
MoB₂中螺旋节线声子谱的预言和验证研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/8694.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，越来越多的拓扑绝缘体和拓扑半金属材料被预言、验证和研究，推动了拓扑材料理论的不断发展和完善。在对称性指标理论和拓扑量子化学理论提出后，中国科学院物理研究所研究员方辰、方忠等确立了对称性数据与拓扑不变量的关系，形成拓扑词典，再与研究员翁红明等合作，发展了高通量计算判别拓扑材料的方法，反过来促进了更多拓扑材料的发现。他们通过筛选ICSD数据库中近四万多种材料，判别出8000余种非磁性拓扑材料，并进行了拓扑分类，建立了“拓扑电子材料目录”的在线数据库。拓扑电子系统研究的长足发展，也促进了玻色子拓扑态的研究，催生了拓扑光子晶体，拓扑声学等研究方向，但对于量子力学极限下的拓扑声子的研究非常少，因为相对于拓扑声学研究的声子体系经典振动波，晶格振动形成的声子需要用量子力学来处理，其准确的理论计算和实验测量都非常困难，很具挑战性，但声子的拓扑特性可能导致新奇的热输运、电输运等特性，值得进行深入研究。

最近，中科院物理所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员翁红明、方忠、博士生张田田（现为日本东京工业大学博士后），与布鲁克海文国家实验室研究员Mark Dean、博士苗虎（现为美国橡树岭国家实验室研究员），中国人民大学物理系教授雷和畅等人合作，通过第一性原理计算和基于对称性指标理论的拓扑分析以及meV分辨率非弹性X射线散射，准确预言并实验探测证实了MoB₂

中两组节线声子谱的存在（图1（f）和图3）。由于这两组节线声子谱只受时间反演对称性和空间反演对称性的保护，无需其它对称性，因此在动量空间的分布具有任意性，呈现出螺旋状的形态（图2（b-c））。在测量体态声子色散的基础上，他们把第一性原理计算的动力学结构因子的强度与实验测量结果进行了对比，结果非常符合，从而证实了MoB₂中节线声子谱的存在（图3）。

由于电子系统中不可避免存在自旋轨道耦合效应，时间和空间反演对称性保护的节线总会因为自旋轨道耦合作用打开能隙，不能形成节线半金属态。因此，形成这种时间空间反演保护的节线态是声子谱等玻色子系统的优势。该项工作建立了一种THz声子系统中拓扑能带的研究模式，通过计算与实验的结合，可以准确地识别拓扑声子激发，为晶体材料中拓扑声子的研究开辟了新途径。这项工作是该研究团队在发现双外尔声子后的又一进展，逐步拓展了拓扑声子研究方向。

该工作近期发表在《物理评论快报》（Phys. Rev. Lett. 123, 245302 (2019)）上。参与该项研究的还包括中科院物理所的林佳琪，美国阿贡国家实验室的曹原、G. Fabbris、A.H. Said，中国人民大学的王琦和上海科技大学的X. Liu等。此项工作得到国家自然科学基金委、科技部和中科院等的资助。

图1：

(a-

b) 声子体系中

等两种拓扑能带交叉，分别为

外尔/狄拉克点和节线点。(c) MoB_2 的布里渊区。(d-e) MoB_2

的晶胞和原包示意图。(f) MoB_2

的声子谱，其中两个虚线穿过的能带交叉点对应文章中提到的两组时间和空间反演对称性保护的节线声子。

图2：(a) 利用对称性指标理论判别 MoB_2 中节线声子的过程。(b-c) MoB_2 中能量较低一组节线声子在布里渊区的分布图。

图3：(a-c) 为第一性原理计算沿着三个方向的动力学结构因子强度图。(d-f) 为非弹性X光散射沿着相同三个方向的测量强度图。(g-h) 分别为(7,7,7)(\rightarrow)(7,7.5,6.5)和(7.5, 7.5,

7.5))(\rightarrow)(7.5,8,7)两个方向非弹性X光散射的测量强度和对应的拟合结果。

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](http://www.iikx.com)转发