

新型网状 β -EuSnAs₂高压晶体结构及其两步重构相变机制研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13640.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近年来，拓扑绝缘体由于独特的能带结构和受拓扑保护的量子性质，是凝聚态物理领域中重要的研究方向。本征磁性拓扑绝缘体的发现，掀起了新的研究热潮。因为在这类磁性拓扑绝缘体中，磁性和拓扑表面态之间的相互作用会产生许多奇异的拓扑量子效应，如量子反常霍尔效应、手性马约拉纳费米子和轴子绝缘体等。2019年，中国科学院物理研究所和上海交通大学物理系合作，通过角分辨光电子能谱（ARPES）测量和第一性原理计算，证实了EuSn₂As₂是本征磁性拓扑绝缘体[Phys. Rev. X 9, 041039 (2019)]。

压力作为基本的热力学参数，在拓扑绝缘体的研究中起重要作用。压力能够有效地调节物质的晶体结构和电子结构，从而诱导新的物理性质和物理现象。在典型的拓扑绝缘体Bi₂Se₃、Bi₂Te₃和Sb₂Te₃中，已观察到压力诱导的超导性。它们在环境压力下具有层状菱形（R-3m）结构并在高压下转变成单斜（C2/m）晶体结构，并且这些结构相变往往伴随着超导相的产生或超导转变温度的突变，体现了结构与超导之间的强相关性。EuSn₂As₂化合物在常压条件下（将其命名为 α -EuSn₂As₂）具有和Bi₂Te₃同样的层状菱形（R-3m）结构，然而目前未有关于EuSn₂As₂的高压研究报道。

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、副研究员于晓辉、博士赵琳（吉林大学联合培养生）、副研究员洪芳、研究员程金光，与吉林大学教授韩永昊等，通过第一性原理理论计算和原位高压实验，发现了一个新的三维网状 β -EuSn₂As₂晶体结构[图1（c）]。理论计算表明该结构具有单斜（C2/m）对称性，由蜂窝状的Sn层和锯齿型As链组成，在压力作用下，可由层状 α -EuSn₂As₂晶体结构通过“两步重构机制”转变而成[图1（a-c）]：最近邻的SnAs原子层通过Sn-Sn成键而链接在一起[见图1（b）]，而后弯曲的Sn-Sn键逐渐变平形成蜂窝状Sn层，同时As原子跨过Eu层成键形成连接Sn层的锯齿型As链，最终形成三维网状 β -EuSn₂As₂结构。能量计算表明当压力大于14.3GPa时，三维网状 β -EuSn₂As₂结构比层状 α -EuSn₂As₂结构更稳定[图1（e）]。声子谱计算同样证实了 β -EuSn₂As₂结构的高压

稳定性（图2）。同时，实验上通过原位高压X射线衍射实验确认了EuSn₂As₂样品在12.6 GPa时发生了由层状菱形相（ α -EuSn₂As₂）到三维网状单斜相（ β -EuSn₂As₂）的结构相变（图3）。通过原位高压电阻测量发现，在约5GPa和15GPa时，样品在低温区发生了“绝缘-金属-超导”的物态转变（图4）。超导转变温度在15GPa到实验最高压力30.8 GPa的压力范围内约为4 K的恒定值。

该实验用样品由物理所博士伊长江、研究员石友国等提供。原位高压X射线衍射（XRD）实验在北京同步辐射装置（BSRF）4W2高压站完成。原位高压电阻测量在怀柔综合极端条件实验装置完成。该研究通过第一性原理理论计算和原位高压实验，发现了一个新的EuSn₂As₂高压晶体结构，有关电子输运性质的转变很好地反映和证实了“两步重构机制”。这些发现扩展了对层状磁性拓扑绝缘体的认识，并将激发更多相关工作的开展。相关研究成果发表在2021年4月13日出版的《物理评论快报》[Phys. Rev. Lett. 126, 155701 (2021)]上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金委员会以及中科院战略性先导科技专项（B类）等的支持。

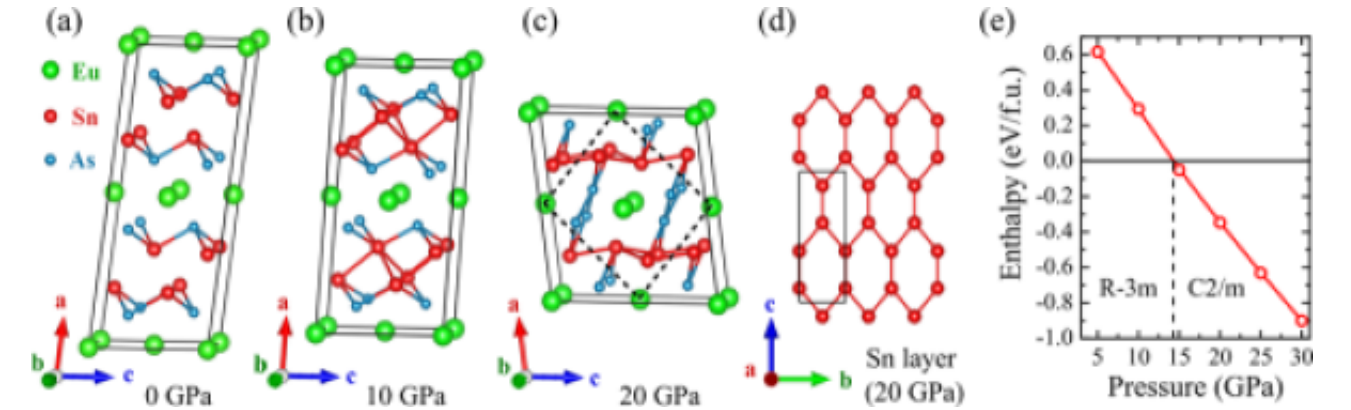


图1.高压结构相变与结构稳定性。（a）层状 α -EuSn₂As₂在0 GPa时的结构（R-3m对称性），包含4个弯曲的SnAs层和两个Eu原子层。（b）层状 α -EuSn₂As₂在10 GPa时的结构（R-3m对称性），最近邻的两个SnAs原子层通过Sn-Sn键链接在一起。（c）单斜 β -EuSn₂As₂网状结构在20 GPa时的形貌（C2/m对称性），其网状结构由蜂窝状Sn层和锯齿型As链组成，虚线表示其磁构原胞（P2/m对称性）。（d）蜂窝状Sn原子层的俯视图。（e） α -EuSn₂As₂和 β -EuSn₂As₂结构的相对焓值随压力的变化，当压力大于14.3 GPa时， β -EuSn₂As₂结构更稳定

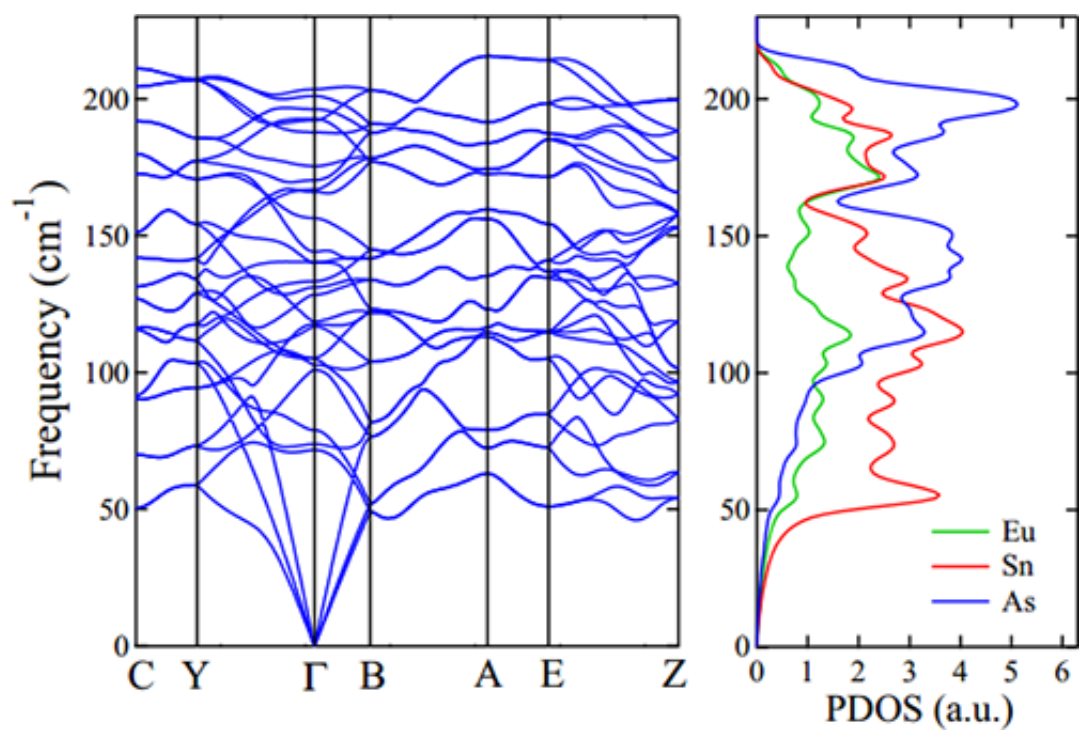


图2. β - EuSn_2As_2 结构 ($P2/m$ 反铁磁对称性) 在 20 GPa 时的声子谱和声子态密度。200 和 140 cm^{-1} 附近的高频声子谱主要由 As 原子贡献，55 cm^{-1} 附近的低频声子谱主要由 Sn 原子贡献。在整个布里渊区，没有观察到虚频，证实了 β - EuSn_2As_2 晶体结构的动力学稳定性

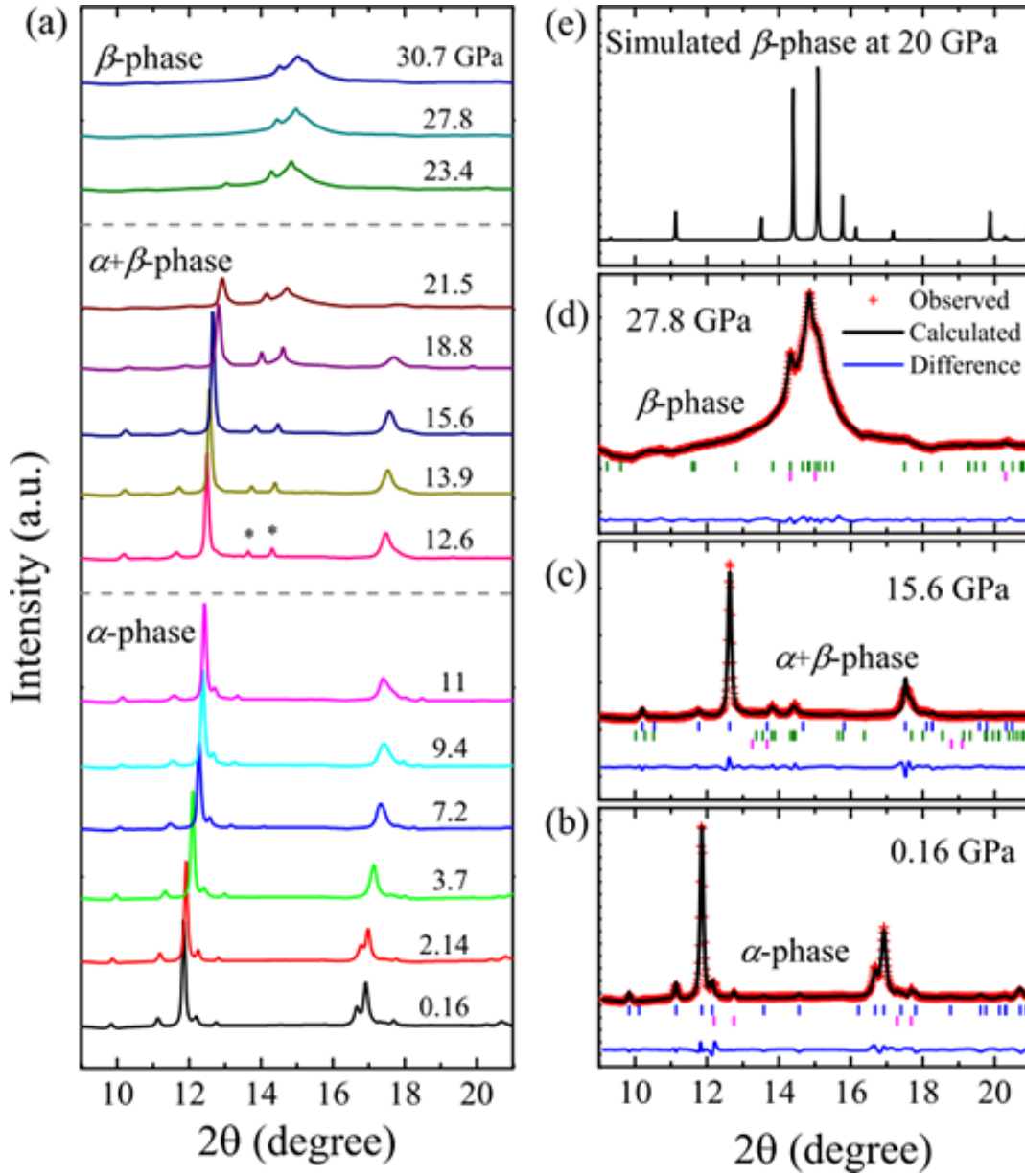


图3. (a) EuSn_2As_2 在0.16-30.7 GPa压力下的原位XRD衍射图，波长 $\lambda = 0.6199$ Å。 (b) - (d) 在0.16, 15.6 和27.8 GPa时的精修XRD衍射图。 (e) 在20 GPa时计算的 β 相XRD图，其中两个主峰对应于 (a) 中12.6 GPa以上出现的两个新衍射峰

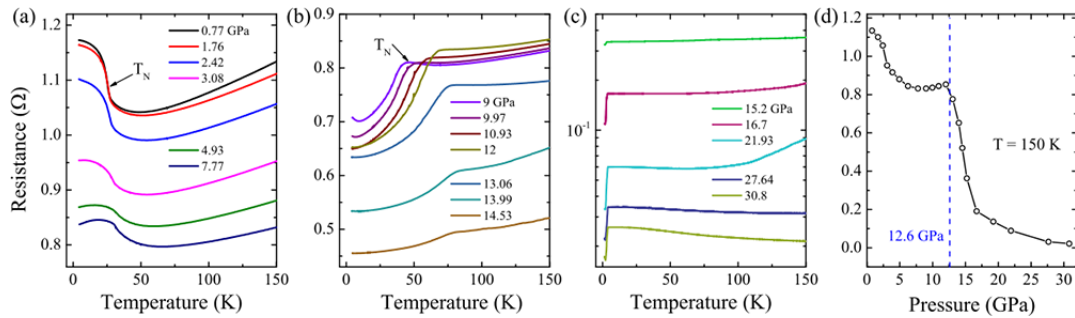


图4. (a-c) 在0.77-30.8 GPa压力下 EuSn_2As_2 的变温电阻测量。低温下的“绝缘-金属-超导”物态转变压力分别约为5和15 GPa

GPa。箭头指示其奈尔温度 (T_N)。 (d) 150 K时电阻随压力的变化曲线。在5 GPa和12.6 GPa附近的两个不连续变化点分别对应于“两步重构机制”的第一阶段和第二阶段的结构转变

研究团队单位：物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发