



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展, 率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

物理所提出新型拓扑Nodal-Net半金属结构

文章来源: 物理研究所 发布时间: 2018-01-17 【字号: 小 中 大】

我要分享

碳碳键的多样性(单键、双键、三键、苯基 π 键以及各种组合键)赋予了碳结构的多样性和丰富的物性。烷基碳碳单键构成三维金刚石结构, 形成透明的具有一个较大带隙(5.47eV)的绝缘体; 苯基大 π 键构成稳定的二维石墨烯, 呈现半金属特性, 能带在布里渊区的K点交叉形成一个狄拉克点; 炔基碳碳三键形成一维碳原子链, 一个具有2.56eV带隙的半导体。近年来, 研究人员致力于三维网络碳晶体结构的研究, 基于乙烯型碳碳双键($C=C<$)结合, 先后提出由三折(cR6)、四折(cT8)和六折(Rh6)螺旋碳原子链重构而成的 $all-sp^2$ 三维碳晶体结构模型以及BC12、SC48等 $all-sp^3$ 三维碳结构。伴随着结构与物性的深入研究, 研究发现由 $all-sp^2$ 或 sp^2-sp^3 混合键构成的二维碳结构能够呈现拓扑Node-Line半金属特性。2015年, 中国科学院物理研究所翁红明等发现, 由于受到时间反演和空间反演的保护, 一类 $all-sp^2$ 的Mackay-Terrones碳晶体结构呈现Node-Line半金属特性; 2016年, 物理所王建涛等提出一个新的由苯环直链构成的 $all-sp^2$ 碳结构BC0-C16发现其呈现Node-Line半金属特性, 费米能级近旁的能带交叉点在动量空间形成一个连续闭合的圆环(A-型 Nodal Line); 湘潭大学陈元平等发现在具有 sp^2-sp^3 混合键的碳结构中(IGN-C₆)有贯穿整个布里渊区的B-型 Nodal Line。所有这些Node-Line投影到特定的表面上形成一个受体态拓扑保护的表面平带, 并局限在Nodal Line的表面投影区域内部或外部, 也被称为鼓膜态或鼓面态。

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员王建涛、博士聂思敏、研究员翁红明, 日本东北大学教授川添良幸, 美国内华达大学教授陈长风合作, 通过第一性原理计算, 提出一个新的三维碳晶体结构【图1(a)】。该结构具有体心正方对称性(I4/mmm), 单位晶胞包含40个碳原子, 因此简称为BCT-C₄₀。它可以看做是一维(5,5)碳纳米管的三维重构形式, 但能量上比(5,5)碳纳米管、fcc-C₆₀、IGN-C₆以及BCT-C₄等结构更稳定[图1(b)]。这个新结构由 sp^2 、 sp^3 键混合而成, 其中具有 sp^2 键的苯环构成石墨烯片, 每个石墨烯片由具有 sp^3 键的炔基碳链单键结合在一起, 形成体心正方结构。因此, BCT-C₄₀碳结构也可以视为是由石墨烯片通过炔基碳单键结合而成的“石墨烯的三维版本”或“三维石墨烯”。

详细的能带计算表明, 这个新的三维石墨烯碳结构呈现nodal-net半金属特性【图2(a-c)】。费米能级近旁的能带交叉点在动量空间的多个高对称面上形成横穿整个布里渊区的B-型Node-Line【图2(c)】, 进而这些Node-Line在高对称轴上相互交接, 形成两个中心反演对称的近似二维的nodal-net【图2(c)】。更有趣的是, 这些nodal-net投影到材料的(100)表面上时, 在费米能级上下呈现出一对受体态拓扑保护的鼓膜状表面平带【红色曲线, 图2(d, e)】。多于一个表面平带的出现为多带关联调控提供了很好的平台。当表面悬挂键用H原子钝化【图2(c)】时表面平带在两个nodal-net投影的外侧, 当未用H原子钝化【图2(d)】时表面平带在两个nodal-net投影的内侧(G点周围)。这些新的能带特征赋予碳新的物性, 拓展了对拓扑Nodal-Line半金属的认识, 并将激发有关实验工作的开展。相关研究成果发表在Physical Review Letters上。

研究工作得到了国家自然科学基金委、中科院战略性先导科技专项(B)和科技部国家重点研发项目的支持。

论文链接

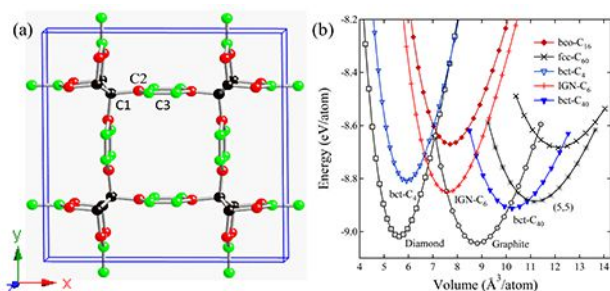


图1. (a) 体心正方BCT-C₄₀石墨烯晶体结构(I4/mmm)。单位晶胞含40个碳原子, 由 sp^2-sp^3 混合键组成。其中, 具有 sp^2 键的碳原子构成石墨烯片, 每个石墨烯片由具有 sp^3 键的炔基碳链单键结合, 形成体心正方结构。

热点新闻

中国科大建校60周年纪念大会举行

中科院召开党建工作推进会
驻中科院纪检监察组发送中秋国庆期间廉...
中科院党组学习贯彻习近平总书记在全国...
国科大举行2018级新生开学典礼
中科院党组学习研讨药物研发和集成电路...

视频推荐

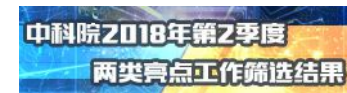


【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【新闻直播间】中国载人航天工程应用成果发布

专题推荐



晶格常数 $a=12.901\text{\AA}$, $c=2.460\text{\AA}$, 占据 $8h(0.7257, 0.7257, 0.5)-C1$, $16l(0.7370, 0.6096, 0.5)-C2$ 和 $16l(0.7615, 0.0558, 0.5)-C3$ 晶格位置。(b) 计算得到的各种碳结构的能量-体积曲线。

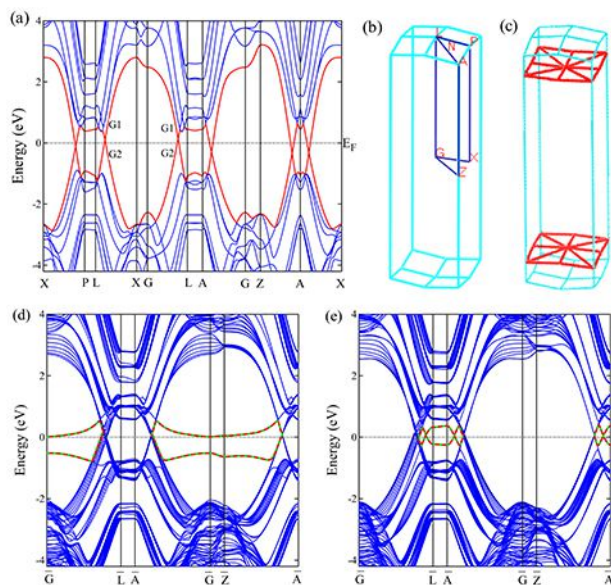


图2. (a)BCT-C₁₀石墨的电子能带结构。G1和G2是费米能级近旁两个交叉能带的不可约表示；(b) 布里渊区及其高对称点；(c) 能带交叉点在布里渊区中形成两个中心反演对称的近似二维的nodal-net。(d, e) nodal-net 投影到材料的(100)表面上时, 呈现出一对受体态拓扑保护的鼓膜状表面平带。当表面悬挂键未用H原子钝化时(d) 表面平带在两个nodal-net的内侧(G点周围), 当表面悬挂键用H原子钝化时(e) 表面平带在两个nodal-net的外侧。

(责任编辑: 侯茜)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们
地址: 北京市三里河路52号 邮编: 100864