
p物理所发现单带Mott绝缘体氯化铌p

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25709.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！

在没有相互作用或者只存在弱相互作用的体系中，能带理论能够很好地描述材料的电子结构，并据此区分金属（部分填充）和绝缘体（全空或全满）。然而，这种理解并不完整，因为多体相互作用可能导致能带理论的失效，典型案例即为Mott绝缘体。在能带理论中，半填充的能带应表现为金属态。然而，由于强电子-电子相互作用，实际上呈现为绝缘态，即Mott绝缘体。

从Mott绝缘体出发，可以引发许多有趣的强关联物理现象，如高温超导、量子自旋液体和巨磁阻效应。理解Mott物理的最基础模型是单带Hubbard模型，该模型仅考虑由单轨道构成的单带上的电子。然而，实际Mott绝缘体材料中的低能激发通常很复杂，使得实验验证和理论分析都面临挑战和争议。因此，寻找具有最简单自由度的Mott绝缘体对Mott物理的理论和实验研究具有重要意义。

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钱天、翁红明、石友国等与中国人民大学教授雷和畅合作，在“呼吸型”Kagome结构的范德瓦尔斯材料Nb₃Cl₈中明确发现了这类Mott绝缘体，可用单带Hubbard模型完美描述。

在高温相（ α 相），层间耦合可以忽略不计。不考虑电子关联效应的单粒子近似下的理论计算显示，在费米能级处存在一支半填充的平带。在平带中电子动能被强烈抑制，在电子-电子相互作用下平带劈裂成上下Hubbard带，费米能级位于它们之间。由于这支源自单轨道的半填充能带孤立与其他能带， α -Nb₃Cl₈是单带Hubbard模型的理想实现。随着温度的降低，体态发生结构相变（ β 相），层间耦合显著增强，导致Hubbard带发生成键-反键劈裂，从顺磁态转变成非磁态，但系统的绝缘行为仍然由Mott物理主导。这一发现为研究Mott物理及其诱导的关联电子态提供了简单而重要的模型系统，有助于增强人们对相关物理现象的理解，具有未来技术应用的潜力。

相关研究成果发表在《物理评论X》（*Physical Review X*）上。研究工作得到科学技术部、国家自然科学基金委和中国科学院的支持。

[论文链接](#)

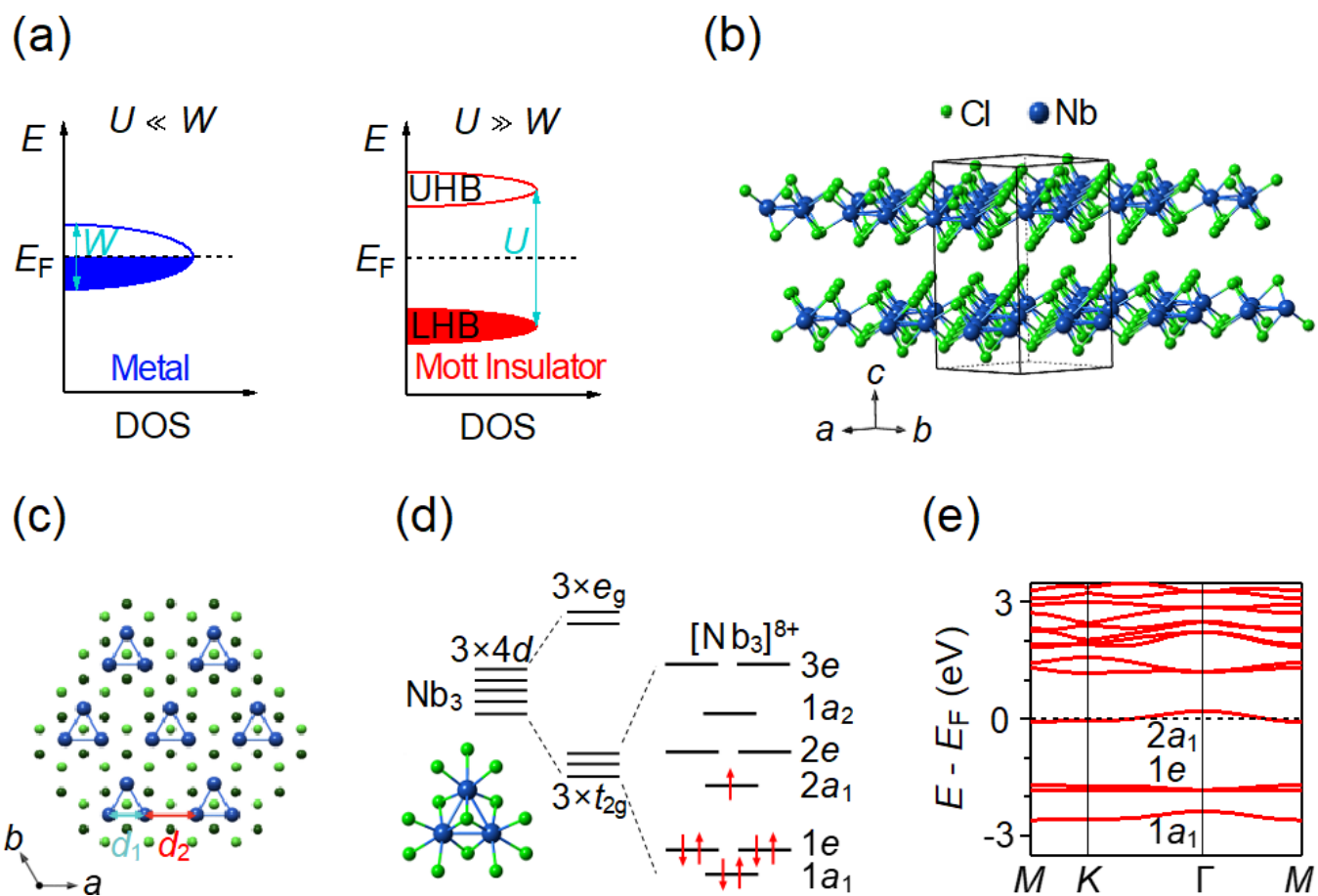


图1 α - Nb_3Cl_8 中的单轨道成分的半填充平带

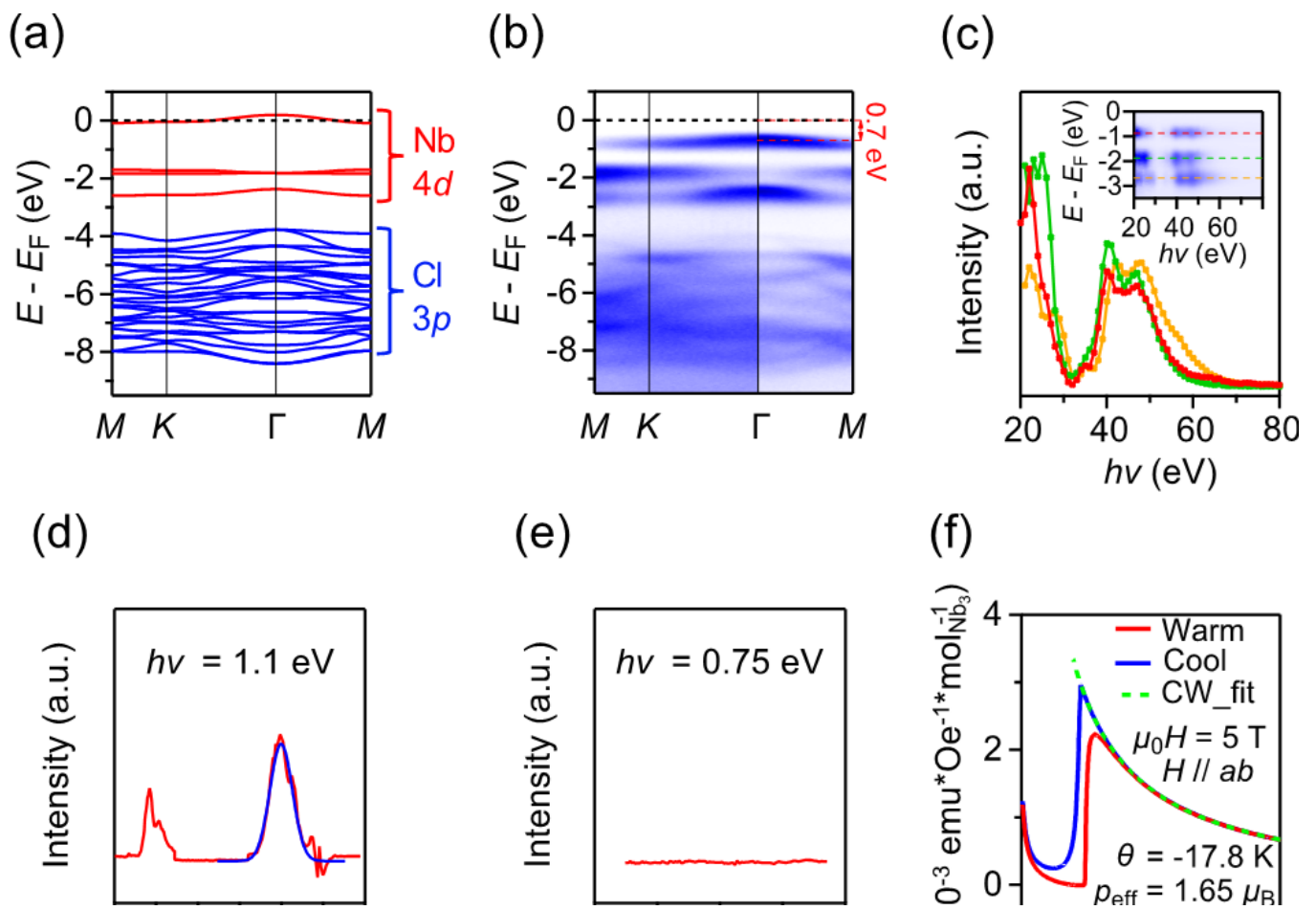


图2 角分辨光电子能谱和光致发光谱实验确定费米能级处的带隙

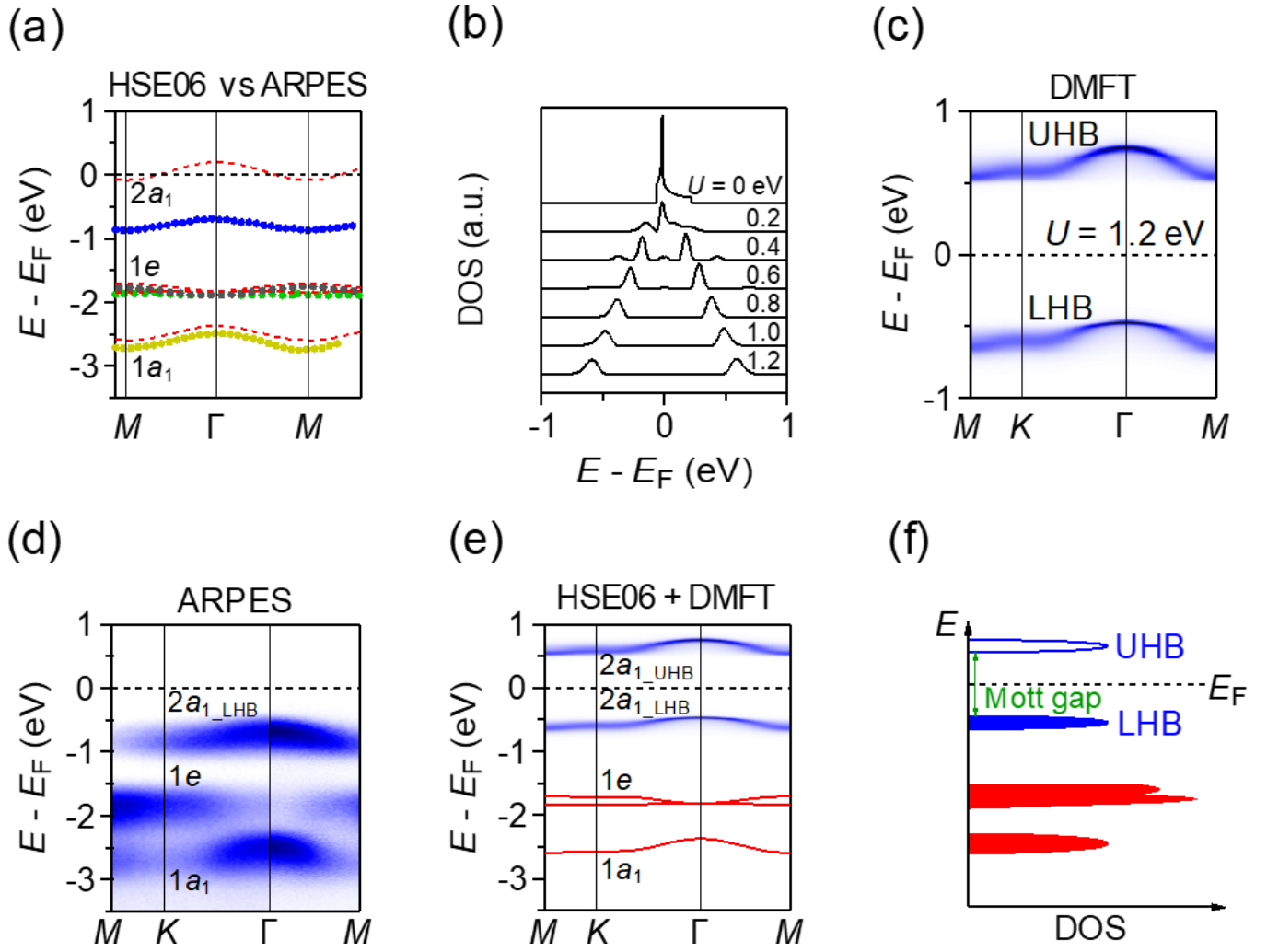


图3 结合DMFT计算确认 $\alpha\text{-Nb}_3\text{Cl}_8$ 中的单带Mott绝缘体态

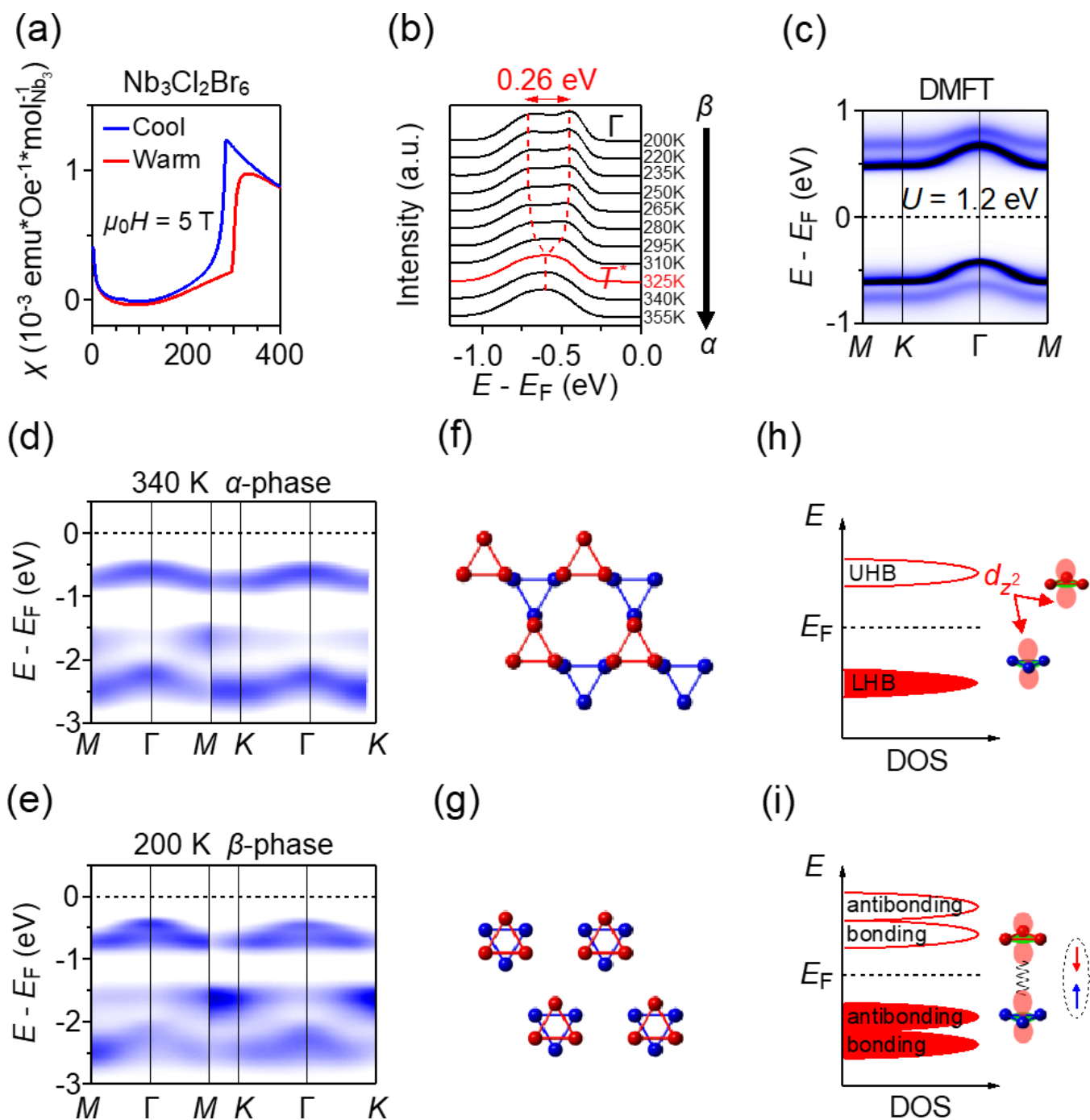


图4 电子结构从高温 α 相到低温 β 相的变化

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/>

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