

物质学院颜世超课题组在层状材料电子结构机理方面取得重要进展

ON 2021-07-07

CATEGORY 科研进展

近日，我校物质学院颜世超课题组在过渡金属硫化物的电子结构机理研究方面取得重要进展。研究人员利用低温扫描隧道显微技术发现1T-TaS₂类材料费米能级附近存在电子窄带，并揭示了电子窄带对这类材料的电子结构的重要作用。近期该结果以“Roles of the Narrow Electronic Band near the Fermi Level in 1T-TaS₂-Related Layered Materials”为题发表于国际知名期刊Physical Review Letters。

在复杂量子材料中，费米面附近的电子窄带能够诱导出新奇的物态，比如超导、磁性和关联电子态等。与普通能带的电子相比，处于窄带的电子动能显著降低。当窄带处于费米能级附近时，电子间的库仑排斥作用会超过电子的动能，使系统进入关联电子态。在层状材料中，具有窄带的层状材料相互堆叠，它们之间的层间耦合也会对电子窄带产生调制。电子关联作用和层间相互作用使得具有窄带的层状材料具有非常复杂的物理性质。

过渡金属硫族化合物1T-TaS₂具有二维层状结构。理论计算表明，低温下（低于180 K）其费米级附近存在金属性窄带，然而光电子能谱和扫描隧道显微实验却显示其单晶材料低温下在费米能级附近存在能隙。对于此现象，科学家们先后提出了电子关联作用、层间相互作用等不同机理来解释该能隙的产生，但迄今为止还没有确定的定论。

为了解决1T-TaS₂这类材料中复杂电子结构机理问题，上科大物质学院颜世超课题组对1T-TaS₂和4Hb-TaS₂材料开展了系统的扫描隧道显微学研究。4Hb-TaS₂是由1T-TaS₂层和1H-TaS₂层交替叠加形成的层状材料。在4Hb-TaS₂中，由于1H-TaS₂层的存在，相邻的1T-TaS₂层之间的层间相互作用被显著减弱。因此，4Hb-TaS₂材料为研究1T-TaS₂层的电子特性提供了一个非常好的平台。

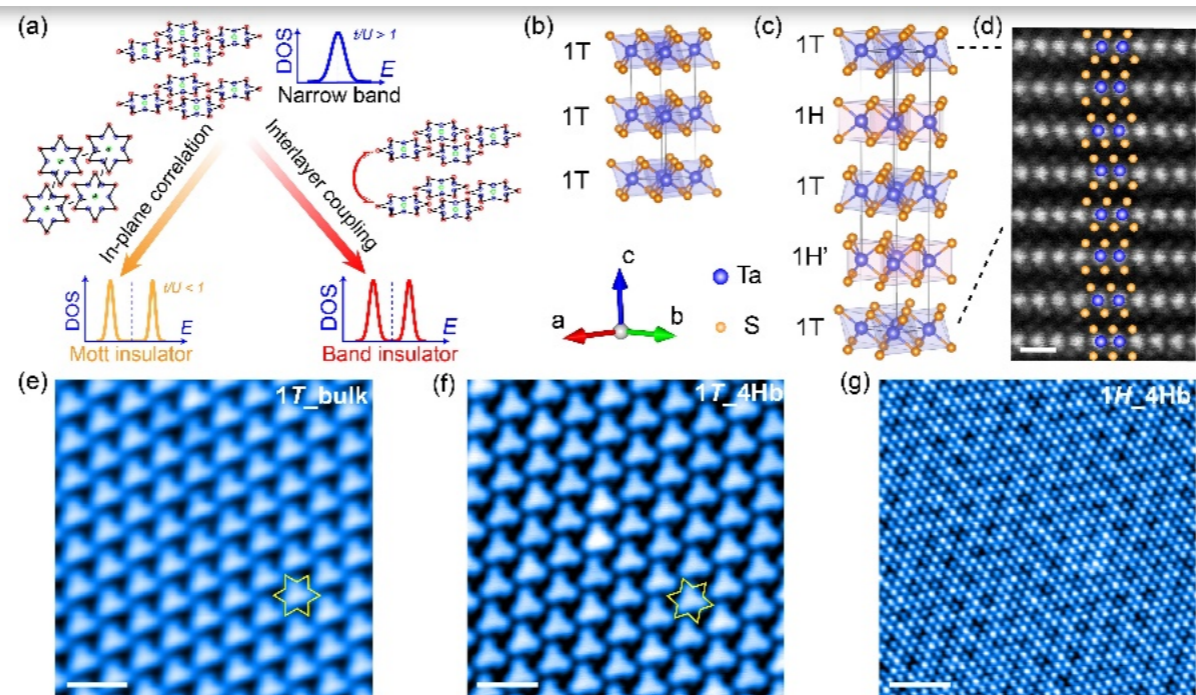


图. 1T-TaS₂和4Hb-TaS₂单晶材料的结构图、高分辨电子显微图和扫描隧道显微图。

研究人员发现，与1T-TaS₂的绝缘态不同，4Hb-TaS₂中的1T-TaS₂层在费米能级附近存在一个窄带。该窄带与之前紧束缚理论计算得到的1T-TaS₂中的窄带特性一致，但表现出略微的空穴掺杂。同时研究人员发现4Hb-TaS₂中1T-TaS₂层的窄带与1T-TaS₂单晶的绝缘能隙处的电子态具有相同的空间分布特征。这表明1T-TaS₂的绝缘能隙处的电子态与4Hb-TaS₂中1T-TaS₂层的电子窄带同源，1T-TaS₂单晶材料的绝缘能隙是这个窄带由于层间相互作用形成的成键态和反键态。

该工作不仅从实验上证实了1T-TaS₂层在费米面附近具有窄带，且表明该窄带对这类材料的电子性质起着非常重要的作用。该工作对于理解4Hb-TaS₂中超导态的性质和单层1T-TaS₂的性质奠定了基础。

中科院合肥固体物理研究所孙玉平研究组为该研究提供了高质量的单晶样品；上海科技大学电镜中心为样品结构表征提供了高质量的电镜数据；上海科技大学李军课题组对4Hb-TaS₂的超导特性进行了输运测量。上海科技大学是该研究的第一完成单位，颜世超课题组助理研究员文陈昊平为文章的第一作者。颜世超教授和孙玉平教授为文章的共同通讯作者。该研究得到了国家自然科学基金委、科技部、国家重点研发基金、上海市科委和上海科技大学启动经费等项目的资助。

文章链接：<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.126.256402?ft=1>

