

漫谈第二类 Weyl 半金属*

姚顺宇 邓可 周树云[†]

(清华大学物理系 北京 100084)

2016-09-15 收到

[†] email: syzhou@mail.tsinghua.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20161002

A brief introduction to type-II Weyl semimetals

YAO Shun-Yu DENG Ke ZHOU Shu-Yun[†]

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

摘要 近日, 清华大学物理系研究人员及合作者在 Weyl 半金属研究中取得新进展: 首次在实验上观测到第二类 Weyl 半金属(MoTe₂)上的拓扑费米弧, 在真实材料中证实了破坏洛伦兹不变性的第二类 Weyl 费米子的存在。相关文章于 2016 年 9 月 6 日在 *Nature Physics* 上发表^[1]。这是继去年第一类 Weyl 费米子得到证实之后凝聚态物理研究上的又一重大突破。什么是第二类 Weyl 费米子? 它与第一类 Weyl 费米子有何区别? 作者通过本文来做一个简单的介绍。

关键词 外尔费米子, 第二类外尔半金属, 破坏洛伦兹不变性, MoTe₂

Abstract Recently, researchers from the Department of Physics at Tsinghua University and collaborators have made important progress in the study of Weyl semimetals. They have reported the first experimental observation of topological Fermi arcs in a type-II semimetal MoTe₂, thus confirming the violation of Lorentz invariance in type-II Weyl fermions in a real material. The results were published online in *Nature Physics* on Sept. 6, 2016. This is a major progress in the field of condensed matter physics, after the realization of type-I Weyl fermions. What are type-II Weyl fermions? And how is it different from type-I Weyl fermions? Here we shall give a brief introduction.

Keywords Weyl fermion, type-II Weyl semimetal, Lorentz violation, MoTe₂

1 什么是 Weyl 费米子?

说来话长, 一切来自于大约一百年前的那场量子力学引发的革命。

1926 年, 薛定谔提出著名的薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi,$$

其中 H 是系统的哈密顿算符。薛定谔方程在量子世界中的地位如同牛顿第二定律($F=ma$) 在经典力

学中的地位一般, 它描述了作为一种概率波的量子态如何随着时间演化。可正如牛顿第二定律在经典力学中遇到的问题一样, 薛定谔方程与狭义相对论并不兼容。然而, 这个问题没有难倒“怪才”狄拉克先生。为了使量子力学和狭义相对论相容, 他将薛定谔方程中与经典能量对应的哈密顿量写成与相对论能量对应的形式。相对论中能量表达为 $E = \sqrt{p^2 + m^2}$, 可是, 算符上的根号给我们的理论带来了困难。这个看似困难的问题却被狄拉克巧妙地化解为中学数学问题: 把根号中的数写成完全平方数不就解决了? 于是, 他使用

* 国家自然科学基金(批准号: 11374191; 11334006)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2015CB92100; 2016YFA0301004; 2012CB932301)资助项目, 清华大学自主科研项目(批准号: 2012Z02285)

“待定系数法”，令 $\sqrt{p^2 + m^2} = \alpha p + \beta m$ 。虽然这样的系数并不能是实数，甚至不是复数，但是它却可以是矩阵！1928年，他提出了狄拉克方程：

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + m)\psi = 0 .$$

这一变化成功地化解了量子力学和狭义相对论的矛盾。值得一提的是，这个看起来简单的方程的意义不仅于此：人们可以通过寻找狄拉克方程的解来预言可能存在的新粒子！有一个著名的例子，正电子就是狄拉克方程电子解的镜像。

著名数学家 David Hilbert 的学生 Hermann Weyl 在 1929 年发现，居然有一种质量为零的粒子满足狄拉克方程。它的自旋是半整数，因此它是一种费米子，并且同时满足泡利不相容原理，即两个全同费米子不能处于同一个态上。这种粒子被称为 Weyl 费米子^[2]。无质量的 Weyl 费米子就像人类一样，可以用两种“性别”加以区分：一种自旋方向与运动方向相同，而另一种相反。人们把这种“性别”命名为手性，并分别称它们为右旋和左旋，二者互为镜像(图 1)。

狄拉克方程居然给出了一种新粒子，这当然让物理学家们激动不已。但是近百年过去了，在

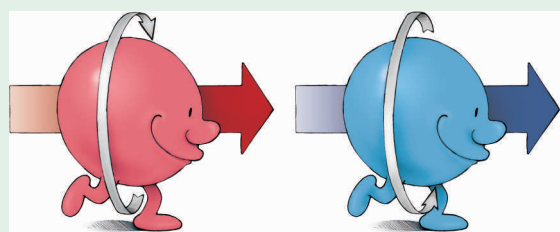


图1 手性不同的费米子

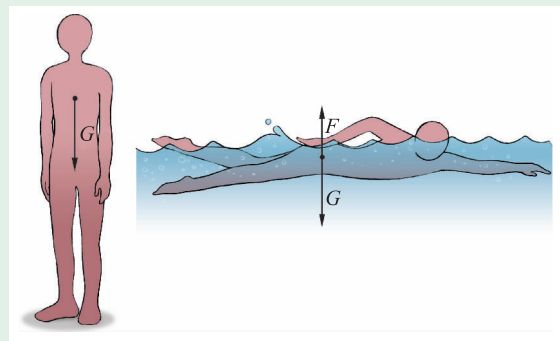


图2 受浮力的影响，行走的人和游泳的人感受到的“重力”会不同

各类针对标准模型的实验验证中，物理学家都没能发现 Weyl 费米子。难道它真的只是数学上的幽灵？

2 凝聚态物理：材料宇宙中的粒子世界

虽然在真空中人们没能找到 Weyl 费米子的实例，但是令人惊奇的是，如果我们在真空中加上特定的周期性势场和对称性，就能制造出想要的 Weyl 费米子。这立刻让物理学家们想到了固体材料。这听起来像天方夜谭：一个实际上不存在的粒子怎么会在固体中出现？其实，此“Weyl 费米子”非彼“Weyl 费米子”。在固体中，电子受到原子核的作用，其运动性质和自由电子不同，被称为“准粒子”。真空中自由电子和固体中准粒子的区别就好比走路的人和水里游泳的人对“重力”感受的不同(图 2)。游泳时人们会发现自己的身体变得很轻，抬腿很容易。这并不是质量真的减少了，而是水的浮力和自身重力同时对身体发生作用的结果。人们在路上和水里不同的“行走”方式使得对应运动模式也不太一样。同样，电子在晶格中“行走”方式与真空中也不太一样。在物理学家看来，由于某些特殊的晶体结构对电子的作用，固体中出现了某些特定的“准粒子”，而这些准粒子的行为与前面提到的 Weyl 费米子别无二致。

看到这里可能会引起一些困惑：电子怎么能算 Weyl 费米子？其实在材料中的准粒子和真空中“Weyl 费米子”有着完全一样的地位，它只不过和真空中的 Weyl 费米子活在了不同的“宇宙”中。不同的是，真空这个宇宙是一种晶格周期性无限长、能隙无限大的绝缘体而已。

3 Weyl 半金属：Weyl 费米子的宇宙

前面说到，Weyl 费米子有左旋和右旋两种手性，如果我们能够在材料中不断地产生其中某一种手性的 Weyl 费米子，那恐怕狄拉克先生能够高兴地活过来(具体原因请看下文)。但是这件事已

经被证明是不可能的(著名的 no-go theorem)。这意味着不同手性的 Weyl 费米子只能同时被产生和消灭。如果不同手性的费米子在动量空间的同一点产生, 那么这就是拓扑 Dirac 半金属^[3]。然而期待着新奇物态的物理学家们肯定不会满足于此, 是否有可能把不同手性的 Weyl 费米子分开呢? 物理学家们发现, 确实存在一些非中心对称的材料。由于反演中心被破坏, 不同手性的 Weyl 费米子在这些材料中会被分离开。这类特殊的材料就是 Weyl 半金属, 也就是 Weyl 费米子可以存在的“宇宙”(例如, 中国科学院物理研究所发现的 TaAs 化合物^[4, 5])。

4 Weyl 半金属的 DNA: 能带

如同前面所说, 固体材料和真空是有区别的。最主要的区别是, 材料的周期性结构会导致电子在运动时受到这种周期性晶格的调制。在真空中, 经典粒子能量和动量的关系是连续的二次函数: $E = \frac{P^2}{2M}$, 而在有周期性结构的固体中, 其能量与动量的关系不再像真空中那样是连续的, 而是存在一定的色散关系($E(k)$), 并且会在某些特殊的地方“断开”。这种能量—动量的色散关系就是我们所知道的能带, 而中间断开的部分, 意味着这种能量的电子“不允许存在”, 也就是我们所说的“禁带”或者能隙。

尽管到这一步能带并未表现出特殊的物理意义, 但是如果我们考虑真空中自由电子的能谱 $E = \frac{P^2}{2M}$, 不同的质量就意味着能带的不同。如果给它们再加上一个作用势能 V (比如前面所讨论的晶格中的周期势场), 则 $E = \frac{P^2}{2M} + V$, 又会再次导致能带的变化^[6]。可见在固体中, 不同的能带结构体现了不同的材料性质。电子会按照顺序从能量较低的能带逐渐填充至能量较高的能带。固体中能量最高(称为费米能)的电子构成了费米面, 它就像水平面, 处于费米面下的能带会被电子充满, 而费米面上的能带一般称为空带(图 3(a))。

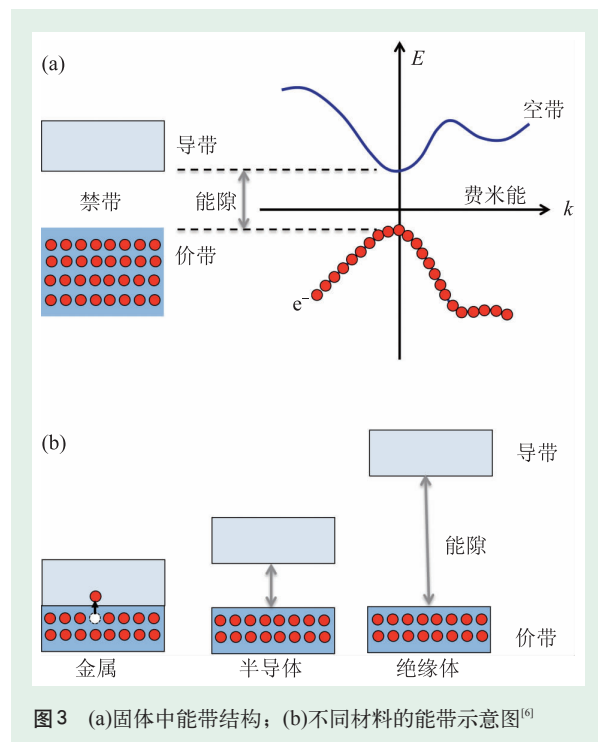


图3 (a)固体中能带结构; (b)不同材料的能带示意图^[6]

简单来说, 金属的费米面位于能带中, 因而导带中存在自由电子, 使得材料可以导电。而半导体和绝缘体的费米面位于禁带中, 它们的导带中没有自由电子不能导电。但是半导体的能隙宽度较小, 在一定温度下可以通过热运动将下层价带中的电子激发到上层导带中, 使其可以导电(图 3(b))。

不同的元素及不同的晶格对称性导致了不同的能带结构。实际上, 能带结构决定了一种材料几乎所有的主要特性, 就像生物体的 DNA 决定了生物的特性一样。从这个角度来看, 能带扮演着“材料 DNA”的作用, 物理学家和材料学家通过研究它便能确定材料的各种属性, 比如我们这里关注的拓扑量子属性。最近十年, 物理学家们借助一些实验手段, 如角分辨光电子能谱, 揭示了许多以前未被发现的量子物态和拓扑能带结构, 如拓扑绝缘体和拓扑半金属。

5 第一类 Weyl 半金属: 沙漏中的粒子

前面说到, 材料中的电子由于受到材料中周期性晶格的调制作用产生了能带结构。而材料的能带结构就是它的“DNA”, 决定了材料的特有

属性。今天我们讨论的Weyl半金属的能带结构非常奇异。前面说过，Weyl费米子是一种质量为零的满足狄拉克方程的粒子，让我们回顾一下狄拉克方程中的哈密顿量 $H = \sqrt{p^2 + m^2} = \alpha p + \beta m$ 。如果我们令 $m=0$ ，就会发现，代表能量的哈密顿量 $H = \alpha p$ ，也就是说，能量和动量成线性关系！（当然，这里的 α 和 p 分别是矩阵和矢量，所以形成的能带实际上是个四维空间中的锥。）当我们画出能量和动量的对应关系，类似Dirac半金属，Weyl半金属的体能带也是线性的圆锥，好比一个“直立的”沙漏。圆锥的顶点(称为Weyl点)就代表Weyl费米子。不同手性的Weyl费米子只能同时产生或者消失。在这个点的附近，材料体内作为准粒子的电子具有与无质量Weyl费米子相同的运动特性。Weyl点的另一个意义是，它其实是动量空间的“时空奇点”。我们可以把它形象地类比于时空隧道，就像物理中所描述的虫洞。这些特殊的奇点对材料表面上电子有很强的影响，比如当表面电子沿某些特定方向运动并达到特定速度时，会突然从表面消失，进入材料体内，并立刻从材料的另一个表面穿出，就像是一艘经历了“虫洞”旅行的宇宙飞船。更进一步，不同手性的Weyl点会在表面的电子态中形成一些非闭合的曲线，使Weyl点彼此互相连接，这就是费米弧。由于这类半金属是受到拓扑保护的，所以这个费米弧也叫拓扑费米弧。不仅如此，Weyl半金属还有另一个令人兴奋的性质：负磁阻效应。当外加平行的电场和磁场时，动量空间中左旋的Weyl点和右旋Weyl点会分离开，而Weyl费米子可以从右旋的Weyl点出发被发射到左旋的Weyl点去，就好比金属中的电子产生定向运动时会有电流。

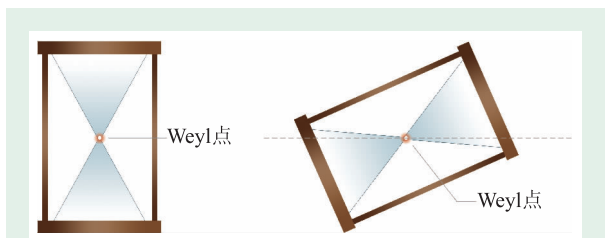


图4 第一类Weyl费米子中“直立”的沙漏与第二类Weyl费米子中“倾斜”的沙漏

随着磁场的增加，越来越多的Weyl费米子参与到运输中，使得材料的电阻降低。磁场在这里犹如水泵般将电子“泵”出来，实际中产生的效应就是“负磁阻”效应^[7]。

6 第二类Weyl半金属：倾斜的沙漏^[5]

前面介绍了一般Weyl半金属的一些性质，也就是第一类Weyl半金属。而这里我们的主角：第二类Weyl半金属，终于要登场了。电子既有自己的自旋，又要围绕着原子核做圆周运动。而我们知道任何电荷的运动都会产生磁场，磁场又和自身的自旋发生作用，这个效应就叫自旋—轨道耦合。在一些特定材料中，这种耦合作用尤其显著，以至于电子的能量—动量关系会发生比较明显的变化。简单地说，也就是“沙漏”转动了一个角度(图4)。沙漏是“直立”的时候，任何方向对于它都是等价的。如果沙漏的转动角度太大，当有一条边穿过了水平面时，Weyl半金属的性质会发生巨大的改变，出现明显的各向异性：在一些方向上呈现出随着磁场增大而电阻减小的“负磁阻”特征；而在另一些方向上，加大磁场会导致电阻一直增大。这种严重倾斜的锥破坏了外尔费米子的洛伦兹不变性，因此第二类外尔费米子在高能物理中不能存在。然而，由于固体材料并不需要满足洛伦兹不变性，第二类外尔费米子可以在固体材料中实现^[8]。

7 实验发现：第二类Weyl半金属的费米弧

第二类Weyl半金属的几种候选材料在理论上被提出后立即引起了很多物理学家的兴趣。然而，确认第二类Weyl半金属依然有一些实验上的挑战。证明一个材料是不是Weyl半金属，首先需要直接检查材料的DNA——能带。而利用角分辨光电子能谱，科学家们可以直接观察到能量和动量的函数关系，也就是能带。一个可能的第二类Weyl半金属候选者是 WTe_2 ，但理

论预言其费米弧的尺度仅仅只有布里渊区(可以理解为能带的范围)的千分之七,远小于当前实验的分辨率。

清华大学物理系的研究者采用了实验上更加可行的 MoTe_2 ,利用角分辨光电子能谱(Angle-resolved Photoemission Spectroscopy)和扫描隧道谱(Scanning Tunneling Spectroscopy)两种互补的表面敏感实验技术,结合第一性原理计算结果,成功验证了 MoTe_2 作为

第二类外尔半金属的基本特征——严重倾斜的狄拉克锥和存在于电子和空穴缝隙中的来自于拓扑表面态的非闭合费米弧(图5(b)),首次确认了低温下的 MoTe_2 正是理论预言的第二类Weyl半金属^[1]。在对称性方面,非中心对称晶格结构是实现外尔费米子的必要条件。目前有关 MoTe_2 的外尔费米子的理解都基于它的低温相是与 WTe_2 相同的 T_d 相的假设。最近,详细的变温拉曼实验提供了 MoTe_2 的低温相是缺乏中心对称的 T_d 相的确切实验证据^[9],并且指出该体系是一个研究高温相的非拓扑态至低温相的拓扑态相变的理想材料体系。

第二类Weyl半金属的发现不仅拓宽了人们对物理世界的认识,建立了粒子物理和凝聚态之间

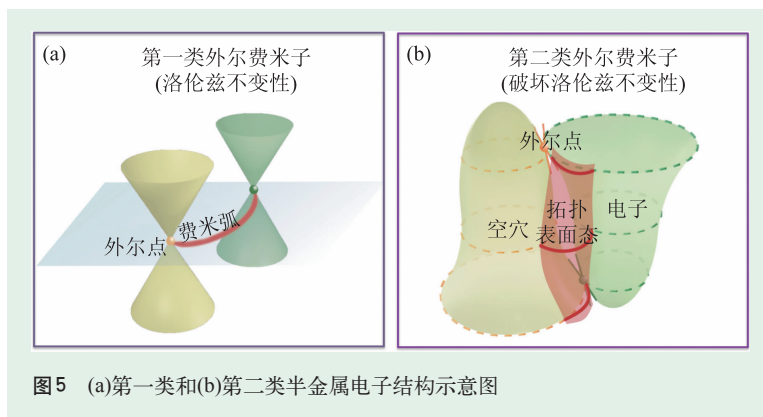


图5 (a)第一类和(b)第二类半金属电子结构示意图

的纽带,更有可能带来新的应用。比如,在现有的电子器件中,电子在不同成分的材料界面上会因为散射而导致很大的损耗,这一度成为困扰电子器件发展的瓶颈。第二类Weyl半金属在不同方向上对磁场存在不同的响应,因此我们有可能做到在同一成分的材料上沿不同方向体现出不同的输运特性,从而有望为拓扑量子电子学的发展带来新机遇^[10-13]。

致谢 感谢清华—富士康纳米科技研究中心吴扬博士、清华高等研究院姚宏研究员和清华大学物理系陈曦教授在本文写作中提供帮助。

参考文献

- [1] Deng K, Wan G, Deng P *et al.* Experimental observation of topological Fermi arcs in type-II Weyl semimetal MoTe_2 . *Nat. Phys.*, 2016, doi: 10.1038/nphys3871
- [2] Weyl H. *Z. Phys.*, 1929, 56 (5):330
- [3] Xu S, Belopolski I, Alidoust N *et al.* *Science*, 2015, 349 (6248): 613
- [4] Lv B Q, Weng H M, Fu B B *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5:031013
- [5] Weng H M, Fang C, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5:011029
- [6] 黄昆(原著), 韩汝珊(改编). 固体物理学. 高等教育出版社, 1998
- [7] Huang X C *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5:031023
- [8] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z *et al.* *Nature*, 2015, 527:495
- [9] Zhang K N *et al.* Raman signatures of inversion symmetry breaking and structural phase transition in type-II Weyl semimetal MoTe_2 . 2016, arXiv: 1589396
- [10] Wang Z J, Gresch D, Soluyanov A A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117:056805
- [11] Bansil A, Lin H, Das T. *Rev. Mod. Phys.*, 2016, 88:021004
- [12] Xu G, Weng H M, Wang Z J *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 107: 186806
- [13] Qi X L, Zhang S. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83(4):1110