

物理所强关联拓扑绝缘体电子结构研究取得进展

文章来源：物理研究所

发布时间：2013-07-03

【字号：小 中 大】

拓扑绝缘体是近年来凝聚态物理的研究热点之一。这类材料不同于传统的“金属”和“绝缘体”，其体内部为有能隙的绝缘态，其表面则是无能隙的金属态。这种金属表面态是由其内在电子结构拓扑性质决定的，受时间反演不变性的保护，因而受缺陷、杂质等外界影响较小。目前，理论上预言的拓扑绝缘体都是半导体材料，电子间的关联效应较小，理论分析相对较为简单。而能否在强关联材料体系中发现新的拓扑绝缘体材料，则是理论上非常关心的问题，因为强关联拓扑绝缘体的发现将带来许多全新的理论问题，如不同拓扑有序态之间的拓扑相变、电子-电子相互作用是否能改变电子结构的拓扑指数等等。

最近，中科院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）戴希研究员、方忠研究员、翁红明副研究员和博士后卢峰、赵建洲在强关联拓扑绝缘体研究方面取得进展。他们利用Gutzwiller变分法结合第一性原理计算研究了典型的混合价态化合物 SmB_6 。在考虑f电子强关联效应下，得到了该材料的能带结构、原子多重态结构等，以及在(001)方向上的表面态。

研究发现，f电子的关联效应对能带的修正主要表现在下面两点：(1)4f的 $j=7/2$ 能带被推到了费米面以上4eV左右，而费米面附近主要由4f的 $j=5/2$ 和5d电子占据；(2)由4f轨道形成的准粒子能带的带宽减小到了不足0.1eV。在考虑了4f电子的关联效应后，并没有破坏该材料的拓扑性质，其 Z_2 拓扑不变量为(1;111)，说明这是一种三维强拓扑绝缘体材料。与已知的拓扑绝缘体不同， SmB_6 在其(001)表面态有三个狄拉克点，该现象可以引起新的物理现象，比如独特的准粒子干涉图像、独特的磁输运性质等。

这一研究成果已发表在《物理评论快报》(*Phys. Rev. Lett.* 110, 096401 2013)上。

相关研究得到国家自然科学基金委员会和科技部有关基金的支持。

[打印本页](#)
[关闭本页](#)