

---

# 笼目材料中自旋轨道耦合驱动的拓扑相变研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39275.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！*

笼目材料中自旋轨道耦合驱动的拓扑相变研究获进展。

笼目材料是研究拓扑量子态的重要体系，但多数笼目结构的理想拓扑性质易被体金属性掩盖，难以辨识与调控。近年来提出的二维、三维堆叠蜂窝—笼目结构，为实现理想拓扑态提供了新的材料平台，但已有研究主要基于无自旋近似，对于自旋轨道耦合如何驱动其中的拓扑相变及表面态演化缺乏认识。

近日，中国科学院理论物理研究所团队以IAMX（IA为碱金属元素，M为稀土元素，X为碳族元素）家族材料为对象，研究其拓扑性质，提出有效模型，揭示自旋轨道耦合（SOC）在三维堆叠蜂窝—笼目材料中可作为连续调控拓扑物态的关键自由度。

在无SOC极限下，IAMX家族可表现为节线半金属；随着SOC增强，体系可依次经历从节线半金属到强拓扑绝缘体，再到临界无隙态，最终进入外尔半金属的拓扑相变过程，从而形成全局拓扑相图。同时，材料的表面态也随之发生连续演化。在SOC的二阶微扰恒定或影响较小时，体系从无SOC时的鼓膜表面态，发展为外尔半金属相中的费米弧与螺旋表面态，在强SOC下并合成单一表面狄拉克锥，展现出体拓扑与表面电子结构之间清晰而统一的对应关系。

为验证该模型的正确性，研究结合第一性原理计算与紧束缚模型，分析3种具有不同SOC强度的代表性材料，包括轨道成分，拓扑数计算等。研究发现，它们对应弱、中、强SOC区间下的不同拓扑相，分别落在统一相图中的不同区域，与模型预测严格一致，表明IAMX家族为研究SOC驱动拓扑相变及表面态重构提供了理想的材料平台。

该工作为理解笼目材料中SOC驱动的拓扑相变提供了统一图像，也为通过化学掺杂、元素替换或同位素调控实现拓扑相工程提供了新思路。这加深了对堆叠蜂窝—笼目体系拓扑电子结构的认识，也为设计具有可调表面态和多重拓扑功能的量子器件奠定了理论基础。

相关研究成果作为编辑推荐文章，发表在《物理评论B》（Physical Review B）上。

[论文链接](#)

---

研究团队单位：理论物理研究所

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](http://www.iikx.com)转发