

# 拓扑Weyl半金属简介\*

万贤纲<sup>1,2,†</sup>

(1 南京大学物理学院 南京大学固体微结构国家实验室 南京 210093)

(2 南京大学人工微结构与量子调控协同创新中心 南京 210093)

2015-04-07收到

† email: ccmp@nju.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20150702

## Topological Weyl semimetals

WAN Xian-Gang<sup>1,2,†</sup>

(1 National Laboratory of Solid State Microstructures and school of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(2 Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

**摘要** 材料体系的拓扑量子行为是当前凝聚态物理研究的热点。作为一种新型拓扑量子态, Weyl半金属最近引起了人们的关注。文章以烧绿石结构铱氧化物 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ (其中 $A=Y$ 或稀土元素)为例, 介绍了Weyl半金属的奇特性质: Weyl点受拓扑保护稳定; Weyl半金属有着受拓扑保护的表面态, 即非闭合的费米弧; Weyl半金属的反常霍尔效应与Weyl点的位置有关, 和能带的细节无关; Weyl半金属特有的输运性质。文章还介绍了人们预言的几种Weyl半金属以及相关的实验进展。

**关键词** Weyl半金属, 费米弧, Adler-Bell-Jackiw反常, 5d过渡金属氧化物

**Abstract** Currently, the topological behavior of materials is a hot topic in condensed matter physics. As a new class of topological quantum states, Weyl semimetals have attracted extensive interest. Taking the pyrochlore iridates  $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  ( $A=Y$  or rare earth element) as an example, we discuss the novel properties of Weyl semimetals. Their Weyl nodes are robust, they have special surface states in the form of Fermi arcs, the anomalous Hall effect is proportional to the separation between the Weyl nodes, and they have novel transport properties. We also discuss some materials predicted to be Weyl semimetals, and recent experimental progress.

**Keywords** Weyl semimetal, Fermi arc, Adler-Bell-Jackiw anomaly, 5d transition metal oxides

## 1 引言

众所周知, 材料体系按照其电子能带结构的不同可以划分为金属和绝缘体。近年来的研究表明, 绝缘体可以进一步细分为平庸绝缘体和拓扑绝缘体。拓扑绝缘体表现出与一般绝缘体完全不同的量子现象与物性, 例如: 拓扑保护的表面

态、反弱局域化、量子自旋/反常霍尔效应等等<sup>[1-3]</sup>。因此从被发现后, 拓扑绝缘体立即成为了凝聚态物理、材料科学中的一大热点研究领域<sup>[1-3]</sup>。拓扑绝缘体的一个重要特性是, 小的微扰对其拓扑不会有影响, 这就使得人们可以定义绝缘体的拓扑性质(也就是说, 只要这个微扰不关闭绝缘体的能隙, 绝缘体的拓扑性质就不会发生改变)<sup>[1-3]</sup>。近年来人们发现了一类特别的金属体系, 它们的低

\* 国家自然科学基金(批准号: 11374137, 91122035, 11174124)资助项目

能激发可以用粒子物理中的2分量Dirac方程即Weyl方程来描述<sup>[4,5]</sup>,因此这类材料体系被称为Weyl半金属<sup>[6-8]</sup>。Weyl半金属虽然没有能隙,但是仍然具有拓扑非平庸行为<sup>[6-8]</sup>。本文将先介绍Dirac方程及Weyl方程,然后以 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 为例,介绍Weyl半金属的奇特性质及相关进展。

## 2 Dirac方程

1928年,Dirac引入下面的描写自由电子的相对论波动方程<sup>[5]</sup>:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi, \quad (1)$$

$$H = -i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + mc^2 \boldsymbol{\beta} = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + mc^2 \boldsymbol{\beta},$$

其中 $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ , $\boldsymbol{\sigma}$ 为Pauli矩阵; $\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$ , $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 是 $2 \times 2$ 单位矩阵。与薛定谔方程不同,由(1)式可见,Dirac方程的波函数为4分量。

Dirac方程除了在粒子物理中广泛应用外,近年来人们还发现它可以用来描述多个凝聚态体系的低能激发行为。人们称这类可以用Dirac方程描写低能激发的材料体系为Dirac材料体系<sup>[8-11]</sup>。目前人们已经发现多个Dirac材料体系,如:石墨烯<sup>[12]</sup>、单层氮化硼<sup>[13]</sup>、高温铜氧化物d波超导体<sup>[8]</sup>、拓扑绝缘体<sup>[1-3]</sup>等。在Dirac材料体系中,电子由准动量为 $p$ ,能量为 $E(p)$ 的布洛赫态描写。显然Dirac方程只能描写在布里渊区某些点附近的低能激发,不能描述Dirac材料体系在整个布里渊区的激发行为。与粒子物理中的Dirac方程不一样,Dirac材料体系满足的Dirac方程中 $c$ 不是光速,而是体系的费米速度,所以该方程不满足洛伦兹不变性。由于材料对外场的响应主要由其低能激发谱决定,所以Dirac材料具有类似的热力学、输运、光学等性质<sup>[8]</sup>。

作为著名的Dirac材料,石墨烯一直是人们关注的热点<sup>[12,14]</sup>。石墨烯是由一层以六角形蜂巢结构周期性紧密堆积的碳原子构成的一种二维碳材料。它的每个元胞晶格矢量可以写为 $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$ , $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$ ,其中 $a \approx 1.42 \text{ \AA}$

为最近邻碳原子的距离。石墨烯元胞里面包含2个碳原子,构成A,B两套子格。碳原子的外层电子构型为 $2s^2 2p^2$ ,在石墨烯中有3个价电子形成 $sp^2$ 杂化,它们与3个近邻碳原子上的电子形成 $\sigma$ 键,远离费米能级,而它的 $p_z$ 电子与3个近邻碳原子上的 $p_z$ 电子组成 $\pi$ 键。 $\pi$ 键电子在费米能级附近,所以在石墨烯中的低能激发可以用 $p_z$ 电子来描写。只考虑最近邻之间的相互作用,即电子可以跳到最邻近原子中,这时系统的哈密顿量有如下形式:

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle} (a_i^\dagger b_j + \text{h.c.}),$$

其中 $a_i, b_j$ 分别为元胞 $i, j$ 的A,B子格上 $p_z$ 电子湮灭算符, $\langle i, j \rangle$ 表示求和是对最近邻进行的。做傅里叶变换,得到动量空间哈密顿量为

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & f(k) \\ f^*(k) & 0 \end{pmatrix},$$

其中

$$f(k) = -t(e^{i\delta_1 k} + e^{i\delta_2 k} + e^{i\delta_3 k}) = e^{i k_x a} + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right) e^{-i \frac{k_y a}{2}},$$

$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$ , $\delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$ , $\delta_3 = -a(1, 0)$ 为3个最近邻矢量。由此可得石墨烯的能带色散关系为 $E(k_x, k_y) =$

$$\pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_x a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right)}.$$

由上式可以看出,导带底和价带顶刚好相交于布里渊区 $K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$ 和 $K' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$ 这2个点,费米面正好通过这2个点,所以石墨烯是能隙为零的半金属材料。在布里渊区 $K$ 和 $K'$ 点附近做展开,可得

$$H(q) \approx \hbar V_F \begin{pmatrix} 0 & q_x \pm i q_y \\ q_x \mp i q_y & 0 \end{pmatrix},$$

其中 $q$ 是相对于Dirac点的动量, $V_F \approx 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ 是费米速度。由于石墨烯是非磁性材料,它的自旋简并,所以在以上的公式中没有考虑其自旋。加入自旋,可以看出石墨烯的低能激发可用2个自旋简并的Dirac锥描写,也就是说,在其布里渊

区  $K$  和  $K'$  点附近, 电子满足 4 分量的无质量 Dirac 方程。由于在布里渊区  $K$ ,  $K'$  点附近, 其电子能量与波矢呈线性关系, 石墨烯的量子霍尔效应与一般材料的量子霍尔行为大不相同: 其阶梯序列与标准的阶梯序列相差  $1/2$ , 没有零级平台<sup>[12]</sup>。

石墨烯中的 Dirac 点是受对称性保护存在的, 是拓扑非稳定的。打破其相应的对称性后, 其 Dirac 点将消失。比如, 打破石墨烯中心反演对称性、 $C_{3v}$  对称性, 都能消除其 Dirac 点, 使得石墨烯变成绝缘体<sup>[8]</sup>。2005 年, 人们还发现, 即使不打破其对称性, 通过引入自旋—轨道耦合相互作用, 石墨烯也会变成绝缘体, 而且是拓扑非平庸的绝缘体<sup>[1-3]</sup>。那么材料体系能带结构中能量与动量成线性的 Dirac 锥是否可能具有拓扑稳定性呢? 答案是肯定的, 下面将介绍具有这一行为的 Weyl 半金属<sup>[6-8]</sup>。

### 3 Weyl 方程

在 Dirac 方程被提出一年以后, Weyl 发现, 当 Dirac 方程中的质量为零时, 该方程可以变成 Weyl 方程<sup>[4]</sup>:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi, H = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} \quad (2)$$

Weyl 方程是静止质量为零、自旋为  $1/2$  的粒子满足的两分量波动方程。Weyl 方程中有  $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}, H] = 0$ , 所以  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}$  守恒,  $\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}$  是自旋沿动量方向的投影, 也是守恒量。因为  $\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})}{|\boldsymbol{p}|} \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})}{|\boldsymbol{p}|} = 1$ , 所以有  $\frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})}{|\boldsymbol{p}|} = \pm 1$ , 其中取  $+1$  的为右旋粒子态, 取  $-1$  的为左旋粒子态。

1930 年, Pauli 认为在  $\beta$  衰变过程中, 除了电子之外, 同时还产生静止质量为零而且电中性的中微子<sup>[15]</sup>。很自然, 人们认为中微子是一种 Weyl 费米子, 它的行为可以用 Weyl 方程描写。但是后来人们发现中微子是有质量的粒子。目前在人们已知的粒子中, 没有一个属于 Weyl 费米子。有意思的是, 最近人们预言有些凝聚态体系的低能激

发可以用 Weyl 方程来描述<sup>[6-8]</sup>, 这类材料被命名为 Weyl 半金属。

## 4 Weyl 半金属

如上所述, Dirac 方程是 4 分量的, 所以 Dirac 材料中的 Dirac 点必须是 4 个能级的交点。而 Weyl 方程是两分量的, 也就意味着 Weyl 半金属中的 Weyl 点必需是 2 个非简并能级的交点。对于同时具有空间反演对称和时间反演不变的材料体系, 每个能带都至少是两度简并的, 因此其能带的交点最少是 4 度简并的。所以在同时具有空间反演对称和时间反演不变的体系中, 不会有 Weyl 半金属材料<sup>[6-8]</sup>。为了得到 Weyl 半金属, 人们需要打破时间反演不变或空间反演对称性<sup>[6-8]</sup>。5d 过渡金属氧化物体系有着较为明显的电子关联相互作用, 往往都是打破时间反演不变的磁性材料<sup>[16-18]</sup>。下面介绍烧绿石结构钷氧化物的能带结构和可能的 Weyl 半金属行为以及 Weyl 半金属特有的性质。

### 4.1 烧绿石结构钷氧化物的电子结构、磁性性质

5d 过渡金属氧化物有着中等强度的电子关联和非常大的自旋轨道耦合强度, 它的自旋序、轨道序对晶格高度敏感, 因此表现出一系列奇特的性质, 近来引起了人们的高度关注<sup>[16-18]</sup>。

烧绿石结构过渡金属氧化物一直是人们感兴趣的研究课题<sup>[19, 20]</sup>。烧绿石结构氧化物属于面心立方晶系, 它的空间群为  $Fd\bar{3}m$  (No.227)。这种结构可以认为是由共顶点的六边钨青铜结构的  $B_2O_6$  八面体和有类赤铜矿 ( $Cu_2O$ ) 结构的  $A_2O$  互相贯穿而成网络结构 (见图 1(a))。其中  $A^{3+}$  占据结晶位置  $16d$  位置  $(1/2, 1/2, 1/2)$ ,  $B^{4+}$  (通常为过渡金属阳离子, 在此为 Ir 离子) 位于结晶位置  $16c(0, 0, 0)$ 。根据对称性, 氧离子分为两类,  $O(1)$  位于  $8b$  位置  $(3/8, 3/8, 3/8)$ ,  $O(2)$  处于  $48f$  位置  $(x, 1/8, 1/8)$ 。内坐标  $x$  值主要由  $A^{3+}$  的半径决定。如果位置参数  $x=3/8$  时, 烧绿石结构中阴离子形成完美的立方排列,  $A$  位多面体是规则的立方体,  $B$  位

多面体是断面成三角形的扁平八面体。 $x=0.3125$ 时,  $B$ 位成为规则的扁平八面体,  $A$ 位扭曲形成断面为三角形的偏三角面体。对于 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ( $A$ 为Y或者稀土元素), 其内坐标 $x$ 介于0.325到0.340之间<sup>[19, 20]</sup>。

实验已合成了一系列烧绿石结构铱氧化物( $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , 其中 $A$ 为Y或者稀土元素)<sup>[21-24]</sup>。实验发现, 随着 $A$ 位元素的变化, 烧绿石结构铱氧化物表现出不同的特性:  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 是绝缘体<sup>[21]</sup>, 随着 $A$ 位原子半径的增大,  $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的电阻下降<sup>[21]</sup>, 当 $A=\text{Nd}$ 时,  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 变为金属<sup>[22]</sup>,  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 表现出Kondo效应并且具有自发的霍尔效应<sup>[23]</sup>。实验还发现, 温度能导致绝缘性的 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 发生金属—绝缘体转变, 而且转变温度和 $A$ 位元素有关。比如 $A=\text{Nd}$ ,  $\text{Sm}$ ,  $\text{Eu}$ ,  $\text{Gd}$ ,  $\text{Tb}$ ,  $\text{Dy}$ ,  $\text{Ho}$ 时,  $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的金属—绝缘体相变温度分别为33 K, 117 K, 120 K, 127 K, 132 K, 134 K和141 K<sup>[24]</sup>。另外, 零场冷却、加场冷却磁化曲线实验表明, 该大类材料体系为磁性材料<sup>[21, 24]</sup>, 由于零场冷却和加场冷却磁化曲线有很大的差异, 早期实验认为 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 是自旋玻璃态<sup>[21]</sup>。

基于局域密度近似的能带理论计算结果表明,  $A$ 位稀土元素 $4f$ 带对 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 费米能级附近的电子结构的影响很小<sup>[6]</sup>, 稀土元素主要是通过改变 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 材料的几何结构从而影响材料的物理性质。随着 $A$ 位原子由 $\text{Nd}\rightarrow\text{Ho}$ , 其原子半径变小。这导致 $\text{Ir}-\text{O}-\text{Ir}$ 键角变小<sup>[21, 24]</sup>。较小的 $\text{Ir}-\text{O}-\text{Ir}$ 键角意味着 $\text{Ir}-\text{Ir}$ 之间的有效的hopping变小,  $\text{Ir}-5d$ 电子受到的屏蔽变小, 从而使其有效库仑关联 $U$ 变大。这是半径较小的稀土元素占据 $A$ 位时

材料有着更大的金属—绝缘体转变温度的原因<sup>[21, 24]</sup>。除了 $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 外, 其他的 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ( $A$ 为稀土元素或Y)材料都有着类似的电子结构和磁性性质, 因此可以以 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 为代表, 对 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的电子结构和磁性性质进行讨论。

$\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 元胞中有4个Ir原子, 每个Ir原子都和其近邻的6个O原子形成八面体, 在此八面体场下, Ir的 $5d$ 轨道分裂为 $e_g$ 和 $t_{2g}$ 轨道, 由于Ir的 $5d$ 轨道实空间很延展, 这使得它有很大的晶体场,  $e_g$ 带约在费米能2 eV以上, 在费米能附近的能带主要是Ir的 $t_{2g}$ 带, 它和O- $2p$ 带有强烈的杂化作用。对于 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 而言, 由于强的自旋轨道耦合作用,  $t_{2g}$ 带分裂为 $J_{\text{eff}}=1/2$ 和 $J_{\text{eff}}=3/2$ 这两个子带<sup>[6]</sup>。 $J_{\text{eff}}=3/2$ 带远离费米面, 靠近费米能是8个 $J_{\text{eff}}=1/2$ 带。不打破时间反演对称性的LDA+SOC(局域密度泛函结合自旋轨道耦合)计算表明, 在 $\Gamma$ 点这8个 $J_{\text{eff}}=1/2$ 能级劈裂为2-4-2简并。在 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 中Ir是+4价的, 每个Ir有5个 $5d$ 电子, 其中4个填 $J_{\text{eff}}=3/2$ 态, 一个填 $J_{\text{eff}}=1/2$ 态。元胞里面有4个Ir, 所以 $J_{\text{eff}}=1/2$ 的带填4个电子。考虑到在 $\Gamma$ 点 $J_{\text{eff}}=1/2$ 是2-4-2简并, 所以在 $\Gamma$ 点4度简并的能带只填2个电子。研究表明,  $5d$ 材料体系的电子关联 $U$ 远小于 $3d$ 电子体系, 因此只有打破时间反演不变性,  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 才有机会在实验观测中表现绝缘体行为<sup>[6]</sup>。

为了找寻 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的基态磁构型, 先选取多个初始的磁构型(包括所有可能的Ir初始磁矩都沿(100)、(111)、(110)、(120)面的铁磁和反铁磁构型), 分别作LSDA+U+SOC(局域自旋密度泛函加电子关联 $U$ 加自旋轨道耦合)计算<sup>[6]</sup>。计算发现,

在自洽过程中, Ir磁矩的取向都有向Ir正四面体的(111)方向(即指向或者指离Ir组成的正四面体中心)转动的趋势<sup>[6]</sup>。这提示人们, 由于晶体场、自旋轨道耦合以及Ir离子之间磁相互作用, 使得Ir的磁矩选择(111)方向。所以可考虑所有的Ir磁矩(111)取向的可能: 全进/全出构型, 即组成正四面体的4个Ir的磁矩要么全部指向正四面体的中心, 要么全部指离正四面体的中心(见

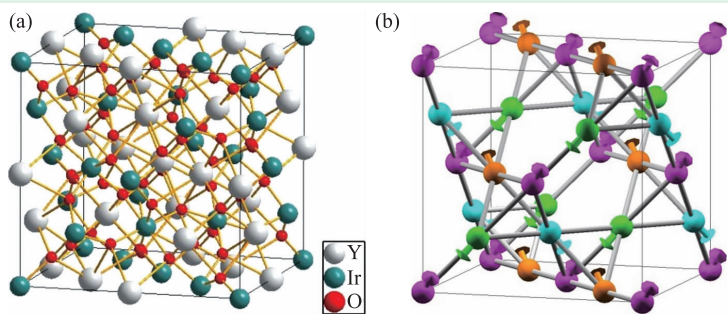


图1 (a)烧绿石结构图; (b)全进/全出的磁构型图

图1(b)); 2进/2出, 即自旋冰磁构型; 3进/1出磁构型, 即组成正四面体的3个Ir的磁矩指向正四面体的中心, 剩下的一个Ir的磁矩指离正四面体的中心。计算结果发现, 这种长程、公度、非共线的全进/全出磁构型总能最低。而且这种构型是唯一在自洽计算过程中保持稳定的磁构型(即在LSDA+U+SOC计算自洽的过程中, 其磁矩方向严格保持全进/全出, 不发生变化)。对于计算考虑的所有其他的磁构型, 即使其总能收敛得很好, 可是其磁矩的取向在自洽循环时仍然一直在发生变化。全进/全出构型的净磁矩为零这也和实验结果一致<sup>[21]</sup>。另外 $U=2.0$  eV时, LSDA+U+SOC给出全进/全出构型为绝缘体, 这也和实验相符<sup>[21]</sup>, 而所有其他的磁构型都得到金属行为。为了探寻可能的 $q$ 不为零的构型, 也可以计算其费米面, 计算没有发现强的费米面nesting行为。基于磁力理论和线性响应理论<sup>[25]</sup>, 也计算了与波矢 $q$ 有关的磁交换作用 $J(q)$ , 发现这个量的极值在 $q=0$ 处。综合上面这些理论研究结果, 可以认为烧绿石结构Ir氧化物的基态磁构型为全进/全出的 $q=0$ 的公度长程序<sup>[6]</sup>。目前这一理论预言已经被多个实验所证实<sup>[26]</sup>。

由于 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 材料系统有磁性, 所以它们不会是有着时间反演不变性的拓扑绝缘体<sup>[1-3]</sup>。那么 $5d$ 电子强自旋轨道耦合和电子关联共同作用下是否可能存在新型拓扑量子态? 如前所述, 随着 $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 上 $A$ 位原子的变化, Ir- $5d$ 电子的有效电子关联强度 $U$ 也将发生变化, 约在 $1.0$  eV到 $2.0$  eV之间<sup>[6, 18]</sup>, 所以系统地研究该材料体系是一个有意义的课题。

众所周知, 在基于平均场理论框架下的LDA+U方法中,  $U$ 的主要影响是使得占据的能带向下移动, 而没有占据的能带向上移动, 所以增

加 $U$ 将使得能隙变大<sup>[27]</sup>。与一般材料完全不同,  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 表现出奇怪的现象。如图2所示, 当 $U=2.0$  eV时, 材料有很小的能隙, 可是当减小 $U$ 时, 由能带图看似能隙在变大。注意到材料满足中心反演对称性时, 中心反演对称会使得实空间 $\mathbf{r}=-\mathbf{r}$ , 波矢 $\mathbf{k}=-\mathbf{k}$ 。所以对于满足 $\mathbf{k}=-\mathbf{k}+\mathbf{G}$ (其中 $\mathbf{G}$ 为倒格矢)的时间反演不变波矢, 可以对其能带标示宇称, 进而分析 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 能带的反常行为。烧绿石结构的8个时间反演不变波矢分别为 $\Gamma=(0, 0, 0)$ ;  $X, Y, Z$ (它们为 $\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$ ,  $\frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$ 和 $\frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$ ); 以及4个 $L$ 点(分别为 $\frac{\pi}{a}(1, 1, 1)$ ,  $\frac{\pi}{a}(-1, 1, 1)$ ,  $\frac{\pi}{a}(1, -1, 1)$ 和 $\frac{\pi}{a}(1, 1, -1)$ )。如前面所述, 费米能附近的带均为Ir的 $t_{2g}$ 带, 由于强的自旋轨道耦合,  $J_{\text{eff}}=3/2$ 带的能量比 $J_{\text{eff}}=1/2$ 带低, 是完全填充的满带。所以在讨论可能的拓扑量子态时不用讨论 $J_{\text{eff}}=3/2$ 带。 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 元胞里面有4个Ir, 所以只需要考虑4个占据的 $J_{\text{eff}}=1/2$ 带的宇称即可。以一个Ir原子为反演中心时,  $X, Y, Z$ 的宇称一样, 虽然根据对称性4个 $L$ 点也等价, 但是这时候 $L(\frac{\pi}{a}(1, 1, 1))$ 与其他3个 $L$ 点的宇称相反。表1中列出了 $U=2.0$  eV和 $U=1.5$  eV时, 8个时间反演不变点上占据的4个 $J_{\text{eff}}=1/2$ 带的宇称。可见 $\Gamma$ 点和 $X, Y, Z$ 点上的宇称并不发生变化, 但是随着 $U$ 的变化, 4个 $L$ 点上的宇称发生了变化。设在 $U_c$ 时宇称发生翻转, 这时候, 在 $U>U_c$ 和 $U<U_c$ 这2种情况下, 只有一个相是绝缘体<sup>[6]</sup>。可以证明, 当宇称发生翻转时, 一对Weyl点由时间反演不变点产生或者消灭<sup>[6]</sup>。计算表明, 当 $U>1.8$  eV时, 得到的宇称和 $U=2.0$  eV时是一样的。所以人们可以断定 $U>1.8$  eV的相为Mott绝缘体, 而 $U<1.8$  eV时, 费

表1 LSDA+U+SOC得到的 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 的4个占据 $J_{\text{eff}}=1/2$ 带(从左向右能级能量增加)的宇称(表中符号+表示宇称为+1, 符号-表示宇称为-1)

| 相位         | $\Gamma$ | $X, Y, Z$ | $L$ | $L(\times 3)$ |
|------------|----------|-----------|-----|---------------|
| $U=2.0$ eV | ++++     | +++       | +++ | +++           |
| $U=1.5$ eV | ++++     | +++       | +++ | +++           |

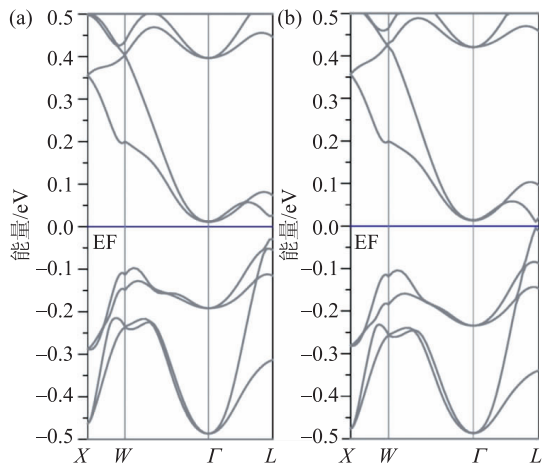


图2 LSDA+U+SOC的 $Y_2Ir_2O_7$ 能带(EF表示费米能级); (a) $U=1.5$  eV的结果; (b) $U=2.0$  eV的结果

米能上出现 Weyl 点<sup>[6]</sup>。

通过在布里渊区取很密的网格点，人们也用 LSDA+U+SOC 方法仔细地搜寻了  $Y_2Ir_2O_7$  中可能的 Weyl 点。计算表明，当  $U=1.5$  eV 时，在波矢  $k=(0.52, 0.52, 0.30) \frac{2\pi}{a}$  处有一个 Weyl 点。由于材料有绕着  $L$  点的 3 度旋转对称性，绕着  $z$  轴的 4 度旋转对称性以及中心反演对称性，所以这个材料有着 24 个 Weyl 点。计算表明，没有其他能带通过费米面，而体系具有中心反演对称性，这使得 24 个 Weyl 点的能量相同。所以费米面正好通过 Weyl 点，材料表现出半金属特性<sup>[6]</sup>。

### 4.2 Weyl 点受拓扑保护稳定性

因为  $A_2Ir_2O_7$  材料有着长程磁序，这打破了时间反演不变性，因此这里得到的是 2 个非简并能级的交点叫 Weyl 点。因为是两个非简并能级的交点，在 Weyl 点附近只有 2 个能带，其哈密顿量可以写为

$$H = \begin{pmatrix} A & B+iC \\ B-iC & -A \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{pmatrix},$$

该方程的 2 个本征值为  $E = D \pm \sqrt{A^2 + B^2 + C^2}$ ，所以 Weyl 点的存在需要同时满足  $A=0, B=0, C=0$  这 3 个条件。而三维体系有 3 个参数  $k_x, k_y, k_z$ 。当然这并不能保证总是可以使得上面 3 个条件成立。但是如果一旦有了 Weyl 点时，外界的微扰就只能

使得 Weyl 点移动，除非 2 个手性相反的 Weyl 点相遇，才能使得 Weyl 点消失。也就是对哈密顿量小的微扰，可以通过调节  $k_x, k_y, k_z$  (即通过移动 Weyl 点在布里渊区的位置)使得上述的 3 个条件成立，这时体系还是有 Weyl 点。需要强调的是，上面的分析没有用任何对称性，这表明在三维材料中 Weyl 点的稳定性是受拓扑保护的，和材料具体的对称性无关。

如前所述， $U=1.5$  eV 时，LSDA+SOC+U 计算给出 Weyl 点在  $k=\pm(0.52, 0.52, 0.30) \frac{2\pi}{a}$  和其对称点处。LDA+U+SOC 计算证实，稍稍变化  $U$  的数值不能使得 Weyl 点消失。计算表明，随着  $U$  的增加，Weyl 点将向时间反演不变点  $L$  点移动。当  $U=1.8$  eV 时，有着相反手性的 Weyl 点在  $L$  点相遇消失，这时候材料变为绝缘体。随着  $U$  的减小，Weyl 点向时间反演不变点  $X$  点移动，并且在  $U=1.0$  eV 时有着相反手性的 Weyl 点在  $X$  点相遇，这时能级的交点消失。这也显示保持平移对称的微扰项不能使得能隙打开，而只能使 Weyl 点在  $k$  空间内移动。因此，Weyl 费米子体系是拓扑稳定的。不幸的是，计算表明，对于小  $U(U=1.0$  eV) 的情况，在布里渊区其他地方有能带通过费米能，材料变为金属而不是具有特别磁电耦合的 Axion 绝缘体<sup>[6, 28]</sup>。

下面以一个三维两能带模型<sup>[29]</sup>为例子来进一步描述 Weyl 半金属：

$$H_k = [2t_x(\cos k_x - \cos k_0) + m(2 - \cos k_y - \cos k_z)]\sigma_x + 2t_y \sin k_y \sigma_y + 2t_z \sin k_z \sigma_z \quad (3)$$

该哈密顿量有空间反演对称性，但是没有时间反演不变性。容易看出上述的哈密顿量有 2 个 Weyl 点，它们的位置在  $k=\pm(k_0, 0, 0)$  处，这 2 个 Weyl 点通过中心反演对称性联系。人们容易看出，对这个哈密顿量做任何保持平移对称的微扰都不能使得能隙打开，而只能使 Weyl 点在  $k$  空间内移动位置。除非这 2 个 Weyl 点在时间反演不变点相遇，这时候它们将成对消失，材料由半金属变为绝缘体。另外也可以看出，打破中心反演对称性也不能消除 Weyl 点。可以把哈密顿量在 Weyl 点附近做展开，这样就得到

$$H_{\pm} = v_x p_{\pm}^x \sigma_x + v_y p_{\pm}^y \sigma_y + v_z p_{\pm}^z \sigma_z, \quad (4)$$

其中  $v_x = 2t_x \sin k_0$ ,  $v_y = 2t_y$ ,  $v_z = 2t_z$ ,  $\mathbf{p}_{\pm} = (\pm k_x \mp k_0, k_y, k_z)$ 。  $\mathbf{p}_{\pm}$  的3个分量都是小量。

Weyl方程描述无质量的费米子<sup>[4]</sup>。中心反演对称改变速度, 所以通过中心反演对称性联系的2个Weyl点有着相反的手性,  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 里面的24个Weyl点一半是左旋, 一半是右旋的。事实上, 根据Nielsen—Ninomiya理论, Weyl点必须左旋/右旋成对出现<sup>[30]</sup>。

基于Weyl方程(2)式, 可以证明Weyl半金属中的Weyl点带有拓扑量子数<sup>[6-8]</sup>。晶格中的布洛赫电子有着等效的矢势(即Berry连接)  $A(\mathbf{k}) = i \langle u(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u(\mathbf{k}) \rangle$ , 以及相应的场强(即Berry曲率)  $F(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times A(\mathbf{k})$ <sup>[31]</sup>。

把Weyl方程(2)式写为  $H = \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ,  $\mathbf{h} = h(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ 。这个两能级体系哈密顿量的2个本征函数分别为:

$$|u_{-}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |u_{+}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

由此可以求出对应的Berry曲率<sup>[31]</sup>:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} \frac{\mathbf{h}}{h^3}. \quad (5)$$

可见这一两能级系统的有效场由  $\mathbf{h} = 0$  (即两能级的交点)的点荷产生<sup>[31]</sup>。因此Weyl点可以看成是动量空间的“磁”单极, “磁”单极的符号由其手性决定(即左旋、右旋对应于不同的“磁”荷符号)<sup>[31]</sup>。它是Berry曲率的源点。由(5)式可知, Berry曲率的任意闭合曲面的积分, 其积分值

(陈数)为该闭合曲面包括的Weyl点之和, 积分符号为Weyl点所对应的“磁”荷符号。

由于Berry曲率绕整个布里渊区的积分为零, 所以对应的总的“磁”荷必须为零, 即Weyl点必须成对出现<sup>[30]</sup>。由此也可再次看出, Weyl点是拓扑稳定的, 一个Weyl点不能单独产生或消失, 它们必须成对消失或者出现。

### 4.3 拓扑表面态费米弧

对于拓扑绝缘体, 一个特征的标志是其具有和对称性无关只与材料拓扑性质有关的表面态<sup>[1-3]</sup>。如上所述, Weyl半金属中Weyl点受拓扑保护, 因而稳定, 它是否也有特征的表面态现象呢?

如图3(a)中红色圆柱所示, 在材料的布里渊区中画一个圆柱面。设在此圆柱面上波矢  $\mathbf{k}$  为  $k_{\lambda} = [k_x(\lambda), k_y(\lambda)]$ , 其中  $\lambda: 0 \rightarrow 2\pi$ 。所以在此圆柱面上的哈密顿量可以写为  $H(\lambda, k_z) = H(k_{\lambda}, k_z)$ , 只要这个圆柱面没有通过Weyl点, 这时候这个哈密顿量就可以看作是一个二维绝缘体系统的哈密顿量。  $H(\lambda, k_z)$  中的2个参数  $\lambda, k_z$  都有周期性, 如图3(a)所示, 该圆柱面是动量空间的一个闭合曲面<sup>[31]</sup>, 根据前面有关两能级体系的讨论可知, 这个二维子体系的陈数(Chern number)等于该体系Berry曲率的积分:  $\frac{1}{2\pi} \int F dk_z d\lambda$ , 根据Stokes定理, 它就等于圆柱面包含的Weyl点对应的点“磁”荷之和<sup>[31]</sup>。如果圆柱面只包含一个Weyl点, 则陈数为1, 即该二维子体系为量子霍尔绝

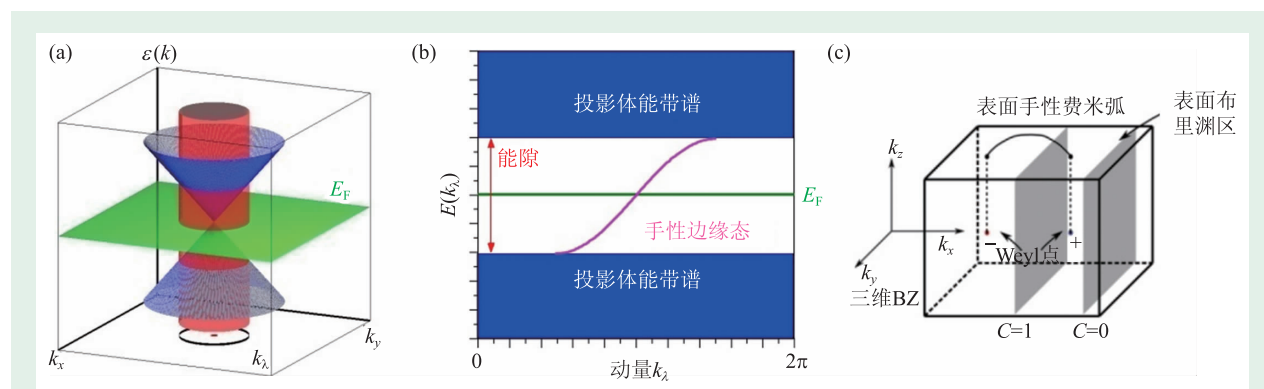


图3 Weyl半金属中费米弧出现的示意图

缘体。设系统有一个 $z=0$ 的边界时候，量子霍尔效应告诉人们，该体系一定有一个有手性的金属边缘态<sup>[1, 2]</sup>，如图3(b)所示。人们可以变化圆柱面的大小，只要这个圆柱面包含一个Weyl点，则一定有一个金属边缘态。当圆柱面没有包含Weyl点，或者所包含Weyl点的点“磁”荷之和为零时，上述受拓扑保护的金属边缘态消失。这样就可以证明了表面态在费米能形成一个费米弧，即与常见的情况不同，Weyl半金属表面态的费米面不是闭合的，而是一个开放的线段，这个开放的线段连接2个手性相反的Weyl点在这个表面上的投影点<sup>[6]</sup>。

美国波士顿学院的冉鹰等人也用上面的方程(3)为例讨论了Weyl半金属中的费米弧<sup>[29]</sup>。如前所述，(3)式有2个Weyl点，它们在 $p = \pm k_0, 0, 0$ 处。固定 $k_x$ ( $k_x$ 是不等于 $k_0$ 的任意值)，这时候 $H_{k_x}(k_y, k_z)$ 可以看作是1个二维系统的哈密顿量(如图3(c)的灰色切面图所示)。因为 $k_x \neq k_0$ ，所以 $H_{k_x}(k_y, k_z)$ 对应的是一个二维的绝缘体系统。容易证明，只要 $k_x$ 在 $(-k_0, k_0)$ 之间，这时候 $H_{k_x}(k_y, k_z)$ 对应体系的陈数为1，否则为0。陈数

为1意味着 $H_{k_x}(k_y, k_z)$ 对应的是整数量子霍尔效应体系。这样只要 $k_x$ 在 $(-k_0, k_0)$ 之间，这个二维体系总是有具有手性的金属边缘态<sup>[1, 2]</sup>。对于 $yz$ 面，这时 $\pm(k_0, 0, 0)$ 这两个手性相反的Weyl点在该面上的投影点重合，所以对于这个面就不会有费米弧。因此，由图3人们可以很好地理解Weyl半金属表面态费米面不是闭合的，而是开放的线段。这个开放的线段连接2个手性相反Weyl点在该表面的投影点。

如前所述，对于 $Y_2Ir_2O_7$ ，当电子关联 $U=1.5$  eV时，Weyl点在 $(0.52, 0.52, 0.30) \frac{2\pi}{a}$ 以及它的对称点上。对于(001)面而言，由于手性相反的Weyl点投影到一个点上，所以(001)面没有受保护的态。而对于(110)和(111)面，手性相反的Weyl点在这些面上的投影并不重合，所以这些面有起始于左旋Weyl点的投影点终结于右旋Weyl点的投影点的费米弧<sup>[6]</sup>。

通过构造紧束缚模型，人们也研究了 $Y_2Ir_2O_7$ 的表面态<sup>[6]</sup>。为了简单，只考虑Ir原子 $5d$ 的 $t_{2g}$ 轨道，由于Ir原子组成正四面体，所以最近邻Ir原子的轨道形成 $\sigma$ 类和 $\pi$ 类这2种键，设它们的hopping系数分别为 $t$ 和 $t'$ 。数值结果表明，必须引进次近邻的hopping系数 $t''$ 才能模拟Weyl点的出现。设置参数为： $t'=0.5t$ ， $t''=-0.2t$ ，自旋轨道耦合为 $2.5t$ 。为了模拟全进/全出的磁构型，对于不同的Ir原子，取指向/背离Ir正四面体中心方向为其量子化轴，并且加入了强度为 $0.1t$ 的Zeeman劈裂。这些参数可以大致描述LSDA+SOC+U计算得到的Weyl点。然后用这个紧束缚模型计算了其(110)面和(111)面的表面态。如图4所示，紧束缚计算的结果证实了费米弧的存在。

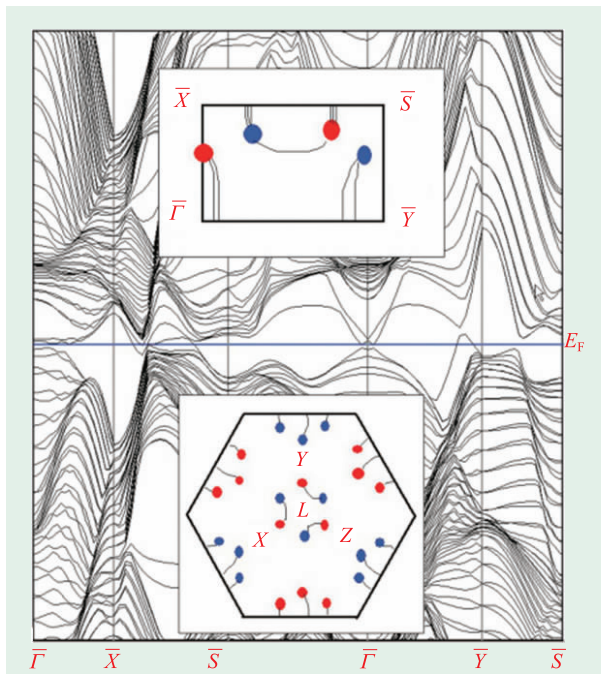


图4 紧束缚模型计算得到的费米弧(上面的插图为(110)表面的结果，下面的插图为(111)表面上的结果。红点和蓝点代表手性不同的Weyl点在这些表面上的投影点)

#### 4.4 外场的拓扑响应

除了有受拓扑保护的表面态外，拓扑绝缘体对外场也有特别的响应<sup>[1-3]</sup>。值得强调的是，Weyl半金属对外场也有很特别的响应。冉鹰等人证明，Weyl半金属的霍尔电导只和Weyl点的符号和位置有关<sup>[29]</sup>：对于Weyl半金属而言，它的反常



霍尔电导为  $\sigma_{ij} = \frac{e^2}{2\pi h} \epsilon_{ijk} \gamma_k$ , 其中  $\boldsymbol{\gamma}$  是陈矢量, 它由 Weyl 点的位置  $\mathbf{p}_i$  和符号  $\zeta_i$  决定,  $\boldsymbol{\gamma} = \sum_i (-1)^{\zeta_i} \mathbf{p}_i$  [29]。

这个问题还是可以用(3)式及图 3(c)来讨论。如图 3(c)所示, 布里渊区里面 2 个 Weyl 点之间的区间可以看成是由很多个二维面组成(如图 3(c)中的灰色切面)。如上所述, 每一个这样的 2 维面对应的陈数都为 1(即每一个面对应于一个量子霍尔效应体系)。所以净霍尔效应与 2 个 Weyl 点之间的距离有关。由于立方对称性,  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  的反常霍尔电导为零, 冉鹰等人预言加压将打破其对称性, 诱导出反常霍尔电导, 而且此效应不依赖于能带的具体细节, 只与 Weyl 点的位置有关 [29]。

#### 4.5 Adler—Bell—Jackiw 反常

Weyl 点有手性, 而且具有不同的动量。动量守恒要求粒子不能在不同的 Weyl 点之间散射, 所以不同的 Weyl 点的粒子可以用不同的方程来描写。在电磁场中, 不同手性粒子可以用下面的方程描述 [7]:

$$H_{RL} = \mp \hbar v \phi_{LR}^+ \left( \nabla - \frac{ieA}{\hbar} \right) \phi_{LR} \quad .$$

它们的变化分别为 [7]

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_{RL}(r)) = \pm \frac{e^2}{\hbar^2} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad ,$$

也就是说如果只有一个 Weyl 点, 粒子数不守恒。这就是场论中的 ABJ(Adler—Bell—Jackiw)反常 [32, 33]。

对于凝聚态中的 Weyl 半金属而言, ABJ 反常表示加上外磁场以及与其平行的外电场后, 将使得电子在手性不同的 Weyl 点之间运动, 运动的速率正比于  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$  [7]。

美国加州大学河滨分校的 Aji 研究了与 ABJ 反常相关的输运现象 [34]。他们发现最低朗道能级的能量与动量在外磁场方向的分量相关, 低能模式的速度与外场的方向相关 [34]。由于不同手性的 Weyl 点的波矢不同, 所以电子在不同 Weyl 点之间的散射需要较长时间, 这使得沿着外磁场方向, Weyl 半金属体系有很大的纵向电导, 该纵向电导正比于外磁场, 导致 Weyl 半金属有着负磁电

阻 [7, 34, 35]。

#### 4.6 可能的 Weyl 半金属材料

除了上面介绍的  $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  体系外, 人们还预言了其他多个体系为 Weyl 半金属 [36–46], 现介绍如下:

基于 LSDA+U+SOC 方法, 人们研究了大的自旋轨道耦合、大的晶体场以及不可忽略的电子关联效应对尖晶石结构 5d 过渡金属氧化物  $\text{BOs}_2\text{O}_4$  ( $B=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ ) 电子结构、磁性性质的影响 [36]。研究表明, 键角对 5d 过渡金属氧化物的物性影响很大。与  $A_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  不同,  $\text{BOs}_2\text{O}_4$  展现铁磁性, 而且根据其电子关联的不同, 这类材料可能是 Weyl 半金属或者具有特别磁电响应的 Axion 绝缘体 [36]。

基于第一性原理计算, 中国科学院物理研究所方忠、戴希研究组研究了铁磁性材料  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$  [37]。 $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$  具有典型的尖晶石结构, 如果把  $\text{Cr}_2\text{Se}_4$  看成一个基团 X, 那么  $\text{HgX}$  形成闪锌矿结构。计算表明, 该材料体系 Cr 为正 3 价,  $\text{Cr}^{3+}$  离子的 3d 带有着很强的自旋极化, 它的电子构型为  $t_{2g}^{3\uparrow} e_g^{0\uparrow} t_{2g}^{0\downarrow} e_g^{0\downarrow}$ 。其自旋向上的能带为正常的结构, 即 Hg 的 6s 带比 Se 的 4p 带能量更高。Cr 的自旋向下 3d 带与 Hg 的自旋向下 6s 带的杂化效应降低了 Hg 自旋向下 6s 带的能量, 这使得在布里渊区  $\Gamma$  点出现反带结构: Hg 自旋向下 6s 带比 Se 自旋向下 4p 带能量更低。分析发现该材料的低能激发可以用  $H_{\text{eff}} = \begin{bmatrix} M_0 - \beta k^2 & Dk_x k_z \\ Dk_x k_z & -M_0 + \beta k^2 \end{bmatrix}$  来描述, 其中  $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ ,  $M_0 > 0$ ,  $\beta > 0$ 。布里渊区中  $(0, 0, \pm \sqrt{M_0/\beta})$  这 2 点为 Weyl 点, 而且满足  $-\sqrt{M_0/\beta} < k_z < \sqrt{M_0/\beta}$  的面上的陈数为 2。同时, 理论计算进一步预言, 如果把  $\text{HgCr}_2\text{Se}_4$  材料制成有限厚度的量子阱, 可以实现量子化的反常霍尔效应。

美国加州大学 Santa Barbara 分校的 Balents 等人也预言, 普通绝缘体和磁掺杂三维拓扑绝缘体材料组成的多层膜体系是有着一对 Weyl 点的 Weyl 半金属 [38]。该体系有着与其 Weyl 点之间距离相关的反常霍尔效应。在零温时, 其直流电导不

为零, 它的德鲁德(Drude)权重与温度的平方成正比, 表现反常金属行为。

美国宾夕法尼亚州立大学的刘朝星和美国斯坦福大学祁晓亮等人系统地研究了 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ <sup>[39]</sup>。他们发现, 适当浓度 Cd 掺杂的 3 维拓扑绝缘体 HgTe 的能带有 Dirac 锥, 然后掺入磁性离子 Mn, 并施加外磁场后将使得 Dirac 点分成 2 个手性相反的 Weyl 点, 材料变为 Weyl 半金属。这样得到的 Weyl 半金属有如下 2 个特别的特性: 第一, 其霍尔电导 $\sigma_{xy}$ 正比于其磁化强度, 从而与体系的温度密切相关; 第二, 有着奇特霍尔电导与外磁场角度的依赖关系。

除了上述打破时间反演对称性的 Weyl 半金属外, 打破空间反演对称性的 Weyl 半金属也引起了人们的关注<sup>[40-45]</sup>。Balents 等人发现, 对于有时间反演对称但没有中心反演对称性的体系, Weyl 半金属相位于平庸绝缘体和拓扑绝缘体之间<sup>[40, 47]</sup>。他们进一步预言 HgTe/CdTe 多层膜体系是 Weyl 半金属, 而且其电导具有高度的各向异性<sup>[40]</sup>。基于密度泛函理论计算, 人们预言三角相的硒和碲是 Weyl 半金属, 而且其有着有趣的自旋结构<sup>[41]</sup>。注意到 LaBiTe<sub>3</sub> 和 LuBiTe<sub>3</sub> 为拓扑绝缘体, BiTeI 为拓扑平庸绝缘体, 美国 Rutgers 大学 Vanderbilt 等人研究了这些材料形成的固溶体, 他们的密度泛函理论结构表明, 当  $x \approx 38.5\% - 41.9\%$  时, LaBi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>Te<sub>3</sub> 为 Weyl 半金属, 而  $x \approx 40.5\% - 45.1\%$  时, LuBi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>Te<sub>3</sub> 为 Weyl 半金属<sup>[42]</sup>。拓扑绝缘体 TlSbSe<sub>2</sub>, TlSbTe<sub>2</sub>, TlBiSe<sub>2</sub>, TlBiTe<sub>2</sub> 和拓扑平庸绝缘体 TlSbS<sub>2</sub>, TlBiS<sub>2</sub> 之间的中间相 TlBi(S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>)<sub>2</sub> 和 Tl-Bi(S<sub>1-x</sub>Te<sub>x</sub>)<sub>2</sub> 也被预言为 Weyl 半金属<sup>[43]</sup>。最近方忠、戴希组系统地研究了多个没有中心反演对称性的材料<sup>[44]</sup>。通过计算体系的镜面陈数和拓扑  $Z_2$  不变量<sup>[1]</sup>, 他们发现 TaAs, TaP, NbAs 和 NbP 为 Weyl 半金属<sup>[44]</sup>。

最近具有三维 Dirac 点的 Dirac 半金属材料也引起了人们的高度关注<sup>[8-11, 48-52]</sup>。特别是方忠、戴希研究组预言的 Na<sub>3</sub>Bi 和 Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub> 已经被实验所证实<sup>[51, 52]</sup>。通过打破时间反演对称性或空间反演对称性, 人们也可以把 Dirac 半金属转变为 Weyl

半金属<sup>[10, 11, 49, 50]</sup>。

## 4.7 实验工作

实验上验证 Weyl 半金属的最好方式是用 ARPES (角分辨光电子能谱) 直接测量 Weyl 点或费米弧。但是由于材料制备等原因, 相关的工作有一定的困难。近来, 美国肯塔基大学曹刚等人合成了一种新的烧绿石结构铋氧化物 Bi<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub><sup>[53]</sup>。和稀土元素以及 Y 不同, Bi 的 6*p* 电子和 Ir 的 5*d* 电子有很大的杂化, 5*d* 电子受到了更大的屏蔽, 从而大大减小了 5*d* 电子的电子关联效应, 因此该材料体系表现金属性质<sup>[53]</sup>。和 ARPES 的结果相比较, 能带计算的结果非常好, 这也侧面支持了文献[6]的理论研究结果<sup>[53]</sup>。2012 年日本东京大学的 Tokura 等人研究了 Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 的光导谱, 他们发现掺 Rh 可以使材料变为 Weyl 半金属的迹象<sup>[54]</sup>。2013 年美国加州大学 Berkeley 分校 Ramesh 等人系统地研究了 Bi<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 的输运行为<sup>[55]</sup>。他们发现外延生长的 Bi<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 薄膜表现线性磁电阻, 而且其在 35 T 的强磁场下仍未饱和, Ramesh 等人认为, 这些反常的磁电阻现象是由材料中的 Weyl 点导致的<sup>[55]</sup>。人们还发现 A<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 的输运行为<sup>[54, 56]</sup>可以用 Weyl 半金属很好地解释<sup>[35, 57]</sup>。

韩国学者 Kim 等人也系统地研究了 Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> 体系, 他们首次在实验中观测到了与 Weyl 半金属手性相关的输运特性<sup>[58]</sup>。Bi 有着拓扑平庸的能带结构, 而 Sb 有着拓扑非平庸的能带结构, 所以可以通过变化  $x$  使得 Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> 的能带中出现一个 Dirac 点<sup>[47]</sup>。他们发现, Bi<sub>0.97</sub>Sb<sub>0.03</sub> 是有着 Dirac 点的材料, 外加磁性将使得其 Dirac 点劈裂为 2 个 Weyl 点, 材料变成 Weyl 半金属。他们成功地在 Bi<sub>0.97</sub>Sb<sub>0.03</sub> 中观测到了与 ABJ 反常相关的弱反局域化、负磁阻等一系列奇特现象。

值得关注的是, 与上述其他通过掺杂、构造多层膜得到的没有中心反演对称性的 Weyl 半金属不同, TaAs 等体系更容易制备。最近中国科学院物理研究所的团队也在 TaAs 中观测到了与 ABJ 反常相关的负磁阻<sup>[59]</sup>。通过仔细分析 Shubnikov de

Haas 结果, 他们也发现了 Weyl 点存在的迹象<sup>[59]</sup>。这些实验结果成功地证实了此前关于该材料体系是 Weyl 半金属的理论预言<sup>[44]</sup>。

除了在凝聚态物理领域外, 美国麻省理工学院的陆凌、傅亮等人预言在光子晶体中也存在 Weyl 点<sup>[60]</sup>, 而且相关的理论预言已被实验验证<sup>[61]</sup>。最近在冷原子领域中的 Weyl 半金属行为也受到了关注<sup>[62]</sup>。

值得提及的是, 因为材料的性质主要由费米能附近的能带决定, 所以即使 Weyl 点不正好在费米面上, 只要其靠费米面很近, 材料仍然会表现出奇特的性质<sup>[63]</sup>。

## 参考文献

- [1] Hasan M Z, Kane C L. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82: 3045
- [2] Qi X L, Zhang S C. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83: 1057
- [3] Ando Y. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2013, 82: 102001
- [4] Weyl H. *Z. Phys.*, 1929, 56: 330
- [5] Dirac P A M. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 1928, 117: 610
- [6] Wan X, Turner A M, Vishwanath A *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83: 205101
- [7] Turner A M, Vishwanath A. *arXiv: 1301.0330* (2013)
- [8] Wehling T O, Black-Schaffer A M, Balatsky A V. *Advances in Physics*, 2014, 63: 1
- [9] Young S M, Zaheer S, Teo J C Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108: 140405
- [10] Wang Z, Sun Y, Chen X Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2012, 85: 195320
- [11] Wang Z, Weng H, Wu Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2013, 88: 125427
- [12] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2009, 81: 109
- [13] Semenoff G W. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, 53: 2449
- [14] Wallace P R. *Phys. Rev.*, 1947, 71: 622
- [15] Brown L M. *Phys. Today*, 1978, 31(9): 23
- [16] Kim B J, Jin H, Moon S J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101: 076402
- [17] Kim B J *et al.* *Science*, 2009, 323: 1329
- [18] Witczak-Krempa W, Chen G, Kim Y B *et al.* *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2014, 5: 57
- [19] Harris M J, Bramwell S T, McMorrough D F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1997, 79: 2554
- [20] Gardner J S, Gingras M J P, Greedan J E. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82: 53
- [21] Taria N, Wakeshima M, Hinatsu Y. *J. Phys.: Condens. Matter*,

## 5 结束语

Weyl 半金属是一种新型的拓扑量子态。由于其奇特的能带结构、表面态性质和特别的输运性质, Weyl 半金属引起人们的高度关注。本文主要讨论了 Weyl 半金属中 Weyl 点可以看作是“磁”荷而受拓扑保护的稳定性, 它的特别表面态费米弧的特性, 它对外场的响应特性以及与 ABJ 反常相关的输运特性。本文也介绍了最新相关材料以及实验方面的进展。目前越来越多不同研究背景的科研人员开始加入对 Weyl 半金属的研究, 可以期待未来会有更多的新奇物理现象被发现。

- 2001, 13: 5527
- [22] Matsuhira K *et al.* *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2007, 76: 043706
- [23] Nakatsuj S *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 087204; Machida Y *et al.* *Nature*, 2009, 463: 210
- [24] Matsuhira K *et al.* *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2011, 80: 094701
- [25] Wan X, Yin Q, Savrasov S Y. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97: 266403
- [26] Disseler S M. *Phys. Rev. B*, 2014, 89: 140413; Disseler S M, Dhital C, Amato A *et al.* *Phys. Rev. B*, 2012, 86: 014428; Le-françois E, Simonet V, Ballou R *et al.* *arXiv: 1502.00787* (2015)
- [27] Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2006, 78: 865
- [28] Wan X, Vishwanath A, Savrasov S Y. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108: 146601
- [29] Yang K Y, Lu Y M, Ran Y. *Phys. Rev. B*, 2011, 84: 075129
- [30] Nielsen H B, Ninomiya M. *Nuclear Physics B*, 1981, 185: 2040
- [31] Xiao D, Chang M C, Niu Q. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82: 1959
- [32] Adler S L. *Phys. Rev.*, 1969, 177: 2426
- [33] Bell J S, Jackiw R. *Nuovo Cimento A*, 1969, A60: 47
- [34] Aji V. *Phys. Rev. B*, 2012, 85: 241101
- [35] Hosur P, Qi X. *Comp. Rend. Phys.*, 2013, 14: 857
- [36] Wan X, Vishwanath A, Savrasov S Y. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108: 146601
- [37] Xu G, Weng H, Wang Z *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107: 186806
- [38] Burkov A A, Balents L. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107: 127205
- [39] Bulmash D, Liu C X, Qi X L. *Phys. Rev. B*, 2014, 89: 081106
- [40] Halász G B, Balents L. *Phys. Rev. B*, 2012, 85: 035103
- [41] Hirayama M, Okugawa R, Ishibashi S *et al.* *arXiv: 1409.7517*

(2014)

[42] Liu J, Vanderbilt D. Phys. Rev. B, 2014, 90: 155316

[43] Singh B, Sharma A, Lin H *et al.* Phys. Rev. B, 2012, 86: 115208

[44] Weng H, Fang C, Fang Z *et al.* Phys. Rev. X, 2015, 5: 011029

[45] Ojanen T. Phys. Rev. B, 2013, 87: 245112

[46] Kurebayashi D, Nomura K. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, 83: 063709; Gorbar E V, Miransky V A, Shovkovy I A. Phys. Rev. B, 2013, 88: 165105; Bzdušek T, Rüegg A, Sigrist M. arXiv: 1501.03029 (2015); Zyuzin A A, Wu S, Burkov A A. Phys. Rev. B, 2012, 85: 165110

[47] Murakami S. New J. Phys., 2007, 9: 356

[48] Gibson Q D, Schoop L M, Muechler L *et al.* arXiv: 1411. 0005 (2014)

[49] Du Y, Wan B, Wang D *et al.* arXiv: 1411.4394 (2014)

[50] Yang B J, Nagaosa N. Nature Communications, 2014, 5: 4898

[51] Liu Z K, Zhou B, Zhang Y *et al.* Science, 2014, 343: 864

[52] Liu Z K, Jiang J, Zhou B *et al.* Nature Materials, 2014, 13: 677

[53] Qi T F, Korneta O B, Wan X G *et al.* J. Phys.: Condens. Matter, 2012, 24: 345601; Wang Q, Cao Y, Wan X G *et al.* J. Phys.: Condens. Matter, 2015, 27: 015502

[54] Ueda K, Fujioka J, Takahashi Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2012, 109: 136402

[55] Chu J H, Riggs S C, Shapiro M *et al.* arXiv: 1309.4750 (2013)

[56] Yanagishima D, Maeno Y. J. Phys. Soc. Jpn., 2001, 70: 2880

[57] Hosur P, Parameswaran S A, Vishwanath A. Phys. Rev. Lett., 2012, 108: 046602

[58] Kim H J, Kim K S, Wang J F *et al.* Phys. Rev. Lett., 2013, 111: 246603

[59] Huang X, Zhao L, Long Y *et al.* arXiv: 1503.01304 (2015)

[60] Lu L, Fu L, Joannopoulos J D *et al.* Nature Photonics, 2013, 7: 294; Lu L, Joannopoulos J D, Soljačić M. Nature Photonics, 2014, 8: 821

[61] Lu L, Wang Z, Ye D *et al.* arXiv: 1502.03438 (2015)

[62] He W Y, Zhang S, Law K T. arXiv: 1501.02348 (2015)

[63] Burkov A A. Phys. Rev. Lett., 2014, 113: 187202; Burkov A A. Phys. Rev. Lett., 2014, 113: 247203; Son D T, Spivak B Z. Phys. Rev. B, 2013, 88: 104412



**安徽量子通信技术有限公司**  
 地址: 安徽省合肥市望江西路800号创新产业园D3  
 电话: 400-885-0929 65368589(传真) 13395515356  
 网址: www.quantum-info.com  
 邮箱: feng.liu@quantum-info.com

### BB84 量子密钥分发教学科研系统



系统组成




技术指标

- 光源功率 (mW): 100
- 可见度: 92%
- 贝尔不等式违反程度:  $S > 2.3$
- P, N偏振对比度:  $> 7:1$
- H, V偏振对比度:  $> 25:1$
- 偶然符合计数率 (Hz):  $< 10$
- 单路光子亮度 (cps):  $> 100k$
- 纠缠光子对亮度 (cps):  $> 10k$

### 量子隐形传态实验系统

量子隐形传态实验系统示意图



数据采集&分析显示界面





提供**最专业的量子信息科研系统**

• BB84量子密钥分发教学科研系统 • 小型纠缠源 • 高亮度纠缠源 • 单光子干涉系统 • 双光子干涉系统 • 双缝量子成像系统 • 量子隐形传态 • 单光子探测器 • 皮秒脉冲激光器