

Observation of floating surface state in obstructed atomic insulator candidate NiP2

近年来随着对拓扑材料分类研究的深入，人们发现在部分拓扑平庸的绝缘体材料中会存在局域在非原子占据位点的电荷。这一类材料被命名为阻塞原子绝缘体 [1, 2]。如果材料表面恰好切过这些位点，会在界面上给出分数填充的电荷和金属性的阻塞表面态 [3]。在本研究中，我们利用角分辨光电子能谱和密度泛函理论对一种阻塞原子绝缘体候选材料 NiP2 中的漂浮表面态进行了系统研究 [4]。区别于先前报道的阻塞原子绝缘体材料中的表面态 [5, 6]，在 NiP2 (100) 面上的漂浮表面态表现出大的有效质量，且其能带色散完全与其他体能带隔离。该漂浮表面态在表面布里渊区中心附近表现为具有大的有效质量的空穴口袋；在表面布里渊区边界处则会演化为一近乎无色散的平带。这一表面态能带在温度升高时会向费米面移动。同时我们利用表面碱金属掺杂实现了对该表面态能带的调控。密度泛函理论的计算结果很好地复现了这一能带色散，并指明了这一表面态能带源于位于界面处的阻塞瓦尼尔电荷中心。结合对 NiP2 (11-1) 面的能带研究结果，我们从表面电子结构的角度对 NiP2 不同表面的催化性能进行了解释，也为未来新型催化剂材料的设计研发提供了新的思路。

参考文献：

- [1] Xu, Y. et al. arXiv 2111.02433 (2021).
- [2] Xu, Y. et al. Phys. Rev. B 109, 165139 (2024).
- [3] Song, Z. D., Fang, Z. & Fang, C. Phys. Rev. Lett. 119, 246402 (2017).
- [4] Liu, X. R., Zhu, M. Y., Feng, Y. W. et al. npj Quant. Mater. 9, 85 (2024).
- [5] Liu, X. R., Deng, H., Liu, Y. et al. Nat Commun 14, 2905 (2023).
- [6] Liu, Z. K., Deng P., Xu, Y. F. et al. arXiv 2406.08114 (2024).

Primary author: 刘, 祥瑞 (南方科技大学物理系)

Co-authors: Mr 朱, 明远; Prof. 刘, 畅; Mr 冯, 远文; Prof. 李, [F](#)

Presenter: 刘, 祥瑞 (南方科技大学物理系)