

На правах рукописи

Первалова Александра Николаевна

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ
ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛУМЕТАЛЛОВ WTe_2 И $MoTe_2$**

1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Екатеринбург – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН).

Научный руководитель: **Марченков Вячеслав Викторович**, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией низких температур, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург.

Официальные оппоненты: **Васильев Александр Николаевич**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики низких температур и сверхпроводимости, Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва.

Кучинский Эдуард Зямович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией теоретической физики, ФГБУН Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет», г. Челябинск.

Защита состоится 10 ноября 2023 г. в 14:30 на заседании диссертационного совета 24.1.133.01 на базе ИФМ УрО РАН по адресу: 620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФМ УрО РАН и на сайте Института www.imp.uran.ru.

Автореферат разослан «___» _____ 2023 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета,

доктор физико-математических наук

Чарикова Татьяна Борисовна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности. В настоящее время поиск и изучение новых топологических материалов являются важными задачами физики конденсированного состояния. Недавние теоретические исследования показали [1], что более 27% всех материалов в природе могут быть топологическими. Можно предположить, что их топологическая классификация еще далека от завершения. Наиболее известными видами топологических материалов являются топологические изоляторы и топологические полуметаллы. Последние включают в себя дираковские полуметаллы, вейлевские полуметаллы и полуметаллы с линиями узлов. Такие материалы обладают необычными свойствами как в объеме, так и на поверхности. В частности, вейлевские полуметаллы характеризуются наличием в объеме уникальных квазичастиц, безмассовых вейлевских фермионов, которые обладают высокой подвижностью и защищены топологически. Поверхностные состояния в таких материалах являются спин-поляризованными дугами Ферми. Исследование вейлевских полуметаллов представляет большой интерес не только с точки зрения фундаментальной науки, но и благодаря высокому потенциалу их использования в различных приложениях сверхбыстрой электроники и спинтроники.

В последние годы было обнаружено большое количество топологических полуметаллов, включая WTe_2 и $MoTe_2$, исследованы особенности их электронной структуры и продемонстрированы необычные физические свойства. Однако механизмы, приводящие к некоторым особенностям электронных характеристик таких материалов, до сих пор остаются неясными. Следовательно, требуется дальнейшая работа в этом направлении. Кроме того, интересно детально проследить взаимосвязь кристаллической структуры и электронных свойств таких материалов, поскольку некоторые из них, например, $MoTe_2$, имеют несколько политипов, физические свойства которых сильно отличаются. Таким образом, большое значение имеет исследование структуры и электронных свойств топологических материалов, включая электро-, магнитотранспортные и оптические характеристики.

Целью данной работы является установление основных закономерностей поведения и взаимосвязи структурных, электро-, магнитотранспортных и оптических характеристик монокристаллов топологических вейлевских полуметаллов WTe_2 и $MoTe_2$.

Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

1. Провести аттестацию структуры исследуемых в работе монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$.

2. Исследовать электросопротивление и гальваномагнитные характеристики данных монокристаллов, описать характерные особенности их поведения и выявить возможные причины таких особенностей.

3. Получить новые экспериментальные данные об оптических свойствах исследуемых монокристаллов, в частности, о комплексной диэлектрической проницаемости, оптической проводимости и отражательной способности.

4. Проследить трансформацию кристаллической структуры и электронных свойств монокристалла $MoTe_2$ при переходе от полупроводниковой фазы к полуметаллической в результате закалки.

В качестве **объектов исследования** выбраны монокристаллы топологических вейлевских полуметаллов WTe_2 и $MoTe_2$, выращенные в ИФМ УрО РАН.

Предметом исследования являются структура, электросопротивление, гальваномагнитные и оптические свойства исследуемых монокристаллов.

Научную новизну работы определяют следующие результаты:

1. Установлено, что наблюдаемые при температурах от 2 до 15 К квадратичная температурная зависимость электросопротивления монокристалла WTe_2 в отсутствие магнитного поля, а также квадратичная температурная зависимость проводимости в магнитном поле связаны с рассеянием носителей тока на поверхности, где имеет место интерференционный механизм рассеяния «электрон-фонон-поверхность».

2. Показано, что минимум на температурной зависимости сопротивления WTe_2 в магнитном поле, который характерен для компенсированных проводников

с замкнутой поверхностью Ферми, вызван переходом от эффективно сильных к эффективно слабым магнитным полям.

3. Показано, что нелинейная полевая зависимость сопротивления Холла WTe_2 и $MoTe_2$, наблюдавшаяся ранее в монокристаллах чистого вольфрама, связана, наряду с известным механизмом компенсации/раскомпенсации электронных и дырочных носителей тока, с рассеянием электронов на поверхности.

4. Впервые проведен сравнительный анализ оптических спектров $MoTe_2$, полученных до и после структурного фазового перехода из полупроводниковой модификации в полуметаллическую. Обнаружено улучшение проводящих свойств $MoTe_2$, о чем свидетельствует рост мнимой части диэлектрической проницаемости и отражательной способности с уменьшением энергии падающей световой волны в инфракрасной области спектра.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теоретическая значимость работы заключается в том, что получены новые данные об электронных характеристиках монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$, которые позволяют сформировать более полную картину об электронной структуре и свойствах топологических полуметаллов, а также в интерпретации ряда особенностей поведения электронных свойств монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$, а именно: квадратичной температурной зависимости электросопротивления при низких температурах, минимума на температурной зависимости сопротивления в магнитном поле, нелинейной полевой зависимости сопротивления Холла. Полученные электронные характеристики и информация об их зависимости от внешних воздействий (температура, магнитное поле, термообработка) могут быть использованы при разработке различных датчиков и устройств на основе данных материалов, что определяет практическую значимость работы.

Методы исследования. Работа проведена с использованием современных хорошо апробированных экспериментальных методик. Аттестация выращенных методом химического газового транспорта монокристаллов проводилась с помощью рентгеноструктурного анализа, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа. Электросопротивление и

гальваномагнитные характеристики измерены с использованием общепринятой четырехконтактной методики. Исследования оптических свойств проведены поляриметрическим методом Битти.

Положения, выносимые на защиту:

1. Обнаруженная при температурах от 2 до 15 К квадратичная температурная зависимость электросопротивления монокристалла WTe_2 связана с рассеянием носителей тока на поверхности, где имеет место интерференционный механизм рассеяния «электрон-фонон-поверхность».

2. Минимум на температурной зависимости сопротивления монокристалла WTe_2 в магнитном поле вызван переходом от эффективно сильных к эффективно слабым магнитным полям.

3. Нелинейная полевая зависимость сопротивления Холла монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$ связана, наряду с известным механизмом компенсации/раскомпенсации электронных и дырочных носителей заряда, с рассеянием носителей тока на поверхности.

4. Закалка $MoTe_2$ приводит к сильному изменению величины и вида температурной зависимости электросопротивления: вид зависимости изменяется с «полупроводникового» на «металлический», а величина электросопротивления при низких температурах уменьшается на 10 порядков. Оптические характеристики $MoTe_2$ претерпевают существенные изменения в результате закалки: рост мнимой части диэлектрической проницаемости и отражательной способности при энергиях менее 1,5 эВ. Это свидетельствует о появлении вклада в оптическое поглощение от свободных носителей и улучшении проводящих свойств.

Степень достоверности. Достоверность представленных экспериментальных данных обеспечена использованием апробированных методик, метрологически аттестованного оборудования, а также хорошей воспроизводимостью при проведении измерений на разных образцах одинакового состава. Результаты данного исследования хорошо согласуются с известными литературными данными, опубликованы в рецензируемых научных изданиях и обсуждались на российских и международных научных конференциях.

Личный вклад автора. Диссертационная работа выполнялась под научным руководством д.ф.-м.н. В.В. Марченкова. Автор совместно с научным руководителем участвовал в формулировке цели и постановке задач исследования, анализе и интерпретации полученных результатов. Личный вклад автора заключается в подготовке образцов к измерениям электросопротивления и гальваномагнитных свойств, измерении температурных зависимостей электросопротивления, обработке полученных экспериментальных данных и их представлении в виде докладов на научных школах и конференциях. Выращивание монокристаллов и рентгеноструктурный анализ проводились к.ф.-м.н. С.В. Наумовым в лаборатории магнитных полупроводников ИФМ УрО РАН. Исследования микроструктуры поверхности методом сканирующей электронной микроскопии и рентгеновский энергодисперсионный микроанализ осуществлялись автором совместно с к.ф.-м.н. Е.Б. Марченковой, а также с к.х.н. Е.И. Патраковым в Центре коллективного пользования (ЦКП) «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» ИФМ УрО РАН. Электросопротивление и гальваномагнитные свойства были измерены совместно с к.ф.-м.н. С.М. Подгорных и д.ф.-м.н. В.Н. Неверовым в ЦКП ИФМ УрО РАН. Измерения оптических характеристик были проведены совместно с к.ф.-м.н. Е.И. Шредер и А.А. Махневым в лаборатории оптики металлов ИФМ УрО РАН. Публикации по теме диссертационной работы были подготовлены автором совместно с научным руководителем и соавторами.

Публикации. Материалы диссертационной работы опубликованы в 10 статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК, а также в 16 тезисах докладов на российских и международных конференциях.

Апробация работы. Основные результаты работы были представлены на следующих российских и международных конференциях, школах и семинарах: XXXVIII совещание по физике низких температур (Москва – Ростов-на-Дону – Шепси, 17.09.2018-22.09.2018); XIX Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-19) памяти А.П. Танкеева (Екатеринбург, 15.11.2018-22.11.2018); VIII Международная

молодежная научная школа-конференция «Современные проблемы физики и технологий» (Москва, 15.04.2019-20.04.2019); Двадцать пятая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-25) (Крым, Севастополь, 19.04.2019-26.04.2019); VII Euro-Asian Symposium «Trends in MAGnetism» (EASTMAG-2019) (Екатеринбург, 08.09.2019-13.09.2019); XX Юбилейная Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-20) (Екатеринбург, 21.11.2019-28.11.2019); 21 Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 25.11.2019-29.11.2019); XXIII Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников (Екатеринбург, 17.02.2020-22.02.2020); 7th International School and Conference on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures "Saint Petersburg OPEN 2020" (Санкт-Петербург (онлайн-участие), 26.04.2020-30.04.2020); 22 Всероссийская научная молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург (онлайн-участие), 23.11.2020-27.11.2020); INTERMAG2021 (Лион, Франция (онлайн-участие), 26.04.2021-30.04.2021); The European Conference PHYSICS OF MAGNETISM 2021 (PM'21) (Познань, Польша (онлайн-участие), 28.06.2021-02.07.2021); 15th Joint MMM-Intermag Conference (Новый Орлеан, США (онлайн-участие), 10.01.2022-14.01.2022).

Связь работы с научными проектами и темами. Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России (темы «Спин» № 122021000036-3 и «Электрон» № 122021000039-4) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 20-32-90069 и № 17-52-52008), стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-2705.2022.1).

Соответствие паспорту научной специальности. Результаты, представленные в диссертационной работе, соответствуют пункту 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и

гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» Паспорта специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Структура и объем диссертационной работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка используемой литературы. Полный объем работы составляет 116 страниц, включая 56 рисунков, 1 таблицу, 23 формулы. Список литературы содержит 118 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, их апробация и степень достоверности, конкретизирован личный вклад автора, изложены положения, выносимые на защиту.

В первой главе приведен обзор литературных источников, посвященных экспериментальному и теоретическому исследованию топологических полуметаллов. Особое внимание уделено описанию кристаллической структуры и электронных свойств топологических полуметаллов Вейля WTe_2 и $MoTe_2$. Сформулирована постановка задачи.

Во второй главе описаны экспериментальные методы, использованные при проведении исследования, а также приведены результаты аттестации структуры монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$ методами рентгеновской дифракции, сканирующей электронной микроскопии и рентгеновского энергодисперсионного микроанализа. Показано, что соединение WTe_2 кристаллизовалось в орторомбической структуре. Продемонстрировано, что закалка $MoTe_2$ от температуры $910^\circ C$ приводит к структурному фазовому переходу от полупроводниковой модификации (гексагональная решетка) к полуметаллической (моноклинная решетка). Установлено, что все образцы имеют слоистую структуру, а их химический состав соответствует стехиометрическим WTe_2 и $MoTe_2$.

В третьей главе рассмотрены особенности электросопротивления и гальваномагнитных свойств монокристалла WTe_2 с отношением сопротивлений $\rho_{300\text{ K}}/\rho_{4,2\text{ K}} \approx 55$ в диапазоне температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл, а также оптические свойства при комнатной температуре. Анализ экспериментальных данных по электронному транспорту позволил оценить концентрации и подвижности носителей тока, проследить их изменение с температурой.

Электросопротивление WTe_2 увеличивается с температурой согласно квадратичному закону при $T < 70$ К (рисунок 1). Как правило, такой вид зависимости $\rho(T)$ объясняют электрон-электронным рассеянием. Обнаружено, что для исследуемого монокристалла WTe_2 имеются два температурных интервала, где наблюдаются квадратичные зависимости $\rho(T)$, для которых коэффициенты при T^2 значительно отличаются: низкотемпературный (2-15) К и «высокотемпературный» (15-70) К (рисунок 2). В низкотемпературной области зависимость $\rho(T)$ можно представить в виде $\rho_L(T) = \rho_0 + A_L \cdot T^2$, где $\rho_0 \approx 0,17 \cdot 10^{-4}$ Ом·см – остаточное сопротивление, $A_L = 1,4 \cdot 10^{-8}$ Ом·см·К⁻². В «высокотемпературной» области зависимости $\rho_H(T) = \rho_1 + A_H \cdot T^2$ соответствуют $\rho_1 \approx 0,15 \cdot 10^{-4}$ Ом·см и $A_H = 2,2 \cdot 10^{-8}$ Ом·см·К⁻².

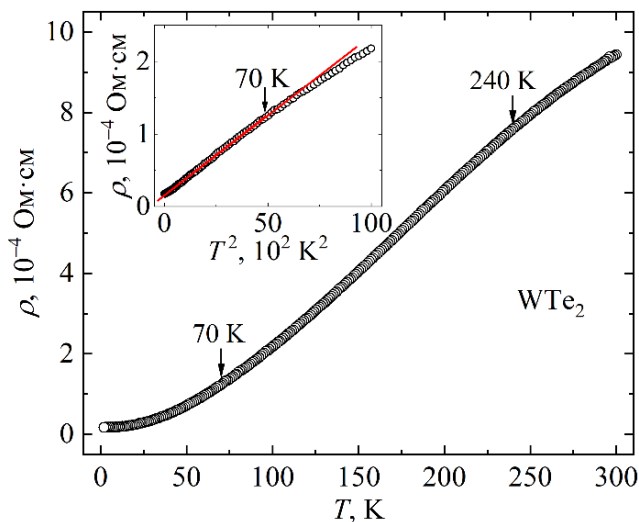


Рисунок 1 – Температурная зависимость электросопротивления WTe_2 . На вставке показана зависимость $\rho = f(T^2)$ при температурах от 2 до 100 К

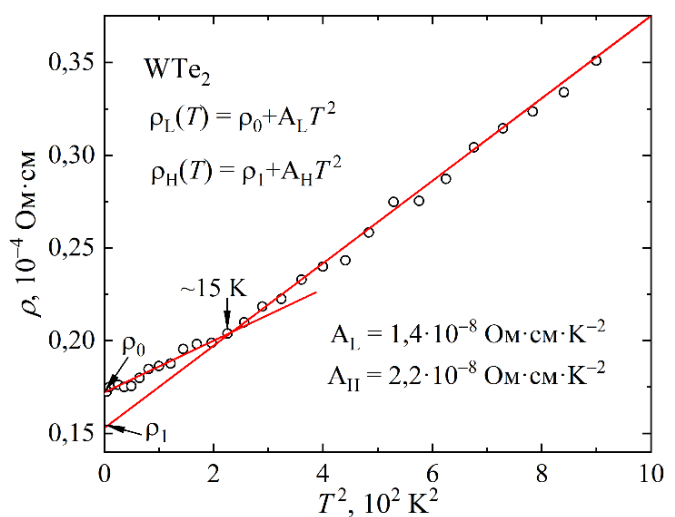


Рисунок 2 – Электросопротивление ρ монокристалла WTe_2 как функция T^2 при температурах от 2 до 30 К

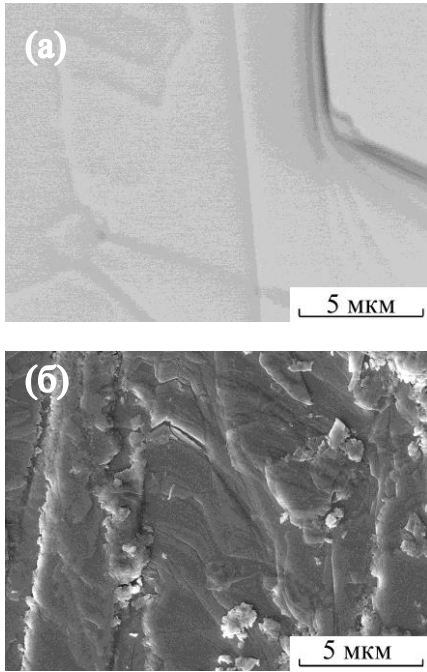


Рисунок 3 – Микроструктура гладкой (а) и дефектной (б) поверхности WTe_2

Установлено, что, как и в монокристаллах чистого вольфрама и молибдена [2, 3], квадратичный по температуре вклад в электросопротивление WTe_2 при температурах от 2 до 15 К связан с рассеянием электронов проводимости на поверхности образца, где имеет место интерференционный механизм рассеяния «электрон-фонон-поверхность». Чтобы изменить характер отражения электронов от поверхности, как это делали в случае чистых металлов, на поверхности WTe_2 был создан дефектный слой. Изображения исходной гладкой поверхности и дефектной поверхности образца, полученные с помощью сканирующей электронной микроскопии, представлены

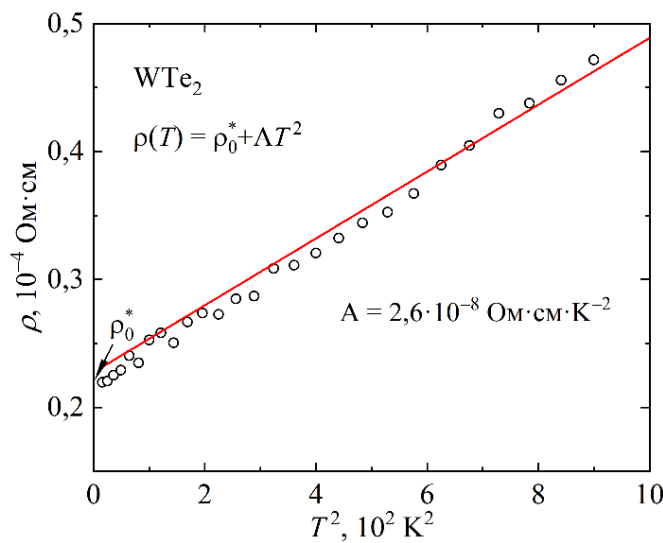


Рисунок 4 – Электросопротивление ρ монокристалла WTe_2 с дефектной поверхностью как функция T^2 при температурах от 2 до 30 К

на рисунке 3. Электросопротивление образца с дефектной поверхностью также изменяется с температурой по квадратичному закону $\rho(T) = \rho_0^* + A \cdot T^2$ в интервале температур от 2 до 70 К, где $\rho_0^* \approx 0,23 \cdot 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$ превышает остаточное сопротивление образца с гладкой поверхностью $\rho_0 \approx 0,17 \cdot 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$, а коэффициент $A = 2,6 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{см} \cdot \text{К}^{-2}$ не изменяется при температурах от 2 до 70 К (рисунок 4).

Показано, что проводимость σ_{xx} в магнитном поле 9 Тл, как и электросопротивление в отсутствие поля, изменяется с температурой по квадратичному закону в интервале температур от 2 до 35 К. На кривой $\sigma_{xx} = f(T^2)$ (рисунок 5) выделены два температурных интервала, где наблюдается квадратичная зависимость $\sigma_{xx}(T)$: низкотемпературный (2-15) К и «высокотемпературный»

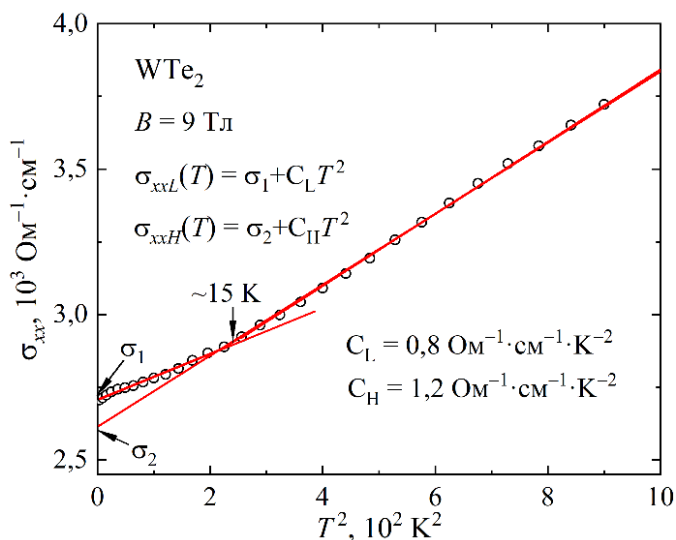


Рисунок 5 – Проводимость σ_{xx} монокристалла WTe_2 как функция T^2 при температурах от 2 до 30 К в поле 9 Тл

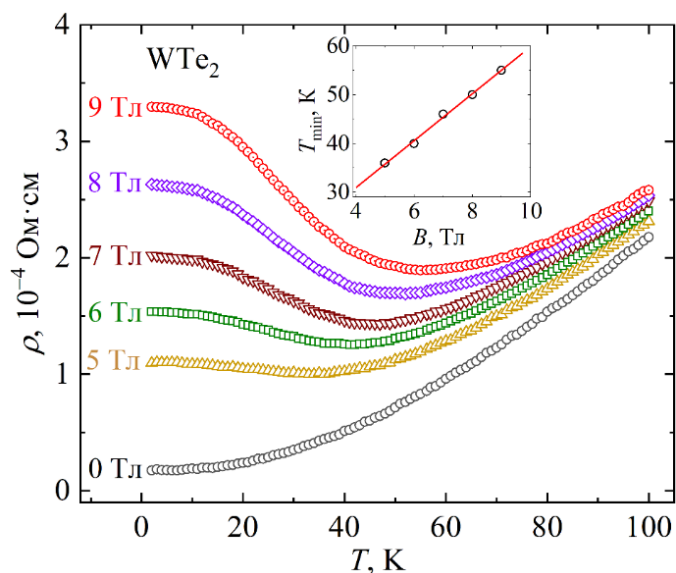


Рисунок 6 – Температурные зависимости электросопротивления ρ ($B = 0$) и сопротивления ρ_{xx} в полях от 5 до 9 Тл монокристалла WTe_2 . На вставке: зависимость температуры минимума T_{min} на кривой $\rho_{xx}(T)$ от магнитного поля B

(15-35) К. В низкотемпературной области $\sigma_{xx}(T)$ можно представить в виде $\sigma_{xxL}(T) = \sigma_1 + C_L \cdot T^2$, где $\sigma_1 \approx 2,7 \cdot 10^3 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, $C_L = 0,8 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-2}$. В «высокотемпературной» области зависимости $\sigma_{xxH}(T) = \sigma_2 + C_H \cdot T^2$ соответствуют $\sigma_2 \approx 2,6 \cdot 10^3 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ и $C_H = 1,2 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{К}^{-2}$.

Обнаружено, что при приложении магнитного поля $B \geq 5$ Тл на температурной зависимости сопротивления $\rho_{xx}(T)$ появляется минимум, температура T_{min} которого увеличивается с ростом магнитного поля, как показано на рисунке 6. Установлено, что объяснением минимума на температурной зависимости сопротивления WTe_2 в магнитном поле является переход от эффективно сильных магнитных полей ($\omega_c \tau \gg 1$, где ω_c – циклотронная частота, τ – время релаксации) к эффективно слабым ($\omega_c \tau \ll 1$) [4],

который наблюдался в компенсированных проводниках с замкнутой поверхностью Ферми, в частности, в монокристаллах вольфрама [5].

Магнитосопротивление $\Delta\rho/\rho$ монокристалла WTe_2 изменяется с полем по закону, близкому к квадратичному, достигая $\sim 1800\%$ в поле 9 Тл при 2 К (рисунок 7). Такая зависимость характерна для компенсированных проводников с замкнутой поверхностью Ферми в области эффективно сильных магнитных полей.

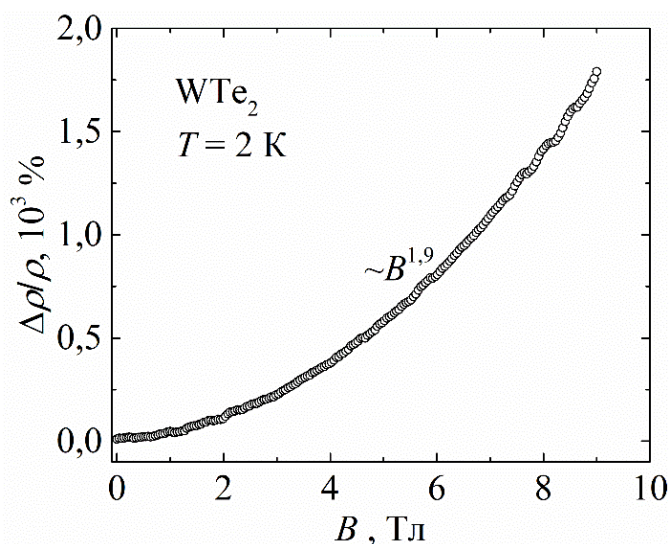


Рисунок 7 – Полевая зависимость магнитосопротивления WTe_2 при $T = 2$ К

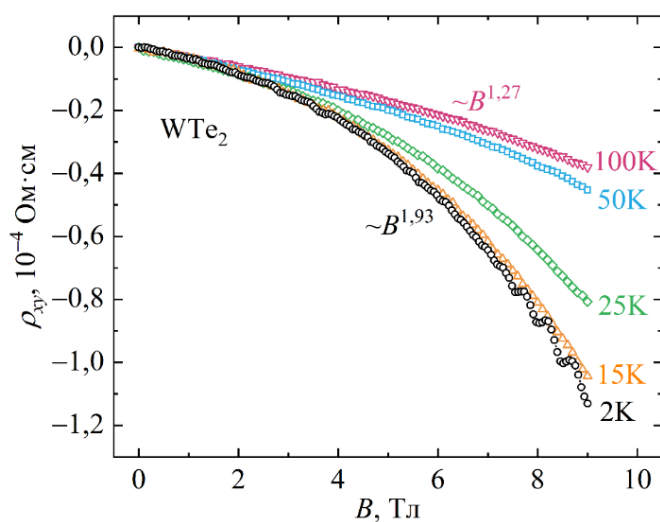


Рисунок 8 – Полевые зависимости холловского сопротивления WTe_2 при различных температурах от 2 до 100 К

Холловское сопротивление ρ_{xy} также изменяется с полем по закону, близкому к квадратичному при 2 К. Нелинейное поведение $\rho_{xy}(B)$ при низких температурах наблюдалось в WTe_2 и другими авторами и свидетельствует о наличии нескольких групп носителей [6]. Кроме того, квадратичная полевая зависимость сопротивления Холла ранее наблюдалась в компенсированных металлах с замкнутой поверхностью Ферми в условиях статического скин-эффекта и связана с рассеянием на поверхности [7, 8]. Авторы работ [7, 8] экспериментально показали на монокристаллах вольфрама, что уменьшение вклада от рассеяния электронов на поверхности путем сокращения длины свободного пробега за счет повышения температуры до

~ 30 К или использования более «грязного» кристалла приводит к уменьшению и даже исчезновению квадратичной полевой зависимости ρ_{xy} и увеличению линейного вклада в холловское сопротивление. Чтобы проверить, имеет ли место аналогичный эффект и в WTe_2 , были измерены полевые зависимости сопротивления Холла WTe_2 при различных температурах от 2 до 100 К (рисунок 8). Видно, что более выраженная нелинейность $\rho_{xy}(B)$ наблюдается при низких температурах, тогда как с ростом температуры заметно увеличение линейного вклада, что согласуется с результатами, описанными в работах [7, 8], и свидетельствует о том, что нелинейная зависимость холловского сопротивления

WTe₂ связана с рассеянием на поверхности. Кроме того, по аналогии с чистыми металлами можно измерить зависимости $\rho_{xy}(B)$ для более «грязного» образца. Однако в данной работе исследуется только монокристалл WTe₂ с отношением сопротивлений $\rho_{300\text{K}}/\rho_{4,2\text{K}} \approx 55$, и не удалось получить образцы WTe₂ другой степени чистоты. В то же время монокристалл MoTe₂, который также изучается в настоящей работе, имеет отношение сопротивлений $\rho_{300\text{K}}/\rho_{4,2\text{K}} \approx 15$, то есть содержит большее число дефектов и примесей. Особенности полевой зависимости $\rho_{xy}(B)$ монокристалла MoTe₂ рассмотрены в четвертой главе.

Концентрации и подвижности электронных и дырочных носителей тока в WTe₂ оценены в рамках двухзонной модели, как показано на рисунке 9. Отметим, что концентрация и подвижность электронов превышают концентрацию и подвижность дырок в исследованном интервале температур, это означает, что электроны являются основными носителями тока.

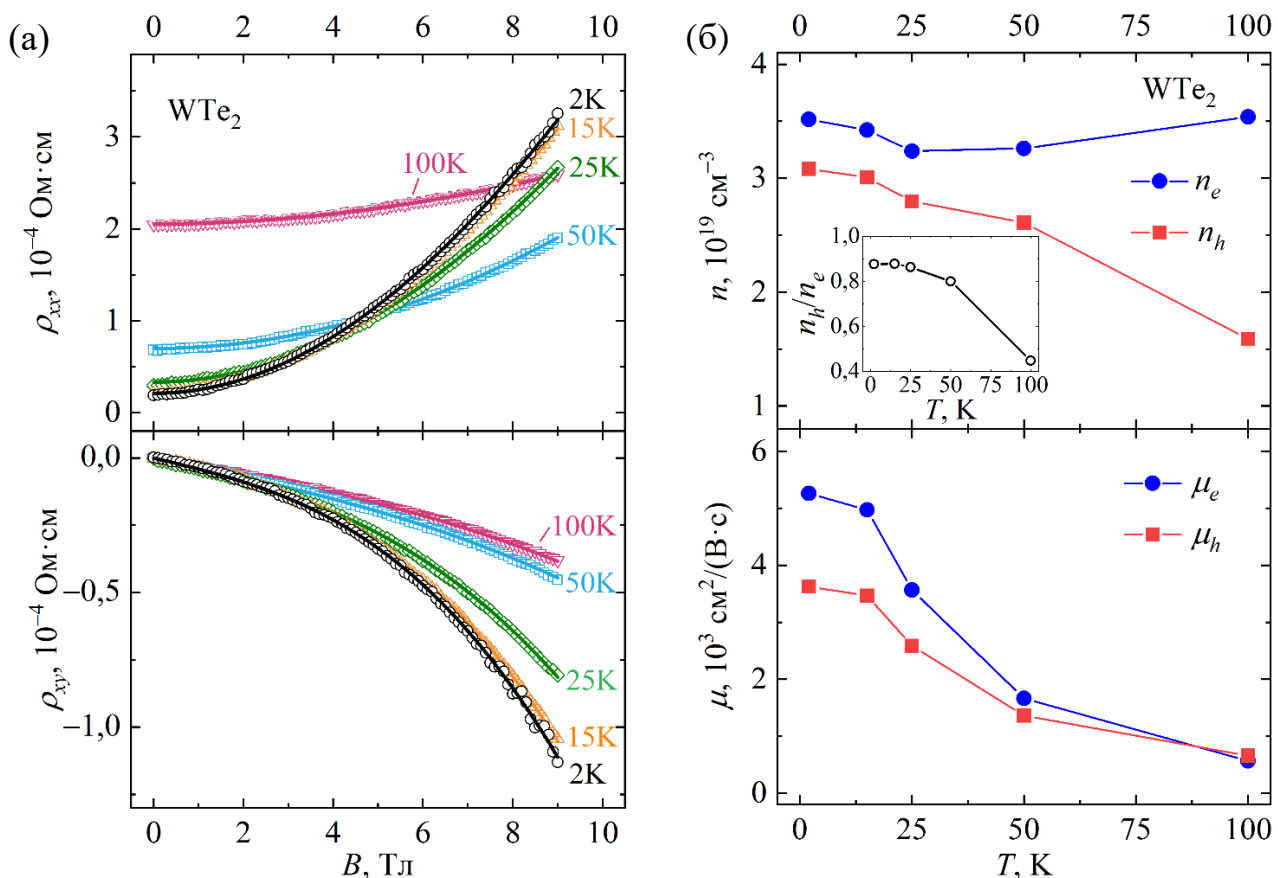


Рисунок 9 – (а) Полевые зависимости сопротивления $\rho_{xx}(B)$ и холловского сопротивления $\rho_{xy}(B)$ монокристалла WTe₂ при температурах от 2 до 100 К: точки – эксперимент; сплошные линии – кривые, полученные с помощью двухзонной модели. (б) Температурные зависимости концентраций n_e (n_h) и подвижностей μ_e (μ_h) электронов (дырок). На вставке показана температурная зависимость отношения концентраций дырок и электронов n_h/n_e

Полученные оценки качественно согласуются с данными, приведенными в работе [6], где также исследовался эффект Холла в WTe_2 , однако дают другой результат по сравнению с работой [9], где на основе анализа квантовых осцилляций в данном соединении было установлено, что концентрации электронов и дырок близки при низких температурах с небольшим преобладанием дырочных носителей заряда. На вставке к рисунку 13(б) видно, что отношение n_h/n_e составляет $\sim (0,8-0,9)$ при температурах ниже 50 К. Это свидетельствует о состоянии, близком к электронно-дырочной компенсации.

Оптические характеристики монокристалла WTe_2 исследованы в диапазоне спектра (0,2-5,0) эВ (рисунки 10, 11). Это позволяет получить новые экспериментальные данные об оптических свойствах данного соединения, поскольку в известных автору литературных источниках оптические измерения WTe_2 были проведены при энергиях падающего света до 1 эВ (см., например, [10]).

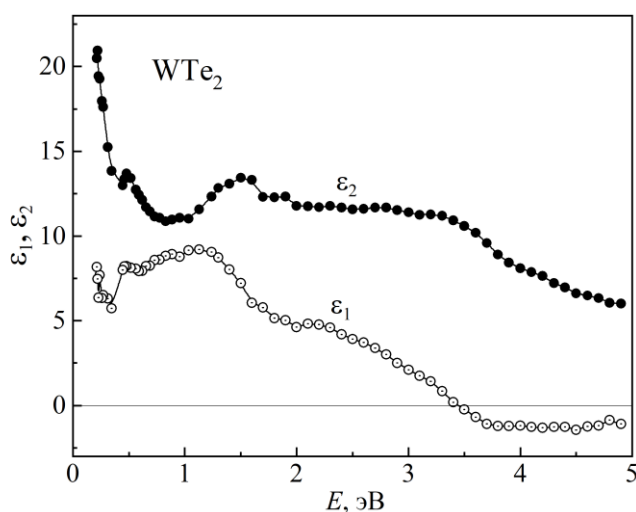


Рисунок 10 – Дисперсия действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 частей диэлектрической проницаемости монокристалла WTe_2

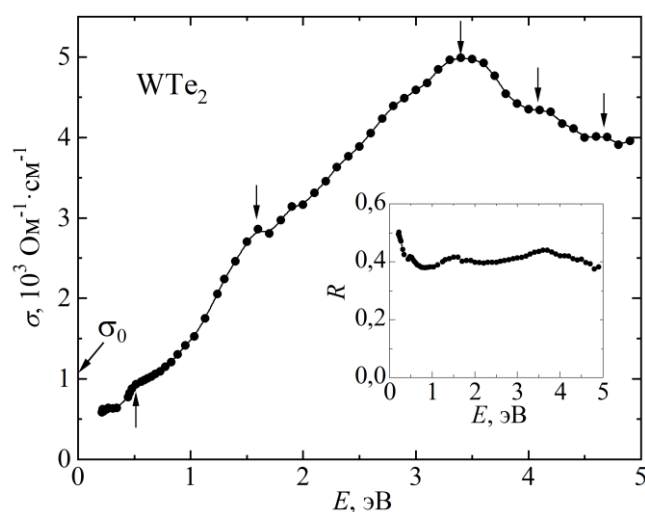


Рисунок 11 – Дисперсия оптической проводимости σ и отражательной способности R (на вставке) WTe_2

Положительные значения действительной $\epsilon_1(\omega)$ части и многочисленные особенности (пики, перегибы) на кривой мнимой $\epsilon_2(\omega)$ части комплексной диэлектрической проницаемости свидетельствуют о преобладании межзонного механизма поглощения в исследованном диапазоне спектра (рисунок 10). Дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ представляет собой одну широкую полосу с центром при 3,4 эВ, сформированную межзонами переходами

(рисунок 11). Ожидается, что с дальнейшим уменьшением энергии падающего света произойдет увеличение оптической проводимости, которая при энергии 0,2 эВ составляет $0,6 \cdot 10^3 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, до статического значения $1,1 \cdot 10^3 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, полученного из данных по электросопротивлению и отмеченного на оси ординат.

Результаты, представленные в третьей главе, опубликованы в работах [A1, A3-A7, A10].

В четвертой главе рассмотрены особенности поведения электросопротивления и гальваномагнитных свойств монокристалла MoTe_2 после закалки с отношением сопротивлений $\rho_{300 \text{ К}}/\rho_{4,2 \text{ К}} \approx 15$ в диапазоне температур от 2 до 300 К и в магнитных полях до 9 Тл. Анализ экспериментальных данных по электронному транспорту позволил оценить концентрации и подвижности носителей тока, проследить их изменение с температурой. Проведен сравнительный анализ оптических свойств MoTe_2 до и после структурного фазового перехода из полупроводниковой модификации в полуметаллическую.

Закалка MoTe_2 приводит к сильному изменению величины и вида температурной зависимости электросопротивления: вид зависимости изменился с «полупроводникового» на «металлический», а величина электросопротивления при низких температурах уменьшилась на 10 порядков (рисунки 12 и 13).

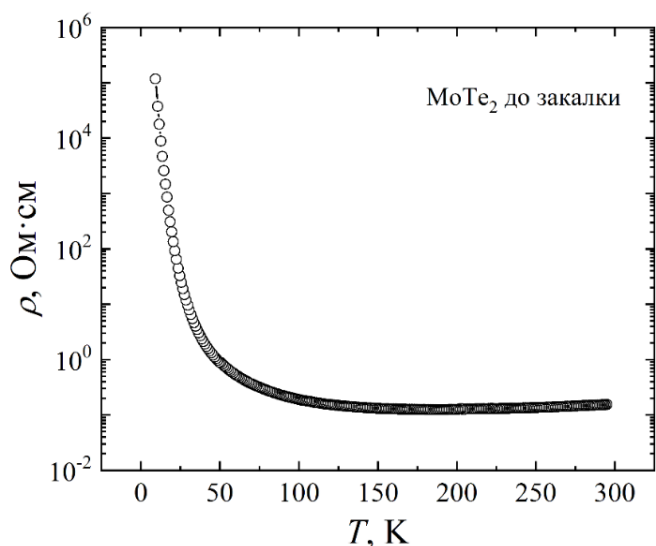


Рисунок 12 – Температурная зависимость электросопротивления монокристалла MoTe_2 до закалки

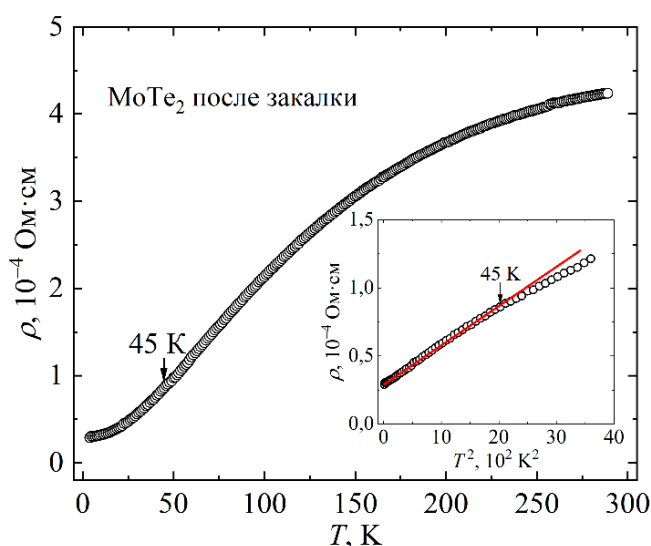


Рисунок 13 – Температурная зависимость электросопротивления монокристалла MoTe_2 после закалки. На вставке: зависимость $\rho = f(T^2)$ при температурах от 4,2 до 60 К

Поскольку свойства вейлевского полуметалла проявляет полуметаллическая T_d -фаза MoTe_2 , рассмотрены особенности электросопротивления и гальваномагнитных свойств MoTe_2 после закалки.

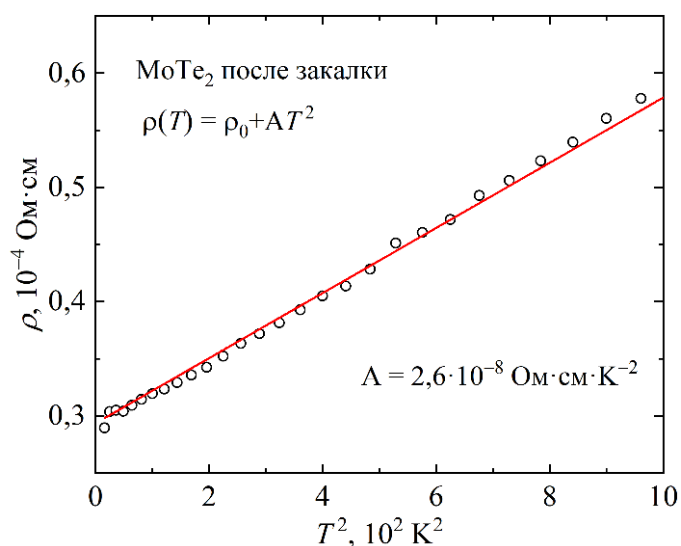


Рисунок 14 – Электросопротивление ρ монокристалла MoTe_2 как функция T^2 при температурах от 4,2 К до 30 К

В области температур от 4,2 К до 45 К электросопротивление MoTe_2 изменяется с температурой по квадратичному закону $\rho = \rho_0 + AT^2$ (вставка на рисунке 13). Коэффициент $A = 2,6 \cdot 10^{-8} \text{ Ом} \cdot \text{см} \cdot \text{К}^{-2}$ не изменяется в рассмотренном интервале температур (рисунок 14). Это связано с тем, что исследуемый монокристалл MoTe_2 имеет меньшее отношение сопротивлений $\rho_{300 \text{ К}}/\rho_{4,2 \text{ К}} \approx 15$, то есть содержит большее число дефектов и примесей, чем WTe_2 . Таким образом, рассеяние на поверхности не вносит существенный вклад в его электросопротивление.

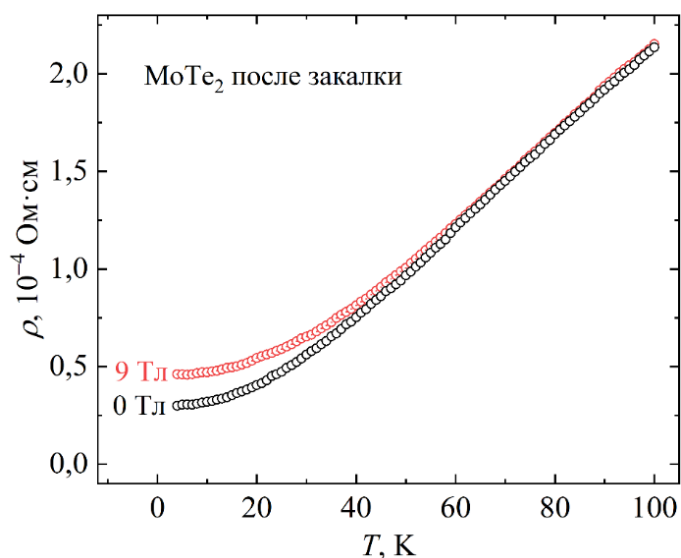


Рисунок 15 – Температурные зависимости электросопротивления ρ ($B = 0$) и сопротивления ρ_{xx} в магнитном поле ($B = 9 \text{ Тл}$) монокристалла MoTe_2 после закалки

Магнитное поле 9 Тл не приводит к появлению минимума на зависимости $\rho_{xx}(T)$ для исследуемого монокристалла MoTe_2 (рисунок 15). Отсутствие минимума на кривой $\rho_{xx}(T)$ связано с более низким отношением сопротивлений $\rho_{300 \text{ К}}/\rho_{4,2 \text{ К}}$ данного образца. Величина $\omega_c \tau \sim 1$ оценена для MoTe_2 в магнитном поле 9 Тл при $T = 4,2 \text{ К}$. Таким образом, в исследованном диапазоне температур и магнитных полей область эффективно сильных магнитных полей ($\omega_c \tau \gg 1$) для MoTe_2 не достигается.

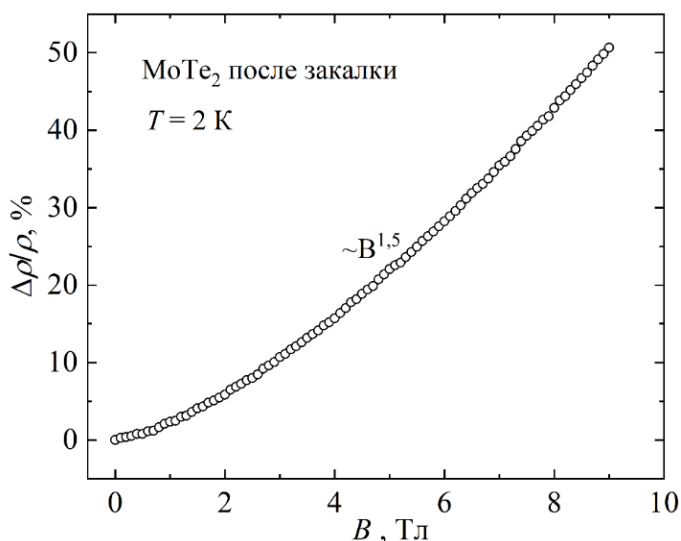


Рисунок 16 – Полевая зависимость магнитосопротивления MoTe_2 после закалки при температуре 2 К

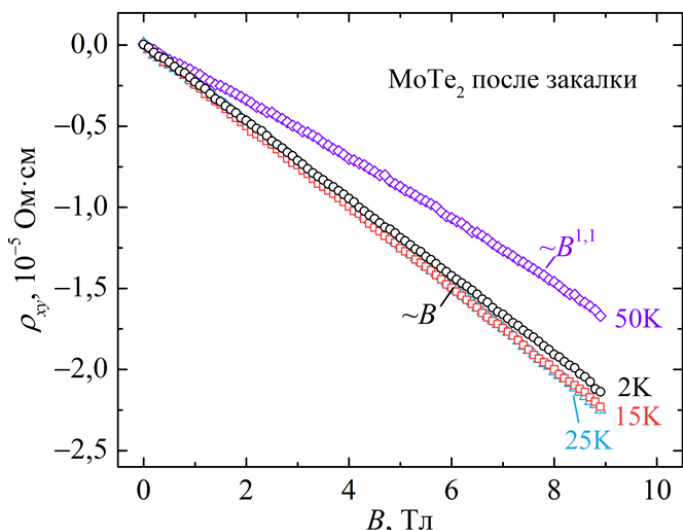


Рисунок 17 – Полевые зависимости холловского сопротивления $\rho_{xy}(B)$ MoTe_2 после закалки при различных температурах от 2 до 50 К

Магнитосопротивление MoTe_2 изменяется с полем по закону $\Delta\rho/\rho \sim B^{1.5}$ при 2 К, достигая 50% в поле 9 Тл (рисунок 16), что намного ниже величины, полученной для WTe_2 в данной работе, а также приведенной в работах [11, 12]. Такое поведение магнитосопротивления исследуемого монокристалла MoTe_2 связано с более низким отношением $\rho_{300\text{ К}}/\rho_{4,2\text{ К}}$.

Холловское сопротивление изменяется с магнитным полем по линейному закону при температурах от 2 до 25 К, в то время как при 50 К появляется нелинейный вклад в ρ_{xy} (рисунок 17). Нелинейная зависимость $\rho_{xy}(B)$ наблюдалась для WTe_2 , как описано в третьей главе, и обусловлена рассеянием носителей тока на поверхности. Поскольку исследуемый монокристалл MoTe_2 имеет меньшее отношение сопротивлений $\rho_{300\text{ К}}/\rho_{4,2\text{ К}}$,

рассеяние на поверхности может не вносить существенный вклад в его холловское сопротивление. С другой стороны, нелинейная зависимость $\rho_{xy}(B)$ при 50 К может быть связана с раскомпенсацией носителей тока, что согласуется с данными работ [11, 12].

Концентрации и подвижности электронов и дырок в монокристалле MoTe_2 оценены в рамках двухзонной модели, как показано на рисунке 18. Видно, что значения концентрации n_e и подвижности μ_e электронов в основном превышают значения n_h и μ_h дырок. Это означает, что электроны являются основными

носителями тока. При температурах от 2 до 25 К величина n_e сравнима с n_h , что свидетельствует о состоянии, близком к электронно-дырочной компенсации.

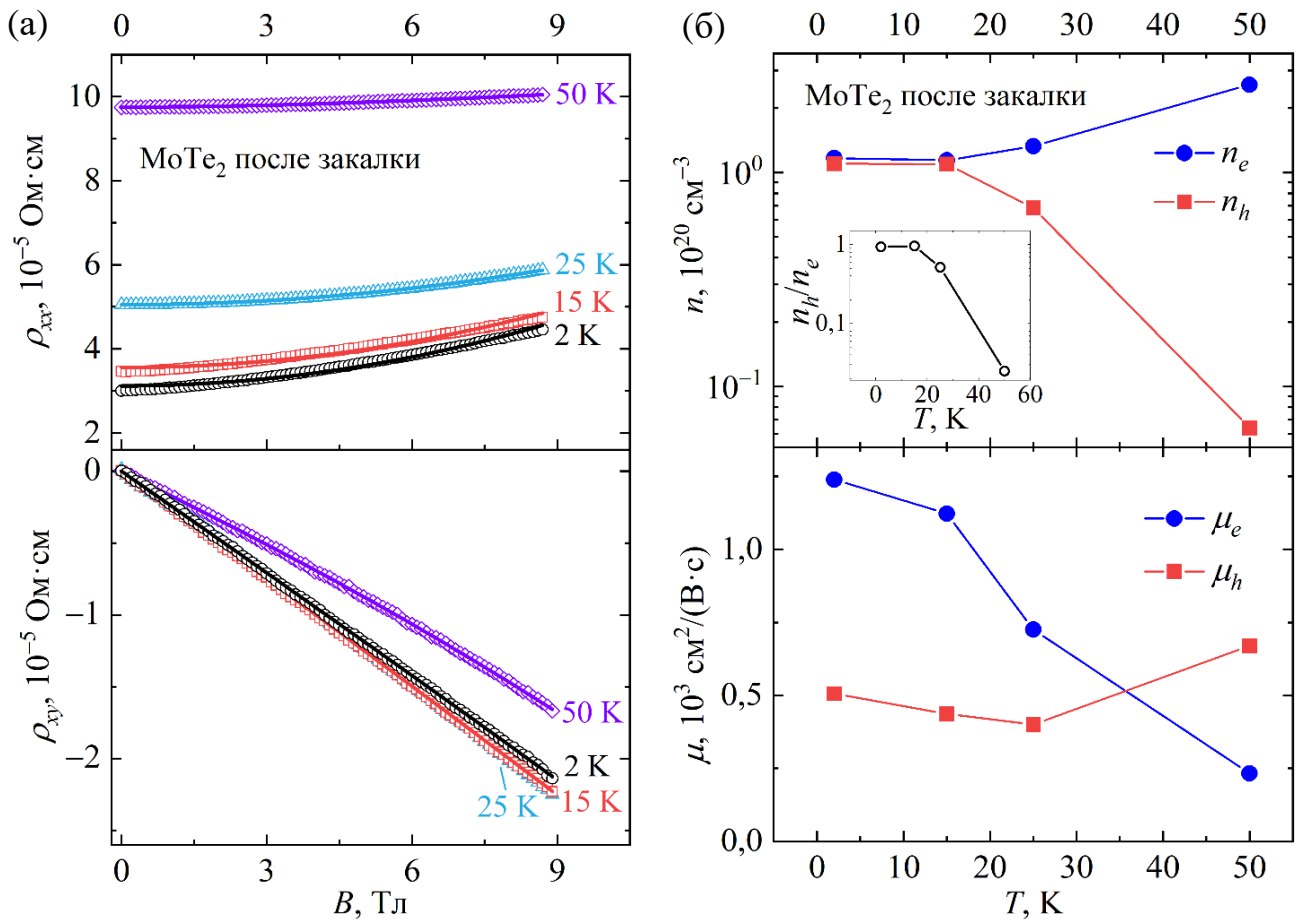


Рисунок 18 – (а) Полевые зависимости сопротивления $\rho_{xx}(B)$ в магнитном поле и холловского сопротивления $\rho_{xy}(B)$ монокристалла MoTe_2 при различных температурах от 2 до 50 К. Точки – экспериментальные данные; сплошные линии – кривые, полученные с использованием двухзонной модели. (б) Температурные зависимости концентраций и подвижностей электронов и дырок, полученные на основе двухзонной модели. На вставке показана температурная зависимость отношения концентраций дырок и электронов n_h/n_e

Проведен сравнительный анализ оптических спектров монокристалла MoTe_2 до и после структурного фазового перехода из полупроводниковой модификации в полуметаллическую, произошедшего в результате закалки (рисунки 19-22). В известных автору литературных источниках такие данные отсутствуют. В результате проведенной термообработки изменились форма кривых, соотношение интенсивностей в разных областях спектра. Основными особенностями являются появление подъема на кривой мнимой части $\epsilon_2(\omega)$ диэлектрической проницаемости и рост отражательной способности R в инфракрасной области. Это свидетельствует о появлении вклада в оптическое поглощение от свободных носителей.

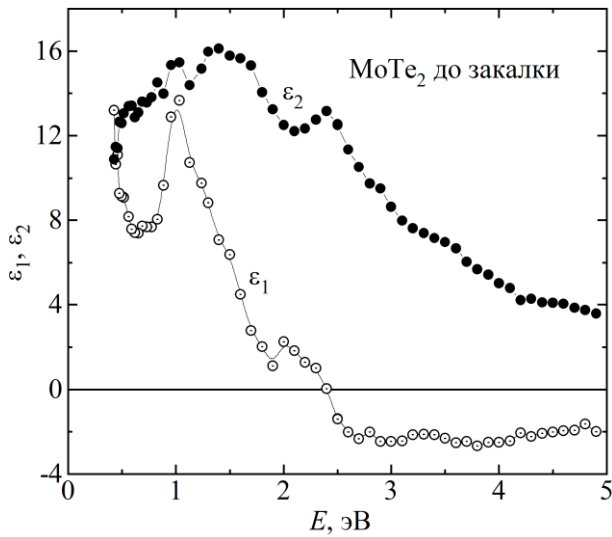


Рисунок 19 – Дисперсия действительной $\varepsilon_1(\omega)$ и мнимой $\varepsilon_2(\omega)$ частей комплексной диэлектрической проницаемости MoTe_2 до закалики

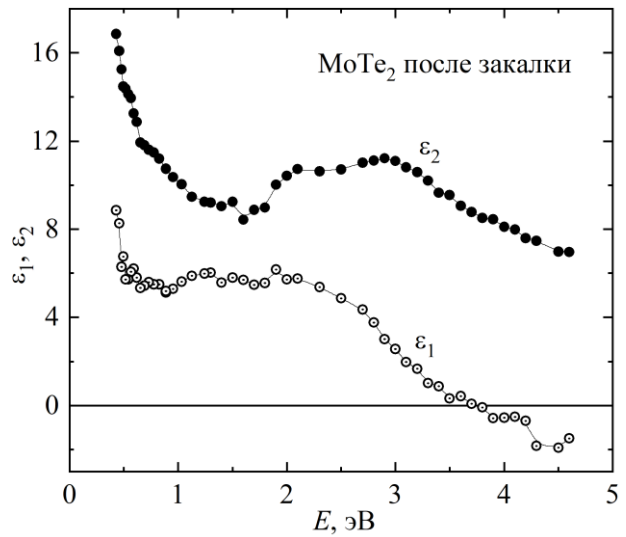


Рисунок 20 – Дисперсия действительной $\varepsilon_1(\omega)$ и мнимой $\varepsilon_2(\omega)$ частей комплексной диэлектрической проницаемости MoTe_2 после закалики

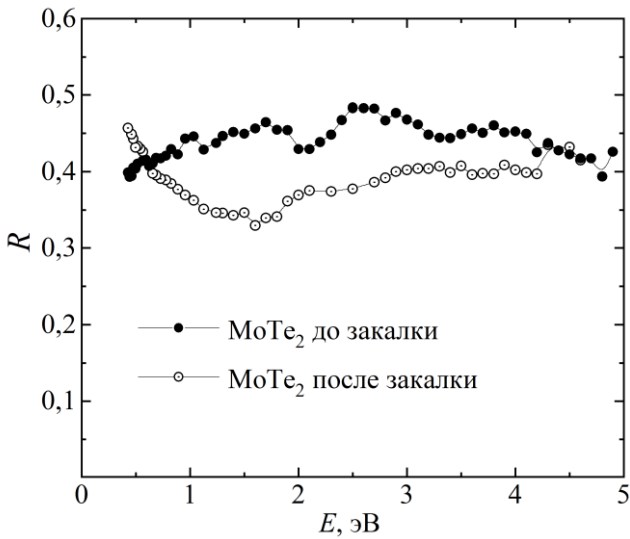


Рисунок 21 – Дисперсия отражательной способности $R(\omega)$ MoTe_2 до и после закалики

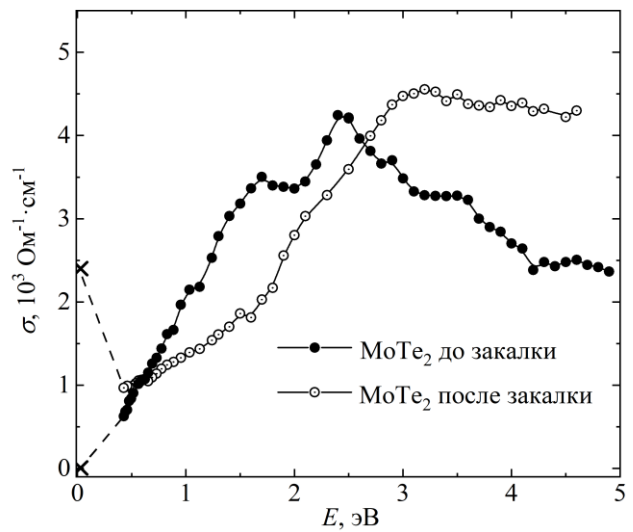


Рисунок 22 – Дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ MoTe_2 до и после закалики. Символами на оси ординат показаны значения статической проводимости при комнатной температуре

Результаты, представленные в четвертой главе, опубликованы в работах [A2, A6, A8-A10].

В **заклучении** представлены основные результаты и выводы, полученные в работе.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведена структурная аттестация монокристаллов WTe_2 и $MoTe_2$, выращенных методом химического газового транспорта: исследована микроструктура их поверхности, подтвержден химический состав.

2. Обнаружены особенности в поведении электросопротивления и гальваномагнитных характеристик полуметаллических WTe_2 и $MoTe_2$, а именно:

– квадратичная температурная зависимость электросопротивления полуметаллических WTe_2 и $MoTe_2$ в температурных интервалах от 2 до 70 К и от 4,2 до 45 К соответственно; причиной квадратичного по температуре вклада в электросопротивление WTe_2 при температурах ниже 15 К является рассеяние носителей тока на поверхности, где имеет место интерференционный механизм рассеяния «электрон-фонон-поверхность», как наблюдалось ранее в монокристаллах чистых металлов;

– минимум на температурной зависимости сопротивления WTe_2 в магнитном поле, объяснением которого является переход от эффективно сильных к эффективно слабым магнитным полям, характерный для компенсированных проводников с замкнутой поверхностью Ферми;

– нелинейная полевая зависимость сопротивления Холла WTe_2 и $MoTe_2$, причиной которой является, наряду с механизмом компенсации/раскомпенсации электронных и дырочных носителей заряда, механизм рассеяния носителей тока на поверхности, как наблюдалось ранее в монокристаллах чистого вольфрама.

3. Получены новые экспериментальные данные об оптических свойствах полуметаллических WTe_2 и $MoTe_2$ в диапазоне спектра (0,2-5,0) эВ. Показано, что спектр оптической проводимости $\sigma(\omega)$ данных материалов представляет собой широкую полосу, сформированную межзонными переходами. Положительные значения действительной $\varepsilon_1(\omega)$ части и многочисленные особенности на кривых мнимой $\varepsilon_2(\omega)$ части комплексной диэлектрической проницаемости, а также невысокие значения отражательной способности свидетельствуют о преобладании межзонного механизма поглощения в исследованном диапазоне спектра.

4. Показано, что закалка MoTe_2 приводит к сильному изменению величины и вида температурной зависимости электросопротивления: вид зависимости изменился с «полупроводникового» на «металлический», а величина электросопротивления при низких температурах уменьшилась на 10 порядков. Оптические характеристики MoTe_2 претерпели существенные изменения в результате закалки: рост мнимой части диэлектрической проницаемости и отражательной способности при энергиях менее 1,5 эВ. Это свидетельствует о появлении вклада в оптическое поглощение от свободных носителей и улучшении проводящих свойств.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. A complete catalogue of high-quality topological materials / M.G. Vergniory, L. Elcoro, C. Felser, N. Regnault, B.A. Bernevig, Z. Wang // *Nature*. – 2019. – V. 566. – P. 480-485.

2. О квадратичной температурной зависимости электросопротивления монокристаллов вольфрама. Роль поверхностного рассеяния электронов / В.Е. Старцев, В.П. Дякина, В.И. Черепанов, Н.В. Волкенштейн, Р.Ш. Насыров, В.Г. Манаков // *ЖЭТФ* – 1980. – Т. 79. – С. 1335-1344.

3. Черепанов, В.И. О квадратичном низкотемпературном вкладе в электросопротивление переходных металлов / В.И. Черепанов, В.Е. Старцев, Н.В. Волкенштейн // *ФНТ*. – 1980. – Т. 6(7). – С. 890-897.

4. Лифшиц, И.М. Электронная теория металлов / И.М. Лифшиц, М.Л. Азбель, М.И. Каганов. – Москва: Наука, 1971. – 416 с.

5. Марченков, В.В. Квадратичная температурная зависимость магнитосопротивления чистых монокристаллов вольфрама в условиях статического скин-эффекта / В.В. Марченков // *ФНТ*. – 2011. – Т. 37. – С. 1068-1072.

6. Hall effect in the extremely large magnetoresistance semimetal WTe_2 / Y. Luo, H. Li, Y.M. Dai, H. Miao, Y.G. Shi, H. Ding, A.J. Taylor, D.A. Yarotski, R.P. Prasankumar, J.D. Thompson // *Appl. Phys. Lett.* – 2015. – V. 107. – P. 182411.

7. Особенности гальваномагнитных свойств компенсированных металлов в условиях статического скин-эффекта в сильных магнитных полях (вольфрам) /

Н.В. Волкенштейн, М. Глиньский, В.В. Марченков, В.Е. Старцев, А.Н. Черепанов // ЖЭТФ. – 1989. – Т. 95. – С. 2103-2116.

8. High-field galvanomagnetic properties of compensated metals under electron-surface and intersheet electron-phonon scattering (tungsten) / A.N. Cherepanov, V.V. Marchenkov, V.E. Startsev, N.V. Volkenshtein, M. Glin'skii // J. Low Temp. Phys. – 1990. – V. 80. – P. 135-151.

9. Quantum oscillations, thermoelectric coefficients, and the Fermi surface of semimetallic WTe_2 / Z. Zhu, X. Lin, J. Liu, B. Fauqué, Q. Tao, C. Yang, Y. Shi, K. Behnia // Phys. Rev. Lett. – 2015. – V. 114. – P. 176601.

10. Homes, C.C. Optical properties of the perfectly compensated semimetal WTe_2 / C.C. Homes, M.N. Ali, R.J. Cava // Phys. Rev. B. – 2015. – V. 92. – P. 161109(R).

11. Extremely large magnetoresistance in the type-II Weyl semimetal $MoTe_2$ / F.C. Chen, H.Y. Lv, X. Luo, W.J. Lu, Q.L. Pei, G.T. Lin, Y.Y. Han, X.B. Zhu, W.H. Song, Y.P. Sun // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 94. – P. 235154.

12. Hall effect within the colossal magnetoresistive semimetallic state of $MoTe_2$ / Q. Zhou, D. Rhodes, Q.R. Zhang, S. Tang, R. Schonemann, L. Balicas // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 94. – P. 121101(R).

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

A1. Кинетические свойства монокристалла топологического полуметалла WTe_2 / А.Н. Перевалова, С.В. Наумов, С.М. Подгорных, В.В. Чистяков, Е.Б. Марченкова, Б.М. Фоминых, В.В. Марченков // ФММ. – 2022. – Т. 123. – С. 1131-1137.

A2. Peculiarities of the electro- and magnetotransport in semimetal $MoTe_2$ / A.N. Perevalova, S.V. Naumov, V.V. Marchenkov // Metals. – 2022. – V. 12. – P. 2089.

A3. Peculiarities of electronic transport in WTe_2 single crystal / V.V. Marchenkov, A.N. Perevalova (Domozhirova), S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang // J. Magn. Magn. Mater. – 2022. – V. 549. – P. 168985.

A4. Features of the electronic transport of topological semimetal PtSn₄ and WTe₂ single crystals / A.N. Perevalova, S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, V.V. Marchenkov // AIP Adv. – 2022. – V. 12. – P. 35225.

A5. Galvanomagnetic and optical properties of type-II Weyl semimetal candidate WTe₂ / A.N. Domozhirova, S.V. Naumov, A.A. Makhnev, E.I. Shreder, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, V.V. Marchenkov // IEEE Trans. Magn. – 2022. – V. 58. – P. 2600305.

A6. Peculiarities of the electro- and magnetoresistivity of WTe₂ and MoTe₂ single crystals before and after quenching / A.N. Domozhirova, S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, V.V. Marchenkov // AIP Adv. – 2021. – V. 11. – P. 15226.

A7. Electro- and magnetotransport properties of a WTe₂ single crystal / A.N. Domozhirova, S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, E.B. Marchenkova, V.V. Chistyakov, A.A. Semiannikova, J.C.A. Huang, V.V. Marchenkov // J. Phys. Conf. Ser. – 2021. – V. 1851. – P. 12023.

A8. Effect of quenching on the electrical and optical properties of MoTe₂ / V.V. Marchenkov, A.N. Domozhirova, R.A. Parulin, S.V. Naumov, A.A. Makhnev, E.I. Shreder, E.I. Patrakov, V.V. Chistyakov, A.D. Ivanov, J.C.A. Huang // J. Phys. Conf. Ser. – 2020. – V. 1482. – P. 12004.

A9. Electronic transport features of MoTe₂ caused by quenching / V.V. Marchenkov, A.N. Domozhirova, S.V. Naumov, S.M. Podgornykh, V.V. Chistyakov, P.S. Korenistov, J.C.A. Huang // J. Phys. Conf. Ser. – 2020. – V. 1695. – P. 12144.

A10. Electronic properties of WTe₂ and MoTe₂ single crystals / A.N. Domozhirova, A.A. Makhnev, E.I. Shreder, S.V. Naumov, A.V. Lukoyanov, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, A.A. Semiannikova, P.S. Korenistov, V.V. Marchenkov // J. Phys. Conf. Ser. – 2019. – V. 1389. – P. 12149.