

1T-NbSeTe电子结构的角分辨光电子能谱

魏志远 胡勇 曾令勇 李泽宇 乔振华 罗惠霞 何俊峰

Angle-resolved photoemission spectroscopy of electronic structure of 1T-NbSeTe

Wei Zhi-Yuan Hu Yong Zeng Ling-Yong Li Ze-Yu Qiao Zhen-Hua Luo Hui-Xia He Jun-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 127901 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220458

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220458>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

铁基高温超导体电子结构的角分辨光电子能谱研究

Angle-resolved photoemission studies on iron based high temperature superconductors

物理学报. 2018, 67(20): 207413 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181768>

高温超导体电子结构和超导机理的角分辨光电子能谱研究

Angle-resolved photoemission spectroscopy studies on the electronic structure and superconductivity mechanism for high temperature superconductors

物理学报. 2021, 70(1): 017406 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201913>

拓扑半金属材料角分辨光电子能谱研究进展

Progress of ARPES study on topological semimetals

物理学报. 2019, 68(22): 227102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191544>

强三维拓扑绝缘体与磁性拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱学研究进展

Angle resolved photoemission spectroscopy studies on three dimensional strong topological insulators and magnetic topological insulators

物理学报. 2019, 68(22): 227901 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191450>

基于过渡金属硫族化合物同质结的光电探测器

Photodetectors based on homojunctions of transition metal dichalcogenides

物理学报. 2021, 70(17): 177301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210859>

过渡金属硫族化合物柔性基底体系的模型与应用

Model and applications of transition metal dichalcogenides based compliant substrate epitaxy system

物理学报. 2018, 67(21): 218102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181571>

专题: 低维材料的新奇物性

1T-NbSeTe 电子结构的角分辨光电子能谱*

魏志远¹⁾ 胡勇^{1)2)†} 曾令勇³⁾ 李泽宇¹⁾乔振华^{1)‡} 罗惠霞^{3)††} 何俊峰^{1)‡‡}

1) (中国科学技术大学物理系, 中科院强耦合量子材料物理重点实验室, 合肥 230026)

2) (瑞士保罗谢尔研究所, 菲利根 CH-5232)

3) (中山大学材料科学与工程学院, 广州 510275)

(2022 年 3 月 14 日收到; 2022 年 5 月 17 日收到修改稿)

过渡金属二硫族化物因其广泛存在超导、电荷密度波等新奇的物理现象成为了近些年来凝聚态物理研究中的一大热点, 同时这也为研究超导和电荷密度波等电子序之间的相互作用提供了典型的材料体系. 本文利用角分辨光电子能谱对 1T 结构的 NbSeTe 单晶进行系统的研究, 揭示了其电子结构. 沿高对称方向的能带测量发现, 1T-NbSeTe 布里渊区 M 点附近存在一个范霍夫奇点, 能量位于费米能以下约 250 meV 处. 对能带色散的仔细分析发现该体系中没有明显电子-玻色子(声子)耦合带来的能带扭折. 基于上述实验结果, 对过渡金属二硫族化物中电荷密度波和超导的产生以及 1T-NbSeTe 中电荷密度波和超导被抑制的可能原因进行了讨论.

关键词: 过渡金属二硫族化物, 角分辨光电子能谱, 范霍夫奇点, 电子-玻色子耦合

PACS: 79.60.-i, 71.20.-b

DOI: 10.7498/aps.71.20220458

1 引言

近些年来人们在二维材料中发现了大量新奇的物理现象, 这对凝聚态物理基础研究及潜在应用带来了极大的促进作用^[1,2]. 这其中就包括了过渡金属二硫族化物(TMDs), 过渡金属二硫族化物化学形式为 AB_2 型, 其中 A 是过渡金属元素, B 是硫族元素. TMDs 材料中除了花样繁多的元素组合外还存在不同的结构类型, 如最常见的 1T, 2H, 3R, 4Hb 等结构相, 这都使得 TMDs 中出现了包括超导电性、电荷密度波、自旋密度波、电子关联等种

类繁多的物理性质^[1-4]. 在这些材料里, 2H-NbSe₂ 中同时存在超导电性和电荷密度波, 且其超导转变温度 (7.3 K) 和电荷密度波临界温度 (33.5 K) 都相对较高. 这使得该材料成为研究电荷密度波起源以及超导与电荷密度波之间相互作用的典型材料^[5-7]. 近些年来, 人们不断在尝试通过化学元素取代、控制材料的原子层数以及施加高压等手段调控该类材料中超导以及电荷密度波等物理性质^[8-15], 从而帮助人们进一步理解超导和电荷密度波之间的相互作用机理. 比如, 研究者使用碱金属元素 Rb 对 NbSe₂ 进行插层得到 Rb_xNbSe₂, 实验结果表明随着插层的 Rb 元素含量的增大, 其超导转变温度从

* 中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: WK2030000035, WK351000008) 和中国科学技术大学启动经费资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yonghphysics@gmail.com

‡ 通信作者. E-mail: qiao@ustc.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: luohx7@mail.sysu.edu.cn

‡‡ 通信作者. E-mail: jfhe@ustc.edu.cn

7.3 K 被快速抑制到低于 4 K^[16]; 使用 Te 元素取代 Se 元素的方式制备出 $2H\text{-NbSe}_{2-x}\text{Te}_x$ 样品, 并发现其超导转变温度会随着 Te 元素含量的增大被抑制^[17]; 研究者也尝试了利用 Cu 和 S 对 NbSe_2 进行双掺杂得到 $\text{Cu}_x\text{NbSe}_{2-y}\text{S}_y$ 以及 $\text{Cu}_x\text{Nb}_{1-x}\text{Se}_{2-y}\text{S}_y$ 样品, 电输运结果表明 Cu 和 S 的掺杂会降低超导电性的临界温度^[18]. 到目前为止, 角分辨光电子能谱 (ARPES) 研究主要集中在 $2H\text{-NbSe}_2$ 这一材料体系, 而对 $1T\text{-NbSe}_2$ 的研究却相对较少, 这也与 $1T$ 相的块体单晶难以生长有直接关系. 目前对 $1T\text{-NbSe}_2$ 的研究主要是基于分子束外延生长的薄膜完成的. 研究发现单层 $1T\text{-NbSe}_2$ 中存在明显的电荷密度波相变^[19], 实验也发现单层 $1T\text{-NbSe}_2$ 表现出莫特绝缘体行为^[19,20], 这与金属性的 $2H\text{-NbSe}_2$ 形成了极大反差. 那么能否通过对 $2H\text{-NbSe}_2$ 和 $1T\text{-NbSe}_2$ 进行掺杂得到类似的单晶材料, 从而对超导、电荷密度波物理性质等进行调控呢? 这对于研究超导和电荷密度波的演化以及其相互作用有重要意义. 2019 年, 通过对 NbSe_2 进行同族 Te 元素的掺杂, 高质量的 $1T\text{-NbSeTe}$ 单晶被成功合成; 实验发现该样品表现出金属性的行为, 输运测试结果中没有发现与 $2H\text{-NbSe}_2$ 类似的电荷密度波相变^[21,22], 并且超导转变温度 (约 1.3 K) 相比于 $2H\text{-}$

NbSe_2 也被极大抑制^[22]. 为研究 $1T\text{-NbSeTe}$ 中电荷密度波和超导被抑制的原因, 进而理解 TMDs 材料中的超导电性, 本文运用角分辨光电子能谱直接测量了 $1T\text{-NbSeTe}$ 材料的电子结构. 实验结果表明 $1T\text{-NbSeTe}$ 中存在与 $2H\text{-NbSe}_2$ 类似的范霍夫奇点, 其能量在费米能级之下约 250 meV 处, 而 $2H\text{-NbSe}_2$ 中的范霍夫奇点却在费米能级附近^[23–25]; 对动量空间中不同方向能带的拟合结果表明在 $1T\text{-NbSeTe}$ 中没有发现电子-玻色子 (声子) 耦合带来的能带扭折, 而 TMDs 材料中超导产生的机理通常被 BCS 理论所描述, 被认为是由电子-声子相互作用所导致的^[7,26,27].

对 $1T\text{-NbSeTe}$ 电子结构的研究有助于进一步理解在类似的 TMDs 材料中同族元素取代以及结构变化带来的电子结构的变化, 以及各种基态之间相互作用所产生的改变. 这为理解超导及电荷密度波等电子序之间的相互作用提供了新的思考.

2 实验方法

实验所使用的 $1T\text{-NbSeTe}$ 单晶通过化学气相运输的方法生长获得, 具体生长方法在之前文献中已有详细描述^[22]. X 射线衍射 (XRD)(图 1(a)) 和

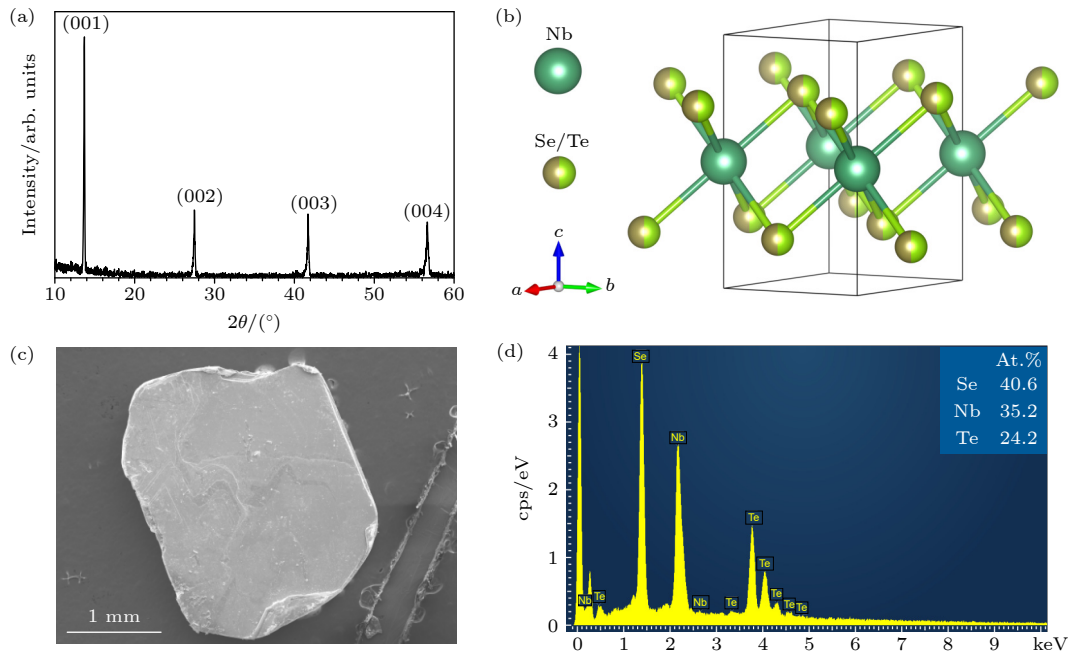


图 1 $1T\text{-NbSeTe}$ 的晶体结构表征 (a) 沿 (001) 方向的单晶 X 射线衍射结果; (b) $1T\text{-NbSeTe}$ 晶体结构示意图; (c) SEM 测试的形貌特征; (d) $1T\text{-NbSeTe}$ 的能量色散 X 射线谱和元素原子比例

Fig. 1. Characterization of the $1T\text{-NbSeTe}$ sample: (a) X-ray diffraction pattern along (001); (b) illustration of the $1T\text{-NbSeTe}$ crystal structure; (c) scanning electron microscopy image of the sample surface; (d) energy dispersive X-ray spectroscopy and the element ratio.

扫描电子显微镜 (SEM)(图 1(c)) 结果均表明生长出的单晶具有很高的质量, 利于 ARPES 实验的开展. 图 1(d) 为样品的能量色散 X 射线谱和元素原子百分比, 结果表明 Se 与 Te 并不是严格的 1:1, Se 要多于 Te, 实际材料更接近 $\text{NbSe}_{1.15}\text{Te}_{0.69}$, 同时 XRD 结果显示材料的结构为 1T. 简单起见, 本文使用 1T-NbSeTe 代表该掺杂材料. 高分辨率角分辨光电子能谱实验在美国斯坦福国家加速器实验室同步辐射光源 5-2 线站进行, 实验使用的光子能量为 90 eV, 样品在超高真空中解理并进行测量, 测量温度为 30 K, 真空度好于 3×10^{-11} Torr (1 Torr = 133.322 Pa), 实验时的能量分辨率约 13 meV. 计算使用 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 软件包中投影缀加波方法实现的[28], 并采用了广义梯度近似交换关联泛函 (PBE)[29]. 平面波截断能设为 500 eV. 根据 Monkhorst-Pack 提出的方案[30], 采用了 $15 \times 15 \times 5$ 的网格进行自洽计算. 在结构优化过程中, 所有原子都完全弛豫直到所有原子受力小于 0.01 eV/Å. 为了正确处理元素的替换, 使用虚晶近似方法及具有有序 Se 和 Te 位点的胞计算 NbSeTe 的性质. 该类 TMDs 材料

k_z 色散较弱, 简单起见, 本文使用其二维布里渊区进行表示.

3 实验结果与讨论

图 2 是 1T-NbSeTe 在不同能量处的等能面 (测量温度为 30 K). 各等能面均表现出六重对称性, 图中光电子信号强度利用色彩度进行描述, 如图 2 右下角所示. 图 2(a) 为 1T-NbSeTe 的费米面, 其费米面存在较高的电子态密度, 黑色六边形实线表示其布里渊区, 高对称点也在图中相应位置进行了标记. 费米面以下 100—500 meV 的等能面分别展示在图 2(b)—(f). 从图 2(a)—(c) 可以看出, 在 Γ 点周围存在一个强度较强的圆形结构, 随着结合能的增大这个圆形结构也在变大, 说明这个圆形结构由一个空穴型的能带构成. 为对其电子结构进行更精确的研究, 测量了该材料沿布里渊区中不同高对称方向的能带结构并进行分析.

图 3 是 1T-NbSeTe 沿布里渊区中不同高对称方向所测量得到的能带结构. 图 3(a) 和图 3(b) 分别为沿 $M-\Gamma-M$ 和 $K-M-K$ 两个高对称方向测量得

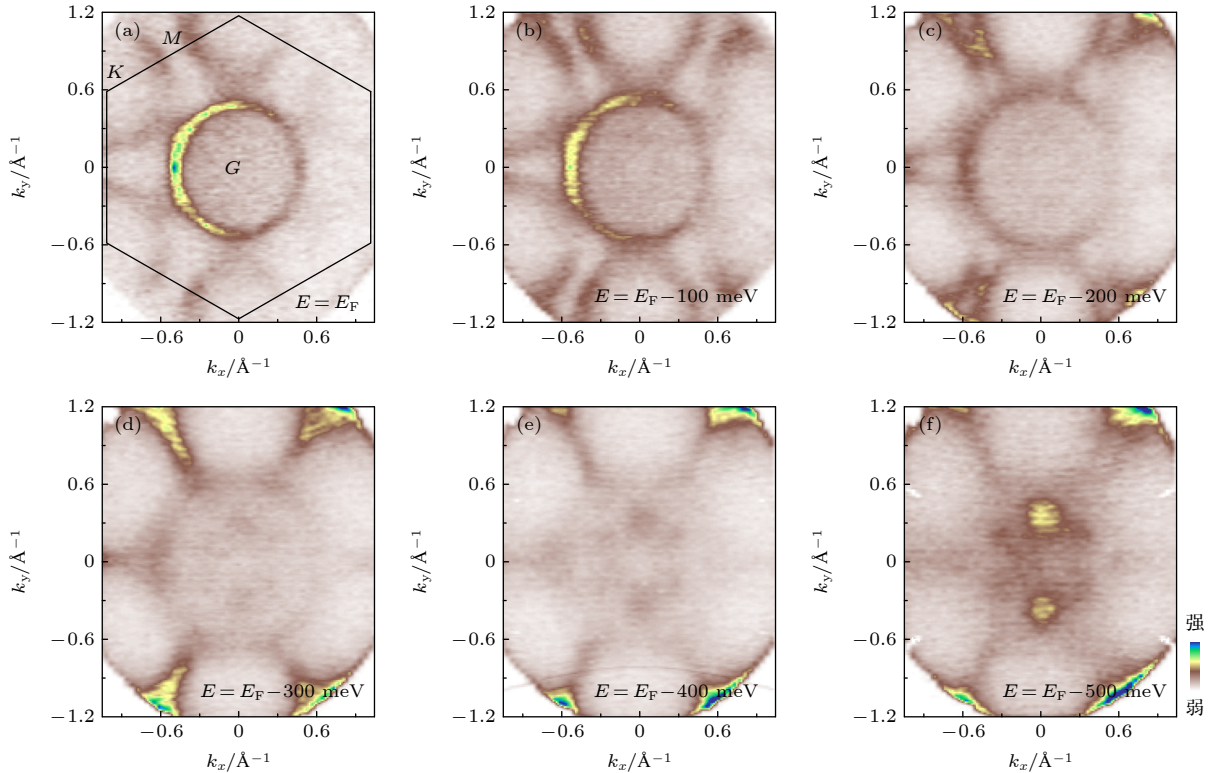


图 2 1T-NbSeTe 的等能面 (a) 费米面; (b)—(f) 分别为费米面以下 100, 200, 300, 400, 500 meV 处的等能面

Fig. 2. Constant energy maps at different binding energies: (a) Fermi surface; (b)–(f) constant energy maps at 100, 200, 300, 400, 500 meV below the Fermi level, respectively.

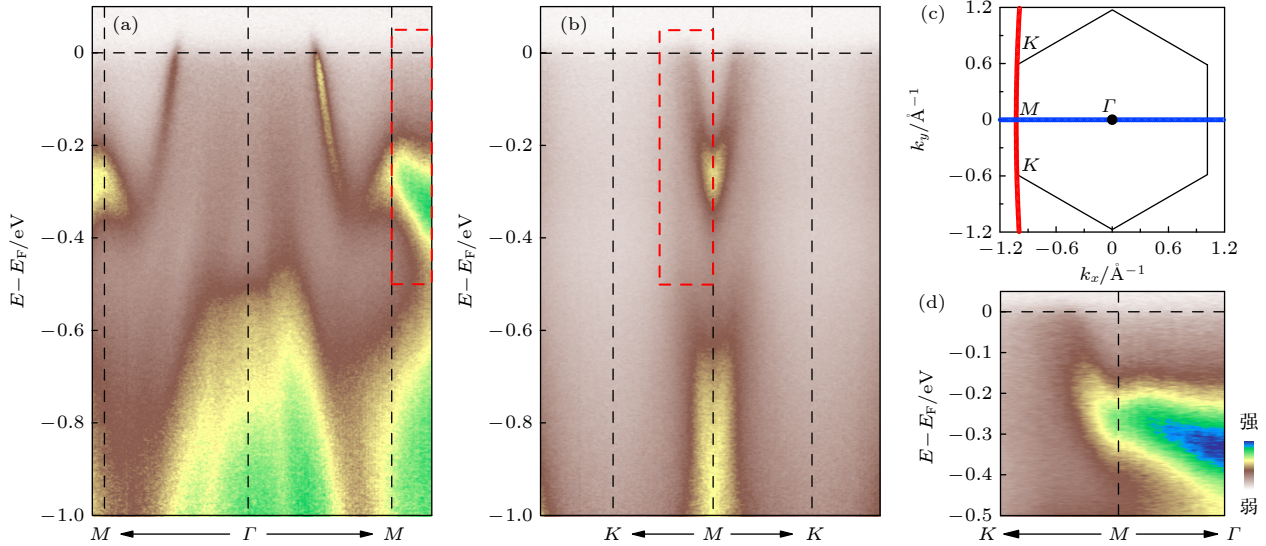


图3 1T-NbSeTe 能带结构中的范霍夫奇点 (a) 沿 $M-\Gamma-M$ 方向的能带结构; (b) 沿 $K-M-K$ 方向的能带结构; (c) 布里渊区和高对称方向; (d) 沿 $K-M-\Gamma$ 方向的能带结构

Fig. 3. van Hove singularity in the band structure of 1T-NbSeTe: (a) Band structure along the $M-\Gamma-M$ direction; (b) band structure along the $K-M-K$ direction; (c) Brillouin zone and the high symmetry directions; (d) band structure along the $K-M-\Gamma$ direction.

到的能带结构, 其测量方向分别如图 3(c) 中蓝色和红色线所示. 发现沿着 $M-\Gamma-M$ 方向, 在 M 点附近的能带结构表现为开口向下的空穴型能带, 带顶在 M 点; 如果沿着 $K-M-K$ 方向, 在 M 点附近的能带结构却表现为开口向上的电子型能带, 带底在 M 点. 这意味着 M 点可能存在一个范霍夫奇点. 为更清楚理解该电子结构, 将图 3(a) 和图 3(b) 中红色虚线方框内的能带结构拼接在一起得到图 3(d) 中沿 $K-M-\Gamma$ 方向的能带结构. 如图中红色曲线所示, 可以看出在 M 点费米能级以下约 250 meV 处存在一个明显的范霍夫奇点.

多体相互作用在材料中通常扮演着重要的角色, 为了研究该材料中的多体相互作用, 对该材料的能带色散进行了仔细分析, 重点探寻是否存在电子-玻色子 (声子) 耦合的迹象. 通常, 电子-玻色子耦合在能带结构中表现为在玻色子对应能量处的能带扭折, 这在多种材料的电子结构测量中都得到很好的验证^[4,31]. 通过对不同能量处的动量分布曲线 (MDCs) 进行拟合, 并得到材料中的电子色散关系, 从而判断是否存在能带扭折, 再结合材料中存在的声子模及其能量来判断是否存在电子-玻色子 (声子) 耦合^[4,31]. 因此, 基于测量得到的沿不同高对称方向的能带结构 (图 4(a), (c), (e)), 对费米能附近的主要能带进行了拟合, 并得到相应的色散关系. 图 4(a), (c), (e) 中蓝色虚线方框表示拟合的能

带区域, 最终拟合得到的色散关系分别如图 4(b), (d), (f) 所示. 为了判断是否存在能带扭折, 对能量范围为 E_F 到 $E_F - 200$ meV 内的色散关系进行线性拟合, 结果如图中黑线所示. 可以看到, 由 MDCs 拟合得到的色散关系在上述能量范围内可以很好地被线性拟合所描述, 没有发现类似 2H-NbSe₂ 中的明显能带扭折现象.

为了更直观理解 1T-NbSeTe 的电子结构, 尝试通过密度泛函理论 (DFT) 计算进一步理解 1T-NbSeTe 的电子结构, 并将其与实验结果 (图 4(g)) 进行比较. 图 4(h) 为 DFT 计算沿图 4(g) 中相同高对称方向路径得到的能带色散关系. 整体而言, 计算结果与实验结果存在一定的相似性. 在 $K-\Gamma-K$ 方向, 计算结果中 Γ 点的空穴型能带与实验结果比较符合; 但是在 Γ 与 K 中点位置附近的电子型能带结构上, 计算与实验结果有所差异. 在 $K-M-K$ 方向, 计算和实验结果都表现为电子型能带, 但其带底能量位置有所差异. 此外, 实验在 $K-M-\Gamma$ 方向发现在 M 点费米能以下约 250 meV 处存在一个范霍夫奇点, 而计算结果没有在该处发现范霍夫奇点.

接下来对实验结果的物理内涵及意义展开讨论. 首先, 通过对比 1T-NbSeTe 和 2H-NbSe₂ 的电子结构, 发现它们具有很多的相似性. 例如: 在费米面 M 点和 K 点周围均存在圆形费米口袋的结

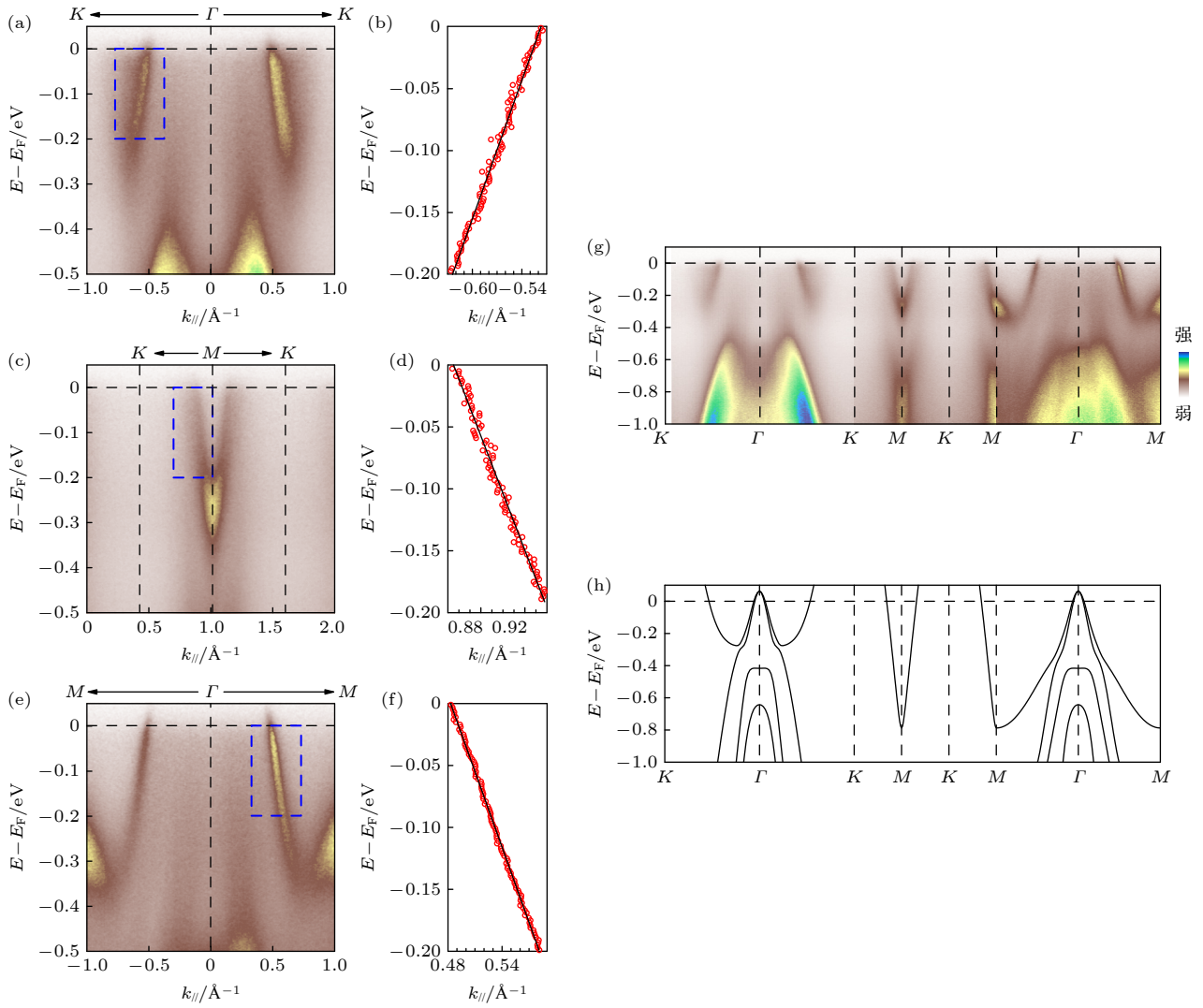


图4 不同高对称方向的能带色散 (a) K - Γ - K 方向的能带结构; (b) 在靠近费米能的低能区域 ((a) 中蓝色虚线方框) 通过 MDC 拟合提取的电子色散; (c), (d) 与 (a), (b) 类似, 但沿着 K - M - K 方向; (e), (f) 与 (a), (b) 类似, 但沿着 M - Γ - M 方向; (g) 和 (h) 分别为高对称方向路径的实验结果与 DFT 计算结果

Fig. 4. Band dispersion along different high symmetry directions: (a) Band structure along the K - Γ - K direction; (b) extracted band dispersion by fitting MDCs in the low energy region near the Fermi level ((marked by the blue dashed box in (a)); (c), (d), same as (a), (b), but along the K - M - K direction; (e), (f), same as (a), (b), but along the M - Γ - M direction; (g) and (h) are the experimental results and DFT calculation results along the high symmetry directions, respectively.

构. 在 $2H$ -NbSe₂ 中, 每个原胞中包含两个原子层, 也就是两层 A-B-A 结构; 因此, 其电子结构会表现出双层劈裂现象^[7,32], 在费米面上就会表现出两套能带. 比如: $2H$ -NbSe₂ 中, 费米面在 Γ 点周围就存在两个圆形结构. 而在对 $1T$ -NbSeTe 的测量中只存在一套, 比如图 2(a) 中显示的费米面在 Γ 点周围就只存在一个圆形结构. 这也说明该 NbSeTe 样品的原胞为一层 A-B-A 结构, 符合 $1T$ 结构的特征. 另外, 其不同等能面中表现出的六重对称性也与图 1(b) 所示的晶体结构的对称性是一致的^[22]. 图 2(a) 中 $1T$ -NbSeTe 在费米能处有较高的电子

态密度也直接说明了该材料具有金属性, 这与电输运的测试结果也是一致的^[22].

对比 $1T$ -NbSeTe 和 $2H$ -NbSe₂ 中的范霍夫奇点, 发现以前的 ARPES 结果表明 $2H$ -NbSe₂ 在费米能级以下约 35 meV 处存在范霍夫奇点 (鞍点)^[23-25], 而 $1T$ -NbSeTe 中的范霍夫奇点却在费米能级以下约 250 meV 处. 由于范霍夫奇点具有较高的电子态密度, 有报道指出, 费米能附近的范霍夫奇点可能会对电荷密度波起到一定程度的促进^[23,33]; 而当范霍夫奇点远离费米能级时, 它对电荷密度波几乎没有影响. 之前报道指出, 在 $2H$ -NbSe₂ 中输运测

量发现电荷密度波转变温度为 33.5 K, 且 ARPES 测量发现其范霍夫奇点在电荷密度波相变时发生了明显变化^[23]. 在 1*T*-NbSeTe 中, 输运测量没有发现明显的电荷密度波相变的迹象^[22], 而测量发现范霍夫奇点位于费米能级以下约 250 meV 处. 因此, 1*T*-NbSeTe 中范霍夫奇点远离费米能级与电荷密度波的减弱或消失可能存在一定的联系.

TMDs 材料中超导的产生通常被认为是由于基于 BCS 理论电子-声子相互作用所引起的. 分析图 4 发现, 在超导转变温度约为 1.3 K 的 1*T*-NbSeTe 中不同动量区间均没有发现明显的由电子-玻色子(声子)耦合导致的能带扭折现象. 而之前对超导转变温度约为 7.3 K 的 2*H*-NbSe₂ 的 ARPES 实验研究结果却在动量空间中发现了明显的与电子-玻色子(声子)耦合相关的能带扭折现象^[32,34]. 如果认为在 2*H*-NbSe₂ 中的能带扭折对应的电子-玻色子(声子)耦合对该体系的超导负责, 那么在 1*T*-NbSeTe 中没有出现明显的能带扭折, 意味着其中的电子-玻色子(声子)耦合非常弱, 这也跟该材料中相对较低的超导转变温度(约 1.3 K)是一致的.

最后, 讨论 ARPES 实验结果(图 4(g))与 DFT 计算(图 4(h))的能带结构之间差异的可能原因. 首先, 考虑是否因为样品有杂相引起. 如图 1(a)所示, 单晶 XRD 结果仅存在 1*T* 结构相关的 4 个衍射峰, 这说明晶体结晶较好且不存在明显的杂相, 即使杂相存在也是非常微弱的, 这不太可能导致 ARPES 实验结果与 DFT 计算结果之间的差异. 其次注意到, 在广泛研究的 2*H*-NbSe₂ 中, DFT 计算结果也与实验得到的能带结构有较大差异. 因此, 考虑是否存在一定的电子关联效应, 导致 DFT 结果与实验之间的差异. 之前的报道指出, 在 1*T* 结构的 TMD 材料, 如 1*T*-NbSe₂, 1*T*-TaS₂ 和 1*T*-TaSe₂ 中, 均存在电子关联效应^[19,20,35-37]. 对 1*T*-NbSe₂ 使用 Te 元素进行同族元素掺杂得到的 1*T*-NbSeTe 也可能出现电子关联效应, 从而使得 DFT 计算结果不能定量描述材料能带结构. 当然, 该体系中电子关联效应及其强度还需要今后更进一步的研究.

4 结 论

通过对 1*T*-NbSeTe 进行角分辨光电子能谱研

究, 本文首次揭示了该材料体系的电子能带结构. 在动量空间 *M* 点, 费米能级以下约 250 meV 处, 发现存在一个范霍夫奇点并具有较强的电子态密度. 相比于 2*H*-NbSe₂ 中的范霍夫奇点, 1*T*-NbSeTe 中存在的范霍夫奇点离费米能很远, 很难对材料的电荷密度波或其他输运性质产生影响. 在该材料中多体相互作用的探索方面, 对 1*T*-NbSeTe 的能带色散关系进行了线性拟合, 没有发现与电子-玻色子(声子)耦合对应的明显能带扭折特征, 显示出 1*T*-NbSeTe 中电子-玻色子耦合较弱, 这也与 2*H*-NbSe₂ 中的结果不同^[32,34]. 在 2*H*-NbSe₂ 等 TMDs 材料中, 一般认为材料中较强的电子-玻色子(声子)耦合会对材料的超导电性起到促进作用. 本文研究结果为 1*T*-NbSeTe 中较低的超导转变温度提供了可能的解释. 另一方面, 在 1*T*-NbSeTe 的输运实验中, 没有发现电荷密度波的证据^[22]. 如果认为 TMDs 材料中的电荷密度波与电子-玻色子(声子)耦合密切相关, 那么上述输运结果也与电子结构测量的结果一致. 从这个角度讲, 在该材料体系中, 超导与电荷密度波并不是简单的竞争关系. 我们注意到, 在 1*T*-NbSe₂ 薄膜中存在明显的电荷密度波态^[19]. 那么从 1*T*-NbSe₂ 到 1*T*-NbSeTe, 电荷密度波是如何随着 Te 元素掺杂演变值得进一步研究. 这对于理解 TMDs 中电荷密度波的起源有着积极作用.

感谢 SSRL 同步辐射光源的路东辉博士和 Hashimoto Makoto 博士对实验的帮助与支持. 感谢 SSRL 同步辐射光源对实验的支持, SSRL 同步辐射光源得到美国能源部、科学办公室、基础能源科学办公室的支持(合同编号为 DE-AC02-76SF00515).

参考文献

- [1] Manzeli S, Ovchinnikov D, Pasquier D, Yazyev O V, Kis A 2017 *Nat. Rev. Mater.* **2** 17033
- [2] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [3] Cattelan M, Fox N A 2018 *Nanomaterials* **8** 284
- [4] Sobota J A, He Y, Shen Z X 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 025006
- [5] Moncton D E, Axe J D, DiSalvo F J 1975 *Phys. Rev. Lett.* **34** 734
- [6] Wilson J A, Di Salvo F J, Mahajan S 1975 *Adv. Phys.* **24** 117
- [7] Yokoya T, Kiss T, Chainani A, Shin S, Nohara M, Takagi H 2001 *Science* **294** 2518
- [8] Wagner K E, Morosan E, Hor Y S, Tao J, Zhu Y, Sanders T, McQueen T M, Zandbergen H W, Williams A J, West D V,

- Cava R J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 104520
- [9] Navarro-Moratalla E, Island J O, Manas-Valero S, Pinilla-Cienfuegos E, Castellanos-Gomez A, Quereda J, Rubio-Bollinger G, Chirrolli L, Silva-Guillen J A, Agrait N, Steele G A, Guinea F, van der Zant H S J, Coronado E 2016 *Nat. Commun.* **7** 11043
- [10] Xi X X, Wang Z F, Zhao W W, Park J H, Law K T, Berger H, Forro L, Shan J, Mak K F 2016 *Nat. Phys.* **12** 139
- [11] Xi X, Berger H, Forro L, Shan J, Mak K F 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 106801
- [12] Wang H, Huang X W, Lin J H, Cui J, Chen Y, Zhu C, Liu F C, Zeng Q S, Zhou J D, Yu P, Wang X W, He H Y, Tsang S H, Gao W B, Suenaga K, Ma F C, Yang C L, Lu L, Yu T, Teo E H T, Liu G T, Liu Z 2017 *Nat. Commun.* **8** 394
- [13] Ugeda M M, Bradley A J, Zhang Y, Onishi S, Chen Y, Ruan W, Ojeda-Aristizabal C, Ryu H, Edmonds M T, Tsai H Z, Riss A, Mo S K, Lee D H, Zettl A, Hussain Z, Shen Z X, Crommie M F 2016 *Nat. Phys.* **12** 92
- [14] Ye J T, Zhang Y J, Akashi R, Bahramy M S, Arita R, Iwasa Y 2012 *Science* **338** 1193
- [15] Novello A M, Spera M, Scarfato A, Ubaldini A, Giannini E, Bowler D, Renner C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 017002
- [16] Fan X, Chen H X, Zhao L L, Jin S F, Wang G 2019 *Solid State Commun.* **297** 6
- [17] Wang H T, Li L J, Ye D S, Cheng X H, Xu Z A 2007 *Chin. Phys.* **16** 2471
- [18] Yan D, Lin Y S, Wang G H, Zhu Z, Wang S, Shi L, He Y, Li M R, Zheng H, Ma J, Jia J F, Wang Y H, Luo H X 2019 *Supercond. Sci. Technol.* **32** 085008
- [19] Nakata Y, Sugawara K, Shimizu R, Okada Y, Han P, Hitosugi T, Ueno K, Sato T, Takahashi T 2016 *NPG Asia Mater.* **8** e321
- [20] Kamil E, Berges J, Schönhoff G, Rösner M, Schütler M, Sangiovanni G, Wehling T O 2018 *J. Phys. Condens. Mat.* **30** 325601
- [21] Naik I, Rastogi A K 2011 *Pramana* **76** 957
- [22] Yan D, Wang S, Lin Y S, Wang G H, Zeng Y, Boubeche M, He Y, Ma J, Wang Y H, Yao D X, Luo H X 2019 *J. Phys. Condens. Mat.* **32** 025702
- [23] Kiss T, Yokoya T, Chainani A, Shin S, Hanaguri T, Nohara M, Takagi H 2007 *Nat. Phys.* **3** 720
- [24] Tonjes W C, Greanya V A, Liu R, Olson C G, Molinie P 2001 *Phys. Rev. B* **63** 235101
- [25] Straub T, Finteis T, Claessen R, Steiner P, Hufner S, Blaha P, Oglesby C S, Bucher E 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4504
- [26] Neto A C 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4382
- [27] Qiu D, Gong C, Wang S, Zhang M, Yang C, Wang X, Xiong J 2021 *Adv. Mater.* **33** 2006124
- [28] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [29] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [30] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [31] Damascelli A, Hussain Z, Shen Z X 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 473
- [32] Rahn D J, Hellmann S, Kallaene M, Sohr C, Kim T K, Kipp L, Rossnagel K 2012 *Phys. Rev. B* **85** 224532
- [33] Rice T M, Scott G K 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 120
- [34] Valla T, Fedorov A V, Johnson P D, Glans P A, McGuinness C, Smith K E, Andrei E Y, Berger H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 086401
- [35] Kim J-J, Yamaguchi W, Hasegawa T, Kitazawa K 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2103
- [36] Law K, Lee P A 2017 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **114** 6996
- [37] Chen Y, Ruan W, Wu M, Tang S, Ryu H, Tsai H Z, Lee R L, Kahn S, Liou F, Jia C 2020 *Nat. Phys.* **16** 218

SPECIAL TOPIC—Novel properties of low-dimensional materials

Angle-resolved photoemission spectroscopy of electronic structure of 1T-NbSeTe*

Wei Zhi-Yuan¹⁾ Hu Yong^{1)2)†} Zeng Ling-Yong³⁾ Li Ze-Yu¹⁾
 Qiao Zhen-Hua^{1)‡} Luo Hui-Xia^{3)††} He Jun-Feng^{1)‡‡}

1) (*Department of Physics & CAS Key Laboratory of Strongly-coupled Quantum Matter Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

2) (*Paul Scherrer Institute, Villigen CH-5232*)

3) (*School of Materials Science and Engineering, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China*)

(Received 14 March 2022; revised manuscript received 17 May 2022)

Abstract

Transition metal dichalcogenides (TMDs) have attracted a lot of interest in condensed matter physics research due to the existence of multiple novel physical phenomena, including superconductivity and charge density wave order, and also TMDs provide a unique window for studying the interactions between different ground states. In this work, the electronic structure of 1T-NbSeTe is systematically examined by angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) for the first time. A van Hove singularity (VHS) is identified at the M point, with binding energy of 250 meV below the Fermi level. Careful analysis is carried out to examine the band dispersions along different high symmetry directions and the possible many-body effect. However, the dispersion kink—a characteristic feature of electron-boson coupling is not obvious in this system. In TMD materials, the van Hove singularity near the Fermi level and the electron-boson (phonon) coupling are suggested to play an important role in forming charge density wave (CDW) and superconductivity, respectively. In this sense, our experimental results may provide a direct explanation for the weakened CDW and relatively low superconducting transition temperature in 1T-NbSeTe. These results may also provide an insight into the charge-density-wave orders in the relevant material systems.

Keywords: transition metal dichalcogenides, angle-resolved photoemission spectroscopy, van Hove singularity, electron-boson coupling

PACS: 79.60.-i, 71.20.-b

DOI: 10.7498/aps.71.20220458

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant Nos.WK2030000035, WK3510000008) and the USTC Start-up Fund.

† Corresponding author. E-mail: yonghphysics@gmail.com

‡ Corresponding author. E-mail: qiao@ustc.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: luohx7@mail.sysu.edu.cn

‡‡ Corresponding author. E-mail: jfhe@ustc.edu.cn