

Электронные транспортные и оптические свойства монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$

В.В. Марченков^{1,2}, А.Н. Доможирова¹, А.А. Махнев¹, Е.И. Шредер¹, С.В. Наумов¹,
В.В. Чистяков¹, J.C.A. Huang³, M. Eisterer⁴

¹*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия
E-mail: domozhirova@imp.uran.ru*

²*Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, ул. Мира, 19, г. Екатеринбург, 620002, Россия*

³*National Cheng Kung University, University Road, 1, Tainan 70101, Taiwan*

⁴*TU Wien Atominstitut, Stadionallee, 2, Vienna 1020, Austria*

Статья поступила в редакцию 4 декабря 2018 г., опубликована онлайн 20 декабря 2018 г.

Синтезирован относительно чистый и совершенный монокристалл вейлевского полуметалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$, исследованы его электросопротивление, гальваномагнитные свойства при температурах от 4,2 до 80 К в полях до 10 Тл, а также оптические свойства при комнатной температуре. Показано, что температурная зависимость электросопротивления имеет металлический вид. При $T = 4,2$ К и в поле 10 Тл магнитосопротивление достигает 29%, монотонно уменьшаясь с температурой. Анализ полевых и температурных зависимостей магнитосопротивления позволяет предположить, что поверхность Ферми $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ может содержать как открытые, так и замкнутые листы. Исследования эффекта Холла и выполненные на этой основе оценки показали, что основными носителями заряда являются электроны с концентрацией $\sim 10^{20}$ см⁻³ и подвижностью ~ 151 см²/В·с при $T = 4,2$ К. С ростом температуры концентрация носителей тока возрастает, а подвижность падает. Оптические исследования показали, что монокристалл $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ не проявляет особенностей, характерных для металлов. Во всей исследованной области спектра доминирует межзонное поглощение света. Появление слабого вклада от свободных носителей отмечено при энергиях менее 0,6 эВ.

Ключевые слова: топологические вейлевские полуметаллы, диалькогениды переходных металлов, монокристаллы, электросопротивление, гальваномагнитные свойства, оптические свойства.

Введение

Поиск и изучение новых топологических материалов [1–3] — чрезвычайно важная задача современной физики конденсированного состояния. Такие материалы имеют богатый потенциал для применения в устройствах электроники и спинтроники, поскольку обладают уникальными электронными свойствами, возникающими вследствие их необычной зонной структуры. Так, в топологических изоляторах их объем представляет собой диэлектрик, а поверхность ведет себя как топологически защищенный металл с линейным законом дисперсии. При этом носители тока в «приповерхностном» слое являются спин-поляризованными, что может найти свое применение в устройствах спинтроники [4,5], а из-за большого различия в

проводимости объема и поверхности в электронном транспорте тонких пленок топологических изоляторов наблюдается «размерный эффект» [6]. В топологических полуметаллах валентная зона и зона проводимости касаются в дискретных точках (дираковские и вейлевские полуметаллы) или вдоль некоторых линий (топологические полуметаллы с линиями узлов) в зоне Бриллюэна, которые защищены топологически [7–10]. В дираковских точках трехмерных дираковских полуметаллов наблюдается линейный закон дисперсии. Если симметрия обращения времени или инверсная симметрия нарушены, дираковская точка распадается на две вейлевские точки, и дираковский полуметалл становится вейлевским полуметаллом. Квазичастицами в вейлевских полуметаллах являются «безмассовые» вейлевские фермионы, киральные частицы с ну-

левой эффективной массой и линейным законом дисперсии вблизи вейлевских точек. Бесщелевые поверхностные состояния — ферми-арки — соединяют проекции вейлевских точек противоположной киральности на поверхностную зону Бриллюэна.

Известно, что полуметаллические дихалькогениды переходных металлов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Te}_2$ проявляют свойства вейлевских полуметаллов [11–13]. В настоящее время существуют работы, посвященные теоретическим и экспериментальным исследованиям $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Te}_2$ с разными соотношениями Mo и W. Например, авторы работы [13] исследовали электрические свойства монокристаллов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Te}_2$, где $x = 0-1$. Однако в существующей научной литературе практически нет данных о низкотемпературных гальваномагнитных свойствах этих материалов. Кроме того, дополнительную полезную информацию об электронной структуре соединений $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Te}_2$ можно получить из исследования оптических свойств, данные о которых также отсутствуют. Поэтому в настоящей работе были исследованы низкотемпературные электро- и магнитосопротивление, эффект Холла и оптические свойства при комнатной температуре монокристаллов $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$.

2. Методика

Монокристаллы $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ с отношением сопротивлений $\rho_{293\text{ K}}/\rho_{4,2\text{ K}} \approx 6$ были выращены методом химического газового транспорта с использованием Wg_2 в качестве транспортного агента [14]. Молибден, вольфрам, теллур в стехиометрическом соотношении помещали в кварцевую ампулу длиной 24 см и диаметром 1,5 см. Плотность паров брома составляла $\sim 5\text{ мг/см}^3$. Ампулу откачивали до остаточного давления $\sim 10^{-4}$ атм. Затем ампулу помещали в горизонтальную трубчатую печь с линейным температурным градиентом. Горячая зона имела температуру 850 °С, холодная зона — зона роста, находилась при температуре 770 °С. Процесс выращивания монокристаллов осуществляли в течение 500 часов. Монокристаллы $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ имели игольчатый вид с размерами: длина $\sim 3-5$ мм, ширина $\sim 0,2-0,5$ мм, толщина $\sim 50-100$ мкм.

Электрические и гальваномагнитные свойства измеряли в интервале температур от 4,2 до 80 К и в магнитных полях до 10 Тл по стандартной методике, описанной в [15,16]. Оптические постоянные, показатель преломления n и коэффициент поглощения k , измеряли методом Битти при комнатной температуре с одним отражением от плоскости образцов в диапазоне спектра 0,17–5,0 эВ. Погрешность измерения оптических постоянных n и k составляла 2–4% в видимой и ультрафиолетовой (ВУФ) области и $\sim 6\%$ в средней инфракрасной (ИК) области. По значениям n и k рассчитаны действительная $\varepsilon_1(\omega)$ и мнимая $\varepsilon_2(\omega)$ части комплексной диэлектрической проницаемости, действительная

часть комплексной оптической проводимости $\sigma(\omega)$ (ω — циклическая частота световой волны) и отражательная способность

$$R(E) = \left[(n-1)^2 + k^2 \right] / \left[(n+1)^2 + k^2 \right]. \quad (1)$$

3. Экспериментальные результаты и обсуждение

На рис. 1 представлена температурная зависимость электросопротивления монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$. Видно, что величина остаточного сопротивления $\rho_{4,2\text{ K}} = 126\text{ мкОм}\cdot\text{см}$, зависимость $\rho(T)$ имеет металлический тип и монотонно возрастает с температурой по закону, близкому к квадратичному при низких температурах с выходом на линейную зависимость при $T > 40$ К. Эти результаты неплохо согласуются с данными работы [13], в которой также изучали зависимость фазовых переходов от состава и температуры в монокристаллах $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Te}_2$, где $x = 0-1$. Внешнее магнитное поле приводит к росту сопротивления, что видно на рис. 2, на котором представлена температурная зависимость магнитосопротивления

$$\Delta\rho_{xx}/\rho_0 = (\rho_{xx} - \rho_0)/\rho_0 \cdot 100\%, \quad (2)$$

где ρ_0 — электросопротивление без магнитного поля, ρ_{xx} — сопротивление в магнитном поле 10 Тл. При температуре жидкого гелия величина магнитосопротивления достигает 29%, монотонно уменьшаясь с температурой (рис. 2). Такое поведение магнитосопротивления характерно для компенсированных проводников с замкнутой поверхностью Ферми в области сильных эффективных магнитных полей либо для металлов с открытой ферми-поверхностью, когда направление открытости совпадает с направлением тока в обратном пространстве [17]. Тогда и в асимптотике полевых зависимостей магнитосопротивления ρ_{xx} должен наблюдаться вклад, квадратичный по магнитному полю. Анализ полевых зависимостей $\rho_{xx}(B)$ по-

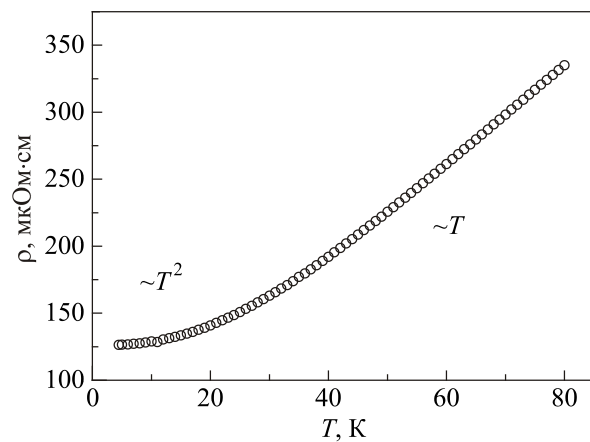


Рис. 1. Температурная зависимость электросопротивления монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ без магнитного поля.

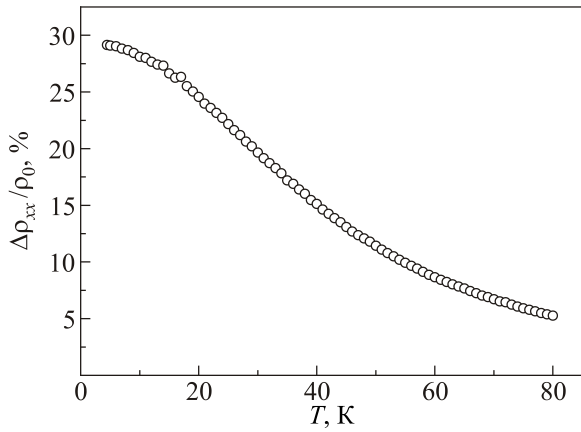


Рис. 2. Температурная зависимость магнитосопротивления монокристалла Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂ в поле 10 Тл.

казал (рис. 3), что в полях до 2 Тл магнитосопротивление ρ_{xx} изменяется по закону, близкому к квадратичному, а в полях свыше 2 Тл $\rho_{xx} \sim B^n$, с показателем степени $n \approx 1,5$, т.е. $\rho_{xx}(B)$ является комбинацией линейного и квадратичного вкладов. Другое возможное объяснение — наличие переходной области между эффективно слабыми и сильными магнитными полями [17,18]. Однако для выяснения причин такого поведения $\rho_{xx}(B)$ нужны дополнительные исследования, в частности, в более сильных магнитных полях.

Для вейлевских полуметаллов характерны высокая подвижность носителей тока с характерной для полуметаллов концентрацией порядка 10^{20} см^{-3} . Поэтому был изучен эффект Холла. Видно (рис. 4), что основным типом носителей заряда являются электроны с концентрацией $n \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и подвижностью $\mu \approx 151 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при $T = 4,2 \text{ К}$. С ростом температуры концентрация носителей тока возрастает, а подвижность падает (рис. 4).

Известно, что при определенных условиях концентрация носителей заряда может быть оценена из исследований оптических характеристик. Поэтому были изме-

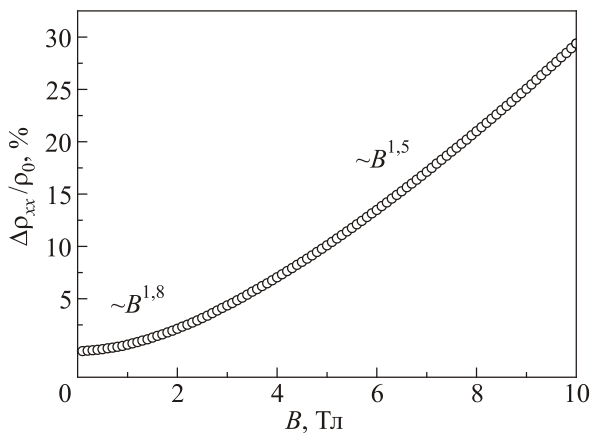


Рис. 3. Полевая зависимость магнитосопротивления Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂ при $T = 4,2 \text{ К}$.

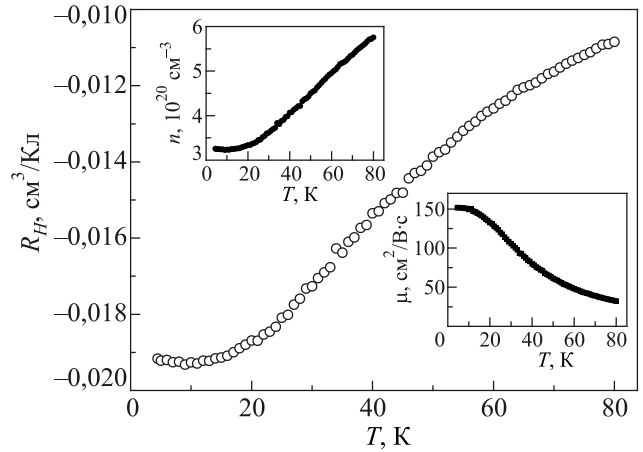


Рис. 4. Температурная зависимость коэффициента Холла монокристалла Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂. На вставках — температурные зависимости концентрации носителей заряда n и их подвижности μ .

рены оптические свойства монокристалла Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂. Результаты измерения представлены на рис. 5 и 6. Поскольку тип температурной зависимости электросопротивления является металлическим, будем анализировать оптические свойства данного соединения с точки зрения оптики металлов. В металлах и сплавах в ИК области спектра основную роль в формировании оптических свойств играет механизм внутризонного ускорения электронов полем световой волны — вклад от свободных носителей [19]. В видимой и ультрафиолетовой (ВУФ) области доминирует квантовое поглощение света с перебросом электронов из нижних энергетических состояний в свободные верхние — межзонное поглощение, дающее информацию об электронном энергетическом спектре. Графики действительной $\epsilon_1(\omega)$ и мнимой $\epsilon_2(\omega)$ частей комплексной диэлектрической проницаемости монокристалла Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂ приведены на рис. 5. Положительные значения $\epsilon_1(\omega)$ и многочисленные особенности (пики, перегибы) на кривой $\epsilon_2(\omega)$ свиде-

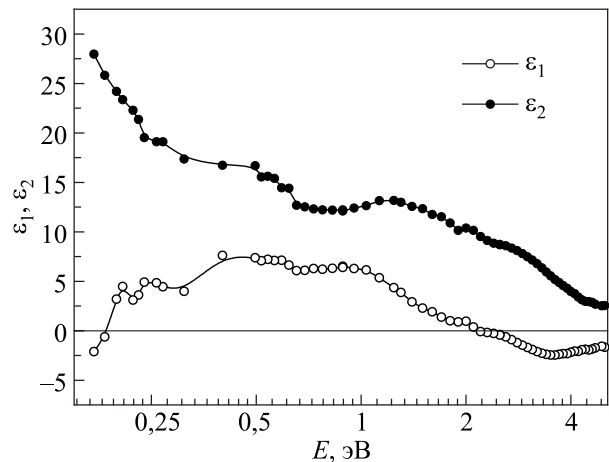


Рис. 5. Дисперсия действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 частей комплексной диэлектрической проницаемости Mo_{0,5}W_{0,5}Te₂.

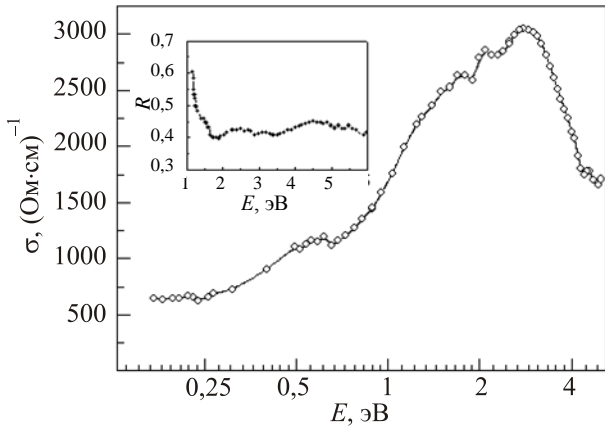


Рис. 6. Дисперсия оптической проводимости $\sigma(\omega)$ монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$. На вставке — дисперсия коэффициента отражения R .

тельствуют о преобладании межзонного механизма поглощения во всем исследованном диапазоне. Отсутствие отрицательных значений $\epsilon_1(\omega)$ в ИК области говорит об отсутствии заметного вклада от свободных носителей. Отрицательные значения ϵ_1 в ВУФ области указывают на ослабление межзонного поглощения, подобный эффект наблюдался ранее для других топологических материалов [20]. Спектр оптической проводимости $\sigma(\omega)$ монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ (рис. 6) представляет собой одну широкую полосу с центром при 2,8 эВ, сформированную межзонными переходами. Можно выделить пик при энергии 0,62 эВ. При энергиях менее 0,3 эВ на кривой оптической проводимости формируется плато, появление которого может быть связано с включением внутризонных переходов. На появление вклада от свободных носителей указывает и рост отражательной способности (вставка на рис. 6) при энергиях менее 0,6 эВ. Отсутствие заметного вклада от внутризонного поглощения не позволяет оценить концентрацию носителей тока. С другой стороны, это может свидетельствовать о малой, характерной для полуметаллов, величине концентрации, что, в свою очередь, качественно согласуется с данными, полученными из транспортных свойств.

4. Выводы

Проведенные исследования электронных транспортных и оптических свойств монокристалла $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ и полученные данные позволяют сделать следующие выводы.

1. Синтезирован относительно чистый и совершенный монокристалл $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ с отношением сопротивлений $\rho_{293\text{ K}}/\rho_{4,2\text{ K}} \approx 6$.
2. Показано, что температурная зависимость электросопротивления имеет «металлический» вид, возрастающая по квадратичному закону при низких (до 40 К) и по линейному при более высоких температурах.

3. В поле 10 Тл магнитосопротивление достигает 29% при $T = 4,2\text{ K}$, монотонно уменьшаясь с температурой. Анализ полевых и температурных зависимостей магнитосопротивления позволяет говорить о том, что поверхность Ферми соединения $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ может содержать как открытые, так и замкнутые листы. Однако для однозначных выводов нужны дополнительные экспериментальные исследования в более сильных магнитных полях.

4. Исследования эффекта Холла и выполненные на этой основе оценки показали, что основным типом носителей заряда в $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ являются электроны с концентрацией $n \sim 10^{20}\text{ см}^{-3}$ и подвижностью $\mu \approx 151\text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при $T = 4,2\text{ K}$. С ростом температуры концентрация носителей тока возрастает, а подвижность убывает.

5. Оптические исследования показали, что монокристалл $\text{Mo}_{0,5}\text{W}_{0,5}\text{Te}_2$ не проявляет особенностей, характерных для металлов. Во всей исследованной области спектра доминирует межзонное поглощение света. Появление слабого вклада от свободных носителей отмечено при энергиях менее 0,6 эВ.

Работа выполнена в рамках государственного задания России (тема «Спин», № АААА-А18-118020290104-2 и «Электрон», АААА-А18-118020190098-5) при частичной поддержке РФФИ (проект № 17-52-52008) и Правительства Российской Федерации (постановление № 211, контракт № 02.А03.21.0006).

1. H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
2. S.-Y. Xu, I. Belopolski, N. Alidoust, M. Neupane, G. Bian, C. Zhang, R. Sankar, G. Chang, Z. Yuan, C.-C. Lee, S.-M. Huang, H. Zheng, J. Ma, D.S. Sanchez, B. Wang, A. Bansil, F. Chou, P.P. Shibayev, H. Lin, S. Jia, and M.Z. Hasan, *Science* **349**, 613 (2015).
3. Z.K. Liu, L.X. Yang, Y. Sun, T. Zhang, H. Peng, H.F. Yang, C. Chen, Y. Zhang, Y.F. Guo, D. Prabhakaran, M. Schmidt, Z. Hussain, S.-K. Mo, C. Felser, B. Yan, and Y.L. Chen, *Nat. Mater.* **15**, 27 (2016).
4. Y.H. Liu, C.W. Chong, J.L. Jheng, S.Y. Huang, J.C.A. Huang, Z. Li, H. Qiu, S.M. Huang, and V.V. Marchenkov, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 012106 (2015).
5. Y.H. Liu, C.W. Chong, W.C. Chen, J.A. Huang, C.M. Cheng, K.D. Tsuei, Z.J. Li, H.L. Qiu, and V.V. Marchenkov, *Jpn. J. Appl. Phys.* **56**, 070311 (2017).
6. V.V. Marchenkov, V.V. Chistyakov, J.C.A. Huang, Y.A. Perevozchikova, A.N. Domozhirova, and M. Eisterer, *EPJ Web Confer.* **185**, 1002 (2018).
7. A.A. Burkov, M.D. Hook, and L. Balents, *Phys. Rev. B* **84**, 235126 (2011).
8. E.V. Gorbar, V.A. Miransky, I.A. Shovkovy, and P.O. Sukhachov, *Fiz. Nizk. Temp.* **44**, 635 (2018) [*Low Temp. Phys.* **44**, 487 (2018)].
9. S. Wang, B.-C. Lin, A.-Q. Wang, D.-P. Yu, and Z.-M. Liao, *Adv. Phys. X* **2**, 518 (2017).

10. C. Fang, H. Weng, X. Dai, and Z. Fang, *Chinese Phys. B* **25**, 117106 (2016).
11. I. Belopolski, D.S. Sanchez, Y. Ishida, X. Pan, P. Yu, S.-Y. Xu, G. Chang, T.-R. Chang, H. Zheng, N. Alidoust, G. Bian, M. Neupane, S.-M. Huang, C.-C. Lee, Y. Song, H. Bu, G. Wang, S. Li, G. Eda, H.-T. Jeng, T. Kondo, H. Lin, Z. Liu, F. Song, S. Shin, and M.Z. Hasan, *Nat. Commun.* **7**, 13643 (2016).
12. Л.А. Чернозатонский, А.А. Артюх, *УФН* **188**, 3 (2018).
13. Y.-Y. Lv, L. Cao, X. Li, B.-B. Zhang, K. Wang, B. Pang, L. Ma, D. Lin, S.-H. Yao, J. Zhou, Y. B. Chen, S.-T. Dong, W. Liu, M.-H. Lu, Y. Chen, and Y.-F. Chen, *Scientific Rep.* **7**, 44587 (2017).
14. F. Levy, *Nuovo Cimento* **32B**, 359 (1977).
15. V.V. Marchenkov, A.N. Cherepanov, V.E. Startsev, C. Czurda, and H.W. Weber, *J. Low Temp. Phys.* **98**, 425 (1995).
16. V.V. Marchenkov, H.W. Weber, A.N. Cherepanov, and V.E. Startsev, *J. Low Temp. Phys.* **102**, 133 (1996).
17. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория*, Наука, Москва (1971).
18. В.В. Марченков, *ФНТ* **37**, 1068 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 852 (2011)].
19. А.В. Соколов, *Оптические свойства металлов*, ГИФМЛ, Москва (1961).
20. А.А. Махнев, Л.В. Номерованная, Т.В. Кузнецова, О.Е. Терещенко, К. А. Кох, *Оптика и спектроскопия* **121**, 395 (2016).

Електронні транспортні та оптичні властивості монокристалів $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$

В.В. Марченков, А.Н.Доможірова, А.А. Махнєв,
Є.І. Шредер, С.В. Наумов, В.В. Чистяков,
J.C.A. Huang, M. Eisterer

Синтезовано відносно чистий та досконалий монокристал вейлівського напівметалу $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$, досліджено його електроопір, гальваномагнітні властивості при температурах від 4,2 до 80 К у полях до 10 Тл, а також оптичні властивості при кімнатній температурі. Показано, що температурна залежність електроопору має металевий вид. При $T = 4,2$ К та у полі 10 Тл магнітоопір досягає 29%, монотонно зменшується з температурою. Аналіз польових та температурних залежностей магнітоопору дозволяє припустити, що поверх-

ня Фермі $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ може містити як відкриті, так й замкнуті листи. Дослідження ефекту Холла та оцінки, які виконані на цій основі, показали, що основними носіями заряду є електрони з концентрацією $\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ та рухливістю $\sim 151 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ при $T = 4,2$ К. Зі збільшенням температури концентрація носіїв струму зростає, а рухливість падає. Оптичні дослідження показали, що монокристал $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ не проявляє особливостей, які характерні для металів. У всій дослідженій області спектра домінує міжзонне поглинання світла. Поява слабого внеску від вільних носіїв відзначено при енергіях менших ніж 0,6 еВ.

Ключові слова: топологічні вейлівські напівметали, діхалькогеніди перехідних металів, монокристали, електроопір, гальваномагнітні властивості, оптичні властивості.

Electronic transport and optical properties of $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ single crystal

V.V. Marchenkov, A.N. Domozhirova, A.A. Makhnev,
E.I. Shreder, S.V. Naumov, V.V. Chistyakov,
J.C.A. Huang, and M. Eisterer

A relatively pure and perfect Weill semimetal $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ single crystal was synthesized and its electrical resistivity, galvanomagnetic properties at temperatures from 4.2 to 80 K in magnetic fields up to 10 T and also optical properties at room temperature were studied. It is shown that the temperature dependence of the resistivity has a metallic type. At $T = 4.2$ K and in a field of 10 T, the magnetoresistivity reaches 29%, monotonously decreasing with temperature. Analysis of the field and temperature dependences of the magnetoresistivity suggests that the Fermi surface of the $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ can contain both open and closed sheets. Studies of the Hall effect and estimates made on this basis showed that the majority carriers are electrons with a concentration of $\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and mobility of $\sim 151 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ at $T = 4.2$ K. Concentration of current carriers increases with temperature, and mobility decreases. Optical studies showed that the $\text{Mo}_{0.5}\text{W}_{0.5}\text{Te}_2$ single crystal does not exhibit features characteristic of metals. Interband absorption of light dominates over the entire studied range of the spectrum. The appearance of a weak contribution from free carriers is noted at energies of less than 0.6 eV.

Keywords: topological Weyl semimetals, transition metal dichalcogenides, single crystals, electrical resistivity, galvanomagnetic properties, optical properties.