



## 我国学者发现磁性外尔半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的表面笼目电子结构

日期 2023-10-18 来源: 信息科学部 作者: 刘鼎 文瑞 孙聆 【大】 【中】 【小】 【打印】 【关闭】

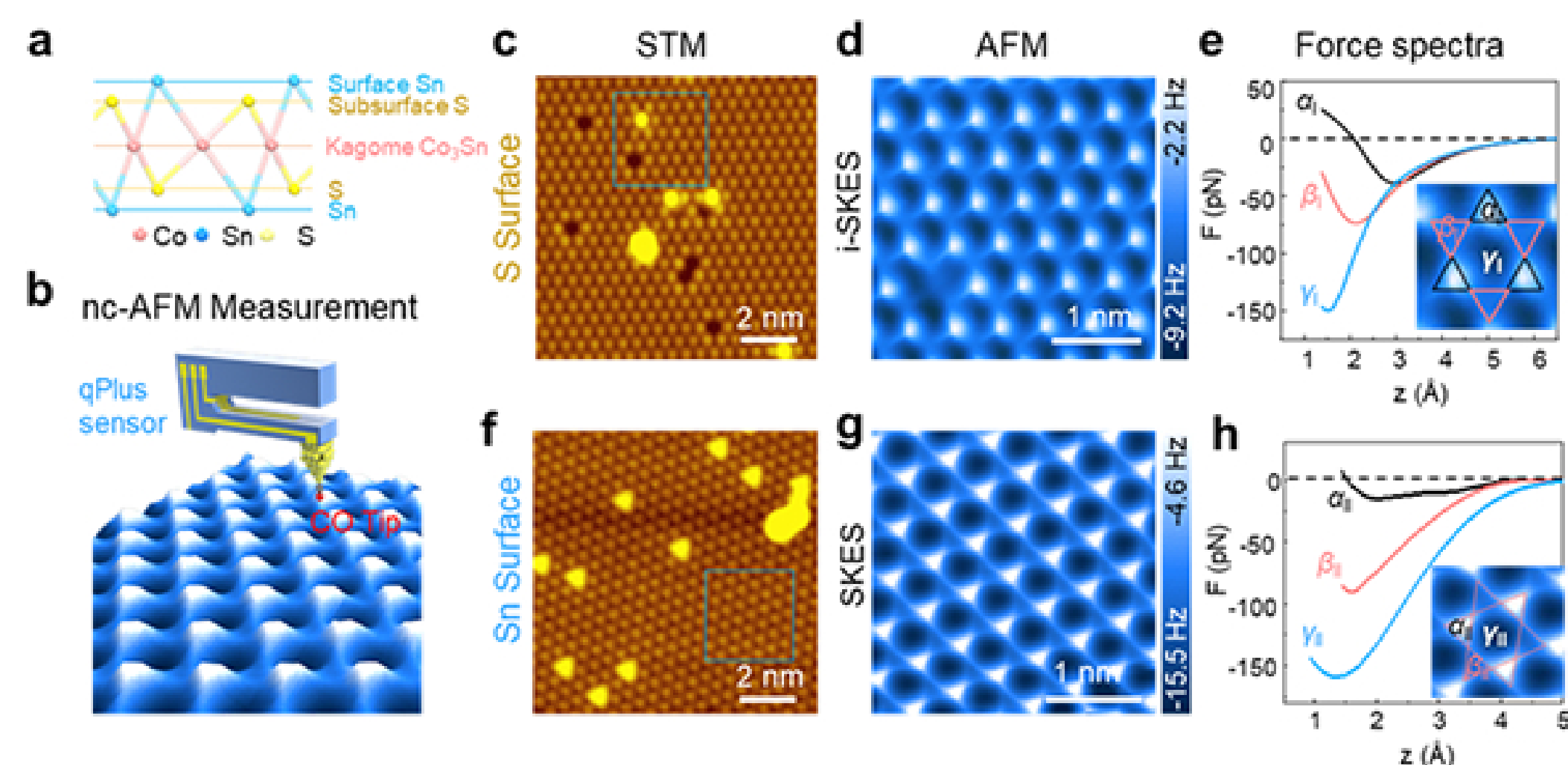


图 通过nc-AFM实现磁性外尔半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 表面笼目电子结构的观测

在国家自然科学基金项目(批准号: 61888102)等资助下,中国科学院物理研究所高鸿钧研究团队与中国人民大学季威教授等合作,利用具有化学键分辨能力的原子力显微镜和第一性原理计算确定了 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 晶体的两个三角晶格解理面,并在这些解理面上发现了表面笼目电子结构(surface kagome electronic states, SKEs)。研究成果以“在 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 中发现与构筑p-d电子杂化诱导的表面笼目电子结构(Discovery and construction of surface kagome electronic states induced by p-d electronic hybridization in  $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ )”为题,于2023年8月26日在《自然·通讯》(Nature Communications)杂志上在线发表。论文链接: <https://www.nature.com/articles/s41467-023-40942-2>。

$\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 是一种笼目晶格的磁性外尔半金属,具有内禀反常霍尔效应、拓扑表面态费米弧、手性异常负磁电阻等新奇物性,且其霍尔电导稳定性高,对缺陷和热扰动不敏感,在信息功能器件应用方面有巨大潜力。扫描隧道显微镜(STM)和角分辨光电子能谱等实验发现, $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的部分物理性质与解理表面密切相关,如“自旋轨道极化子”仅存在于特定解理面、外尔费米弧在不同解理面上有不同的分布等。然而,目前国际上对该晶体的两个解理面(Type-I面和Type-II面)的确定还存在争议。这两个解理面在STM图中均为三角晶格,因而难以判断其为三角晶格的S面还是Sn面。一些研究认为Type-I表面为S面(Type-II表面为Sn面);而另一种观点给出了相反的定面。对解理出的表面给予确定性的判断,并在此基础上掌握对其表面功能电子结构的可控调控方法,是进一步设计与构筑功能器件的基础。

针对上述争议,该研究团队通过化学键分辨的原子力显微镜(nc-AFM)与第一性原理计算(DFT)相结合的方法,对两种解理面进行定面。在原有通过局域接触电势差测量定面的基础上,他们发展了一种通过短程力谱测量定面的方法。通过这一精确度更高的实验方法测得S面和Sn面上晶格高对称点处力谱与DFT计算得到的S面、Sn面和 $\text{Co}_3\text{Sn}$ 面(笼目晶格解理面)力谱进行对比,准确给出了解理面元素与结构信息,从而明确了Type-I表面为S面,Type-II表面为Sn面,解决了国际上 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 晶体解理面定面的争议。

更进一步,他们研究了这两种解理面上的笼目晶格相关电子态。通过nc-AFM实空间成像,发现两种解理面表面的原子均呈三角形,与笼目原子层中 $\text{Co}_3$ 的对称性相同。在Sn面上,相邻的三角形以共角的形式连接,形成表面笼目电子态(surface kagome electronic states, SKEs,指波函数在空间上遵循笼目对称性分布的表面电子态);而在S面上三角形相互独立,形成了不完整的表面笼目电子态(i-SKEs)。结合第一性原理计算,他们证实了表面Sn(亚表面S)原子与下层Co笼目晶格之间存在垂直方向的p-d电子杂化,使表面原子呈现三角形。他们进一步发现,在Sn表面,Sn和S原子以共角的方式进行横向杂化,从而产生SKEs;而在S面,因为没有Sn原子的参与,则形成了i-SKEs。这些实验结果说明,Sn(S)原子层可以通过电子杂化的方式将下层的笼目对称性电子态“传导”到表面,从而构筑出SKEs。基于上述研究发现,他们提出用III-A、IV-A或V-A族元素(Se或Te元素)替换表面Sn原子(次表面S原子)以构建具有可调性质的SKEs。

项目研究不仅确定了 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 晶体的两个三角晶格解理面,还发现了Sn(Type-II)表面的笼目晶格电子态,提出了构筑稳定的SKEs表面结构并对其进行物性调控的方法。这种以笼目晶格原子层作为电子结构模板外延生长稳定SKEs的方法为发展 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 等笼目材料的器件提供了新思路。

机构概况: 概况 职能 领导介绍 机构设置 规章制度 专家咨询 评审程序 资助格局 监督工作

政策法规: 国家科学技术相关法律 国家自然科学基金条例 国家自然科学基金规章制度 国家自然科学基金发展规划

项目指南: 项目指南

申请资助: 申请受理 项目检索与查询 下载中心 代码查询 常见问题解答 科学基金资助体系

共享传播: 年度报告 中国科学基金 大数据知识管理服务 优秀成果选编

国际合作: 通知公告 管理办法 协议介绍 进程简表

信息公开: 信息公开制度 信息公开管理办法 信息公开指南 信息公开工作年度报告 信息公开目录 依申请公开

相关链接 政府 新闻 科普

