

拓扑近藤半金属*

刘洋^{1,†} 曹超^{1,2,††} 吴帆¹ 袁辉球¹

(1 浙江大学物理系 关联物质中心 杭州 310058)

(2 杭州师范大学物理系 杭州 311121)

2020-08-21 收到

† email: yangliuphys@zju.edu.cn

†† email: ccao@hznu.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20200905

Topological Kondo semimetals

LIU Yang^{1,†} CAO Chao^{1,2,††} WU Fan¹ YUAN Hui-Qiu¹

(1 Center for Correlated Matter, Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China)

(2 Department of Physics, Hangzhou Normal University, Hangzhou 311121, China)

摘要 拓扑物态是凝聚态物理近年来最重要的研究领域之一。随着研究的不断深入,对拓扑物态的研究逐渐从弱关联材料体系拓展到了强关联材料体系。文章梳理了近年来对拓扑近藤半金属的相关研究,介绍了其中的理论模型、计算方法和一些候选材料及实验研究,并对该方向未来的发展做了展望。

关键词 拓扑序, 能带拓扑, 近藤效应, 狄拉克半金属, 外尔半金属

Abstract Topological matter has been one of the most active research areas in condensed matter physics during the last decade. The development of this field has gradually expanded from weakly correlated to strongly correlated materials. In this paper we review studies of topological Kondo semimetals by introducing theoretical models, calculation approaches, as well as some candidate materials and their experimental studies. We also look ahead to the future development of this field.

Keywords topological order, band topology, Kondo effect, Dirac semimetal, Weyl semimetal

1 从拓扑序到拓扑近藤半金属

拓扑物态是凝聚态物理过去40年的一个重要发现,它突破了基于对称性破缺的经典朗道理论,蕴含着量子霍尔效应、涡旋激发、拓扑超导等一系列重要的物理问题,是目前凝聚态物理前沿的研究领域。拓扑物态最早在整数量子霍尔效应中提出,对于二维电子气,其低温和强磁场下的霍尔电导会呈现出量子化的平台,即 $\sigma_{xy} = ne^2/h$,其中整数 n 又称为陈数,表征体系的拓扑性质。

在整数量子霍尔效应中,磁场引起的时间反演对称破缺是形成单向传播边界态的重要因素,也是无能隙运输的基础。在时间反演对称的体系中也可以存在类似的边界态,不过将同时存在两个自旋相反的边界态沿着相反的方向传播,形成量子自旋霍尔效应。二维量子自旋霍尔效应最早在HgTe/CdTe量子阱中被发现^[1, 2]。将这种效应延伸到三维,就形成了现在通常所说的三维拓扑绝缘体,典型的材料包括Bi₂Te₃、Bi₂Se₃等^[3, 4]。在三维拓扑绝缘体中,强自旋轨道耦合引起块体能带的反转,从而产生受拓扑保护的表面态,具有类似狄拉克费米子的线性色散关系^[5, 6]。同时这种表面态具有自旋-动量锁定的特点,其动量与自旋在面内互相垂直,因此能有效地减少非磁性杂质产

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2017YFA0303100, 2016YFA0300200)、国家自然科学基金(批准号: 11674280, U1632275, 11974306, 11874137)、科学挑战计划(批准号: TZ2016004)资助项目

生的背散射。

拓扑序可以进一步延伸到半金属材料中,形成所谓的拓扑半金属^[7]。严格的拓扑半金属要求材料的三维费米面只包含由于导带和价带交叉形成的分离的点或者线(也即所谓的节点)。在实际材料中这一条件很难满足,因此如果某个材料的能带结构经过一系列绝热连续变化之后可以满足这个条件(例如将费米能改写成一个动量的连续函数,使之总是处于导带或价带之间),我们也可以认为它是拓扑半金属^[1]。迄今为止,拓扑半金属大致可以分为狄拉克半金属、外尔半金属、节线半金属和非常规简并度的新型费米子半金属等。狄拉克半金属在其狄拉克点具有四重简并度,其低能激发可以由狄拉克方程描述,在三个动量方向上都具有线性色散^[8]。当时间反演对称或者晶格的中心反演对称被破坏时,每个简并的狄拉克点将分裂成为两个不同手性的外尔点,形成了外尔半金属。外尔半金属的特点之一是成对出现的外尔点在晶体表面的投影将由动量空间中不连续的费米弧连接,这些特征后来在非中心对称的TaAs中最先被实验所证实^[9-12]。此外,在一些特殊的晶体群中还可能存在非传统的费米子,比如具有三重简并度的费米子^[13],也吸引了广泛的关注。

对于弱关联材料体系,其能带结构可以由第一性原理计算比较准确地得到,其拓扑性质和分类已经有非常系统和深入的研究^[14-16]。但是对于强关联电子体系中的拓扑物态,现在还研究得比较少。在强关联拓扑物态的研究中,近藤晶格是一类吸引了广泛关注的材料。从20世纪70年代开始被发现,近藤晶格一直以来都是强关联领域的重要分支,它们通常存在于含有f电子的镧系或者铜系金属间化合物中。在低温下,比较局域的f电子与导带电子发生杂化,其磁矩被导带电子屏蔽,从而形成通常所说的近藤效应。由于局域的f电子处于一个周期性的晶格中,这类材料在费米能附近会形成有效质量很大的准粒子态,即重费米子态。在这类材料中,电荷、自旋、轨道、晶格等自由度的强烈耦合可导致重电子态、磁有

序、非常规超导、非费米液体以及拓扑序等多种量子态,并伴随强烈的自旋/电荷/轨道涨落,呈现出丰富的物理现象。相对于其他关联电子材料而言,重费米子体系的特征能量尺度低且样品纯度高,其量子态很容易通过磁场、压力等进行调控,在探索强关联电子态和拓扑物态上具有独特的优势。尽管低温下近藤晶格中的准粒子色散会由于电子的关联效应而被极大地重整化,但由于其准粒子态依然可以很好地定义,因此其准粒子色散也可以表现出能带拓扑性质。同时,由于这种准粒子态来源于电子关联效应,因此可以呈现出更加丰富的物理性质。目前被研究得最多的近藤拓扑材料是拓扑近藤绝缘体,主要包括SmB₆^[17, 18]、YbB₁₂^[19]等。由于拓扑近藤绝缘体是本专题另一篇综述的主要内容,这里不做赘述。这里只重点讨论拓扑近藤半金属。

2 理论模型和计算方法

与弱关联体系中丰富的拓扑半金属类型相比,拓扑近藤半金属的研究则主要集中在外尔近藤半金属的研究上。由于强关联体系的电子结构具有很强的温度依赖关系,因此对近藤半金属能带拓扑性质的研究一般是指这些材料在低温区,f电子进入相干态后,电子结构不再强烈地随着温度变化而改变后的能带拓扑性质。由于重整化后的准粒子激发的能量尺度很小(一般在meV量级),给实验和理论研究均带来了巨大的挑战。近藤体系的基态电子态除了依赖于自旋轨道耦合之外,还强烈地依赖于电子关联、f电子与传导电子的杂化以及外场等。因此,在近藤体系中,更容易通过不同调控手段来获取拓扑近藤半金属(图1)。

由于拓扑半金属可以认为是拓扑绝缘体和普通能带绝缘体的过渡相,许多理论研究都是从调节拓扑近藤绝缘体中的参数出发的。封晓勇等人考虑了二维六角近藤晶格下的Anderson模型,在传导电子自旋轨道耦合可以忽略不计时,这一体

1) 当然,如果这个材料穿过费米能的拓扑平庸能带太多,那它的拓扑性质可能无法在实验中被观测到。

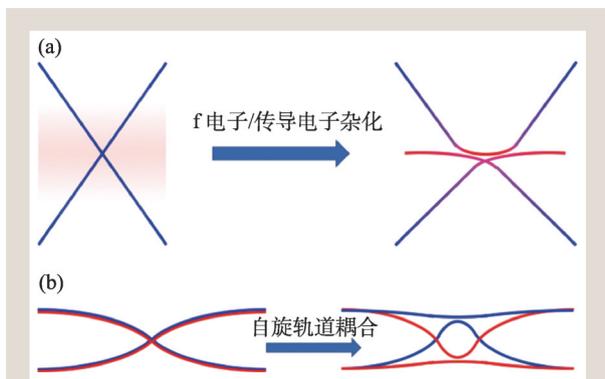


图1 获得拓扑近藤半金属的两种可能途径 (a)通过调节f电子与传导电子杂化强度。蓝色表示传导电子能带,红色表示f电子态。在杂化强度增加后,受晶格对称性保护的拓扑电子态的群速度显著下降;(b)通过调节自旋轨道耦合强度。红色/蓝色代表不同的自旋。自旋轨道耦合解除自旋简并,但是部分能带交叉点受到晶格对称性保护而被保留下来

系中可以出现狄拉克近藤半金属相^[20]。在弱耦合极限下,这一拓扑相出现在3/4填充时,主要由传导电子贡献;而在强耦合极限下,这一拓扑相出现在1/4填充时,主要由重整化后的局域电子贡献。由于局域—传导电子的杂化也必须满足晶格对称性,因此在这一模型中,狄拉克点的出现也是由晶格对称性保证的。当传导电子的自旋轨道耦合不可忽略(大于某个临界值)时,这个二维六角晶格中的狄拉克点被打开,从而形成拓扑近藤绝缘体(TKI)^[21]。这一结果也同时表明,低载流子浓度拓扑近藤绝缘态是近藤耦合与自旋轨道耦合相互竞争的结果,这一点与P. Coleman等人提出的基于基态宇称考虑的拓扑近藤绝缘体相^[18]是有根本区别的。Hsin-Hua Lai等则进一步说明了在空间反演对称破缺的非点群晶格中,当占据数合适时,即使考虑了传导电子的自旋轨道耦合,体系依然可以成为外尔近藤半金属^[22]。具体的,他们从Anderson模型出发,考虑了一个金刚石结构晶格的紧束缚近似哈密顿量。通过在金刚石的两套面心立方子格子中分别引入一对大小相同,符号相反的原位势来破坏其空间反演对称性,同时考虑其中具有Dresselhaus型的反对称自旋轨道耦合作用。当体系处于1/4填充时,计算表明在合适的参数空间,体系是外尔近藤半金属。其中的外尔点能带交叉,是受到非点群对称性和电子填充

保护的。Po-Yao Chang等则是从晶格的空间反演对称性出发考虑了近藤半金属存在的条件^[23]。他们指出,在空间反演对称性破缺的材料中,外尔近藤半金属相是作为普通近藤绝缘体和拓扑近藤绝缘体的中间相出现的,在空间反演对称性破缺作用趋于零时,拓扑近藤半金属是一个拓扑相变的量子临界点。同时,由于在表面附近的传导电子较体内变少,局域磁矩可能无法得到有效屏蔽,近藤材料的表面可能发生“近藤失效”(Kondo breakdown)。由于外尔半金属的表面态是连接具有两个手性相反的外尔点的费米弧,其具体的连接方式与包括表面构型、化学势等微观参数相关;而近藤材料的化学势等又与温度紧密相关,因此其表面的费米弧构型会具有很强的温度依赖关系。这与弱关联外尔半金属材料的表面态有很大的不同。

除上述理论模型研究外,对拓扑近藤半金属备选材料的计算研究也是理论研究的一个重要方面。从具体材料计算的角度,为了准确描述强关联体系的能带结构,一般都需要使用比局域密度近似(LDA)更为高级的计算方法,常见的包括LDA+Gutzwiller^[24]、LDA+DMFT^[25]等。在这些计算中,体系的哈密顿量一般都表示成一个无相互作用哈密顿量 H_0 与一个电子自能项 Σ 之和的形式。由于后者是能量 ω 及动量 \mathbf{k} 的函数,在相互作用体系中的拓扑不变量计算是一个十分棘手的问题。Lei Wang等推导了局域电子自能假定(也即电子自能 Σ 与晶格动量 \mathbf{k} 无关)下的陈数^[26],其结果表明在具有相互作用时,体系的陈数可以表达为两部分的乘积,其中第一部分是频率空间的绕数 γ ,表征体系相互作用导致的拓扑;而另一部分就是无相互作用部分哈密顿量的 Z_2 不变量 l 。只有当两者均是奇数(拓扑非平庸)时,相互作用体系整体才是拓扑非平庸的。幸运的是,对于无相互作用的情形,前者总是1。这一方法需要对自能在整个频率空间求积分,计算量很大。汪忠和张首晟注意到Matsubara频率空间的格林函数总可以与零频格林函数绝热地联系起来,因此通过零频格林函数就足以计算体系的拓扑性质^[27]。更进一步,汪忠和颜丙海意识到在此基础上,可以引入零频格

林函数的倒数，或者更直接的 $H(k)=H_0(k)+\Sigma(0,k)$ ，来研究体系的能带拓扑结构^[28]。这一方法被称为“拓扑哈密顿量”方法，它大大简化了相互作用体系拓扑不变量的计算，成为现在计算关联体系拓扑不变量最为普遍使用的方法。

3 CeRu₄Sn₆中的重外尔费米子态

中国科学院物理研究所戴希和翁红明等人提出在重费米子体系 CeRu₄Sn₆中存在源于电子关联的外尔费米子^[29]。CeRu₄Sn₆这个重费米子材料在1992年最先发现^[30]，其电阻行为表明存在来自于近藤杂化的能隙^[31]，而光导率测量显示体系依然具有很弱的金属行为^[32]。CeRu₄Sn₆为体心四方结构，但是不具备中心反演对称性。戴希和翁红明等人利用DFT+Gutzwiller方法计算了这个材料低温下的准粒子电子结构。由于Gutzwiller变分法能较好地处理来自4f电子的强关联效应，因此能获得与DFT+DMFT类似精度的结果。他们的计算表明，4f电子的强关联效应将对体系的能带结构产生重要影响(图2)：首先，费米面附近的能带主要来自4d轨道以及4f轨道中的 $|j=5/2, j_z=\pm 1/2\rangle$ 轨道，同时4f轨道形成的准粒子能带宽度与DFT相比减少了50%左右。4f电子与4d电子在费米面附近形成有效杂化并反转，由于体系没有空间反演对称性，形成的准粒子能带不具有自旋简并，因此可能形成外尔点。通过计算，他们在布里渊区内一共找到了8对外尔点。利用表面格林函数

方法，他们进一步计算了体系在不同表面的表面态，发现(010)面上不同手性外尔点的投影点明显分离，因此存在外尔半金属特征的费米弧，而对于(001)表面，由于不同手性的外尔点投影到同一点，因此没有明显的费米弧出现。与弱关联的外尔半金属不同，CeRu₄Sn₆中的外尔费米子态来源于4f电子的关联效应，因此对Ce的价态非常敏感。通过改变Ce的价态(或者4f电子的占据数)，即可以让体系产生从外尔半金属，到拓扑平庸的普通半金属，甚至半导体的拓扑相变。由于这种价态的调节可以通过压力、掺杂等实现，这说明CeRu₄Sn₆中的外尔费米子具有高度的可调性，这也是拓扑近藤半金属的特征之一。

由于CeRu₄Sn₆中准粒子色散的能量尺度很小，这种外尔费米子还没有被实验直接观测到。不过已经有一些间接的实验证据，比如Severing等人利用X射线吸收谱和非弹性X射线散射直接证明4f电子态的晶体场劈裂，4f电子占据数均与理论预测符合^[33]，证明这个体系的准粒子色散应该可以由DFT+DMFT或者Gutzwiller方法描述。孙培杰等人也通过电阻测量发现CeRu₄Sn₆在压力下杂化能隙变大，且在低温下出现电阻的平台^[34]。

4 YbPtBi 中的重外尔费米子

YbPtBi材料是一个经典的重费米子材料，其低温下的电子比热系数高达7 J/mol·K²，是迄今已知的电子比热系数最大的重费米子材料^[35]。郭

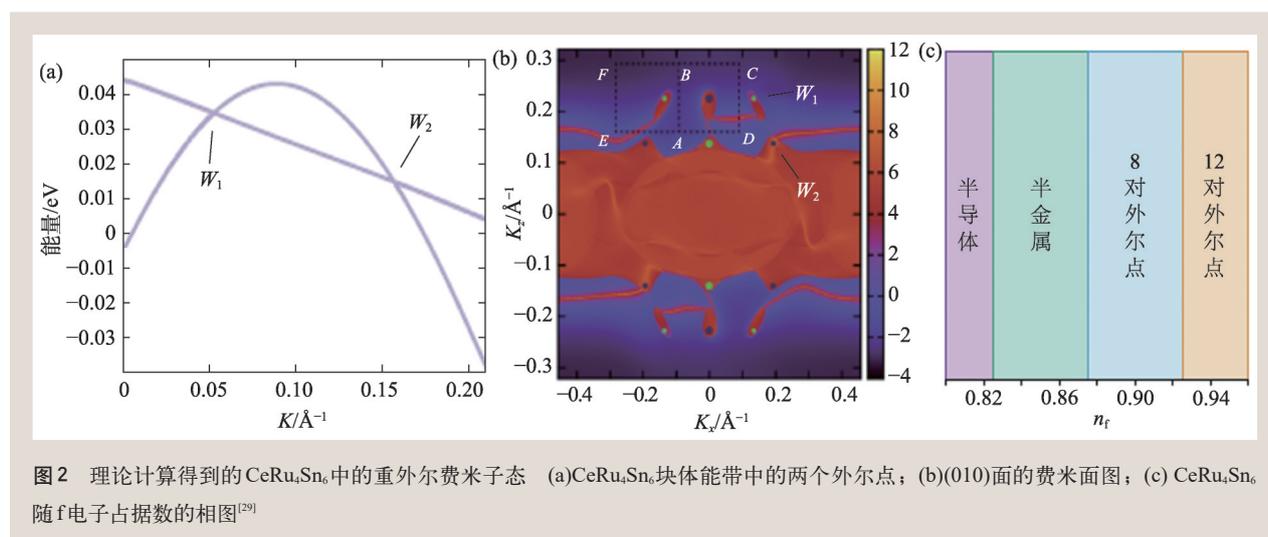


图2 理论计算得到的CeRu₄Sn₆中的重外尔费米子态 (a)CeRu₄Sn₆块体能带中的两个外尔点；(b)(010)面的费米面图；(c) CeRu₄Sn₆随f电子占据数的相图^[29]

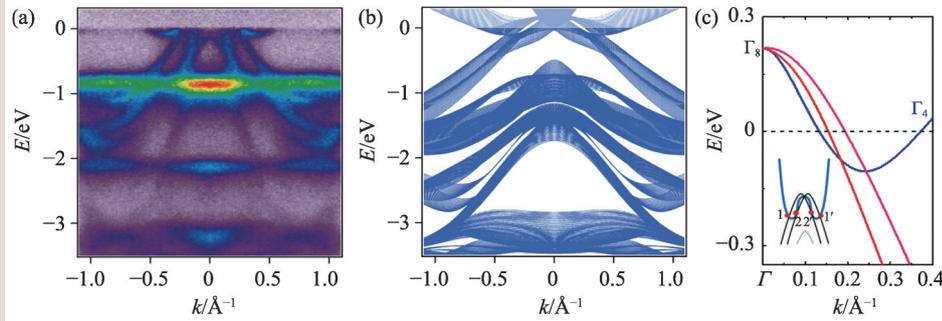


图3 (a)YbPtBi的ARPES谱；(b)对应的能带结构计算结果；(c)能带结构的三重简并点

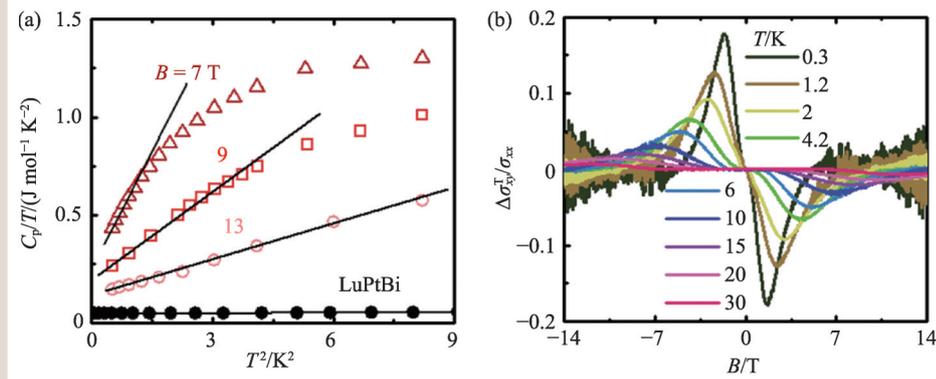


图4 YbPtBi的低温拓扑性质 (a)比热 C_p 与温度 T 的三次方关系；(b)不同温度下的拓扑霍尔效应^[36]

春煜等通过多种宏观物性和ARPES的测量，并结合能带计算，在YbPtBi中发现了外尔费米子激发，并且观察到外尔费米子在重费米子体系中由于电子相互作用所呈现出来的新物性^[36]。在高温区间，4f电子是局域的，与周围的巡游电子杂化很弱，类似于弱关联电子材料。此时块体的费米面将由 Γ 点附近的空穴能带与稍微偏离 Γ 点的电子能带组成(图3)。沿着[111]方向，原来四重简并的 Γ_8 态劈裂成两个非简并的空穴带和一对简并的 Γ_6 电子带。二重简并的 Γ_6 电子带与非简并的空穴带交叉，形成了两个三重简并的费米子态^[13]。这种三重简并的费米子态被ARPES测量直接证实，而且实验发现这些三重简并点位于费米面附近，可以对输运产生重要影响。

在外加磁场下，这些三重简并点将进一步劈裂，形成外尔节点。转角磁阻的测量显示有明显的手性异常效应，证实了外尔节点的存在。同时，径向电阻手性异常效应随样品载流子浓度有明显变化，且仅出现在电子型载流子的临界阈值

附近，这进一步证明YbPtBi的径向负磁阻是由费米面附近的外尔节点的手性异常效应导致的^[37]。随着温度下降，局域4f电子与巡游电子的杂化增强，形成有效质量很大的复合费米子，导致其费米速度迅速下降。与之相应，手性异常效应对径向磁阻的贡献迅速减少，在20 K以下可以忽略。由于复合费米子态的能量尺度很小，目前ARPES的能量分辨率还不足以揭示重费米子态中的能带拓扑结构。另一方面，

重费米子体系的电子比热系数很大，有助于研究低能激发。低温比热的测量显示电子比热正比于温度的三次方(图4(a))，与理论预言的具有线性色散关系的外尔节点相吻合^[22]。此外，低温下还观察到了明显的拓扑霍尔效应(图4(b))，进一步表明非平庸拓扑态的存在。

综合ARPES和低温下的物性测量，可以得到YbPtBi中外尔费米子随温度的演化图像^[36]。高温下，磁场诱导下的外尔费米子主要来自导带电子，因此有效速度较大；低温下，4f电子与导带电子的杂化效应使得外尔费米子附近的色散关系被极大地重整化，导致有效速度大大降低，但外尔费米子依然存在。

5 稀土元素铈化物和铋化物的外尔费米子和关联拓扑态

稀土元素铈化物(RESb, RE代表稀土元素)和铋化物(REBi)是一类具有关联效应的拓扑半金属

材料。体系的关联效应来源于稀土元素中的4f电子，其在低温下与导带电子发生耦合，可以产生复杂的磁性以及近藤屏蔽效应(特别对于Ce和Sm基材料)^[38]。与此同时，由于Sb和Bi都有较强的自旋轨道耦合，其电子能带具有拓扑非平庸的性质(或者接近拓扑相变的临界点)。之前的研究发现这一类材料普遍具有很大的磁阻，同时在外加磁场下电阻会在低温下上翘，并且最终在很低的温度下饱和，与很多的拓扑半金属有非常强的相似性^[39, 40]。后续研究表明这种奇异的磁阻行为更有可能来自于经典的电子—空穴补偿效应^[41—44]。

郭春煜等人在CeSb的铁磁态中发现手性异常现象，提出铁磁态的CeSb可能在外尔节点，并得到了能带计算的支持^[45]。CeSb做为一个经典的低载流子浓度近藤晶体，在20世纪80年代受到了广泛的关注。随着温度的降低，CeSb首先进入反铁磁态，然后会陆续进入一系列复杂的磁有序态，并在最低温时形成一种特殊的类亚铁磁基态。在外加磁场下，CeSb具有更加复杂的相图，包括反铁磁态、亚铁磁态、铁磁态等十多种不同的磁有序态。与此同时，CeSb在这么低载流子浓度下是否存在近藤效应以及其产生的机理，仍然是一个有很大争议的问题。郭春煜等首先对CeSb以及相关的稀土元素锑化物的宏观物性进行了系统的研究和比较，发现CeSb中确实存在明显的近藤效应，并且与磁性RKKY相互作用共存。接下来，他们对

转角磁阻进行了测量(图5)。当磁场平行于电流方向时，在磁结构转变为铁磁之前，电阻随磁场增加而增加，即表现出正磁阻行为。当外加磁场大于临界磁场时，样品的磁结构转变为铁磁有序，此时磁阻上出现一个跳变。继续增大外加磁场时，样品的电阻随着磁场的增加而逐渐下降，即出现负磁阻行为。这一负磁阻行为可以由铁磁状态下形成的外尔点诱发的手性异常效应解释。随着温度升高，这一负磁阻效应逐渐减弱。同时，在低温区间，负磁阻对于磁场方向极为敏感：例如在2 K时，当且仅当磁场与电流方向夹角小于2°时，才能观测到负磁阻行为。而在6 K时，当夹角大于0.5°时，就已经无法观测到明显的负磁阻效应。这种仅在电流平行于磁场方向时才出现的负磁阻符合手性异常效应理论的描述。

铁磁态的CeSb中存在的外尔费米子也得到了

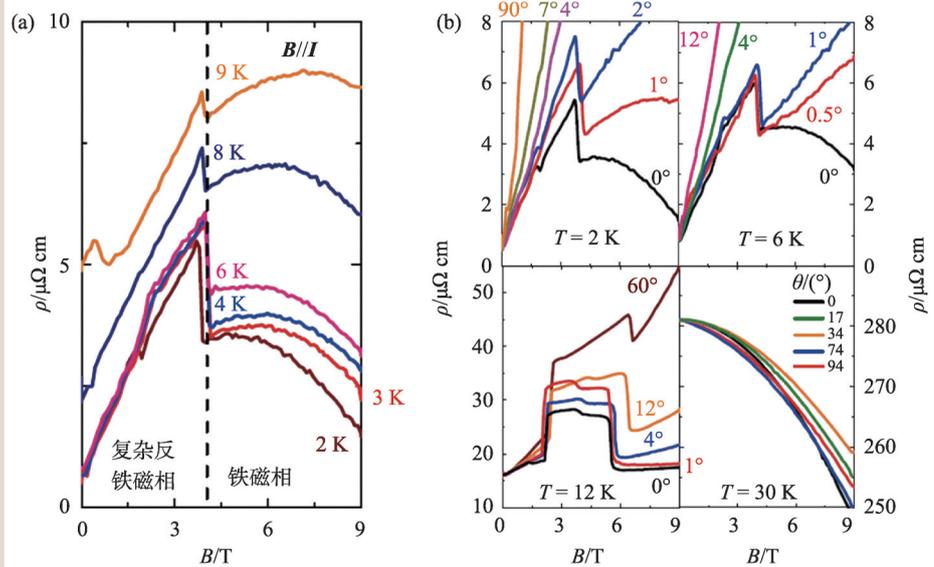


图5 (a)CeSb中径向磁阻随温度的变化；(b)不同温度下磁阻随转角的变化^[45]

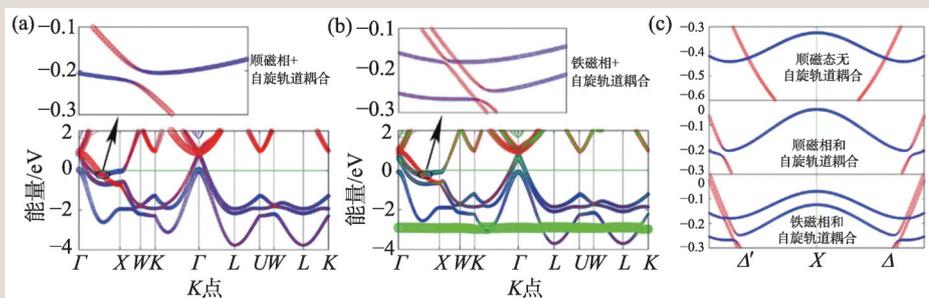


图6 (a)顺磁态下CeSb的能带结构；(b)铁磁态下CeSb的能带结构；(c)顺磁和铁磁态在X点附近的能带结构^[45]

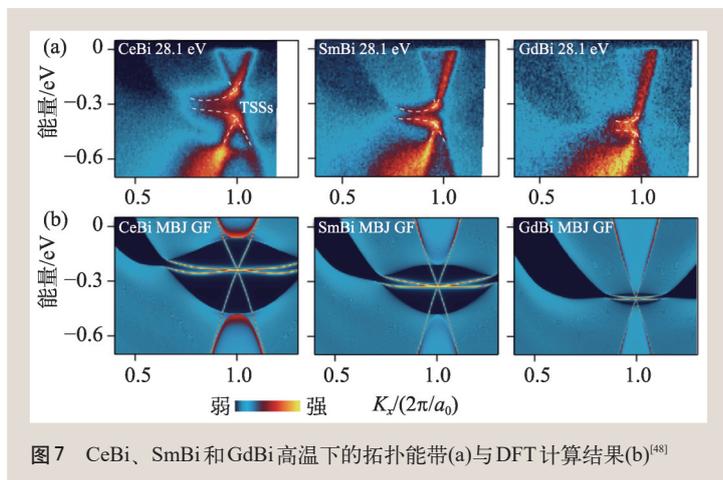


图7 CeBi、SmBi和GdBi高温下的拓扑能带(a)与DFT计算结果(b)^[48]

理论计算的验证。在顺磁态，当不考虑自旋轨道耦合时，Ce的 t_{2g} 轨道与Sb的5p轨道出现交叠，这些交叠在考虑自旋轨道耦合时会被破坏，并出现能带反转。而在场致铁磁态的情况下，自旋简并被破坏，电子自旋相同的能带互相交叠，这些交叠点就是外尔点(图6)。这些外尔点就是以上观测到的手性异常效应的起源。

RESb系列中另一个材料SmSb也表现出奇异的物理性质。强磁场量子振荡实验发现该体系也有大小为 π 的Berry相位，并且其dHvA(De Haas-van Alphen效应，磁化强度随磁场的振荡)和SdH(即Shubnikov de Haas效应，电导率随磁场的振荡)的振荡幅度随着温度变化的行为非常不同^[46]。dHvA的振荡幅度可以用标准的LK公式拟合，而SdH的振荡在低温下却有很大偏差，这种行为与SmB₆中观察到的量子振荡有些类似^[47]。这种奇异的量子振荡行为现在还没有很好的解释，其是否与非平庸的拓扑能带有关是一个值得未来继续研究的问题。

李鹏等人对REBi的拓扑能带进行了ARPES测量。测量结果表明，这类材料在高温下具有明显的块体能带反转，从而产生拓扑表面态。能带反转和拓扑表面态的色散与DFT计算的结果很接近，说明在高温下4f电子是完全局域的(图7)^[48]。同时拓扑表面态的色散可以由稀土元素RE进行调控，在GdBi时反转能隙变得很小，当RE为Dy元素时将发生拓扑相变^[49]。

在低温下，CeBi中的4f电子与导带电子发生

杂化。由于体系载流子浓度很低，通过p-f杂化形成的近藤效应被极大地抑制。近邻Ce原子间的d-f杂化很强，从而产生了Ce的变价行为，导致在低温下Ce的5d电子口袋明显变大^[50]。与此同时，共振ARPES的测量发现随着温度的降低，4f电子的谱权重会有明显的降低，而导带电子权重却明显上升。这表明观察到的费米面变化来自于相邻Ce原子的4f电子与5d电子的杂化，也即Ce的微弱的变价行为(~1%)。这种微弱的变价行为在一般的近藤晶体中很难观察到，因为多体的近藤效应会起主导作用。但是在低载流子近藤体系中，由于近藤效应被抑制导致费米面体积很小，这种微弱的价态变化可以被观察到。这种价态的变化也对体系的拓扑表面态色散产生了明显影响。

6 Ce₃Pd₃Bi₄中的节线半金属态

Ce₃T₃Pn₄体系是一系列经典的重费米子材料，其代表是Ce₃Pt₃Bi₄。作为典型的近藤绝缘体，早在20世纪90年代初，人们就已经详细地研究了Ce₃Pt₃Bi₄的物性。这类系统均是体心立方结构，属220号空间群(I $\bar{4}3d$)。这一结构具有一系列螺旋转动、滑动镜像等非点群操作。电子输运^[51, 52]、比热测量^[51]、中子散射^[53]、高压输运^[54]、共振光电子谱^[55, 56]等实验均证实Ce₃Pt₃Bi₄是一个近藤温度在100 K左右，能隙在7—12 meV的近藤绝缘体。

对这类体系近期的关注是由于Ce₃Pt₃Bi₄是拓扑近藤绝缘体的备选材料之一^[18, 57]。P. Y. Chang等人还提出，由于其晶格结构的非点群对称性，Ce₃Pt₃Bi₄也可能是新的一类“莫比乌斯”近藤绝缘体的备选材料之一，其表面态可以有类似莫比乌斯环的结构^[58]。在此基础上，Dzsaber等人通过使用Pd替换Pt获取了一系列样品Ce₃(Pt_{1-x}Pd_x)₃Bi₄。这一元素替代导致Ce₃Pt₃Bi₄的能隙迅速被压制，由于这一系列样品的晶格常数基本不变，他们认为Ce₃Pd₃Bi₄是一个从近藤拓扑绝缘体Ce₃Pt₃Bi₄通过调节自旋轨道耦合强度获得的外尔近藤半金属^[22, 59]。

不过，同时也有一些实验对上述结果提出

了质疑。Wakeham 等人对 $\text{Ce}_3\text{Pt}_3\text{Bi}_4$ 进行了霍尔系数对样品厚度依赖关系以及表面无磁杂质对电子输运影响的测量，结果均表明其低温输运性质主要来源于体态而非表面态，与 SmB_6 有显著的不同^[52]。Kushwaha 等人也对 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 的输运性质进行了仔细的测量，认为 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 与 $\text{Ce}_3\text{Pt}_3\text{Bi}_4$ 一样都

是近藤绝缘体，但是其近藤能隙只有大约 0.4—1.8 meV，很容易通过外加磁场将近藤能隙完全抑制而表现出费米液体金属行为。因此，他们认为 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 可能在 $B_c=11$ T 左右表现出量子临界行为^[60]。

从具体材料计算的角度，DFT+DMFT 计算表明 $\text{Ce}_3\text{Pt}_3\text{Bi}_4$ 是一个近藤绝缘体^[61]，其近藤温度大约在 36—72 K 之间，近藤能隙约为 6 meV 左右 (图 8)。对其拓扑哈密顿量进行的 Wilson loop 计算表明其 Z_2 拓扑指数为 (0;000)，也即是一个拓扑平庸的绝缘体，而非先前猜测的拓扑绝缘体^[61]。而 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 在 DFT+DMFT 计算中一直都没有形成清晰的近藤能隙；在 4 K 时，其费米能附近的动量依赖谱函数及费米面与掺杂了 2 个电子的局域 f 电子的 DFT 计算十分相似。而 DFT 计算表明， $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 中存在 24 个受非点群对称性保护的节点环 (图 9)，而其拓扑哈密顿量也在相同的位置给出了同样数量的节点环，因此 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 在 4 K 时是一个节点环近藤半金属^[61]。注意到这里的节点环的形成是受晶格对称性保护的，同时由于每个原胞中有 6 个 Ce 原子，因此 2 个电子掺杂等价于 1/3 占据，这与之前的理论工作^[20]是一致的。最后，计算表明 Pd 替换 Pt 的最主要效应对局域/传导电子杂化函数的调节，而非自旋轨道耦合的贡献^[61]。这一结果也得到了其他 DFT 计算的支持^[62]。

7 展望

相对于弱关联拓扑半金属研究，拓扑近藤半金属研究还在起步阶段，充满着挑战。从理论的

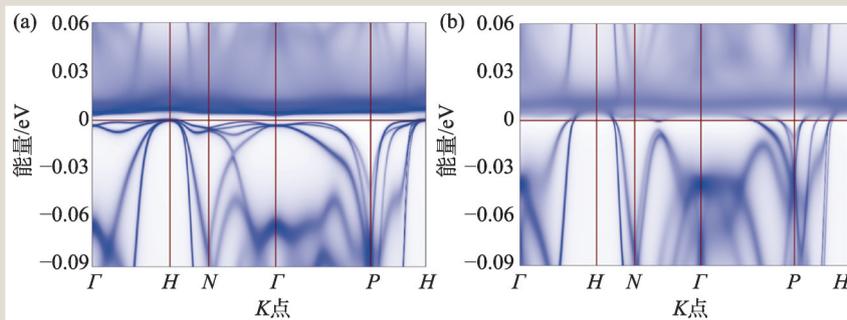


图8 低温下 $\text{Ce}_3\text{Pt}_3\text{Bi}_4$ 体系 DFT+DMFT 能谱色散关系 (a) $\text{Ce}_3\text{Pt}_3\text{Bi}_4$ 在 18 K 时的色散关系；(b) $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 在 4 K 时的色散关系

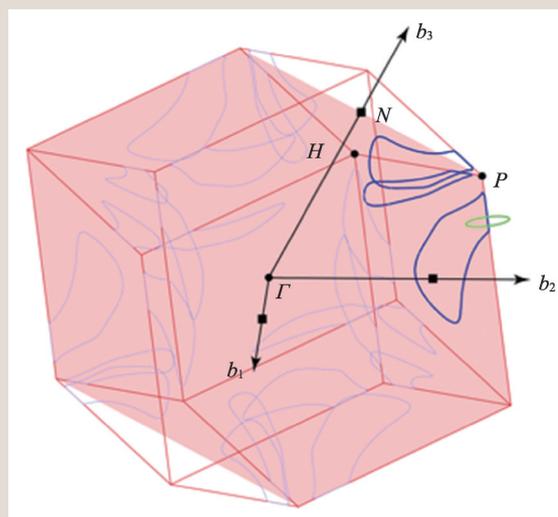


图9 $\text{Ce}_3\text{Pd}_3\text{Bi}_4$ 中的节点环结构

角度来看，对于如何实现拓扑近藤半金属还没有一个统一的途径和方法。根据 Wang 等人的理论，强关联体系中实现非平庸拓扑必然要求无相互作用部分的哈密顿量是拓扑非平庸的^[26]，因此在低温下的电子填充数，或者说 f 轨道元素的价态就显得尤其重要。除 Chang 等人提出的方法外，其他的研究都要求偏离空态、满态或半填充^[20, 22]，而材料计算似乎也有相同的结果^[29, 61]。究竟是否存在一个如 Chang 等人所提出的，介于拓扑近藤绝缘体和普通绝缘体之间，可以通过某个参数连续调节的拓扑近藤半金属态，进而实现拓扑量子临界点，还是一个悬而未决的问题。在材料拓扑性质计算与预测方面，弱关联材料已经形成了一套较为完整的，基于对称性指标的分类和预测方法^[14-16]，这一方法是否能拓展至强关联体系还有待进一步的研究。

从实验的角度来看, 拓扑近藤半金属由于强关联效应导致能带强烈地重整化, 其准粒子色散的能量尺度非常小, 这对 ARPES 等电子谱学手段提出了很高的能量分辨率要求。此外, 很多近藤晶体都不能很好进行真空解离, 这也为高分辨的 ARPES、STM 等测量提高了难度。未来如何获取决定性的实验证据也是挑战的一部分。在材料方面, 已有的这些材料在费米能附近除了有拓扑非平庸的电子态, 一般也有较多的来自拓扑平庸能

带的贡献。更为干净和纯粹的拓扑近藤半金属材料也有待于人们的发现。同时, 现在已知的拓扑近藤半金属材料均是非中心对称的, 因此只能是外尔近藤半金属。是否存在中心对称的狄拉克近藤半金属也并没有明确的定论。最后, 重费米子超导材料一般都是非常规超导体, 如果其在超导转变温度以上的能带结构具有拓扑性质, 是否可以形成重费米子拓扑超导? 这一系列的问题都有待在今后的研究中逐步解决。

参考文献

- [1] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C. *Science*, 2006, 314: 5806
- [2] König M *et al.* *Science*, 2007, 318: 5851
- [3] Chen Y L *et al.* *Science*, 2009, 325: 178
- [4] Hsieh D *et al.* *Nature*, 2009, 460: 1101
- [5] Hasan M Z, Kane C L. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82: 3045
- [6] Qi X L, Zhang S C. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83: 1057
- [7] Weng H, Dai X, Fang Z. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2016, 28: 303001
- [8] Liu Z K *et al.* *Science*, 2014, 343: 864
- [9] Weng H, Fang C, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5: 011029
- [10] Lv B Q *et al.* *Phys. Rev. X*, 2015, 5: 031013
- [11] Yang L X *et al.* *Nat. Phys.*, 2015, 11: 728
- [12] Huang S M *et al.* *Nat. Commun.*, 2015, 6: 7373
- [13] Lv B Q *et al.* *Nature*, 2017, 546: 627
- [14] Tang F *et al.* *Nature*, 2019, 566: 486
- [15] Zhang T *et al.* *Nature*, 2019, 566: 475
- [16] Vergniory M G *et al.* *Nature*, 2019, 566: 480
- [17] Lu F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 110: 096401
- [18] Dzero M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 104: 106408
- [19] Weng H *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112: 016403
- [20] Feng X Y *et al.* Dirac-Kondo semimetals and topological Kondo insulators in the dilute carrier limit. arXiv: 1605. 02380. 2016
- [21] Feng X Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2013, 111: 016402
- [22] Lai H H *et al.* *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2018, 115: 73
- [23] Chang P Y, Coleman P. *Phys. Rev. B*, 2018, 97: 155134
- [24] Deng X *et al.* *Phys. Rev. B*, 2009, 79: 075114
- [25] Kotliar G *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2006, 78: 865
- [26] Wang L *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 84: 205116
- [27] Wang Z *et al.* *Phys. Rev. X*, 2012, 2: 031008
- [28] Wang Z *et al.* *J. Phys.: Condens. Matter*, 2013, 25: 155601
- [29] Xu Y, Yue C, Weng H *et al.* *Phys. Rev. X*, 2017, 7: 011027
- [30] Das I, Sampathkumaran V. *Phys. Rev. B*, 1992, 46: 4250
- [31] Paschen S *et al.* *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2010, 200: 012156
- [32] Guritanu V *et al.* *Phys. Rev. B*, 2013, 87: 115129
- [33] Sundermann M *et al.* *Sci. Rep.*, 2015, 5: 17937
- [34] Zhang J *et al.* *Chin. Phys. B*, 2018, 27: 097103
- [35] Fisk Z *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1991, 67: 3310
- [36] Guo C Y *et al.* *Nat. Commun.*, 2018, 9: 4622
- [37] Guo C Y *et al.* *AIP Advances*, 2018, 8: 101336
- [38] Takahashi H, Kasuya T. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1985, 18: 2697
- [39] Tafti F F, Gibson Q D, Kushwaha S K *et al.* *Nat. Phys.*, 2015, 12: 272
- [40] Tafti F F *et al.* *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2016, 113: E3475
- [41] Guo P J, Yang H C, Zhang B J *et al.* *Phys. Rev. B*, 2016, 93: 235142
- [42] Zeng L K *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117: 127204
- [43] He J F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2016, 117: 267201
- [44] Wu Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2019, 99: 035158
- [45] Guo C Y *et al.* *npj Quantum Materials*, 2017, 2: 39
- [46] Wu F *et al.* *npj Quantum Materials*, 2019, 4: 20
- [47] Hartstein M *et al.* *Nat. Phys.*, 2018, 14: 166
- [48] Li P *et al.* *Phys. Rev. B*, 2018, 98: 085103
- [49] Duan X *et al.* *Commun. Phys.*, 2018, 1: 71
- [50] Li P *et al.* *Phys. Rev. B*, 2019, 100: 1551110
- [51] Hundley M F *et al.* *Phys. Rev. B*, 1990, 42: 6842
- [52] Wakeham N *et al.* *Phys. Rev. B*, 2016, 94: 035127
- [53] Severing A *et al.* *Phys. Rev. B*, 1991, 44: 6832
- [54] Cooley J C *et al.* *Phys. Rev. B*, 1997, 55: 7533
- [55] Breuer K *et al.* *EPL*, 1998, 41: 565
- [56] Takeda Y *et al.* *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1999, 38: 209
- [57] Dzero M *et al.* *Phys. Rev. B*, 2012, 85: 045130
- [58] Chang P Y *et al.* *Nat. Phys.*, 2017, 13: 794
- [59] Dzsaber S *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 118: 246601
- [60] Kushwaha S K *et al.* *Nat. Commun.*, 2019, 10: 5487
- [61] Cao C, Zhu J X. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 166403
- [62] Tomczak J M. *Phys. Rev. B*, 2020, 101: 035116