



## 層状 MAX 相化合物 $Zr_3SnC_2$ の角度分解光電子分光

三田愛也<sup>A</sup>, Damir Pinek<sup>B</sup>, 仲武昌史<sup>C</sup>, 高倉将一<sup>C</sup>, 田中清尚<sup>D</sup>, Thierry Ouisse<sup>E</sup>, 伊藤孝寛<sup>A,F</sup>  
 名大院工<sup>A</sup>, ESRF, France<sup>B</sup>, あいち SR<sup>C</sup>, 分子研 UVSOR<sup>D</sup>,  
 LMGP, Grenoble INP, France<sup>E</sup>, 名大 SR セ<sup>F</sup>

キーワード : ARPES, MAX 相化合物、電子状態

### 1. 背景と研究目的

層状 MAX 相化合物は、 $M_{n+1}AX_n$  系 (M : 遷移金属, A : III-A, IV-A 族元素, X : C もしくは N) の総称である。MAX 相化合物は、切削加工性や高い電気および熱伝導性などの金属的特長と、高温安定性や耐酸化性などのセラミック的特長を併せ持つ。さらに、HF 処理や剥離法などを用いて A 層を除去することで、MX 層のみから形成される原子層系物質 MXene が得られることから、グラフェンやシリセンに代わる、強相関機能性を付加した新たな 2 次元材料として期待されている [1, 2]。しかしながら、その機能性を担う電子状態については、最近の我々の研究グループによる数例を除いて母物質の MAX 相化合物においてもほとんど報告例がない現状にある。そこで本研究では、層状 MAX 相化合物の中でも MX 層厚さが厚いことから 2 次元性が強く、さらに 5d 遷移金属 Zr による強いスピン軌道相互作用の効果が期待される 312MAX 相化合物  $Zr_3SnC_2$  について、角度分解光電子分光 (ARPES) を用いた機能性を担う電子状態の直接観測を行った。

### 2. 実験内容

ARPES 測定は、 $Zr_3SnC_2$  単結晶試料について、あいち SR BL7U におけるシンクロトロン光を励起光として用いて行った。励起エネルギーは  $\Gamma$  点近傍の走査に対応する  $h\nu = 155$  eV ( $V_0 = 17.7$  eV) を用いて行った。測定温度は  $T = 35$  K に設定した。

### 3. 結果および考察

図 1(a)および(b)に  $Zr_3SnC_2$  のフェルミエネルギー ( $E_F$ ) および 1.4 eV における等エネルギー ARPES 強度イメージを示す。M (L) 点近傍において底を持つ電子面による葉巻状(点線)分布がブリルアンゾーンの 6 回対称性を反映して明確に観測されていることがわかる。 $\Gamma$  KM(AHL)- $\Gamma$  M(AL)軸におけるバンド構造と DFT 計算の比較から、 $\Gamma$ (A)点近傍における 2 枚のホール面については、DFT 計算により定性的によく再現されることを見出した。一方で M(L)点の  $E_F$  直下においては、DFT 計算では予測されない 100 meV 近傍に Saddle Point を有する鞍状の分散 (赤点線: SP) が存在することが明らかになった。観測された SP 分散は  $Zr_3SnC_2$  における表面バンド分散に起因するものと考えている。

### 4. 参考文献

1. Y. Gogotsi and B. Anasori, ACS Nano **13**, 8491 (2019).
2. A. VahidMohammadi *et al.*, Science **372**, 1165 (2021).

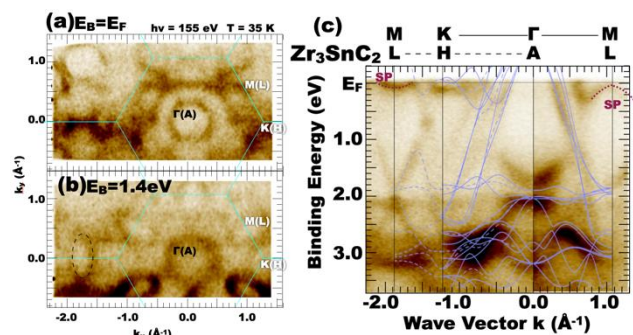


Fig.1 (a,b)  $Zr_3SnC_2$  の  $E_F$  (a) および 1.4 eV (b) における等エネルギー ARPES 強度イメージ。(c)  $Zr_3SnC_2$  の  $\Gamma$  KM(AHL)- $\Gamma$  M(AL) 軸におけるバンド構造。紫実線および点線は  $\Gamma$  M および AHL 軸における DFT 計算。赤点線は鞍状表面バンド分散 (SP) のガイドライン。