合肥研究院在二维材料低温物性研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8925.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院强磁场科学中心研究员杨晓萍与陆轻铀合作，对二维过渡金属硫化物材料$MoTe_2$
温度依赖的表面STM图像、电子结构、晶格动力学和拓扑性质进行了研究。研究结果以*Uniaxial negative thermal expansion and band renormalization in monolayer Td-MoTe2 at low temperature* 为题，发表在美国物理学会杂志《物理评论B》上。

$MoTe_2$是二维过渡金属硫族化合物MX_2
家族的典型代表，在不同温度下可以实现2
H，1T和T_d
相的生长，同时它还具有
超导性和非平庸拓扑性质。近来对Td相$MoTe_2$
低温磁阻“开关”现象的研究发现了各向异性负热膨胀效应，同时表面STM图像在70K和7K时有非常显著的差异（图1）。这表明$MoTe_2$
在低温下可能经历了温度诱导的电子相变，同时也有相关文献基于载流子浓度的异常变化得到了类似的结论。

温度引起的结构变化及其对物理性能的影响对基于器件应用的材料制备是至关重要的。为了解70
K
以
下各
向异性负
热膨胀和异常表面S
TM图像的微观起源，杨晓萍从理论计
算角度研究了$MoTe_2$
温度依赖的电子结
构、晶格动力学和拓扑性质。值得注
意的是，研究发现MX_6
八面体畸变导致的不等价的Te原子对声子谱和电子结构有定性不同的贡献。面内纵向声学模和Te(2)原子分别对单轴负热膨胀和温度依赖的电子相变的产生起重要作用。有趣的是，在标度相对论近似下，体系一旦冷却至70K以下，费米能级处的能带发生重整化，伴随着出现一个II型向I型的狄拉克相转变。自旋轨道耦合的引入引起温度依赖的平庸半金属向半导体的转变。研究结果很好地解释了实验现象：低于70K的表面STM反常图像并非源于Te原子的移动，而是由于强的电子-晶格耦合，使费米能级附近的能带发生重整化（参见图2）。

该工作为二维过渡金属硫化物材料MX_2
的低温研究、实验制
备和器件开发提供了直接的理论支持，其
揭示的$MoTe_2$
低温下反常物性的内在物理机制对其它具有
内在MX_6八面体结构畸变的二维材料同样具有参考价值。

该研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中科院合肥科学中心、中科院科研仪器设备研制项目等的支持。

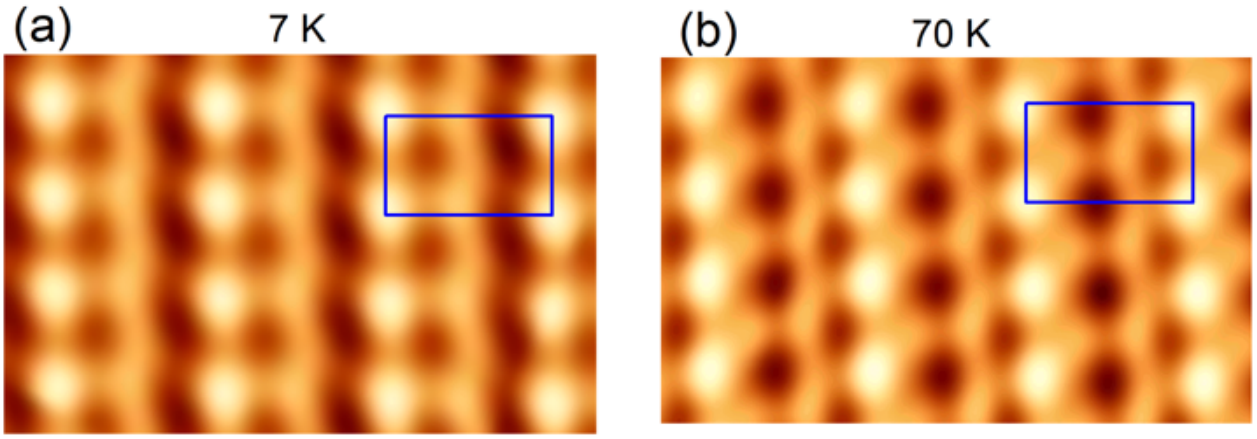


图1. Td相MoTe2在T = 7 K（a）和70
K（b）时的原子分辨率表面STM图像。蓝色矩形表示二维原胞【*Phys. Rev. B* 96, 075132
(2017)】。

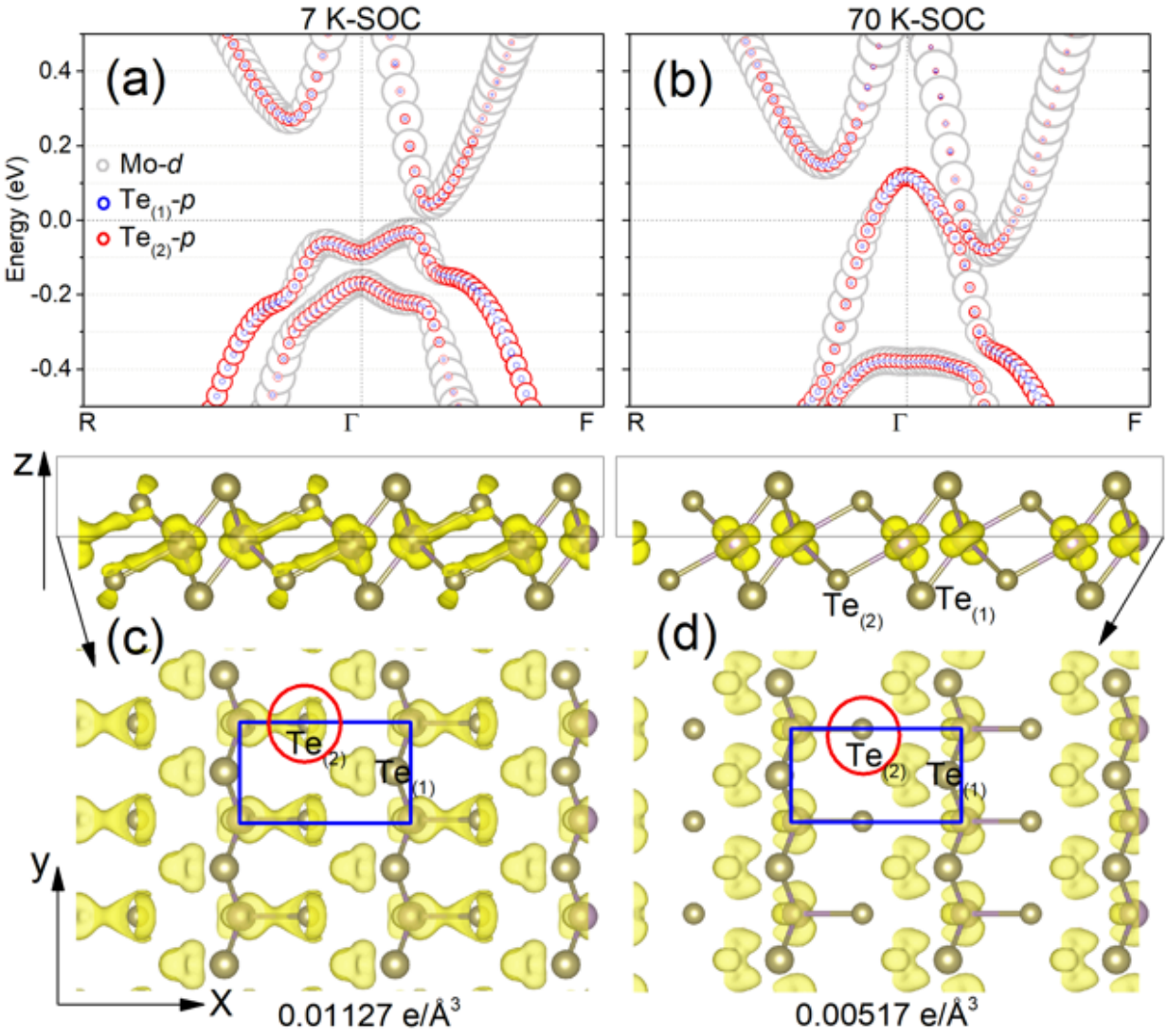


图2. 温度为7K（a）和70K（b）时包含自旋轨道耦合的GGA能带结构。圆圈的尺寸代表不同轨道对能量态的贡献。（c）和（d）分别是7K时低于价带顶0.1eV的占据态，和70K时费米能级以下0.1eV占据态的分波电荷密度。蓝色矩形代表二维原胞。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发