拓扑量子物态研究获关键理论突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/43364.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！

拓扑量子物态研究获关键理论突破。近日，香港科技大学（广州）助理教授周桐、李昊翔课题组在二维层状电子化合物YCl中取得关键理论突破，预言该体系存在多轨道关联拓扑平带，并支持稳健的二维铁磁基态与电门可控的量子反常霍尔效应。相关成果以快报形式发表于《物理评论B》。

自1986年骰子晶格模型提出以来，在真实材料中实现兼具平带与非平庸拓扑性质的电子态，一直是凝聚态物理的前沿难题。平带的独特之处在于电子能量随动量变化极小，动能被抑制，电子间的相互作用因而更容易影响体系的集体行为。此前实验已在层状YCl中直接观测到骰子晶格平带，为相关理论提供了真实平台。但一个根本性问题随之而来：能带形状与理想骰子晶格相似，是否意味着物理性质也相同？

研究团队进一步考察电子波函数的轨道成分与对称性后发现，YCl在K和K＇两个能谷附近存在层、轨道与能谷的耦合：电子处于哪一层、具有何种轨道特征，随能谷而改变。这意味着仅保留一个轨道的简化模型，无法在整个布里渊区内正确描述波函数的对称性与能带连接关系。为此，团队构建了包含钇原子d轨道和s轨道的七轨道紧束缚模型，为分析该体系的拓扑与关联性质建立了更完整的微观描述。

在新模型中，钇原子自身的自旋轨道耦合打开能带交叉点能隙，产生非零贝里曲率，使自旋分辨拓扑平带具有绝对值为4的陈数。自洽Hartree-Fock计算表明，平带在费米能级附近提供的高态密度增强了磁性不稳定性，而多轨道结构中的洪特耦合进一步降低平行自旋电子的交换能，二者共同使铁磁态在较广参数范围内占据优势。相比之下，理想单轨道模型倾向于形成亚铁磁态。这一对比揭示，轨道自由度是连接YCl电子结构与宏观磁性的关键环节。

层状结构还为外场调控提供了直接途径。理论计算表明，垂直于层面的位移电场可引入层间电势差，经由层-轨道-能谷耦合改变能带交叉点附近的有效质量，驱动拓扑相变。在填充因子ν=3处，当一个自旋极化拓扑平带被填满，体系可进入关联量子反常霍尔态，其拓扑性质可通过位移电场调控；在接近自然填充的ν=4处，体系仍呈现显著且可电场调节的反常霍尔响应，但由于能带结构更为复杂，霍尔电导并非严格量子化。这一区别为后续实验选择载流子浓度、识别相应物态提供了可检验的参考。

该研究将YCl的天然骰子晶格、真实轨道结构与电子关联联系起来，为在天然晶体中探索可电控的关联拓扑物态开辟了路径。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：https://doi.org/10.1103/pj5b-mzql

作者：周桐 等 来源：《物理评论B》

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转发