

### 用应力调控过渡金属硫属化合物的拓扑表面态及其朗道量子化

调控电子的多种量子自由度，例如自旋、谷、轨道、旋度等是构筑新型功能器件的物理基础。拥有自旋轨道锁定拓扑表面态的拓扑量子材料是一个研究调控拓扑保护量子态多自由度的理想材料体系。二维的拓扑表面态在强磁场下将会发生朗道量子化现象，利用朗道能级谱学，可以精细测量拓扑表面态量子自由度的变化，从而进一步调控量子自由度。近年来研究人员发现，过渡金属硫属化合物（TMDs）是一个含有丰富拓扑性的体系。例如，TMDs材料NiTe<sub>2</sub>和PdTe<sub>2</sub>具有双拓扑性质，它们既有一个第二类狄拉克锥，又有拓扑表面态。因此TMDs提供了一个调控拓扑保护量子态自由度的理想平台。然而，基于TMDs的多量子自由度的调控，尚未实现。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心高鸿钧研究团队长期致力于探索新型低维层状材料的原子级精准构筑与新奇量子态的调控。该团队的陈辉副研究员等利用极低温强磁场扫描隧道显微镜，在三分之一氢化石墨烯精准构筑（Adv. Mater. **30**, 1801838 (2018)）、石墨烯“折纸术”（Science **365**, 1036 (2019)、磁性外尔半金属自旋轨道极化子（Nat. Commun. **11**, 5613 (2021)）、“庞目”超导体配对密度波（Nature **599**, 222 (2021)）等研究方向上取得了重要进展。

最近，高鸿钧院士带领的团队研究了TMD拓扑金属材料NiTe<sub>2</sub>在应力调控下的多重朗道量子化现象。杨海涛研究员和博士生冼国裕生长了高质量的NiTe<sub>2</sub>单晶。陈辉副研究员和博士生黄子豪等利用极低温强磁场扫描隧道显微镜/谱对NiTe<sub>2</sub>单晶表面进行了系统研究。他们发现，强磁场下在没有应力的表面区域，NiTe<sub>2</sub>的自旋极化拓扑表面态发生朗道量子化，产生一套清晰的朗道能级（图1）。在有应力的区域，他们观测到朗道能级发生劈裂，出现多套朗道能级。通过分析发现，在单轴应力（uniaxial strain）的NiTe<sub>2</sub>表面区域，存在两套朗道能级（图2）；更进一步，他们发现在剪切应力（shear strain）的NiTe<sub>2</sub>表面区域，存在三套朗道能级（图3）。朗道能级的劈裂预示着NiTe<sub>2</sub>拓扑表面态的谷自由度受表面应力的调控。为了进一步探究应力调控拓扑表面态谷自由度的原理，刘邦贵研究员和肖湘波博士进行了第一性原理计算。结果表明，NiTe<sub>2</sub>单晶中应力破坏了晶格旋转对称性，导致拓扑表面态的谷简并被打破。拓扑表面态的谷分支不再简并，从而朗道量子化衍生出多套朗道能级（图4）。其中，单轴应力将会部分打破NiTe<sub>2</sub>晶格的三重对称性，导致拓扑表面态谷简并被部分打破，产生两套能级。剪切应力则将完全打破三重对称性，导致拓扑表面态谷简并被完全打破，产生三套朗道能级。

该工作是实验上首次观测到TMDs材料应力调控的拓扑表面态谷极化及其多套朗道量子化。有望在谷电子学、旋度极化器件和约瑟夫森二极管效应器件领域发挥重要作用。应力调控多自由度的方式可以拓展到其它拥有类似丰富拓扑性的TMDs材料，实现新奇量子态的调控。相关论文以Tuning multiple Landau Quantization in Transition-Metal Dichalcogenide with Strain为题发表在Nano Letters 23, 3274 (2023)上。中科院物理所博士生黄子豪、冼国裕和博士后肖湘波博士为文章的共同第一作者，陈辉、杨海涛和刘邦贵为通讯作者。该工作得到国家自然科学基金（61888102，52022105，11974393）、科技部（2018YFA0305800，2019YFA0308500）、中国科学院（XDB33030100，XDB30000000，YSBR-003，ZDBS-SSW-WHC001）的支持。

文章链接：<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.nanolett.3c00110>

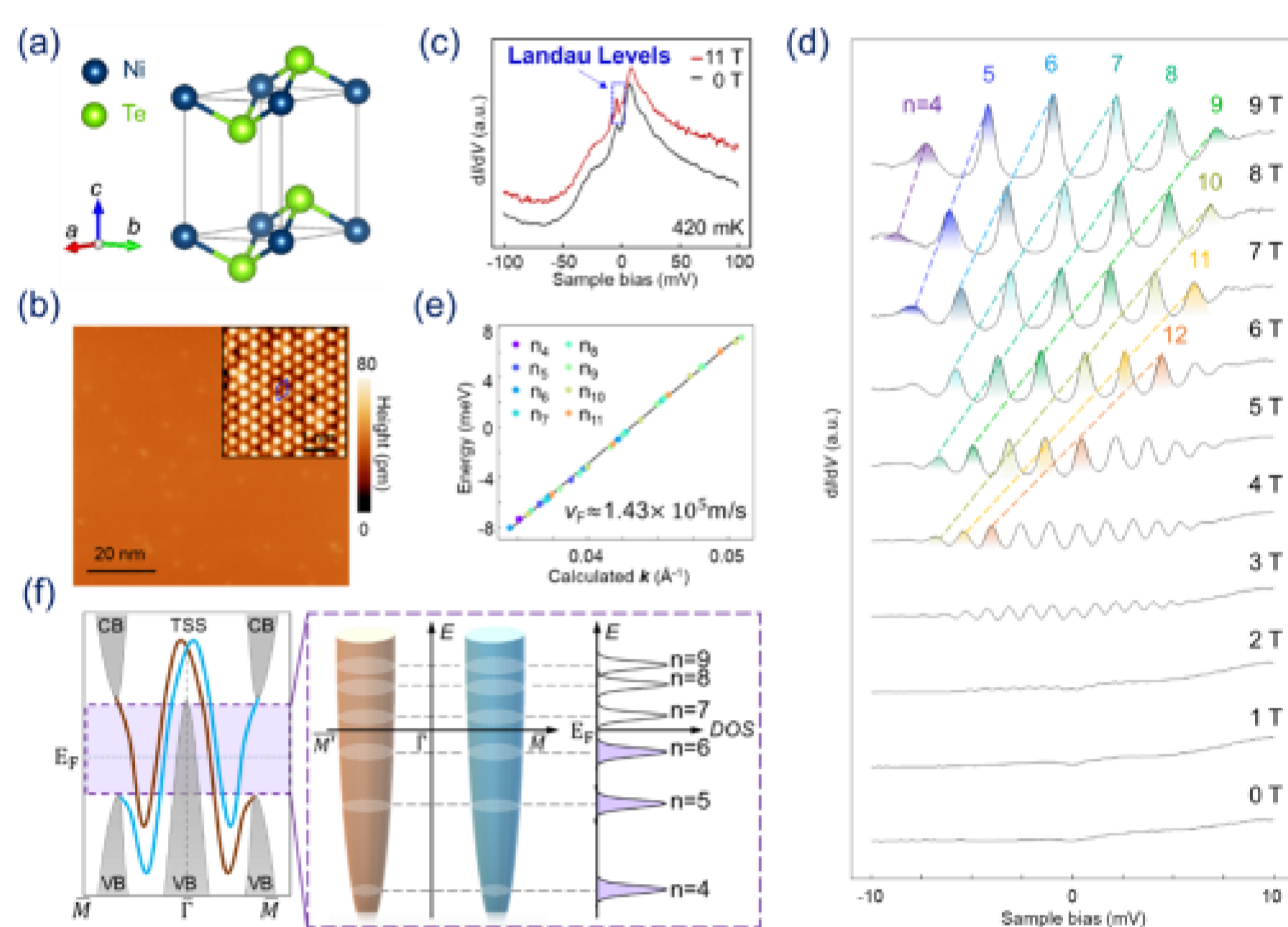


图1. 磁场条件下NiTe<sub>2</sub>单晶无应力表面区域拓扑表面态的朗道量子化

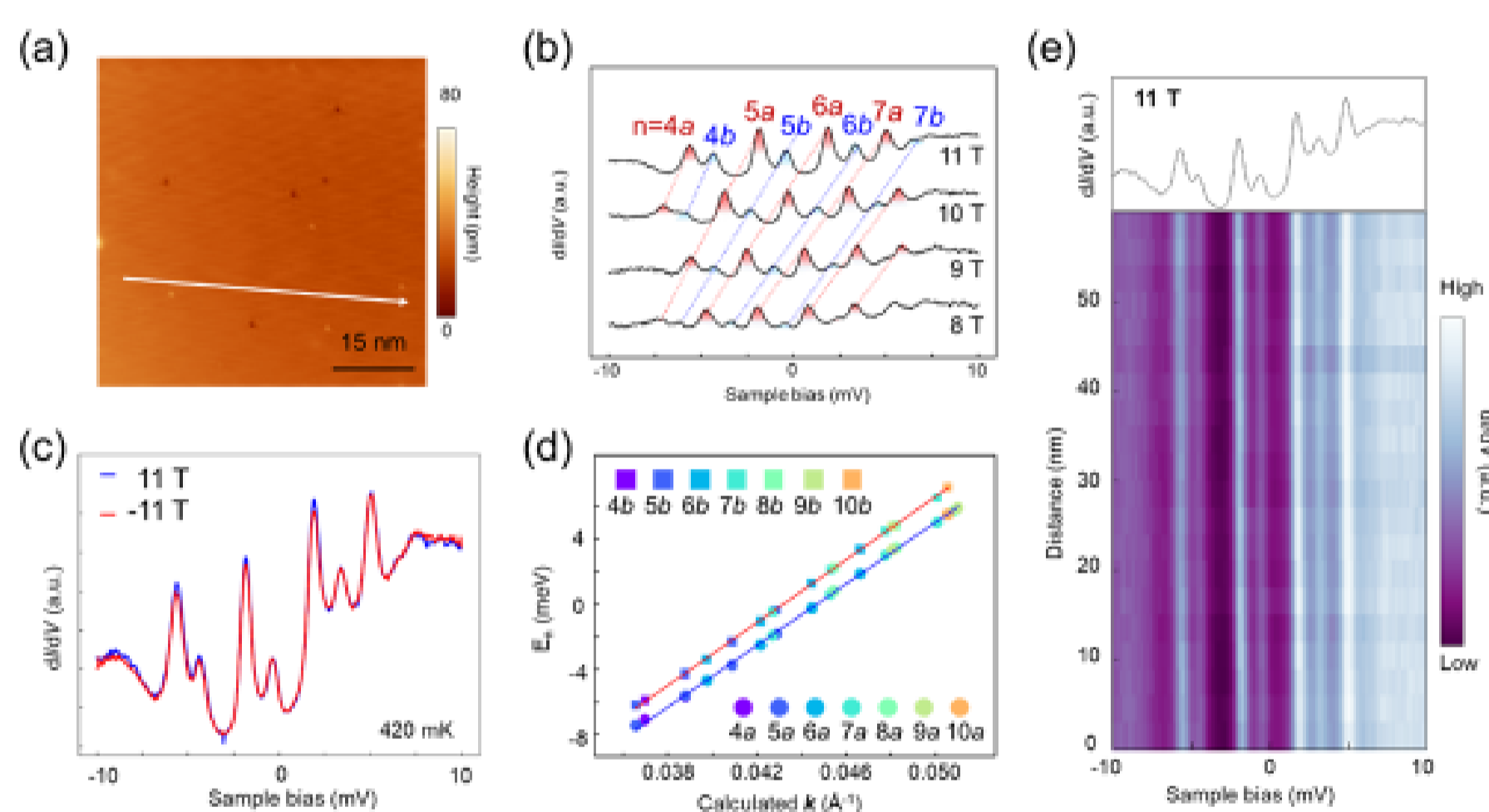


图2. NiTe<sub>2</sub>单晶单轴应力表面区域观测到两套朗道能级

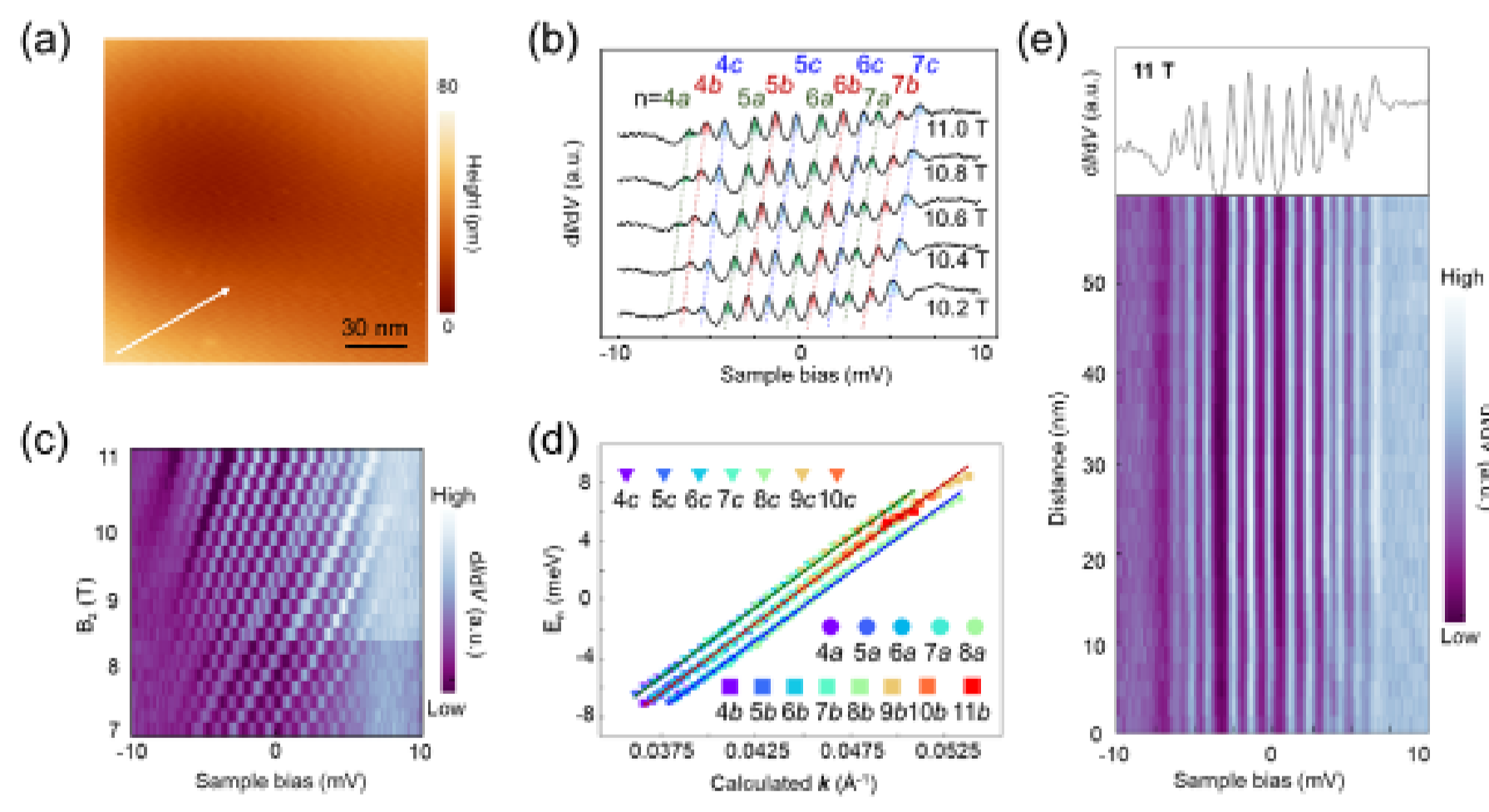


图3. NiTe<sub>2</sub>单晶剪切应力表面区域观测到三套朗道能级

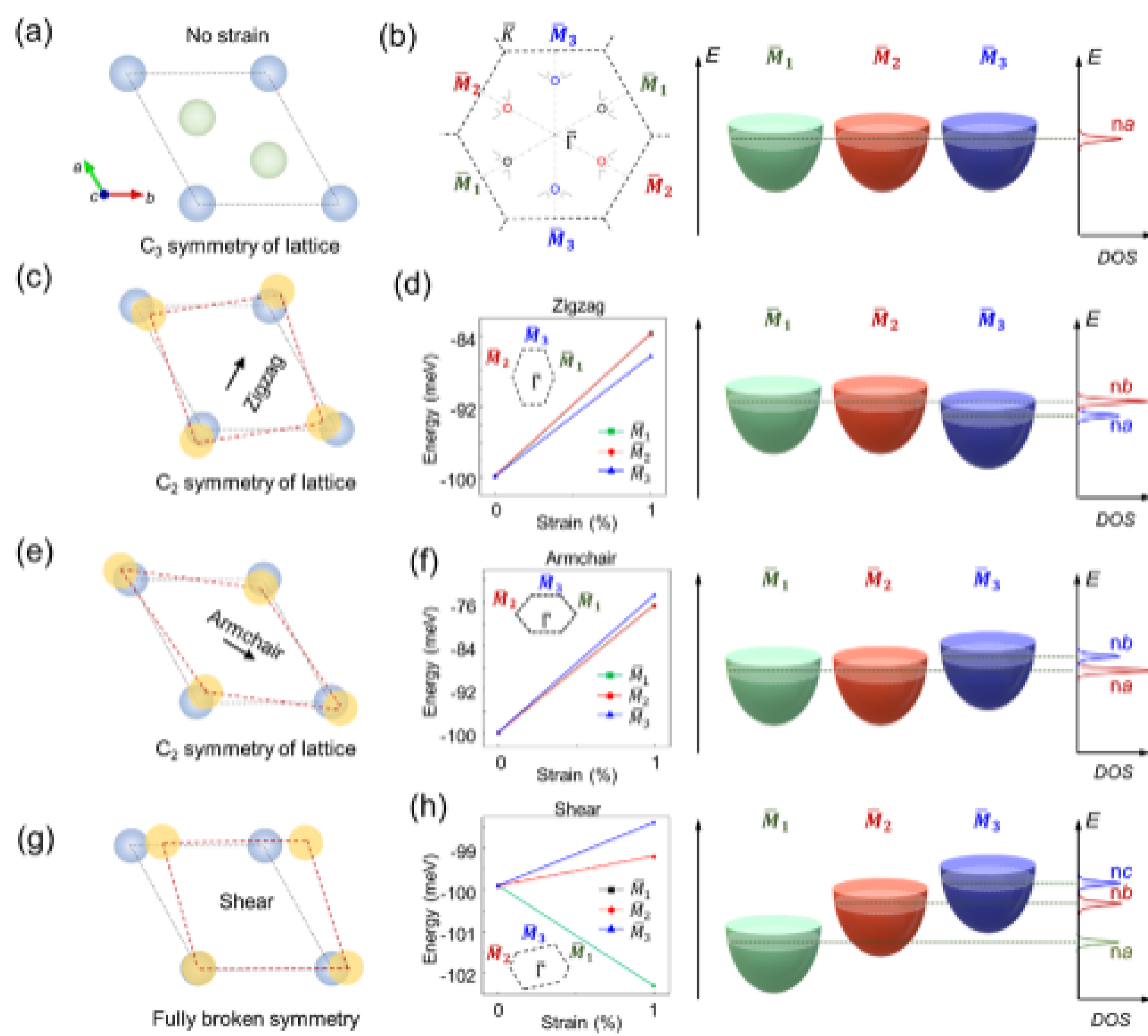


图4. 应力调控的拓扑表面态谷极化导致出现多套朗道能级

acs.nanolett.3c00110.pdf