

# 拓扑半金属研究最新进展\*

翁红明<sup>†</sup> 戴希 方忠

(中国科学院物理研究所 量子物质科学协同创新中心 北京 100190)

2015-03-24收到

<sup>†</sup> email: hmweng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20150408

凝聚态物理一个重要的研究内容就是，发现新物态，标识新物态，观测、理解并调控它所具有的物理性质以及不同物态之间的相互转变。日常生活中常见的固态、液态和气态就是三种不同的物态。而无处不在的导电金属和不导电的绝缘体又是另外一种物态分类方式。固体能带理论告诉我们，这是通过对固体中电子的排布方式进行分类的。电子在周期性的固体中呈现能带结构，泡利不相容原理使得每个能带只能填充两个自旋反向的电子。再根据能量最低原理，电子按能量高低次序填充能带，如果恰好填满某个能带，与最低未占据能带之间存在有限大小的能量间隙，那就是绝缘体；如果有能带未填满，部分占据，那就是金属。

最近几年的拓扑绝缘体研究告诉我们，完全占据的电子能带还具有拓扑特性，借助数学中封闭曲面的拓扑分类方法，引入电子能带结构的拓扑不变量，进一步把绝缘体划分为普通绝缘体和拓扑非平庸绝缘体(即拓扑绝缘体)。根据不同的拓扑不变量，拓扑绝缘体又可以进一步划分为整数霍尔效应态(包括量子化反常霍尔效应态)、拓扑 $Z_2$ 绝缘体、拓扑晶体绝缘体等<sup>[1]</sup>。这些拓扑非平庸

物态吸引人的地方在于其新奇的边缘态。虽然它们的体内跟普通绝缘体一样不导电，但是其边缘上却存在受体内拓扑特性保护的导电态，可以用作没有能量耗散的理想导线，具有巨大的潜在应用价值。

我国科学家在拓扑绝缘体领域做出了几个关键的突破性贡献。2009年理论预言三维强拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ， $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 家族，掀起了拓扑绝缘体研究热潮<sup>[2]</sup>。2010年理论预言Cr，Fe等掺杂的 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 家族拓扑绝缘体薄膜可实现量子化反常霍尔效应<sup>[3]</sup>，并于2013年首次实验观察到了该效应<sup>[4]</sup>。随着拓

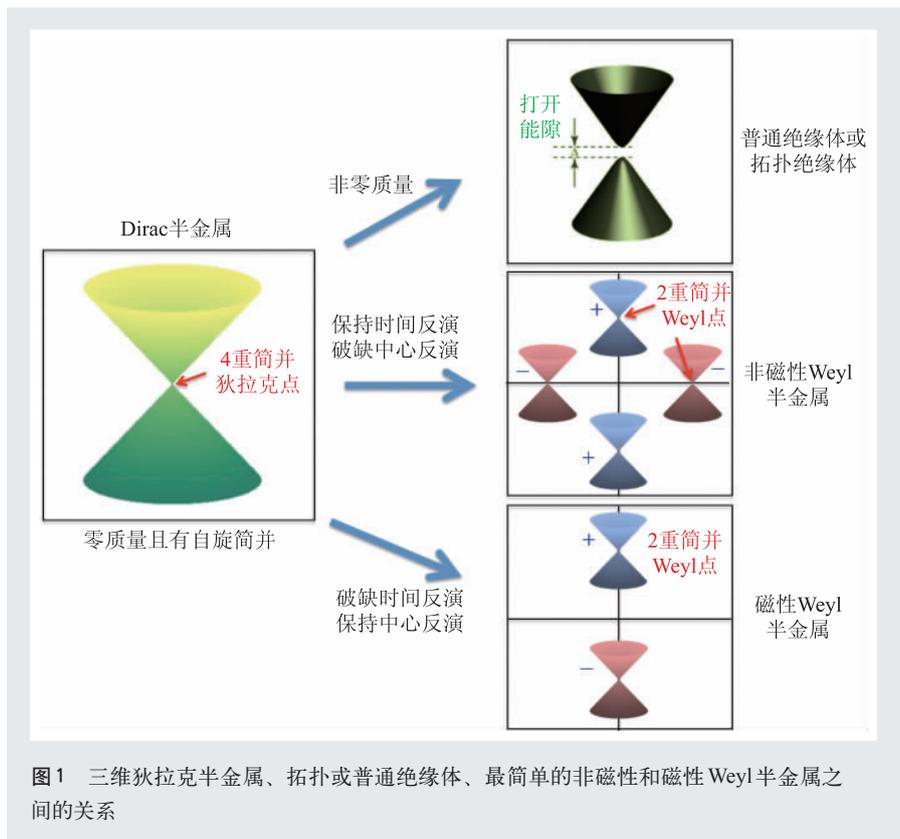


图1 三维狄拉克半金属、拓扑或普通绝缘体、最简单的非磁性和磁性Weyl半金属之间的关系

\* 国家自然科学基金(批准号: 11274359, 11422428)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CBA00108, 2013CB921700)资助项目; 中国科学院先导B项目(批准号: XDB07020100)

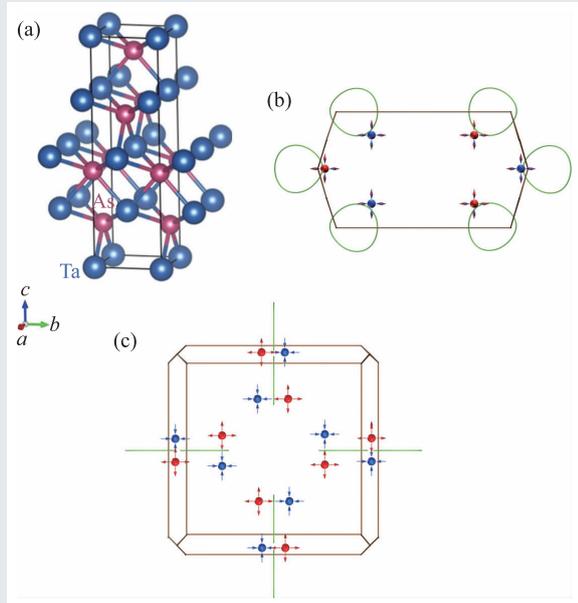
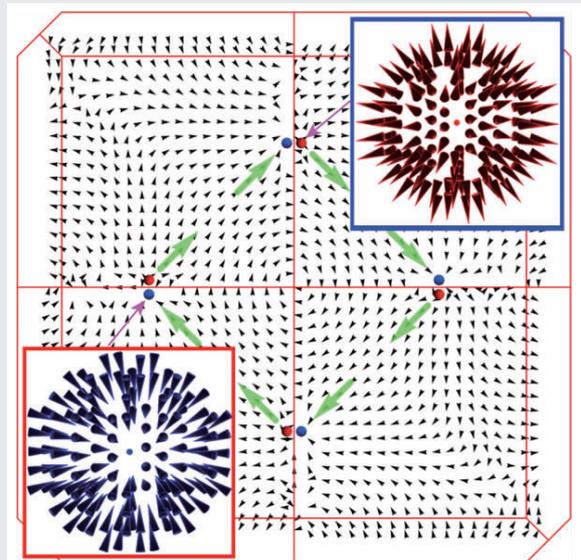


图2 (a)非磁性非中心对称Weyl半金属TaAs家族的晶体结构。12对Weyl费米子在TaAs的晶格动量空间的分布。红蓝色表示相反的磁荷，箭头表示磁力线方向；(b)沿 $a$ 方向的视图，只保留分布在正截面附近的Weyl点，每个可见的Weyl点背后还有一个相反的磁荷点；(c)沿 $c$ 方向的视图，内圈可见的4对Weyl点背后都有一个相同磁荷的点<sup>[13]</sup>

扑绝缘体研究的深入，人们自然而然会问这样一系列的问题：金属是否也有拓扑金属和普通金属的分类？如何分类？会有什么样新奇的物理现象？<sup>[1]</sup>

要回答这些深刻的物理问题，还要从1928年说起。这一年，狄拉克提出描述带有相对论效应电子态的狄拉克方程。第二年，H. Weyl指出狄拉克方程无质量的解描述的是一对新粒子，这一对新粒子具有相反的手性，这就是Weyl费米子。无质量的狄拉克电子是一对手性相反的Weyl费米子的简单叠加，其色散关系就是图1所示的狄拉克锥。自此，寻找Weyl费米子的努力一直持续不断。中微子曾经被认为是Weyl费米子，但是后来发现中微子是有质量的。直到最近拓扑绝缘体和拓扑半金属的快速发展，为在凝聚态体系中产生Weyl费米子提供了新的思路和途径。

由拓扑绝缘体的研究得知，拓扑不变量是定义在封闭的曲面上的，譬如晶格动量空间。虽然金属态因为有部分占据的能带，不能在整个晶格动量空间形成封闭曲面，但是其费米面总是封闭



(001) 表面费米面 @0.05 eV

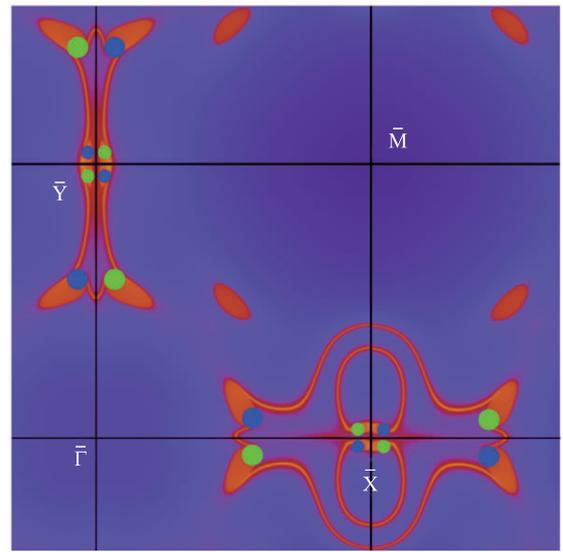


图3 Weyl点附近贝里曲率分布和(001)表面上连接相反磁荷投影点的费米弧。不同颜色点表示投影的磁荷相反，大和小表示磁荷数分别为2和1<sup>[13]</sup>

的，因此类似地可以定义拓扑不变量来标识金属态<sup>[1]</sup>。1984年，M. Berry推广了贝里相位的概念，并指出，晶格动量空间中的能级交叉点就是由贝里曲率定义的规范场的磁单极子，其磁荷就是通过包裹该能级交叉点的费米面的磁通量子数<sup>[5]</sup>。在该能级交叉点附近电子的低能激发就是Weyl费米子，而且不同的磁荷对应不同的手性，也就是说，固体中的这种低能激发可以看作是Weyl费米子在晶格动量空间的存在。2003年，方忠等人通

过第一性原理计算表明,铁磁金属中的Weyl费米子贡献了反常霍尔效应的内禀部分<sup>[6]</sup>。这说明Weyl费米子在固体能带结构中广泛存在。但是这些金属的费米面非常复杂,很难将Weyl费米子的贡献分离出来。因此发现费米面仅仅由Weyl费米子或能带交叉点构成的实际材料成了众多研究者竞相实现的目标。由于这样的金属态费米面上的态密度为零,因此也被称为Weyl半金属。2011年,万贤纲等人通过理论计算提出,烧绿石结构的铋氧化物可能是磁性Weyl半金属<sup>[7]</sup>。同一年,徐刚等人理论预言铁磁尖晶石 $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$ 也是Weyl半金属<sup>[8]</sup>。它们都破缺时间反演,使得手性相反的Weyl费米子不再重叠。但这两个提议都还需要实验的证实。

突破来自狄拉克半金属的发现。2012年和2013年,方忠、戴希研究组理论预言 $\text{Na}_3\text{Bi}$ <sup>[9]</sup>和 $\text{Cd}_3\text{As}_2$ <sup>[10]</sup>是狄拉克半金属,其费米面是由重叠的Weyl费米子对构成的,并受到晶格对称性的保护。他们与实验研究组合作,在2014年证实了这些理论预言,是世界上首次发现三维版本的石墨烯<sup>[11, 12]</sup>。随后,众多的实验和理论工作迅速开展起来,已经形成了当前凝聚态领域的一个研究热点。

在如此密切的关注下,发现真实的Weyl半金属材料显得非常重要和急迫。2014年底,翁红明

等人通过理论计算第一次发现TaAs, TaP, NbAs和NbP等是Weyl半金属<sup>[13]</sup>。不同于以往的理论方案,这一系列材料能自然合成,无需进行掺杂等细致繁复的调控。更重要的是,这类材料没有中心反演但保持时间反演对称,因此没有磁性材料带来的磁畴等复杂性,也可以用角分辨光电子能谱(ARPES)实验来直接观测。图2显示TaAs家族呈体心四方结构,其晶格动量空间存在12对手性相反的Weyl费米子。图3显示Weyl点附近的贝里曲率呈刺猬状分布,与实空间中点电荷产生的电场分布类似,表明它们是动量空间中的磁单极子。在TaAs的(001)表面上,会出现连接不同手性Weyl费米子投影的费米弧,能被ARPES实验直接观测到。

该工作2014年底首先在arXiv网站公开后(arXiv: 1501.00060, 已发表于*Phys. Rev. X*, 2015, 5: 011029),受到了热切关注。许多研究组开始了竞赛般的实验验证工作。在近三个月内,就已经有近8个实验工作证实了这个理论预言,例如观测到了TaAs的表面费米弧<sup>[14]</sup>,由“手性异常”导致的负磁阻现象<sup>[15]</sup>和Weyl点及其附近的三维狄拉克锥<sup>[16]</sup>等。这是自1929年Weyl费米子被提出以来,首次在真实材料中观测到Weyl费米子及其物理特性,具有重要的物理意义。

## 参考文献

- [1] Weng H M, Dai X, Fang Z. *MRS Bulletin*, 2014, 39: 849
- [2] Zhang H, Liu C X, Qi X L *et al.* *Nature Physics*, 2009, 5: 438
- [3] Yu R, Zhang W, Zhang H J *et al.* *Science*, 2010, 329: 61
- [4] Chang C Z, Zhang J, Feng X *et al.* *Science*, 2013, 340: 167
- [5] Berry M V. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1984, 392: 45
- [6] Fang Z, Nagaosa N, Takahashi K S *et al.* *Science*, 2003, 302: 92
- [7] Wan X G, Turner A M, Vishwanath A *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83: 205101
- [8] Xu G, Weng H M, Wang Z *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107: 186806
- [9] Wang Z, Sun Y, Chen X Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2012, 85: 195320
- [10] Wang Z, Weng H M, Wu Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2013, 88: 125427
- [11] Liu Z K, Zhou B, Zhang Y *et al.* *Science*, 2014, 343: 864
- [12] Liu Z K, Jiang J, Zhou B *et al.* *Nat. Mater.*, 2014, 13: 677
- [13] Weng H M, Fang C, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5: 011029
- [14] Lv B Q, Weng H M, Fu B B *et al.* arXiv: 1502.04684; Xu S Y *et al.* arXiv: 1502.03807
- [15] Huang X C, Zhao L X, Long Y J *et al.* arXiv: 1503.01304; Zhang C L *et al.* arXiv: 1503.02630
- [16] Lv B Q, Xu N, Weng H M *et al.* arXiv: 1503.09188