
科学家首次实验证实轨道序的存在

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40657.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！

科学家首次实验证实轨道序的存在。在国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目资助下，松山湖材料实验室阿秒科学中心研究员陈朝宇团队与合作者，首次从实验上给出了轨道序存在的确凿证据。相关成果近日发表于《自然-物理》（Nature Physics）。

Tb₂CoAl₄Ge₂的磁结构(a)，电子结构特征(b)与铁轨序模型(c)。研究团队供图，下同

轨道序是一个自20世纪30年代起被提出的概念，由1963年诺贝尔物理学奖得主尤金·维格纳运用群论描述对称性强制的能量简并。轨道序本质上是一种自发对称性破缺相，其中电子的局域占据轨道呈周期性排列，导致轨道间能带简并消除，类似于磁有序中的自旋排列与自旋劈裂。在凝聚态物理中，轨道序被认为与众多现象密切相关，如四氧化三铁的Verwey转变、PrAlO₃的协同Jahn-Teller畸变、LaMnO₃的巨磁阻效应、铁基超导体的向列相以及铜氧化物超导体的赝能隙相，但其主导作用和决定性特征始终未被明确证实。

主要挑战来自两方面：一是轨道序常与晶格、电荷、自旋自由度纠缠，一种序的出现往往诱发其他序，导致起源问题类似先有鸡还是先有蛋；二是目前缺乏公认的能直接识别轨道序的实验手段，远不如自旋序或电荷序可通过磁化或极化强度直接测量。

为此，陈朝宇团队联合中国科学院物理研究所研究员王志俊团队、中国科学技术大学教授陈仙辉/王震宇团队、中国散裂中子源高分辨中子衍射仪负责人缪平团队、大连理工大学助理教授蔡永青等，在单晶 $Tb_2CoAl_4Ge_2$ 中明确证实了由Tb 5d轨道形成的轨道序。通过综合运用线二色性角分辨光电子能谱（ARPES）、空间分辨ARPES、扫描隧道显微镜/扫描隧道谱（STM/STS）、中子衍射、第一性原理计算及平均场理论分析，团队提供了轨道序存在的明确能谱证据，并进一步证明该轨道序驱动了表面向列相转变。

$Tb_2CoAl_4Ge_2$ 的线二色费米面(a)、准粒子干涉图案(b)与费米面(c)。

该材料晶体结构由Tb、Co、Al、Ge四种元素的原子层沿c方向堆叠，体态磁有序来源于Tb的4f轨道，在20 K以下发生多个复杂反铁磁相变及细微晶格相变。独立于体态反铁磁长程序，团队在材料表面利用ARPES观测到额外的表面态能带，其费米面呈现明显电子向列相特征（面内四重对称性破缺为二重对称性），能带表现出各向异性。平均场理论分析表明，这些特征源自表面态自发形成的铁轨序，该对称性破缺相导致表面态电子的d-xz/d-yz轨道产生能带劈裂，使电子仅占据一种轨道，另一种近乎全空。线二色性ARPES结果进一步显示，M点附近表面态呈现均一二色性信号，直接证实了铁轨序的存在。

为探究表面向列相的起源，团队开展了高精度STM/STS和低能电子衍射研究，结果显示样品表面无可分辨的结构畸变，排除了向列相的结构起源；准粒子干涉图案与费米面特征一一对应，且四重对称性破缺不受外加磁场影响，基本排除磁性起源，有力支持了轨道序的物理图像。

该研究的意义和影响体现在三方面：

一是，定义轨道序的特征指纹：近百年来的概念首次获得明确的能谱特征描述，包括费米面形变、各向异性轨道分裂及轨道极化。

二是，确立轨道序的主导作用：此前在锰氧化物中轨道序与Jahn-Teller畸变共存，铁基超导中向列相的轨道序与自旋涨落驱动机制难以区分。本工作观察到的轨道序形成温度远高于反铁磁转变和结构转变温度，表明其起驱动作用，这是首次发现不受结构或自旋影响的轨道序。

三是，建立研究轨道序的实验方法标准：联合空间、色散和轨道分辨的ARPES技术可作为轨道序的直接探针，为强关联电子系统中轨道物理的研究设定了新基准。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41567-026-03359-4>

作者：陈朝宇等 来源：《自然—物理》

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