



MXenes 単結晶 V_2CT_z の角度分解光電子分光

與田康人¹, 倪遠致¹, 高倉将一², 仲武昌史³, 田中清尚⁴,
Hanna Pazniak⁵, Thierry Ouisse⁵, 伊藤孝寛^{1,2}

¹名大院工, ²名大 SR セ, ³あいち SR, ⁴分子研 UVSOR, ⁵LMGP, 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

AX 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 からイオンインプラネーション法により Al を除去することにより得られた、 V_2CT_z MXenes (T = OH or O 終端) 単結晶 [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、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

ARPES 測定は $h\nu = 110$ eV を用いて行った。測定温度は $T = 300$ K に設定した。試料表面清浄化は、 V_2CT_z MXenes 単結晶試料を劈開することにより得た。

3. 結果および考察

図 1 (a)に V_2CT_z MXenes 単結晶試料の劈開表面において得られたワイドスキャンスペクトルを示す。結合エネルギー 72 eV における Al 2p 内殻が現れていないことから、 V_2AlC が V_2CT_z へと転換し Al 元素が測定領域においては観測されていないものと考えている。図 1(b)および(c)に ARPES 測定により得られたフェルミ面イメージおよび Γ M ライン上のバンドマッピングを示す。 Γ 点近傍で 0.4 eV に底を持つ電子ポケットが第 2 ブリルアンゾーンまで 6 回対称性をもって観測されていることがわかる。観測されたバンド分散はこれまでに報告してきた V_2AlC [4] や V_2AlC ドメインの影響を受けた V_2CT_z MXenes 単結晶劈開面 [5] におけるものと大きく異なることから、 V_2AlC ドメインの影響を受けていない V_2CT_z MXenes の電子状態の観測に成功したものと考えている。今後、DFT 計算との比較により、終端修飾に伴う MXenes 特有の機能性変化について知見が得られると期待している。

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.
- [4] D. Pinek *et al.*: Phys. Rev. B **98** (2018) 035120.
- [5] 與田康人他、あいち SR 成果報告書 202404020 (2024).

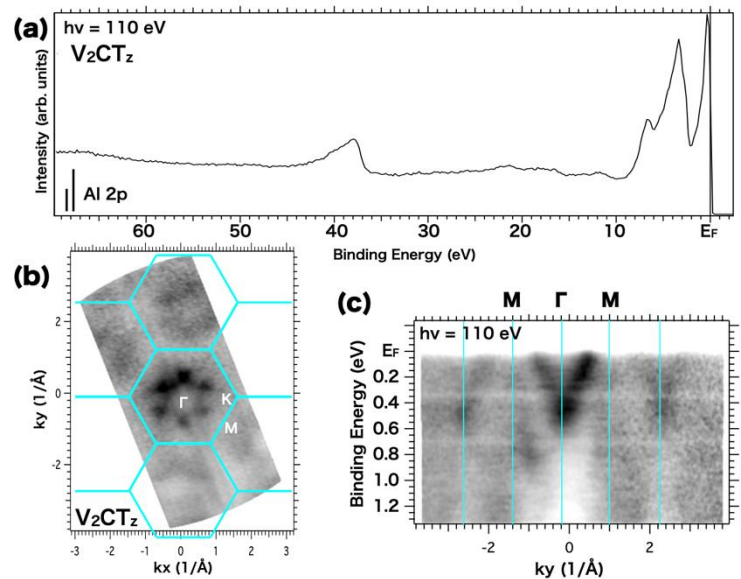


Fig.1 V_2CT_z 単結晶試料の劈開面において得られたワイドスキャンスペクトル (a)、フェルミ面イメージ (b) および Γ M ライン上のバンドマッピング (c)。