スペクトルと同程度であり、共鳴スペクトル (ON) において明確な金属フェルミ端が観測されていることおよび非共鳴スペクトル (OFF) において清浄化前に 11 eV 近傍に観測される酸化ピークがほとんど観測されないことから表面清浄化処理が適切に行われているものと考えている。

図 1 (c) および (d) に同一清浄化表面において得られた価電子帯 ARPES イメージ (c) および ARPES スペクトル (d) をそれぞれ示す。価電子帯の電子状態は 1.5 eV 近傍のほとんど分散を示さない構造と E_F 近傍および高結合エネルギー側で非常にブロードな角度依存性を示す分散ピークにより形成されることを見出した。観測されるピーク分散は DFT 計算による V_2CF_2 の $\Gamma M \Gamma$ ライン上のバンド分散と定性的に類似することから、 V_2CT_z MXenes 単結晶の $V 3d$ バンド分散を観測した結果であると期待している。

4. 参考文献

- [1] M. Barsoum, MAX phases (Wiley, Weinheim 2013).
- [2] A. VahidMohammadi *et al.*: Science **372** (2021) 1165.
- [3] H. Pazniak *et al.*: ACS Appl. Nano Mater. **5** (2022) 8029.

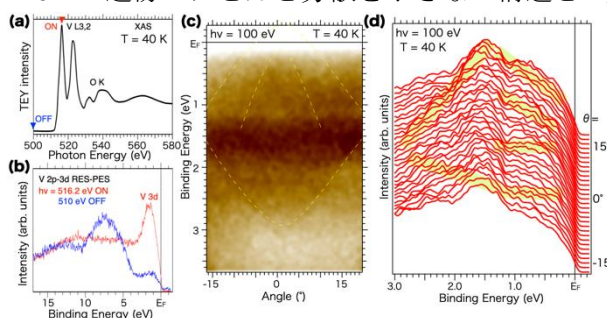


Fig.1 (a,b) V_2CT_z MXenes 単結晶の $V L_{2,3}-O K$ XAS スペクトル (a)、 $V 2p-3d$ 共鳴 ($h\nu = 516.2$ eV; 赤線) および非共鳴 ($h\nu = 510$ eV; 青線) RESPES スペクトル (b)。 (c, d) $h\nu = 100$ eV で得られた V_2CT_z MXenes 単結晶の ARPES イメージ (c) および ARPES スペクトル (d)。黄色点線および緑実線は観測されたピーク分散のガイドライン