

## 物理所观测到呼吸笼目半导体中的拓扑平带

晶格结构、拓扑和磁性之间的相互作用会赋予材料丰富的物性，一个典型的案例是二维笼目（kagome）晶格。若采取简单的紧束缚模型计算，只考虑最近邻格点间的电子跳跃，可得到其特征性的能带结构——狄拉克锥与拓扑平带并存。该平带起源于kagome晶格中近邻格点间电子跃迁波函数的相位相消，并且受镜面对称性的保护。由于平带中存在大量能量简并的电子，因此电子关联效应非常强，可诱导出多种奇特的物态，如关联绝缘态、超导、分数量子霍尔效应等。近年来，人们利用角分辨光电子能谱（ARPES）技术，在一系列kagome金属中观测到了拓扑平带和狄拉克电子态，例如Fe<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>、FeSn、CoSn、YMn<sub>6</sub>Sn<sub>6</sub>。然而，这些材料均为金属，费米能级附近不存在能隙，因此无法应用于逻辑和光电器件。另一方面，真正意义的kagome晶格为单层材料，而此前发现的kagome材料均为体材料，其层间作用较强，难以通过剥离方式获得单层或少层。分子束外延法的生长条件较为苛刻，比如仅适用于特定的衬底、单畴的面积较小（通常只有几十纳米）等。因此，实现具有大能隙并且可剥离的kagome材料具有重要的理论和实用价值。

近日，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究人员首次实现了具有半导体特性、可剥离到单层的kagome材料Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>，并且利用ARPES观测到了拓扑平带。

Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>中的Nb原子形成的是呼吸笼目（breathing kagome）晶格，相较于传统的kagome晶格，这种晶格不具有空间反演对称性，打开了狄拉克锥的能隙，形成半导体性的基态。另一方面，呼吸笼目晶格仍然保留镜面对称性，受它的保护拓扑平带仍然存在（图1）。通过改变光子能量和偏振依赖的ARPES测量，研究人员观测到一条跨越整个布里渊区的平带（图2），与计算结果吻合。进一步的理论计算表明该能带具有拓扑性。

由于Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>单晶层间相互作用很弱，可以很容易地被剥离至少层和单层（图3）。实验通过差分透射谱的测量，证实了该材料具有约1.1

eV的光学带隙，且单层

样品在空气中非常稳定（图3）。此外，第一

性原理计算表明，单层Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>具有铁磁性和高阶拓扑性。这些奇特的物性有待进一步的理论和实验研究。

相关成果以Observation of topological flat bands in the kagome semiconductor Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>为题发表在Nano Letters上。该工作得到了国家自然科学基金委、科学技术部、北京市自然科学基金、中科院国际合作项目以及中科院战略性先导科技专项等项目的资助。

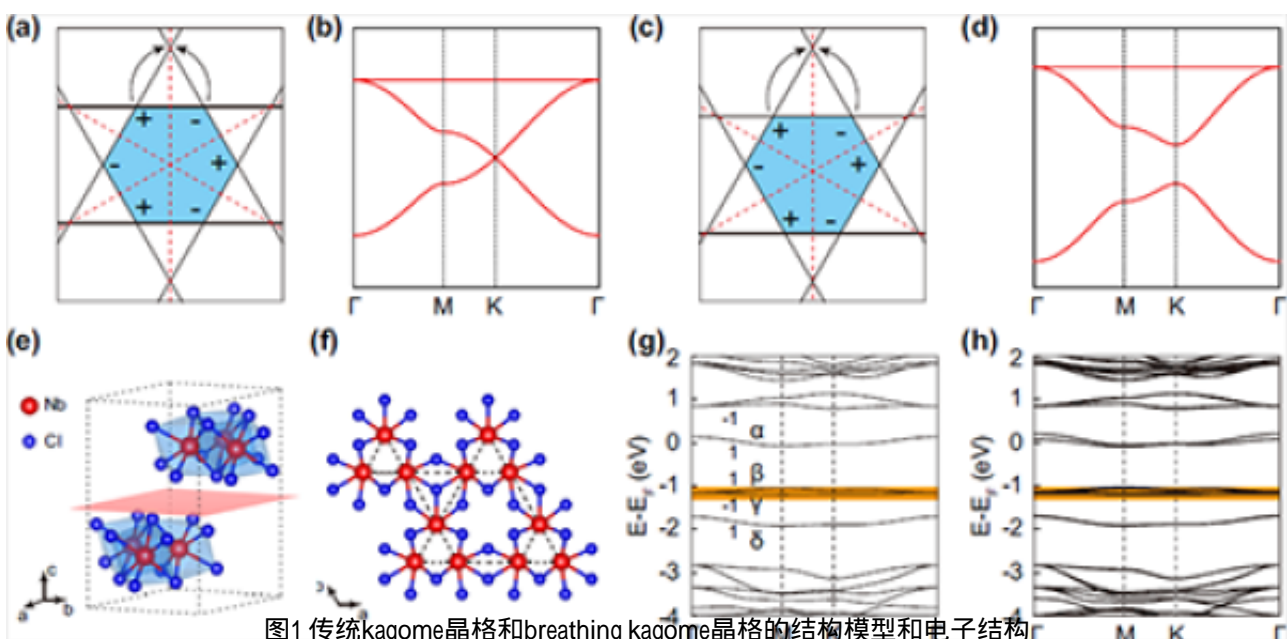


图1 传统kagome晶格和breathing kagome晶格的结构模型和电子结构

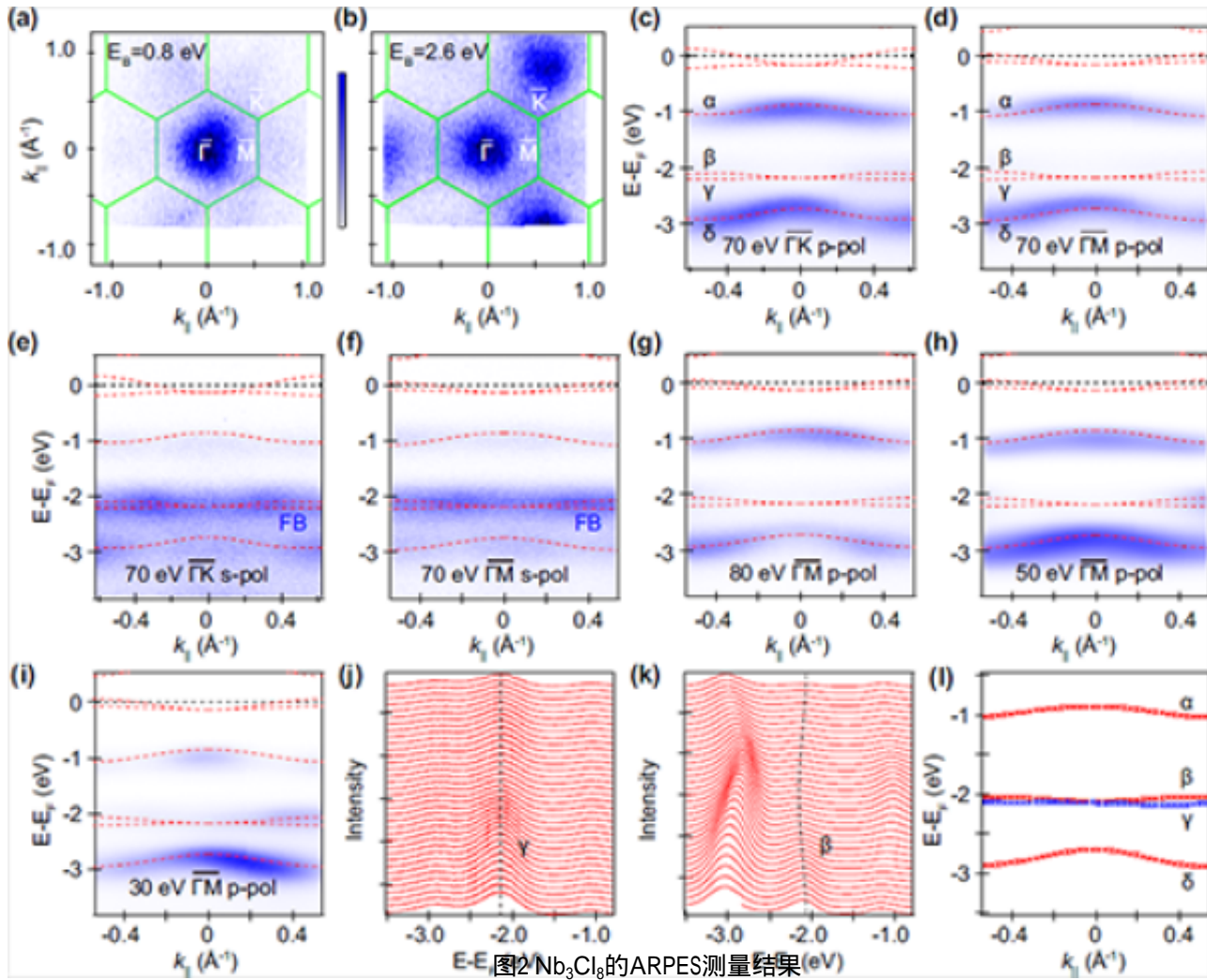


图2  $\text{Nb}_3\text{Cl}_8$  的ARPES测量结果

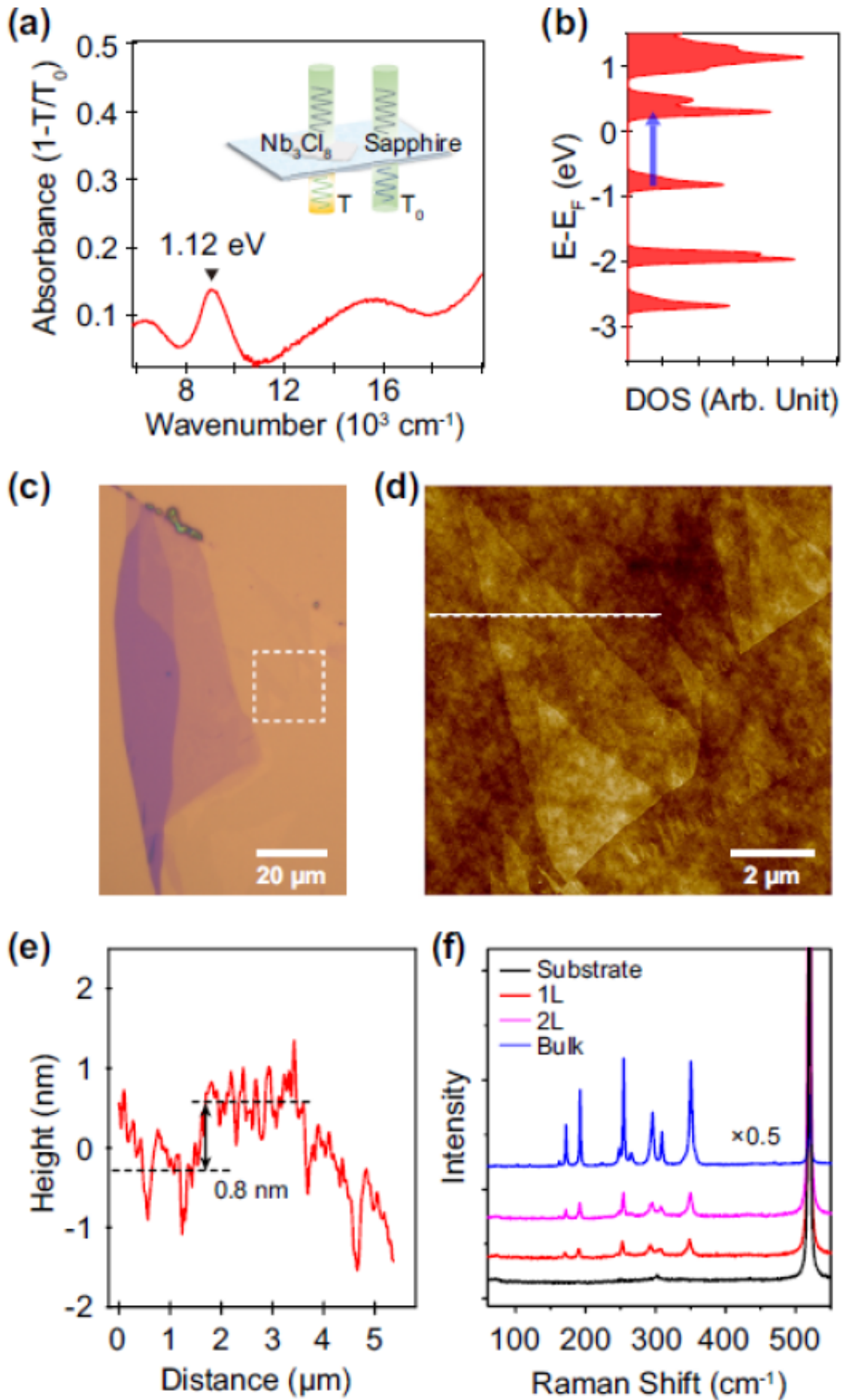


图3 Nb<sub>3</sub>Cl<sub>8</sub>的机械剥离及光学吸收

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/182715.html>