



首页 所况简介 机构设置 研究成果 人才队伍 研究生教育 党群园地 科学传播 学术期刊 信息公开

新闻动态

所内新闻

科研动态

综合新闻

通知公告

媒体扫描

物理所公开课

当前位置：首页 > 新闻动态 > 科研动态

中国科学院物理研究所
北京凝聚态物理国家研究中心

EX7组供稿

第5期

2017年02月10日

As(111)表面观测到拓扑纠缠Shockley表面态

由于平移对称性的破缺，在晶体材料的表面可能会存在表面电子态。1939年，Shockley发现晶体场导致的体态反转能隙中会出现表面态，后来被称为Shockley表面态。它在许多金属，例如金、银、铜、铂、钯、铍、镁等，的表面广泛存在。Shockley表面态通常表现出近自由电子型（即抛物线型）的能带色散，位于晶体场导致的体态能带反转的能隙中，并且连接到体态的反转能带交叉的位置（图1b）。由于表面中心反演对称性破缺，材料中的自旋-轨道耦合会导致Shockley表面态能带出现Rashba型的自旋劈裂，最著名的例子就是Au(111)面上Rashba劈裂的Shockley表面态。

另一方面，由于自旋-轨道耦合，体态反转能带在交叉的位置通常会打开能隙，导致半金属型的电子结构，即价带和导带之间在布里渊区每个位置都存在直接能隙。和拓扑绝缘体类似，也可以计算半金属材料中的 Z_2 拓扑不变量。对于拓扑非平庸的半金属（ $Z_2 = 1$ ），Rashba劈裂的表面态能带在自旋-轨道耦合打开的能隙附近分别连接价带和导带，即拓扑纠缠的Shockley表面态（图1a）。对于拓扑平庸的半金属（ $Z_2 = 0$ ），表面态能带同时连接导带或价带，即传统意义上的Shockley表面态（图1c）。

最近的一些理论工作开始关注金属表面上Shockley表面态的拓扑性质。从实验上判断其拓扑性质最直接的方法就是用角分辨光电子能谱（ARPES）探测表面态与体态之间的连接方式。然而，对于这些已知的Shockley表面态，实验验证有很大的困难。例如金、银、铜、铂、钯的Shockley表面态连接体态的位置在费米能级以上几个eV，而常规ARPES只能测量费米能级以下的占据态，即使利用泵浦技术的ARPES也只能探测费米能级以上一定范围内的未占据态；铍和镁的自旋-轨道耦合很小，对能带几乎没有影响，无法通过实验分辨出表面态和体态的连接方式来确定其拓扑性质。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）EX7组博士生张鹏（现为东京大学博士后）、博士生马均章、钱天副研究员和丁洪研究员与东京大学物性研究所的Shik Shin教授研究组合作，利用激光光源和同步辐射光源ARPES，首次测量了单质As单晶的电子能带结构，揭示了As(111)表面存在拓扑纠缠的Shockley表面态。SC10组博士生赵凌霄和陈根富研究员提供高质量As单晶样品，T04组博士生许秋楠和翁红明研究员进行了能带计算。As在费米能级附近存在晶体场导致的反转能隙，ARPES测量As(111)面清晰地观察到能隙中存在表面态。该表面态在费米能级以下具有近自由电子型的能带色散，并显示出Rashba型的自旋劈裂（图2）。通过以上特征可以确认其属于Shockley表面态。利用泵浦技术，测量了费米能级以上未占据态的电子结构，观测到表面态能带在费米能级以上明显偏离近自由电子型色散，并分别连接体态的导带和价带，确定了其具有拓扑非平庸的属性（图3）。第一性原理计算也确认了As具有拓扑非平庸属性，并且高度复现了实验观测结果（图3c）。这些结果揭示了As(111)面存在拓扑纠缠Shockley表面态。

这一研究成果1月27日在线发表在Physical Review Letters 118, 046802 (2017)上，并入选PRL编辑推荐亮点工作。该工作得到了国家自然科学基金委、科技部“国家重大科学研究计划”和“国家重点研发计划”、中国科学院先导B项目的支持。

<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.118.046802>

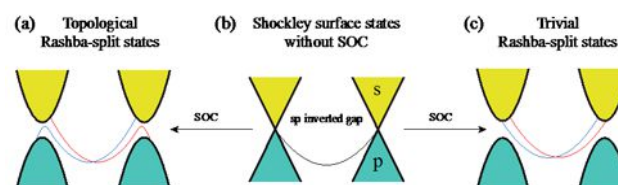


图1 : Shockley表面态出现在晶体场导致的sp能带反转能隙中 (b)。当引入自旋 - 轨道耦合, 演化成具有Rashba劈裂的拓扑非平庸 (a) 或者平庸 (c) 的表面态。

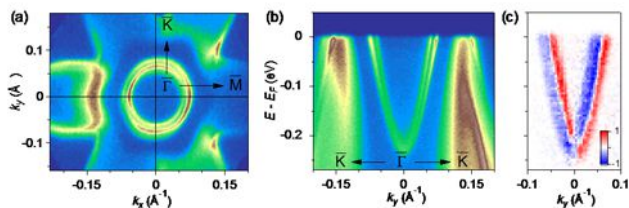


图2 : (a) As(111)面布里渊区中心附近费米面强度图, 显示出Rashba劈裂的表面态形成两个同心圆型的费米面。 (b) 表面态能带具有Rashba劈裂的近自由电子形式的色散。 (c) Rashba劈裂表面态能带具有自旋极化。

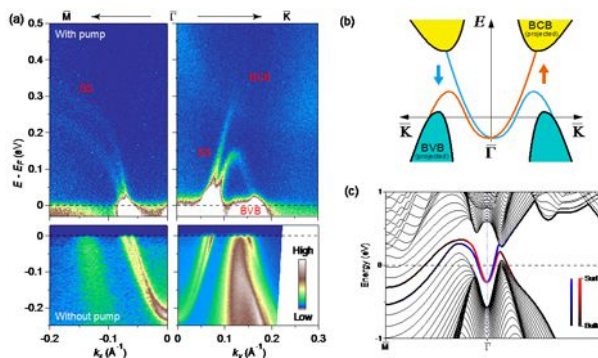


图3 : (a) 利用泵浦技术测量未占据态的电子结构 (上半部分)。 (b) 沿 $\bar{\Gamma} - \bar{K}$ 方向能带拓扑的示意图。 (c) 第一性原理计算高度复现实验结果。

附件列表 :

[下载附件>> Topologically Entangled Rashba-Split Shockley States on the Surface of Grey Arsenic.pdf](#)

电子所刊

公开课

微信

联系我们

友情链接

所长信箱

违纪违法举报

