

拓扑节线与节面金属的研究进展

王珊珊 吴维康 杨声远

Progress on topological nodal line and nodal surface

Wang Shan-Shan Wu Wei-Kang Yang Sheng-Yuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 227101 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20191538

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191538>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

拓扑半金属材料角分辨光电子能谱研究进展

Progress of ARPES study on topological semimetals

物理学报. 2019, 68(22): 227102-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191544>

拓扑半金属材料的单晶生长研究进展

Research progress of single crystal growth for topological semimetals

物理学报. 2018, 67(12): 128102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180796>

拓扑光子学研究进展

Research progress of topological photonics

物理学报. 2019, 68(22): 224206-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191437>

拓扑半金属的红外光谱研究

Optical properties of topological semimetals

物理学报. 2019, 68(22): 227804-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191510>

专题：拓扑物理前沿与应用

拓扑节线与节面金属的研究进展*

王珊珊^{1)†} 吴维康²⁾ 杨声远²⁾

1) (东南大学物理学院, 南京 211189)

2) (新加坡科技与设计大学, 量子材料理论研究室, 新加坡 487372)

(2019年10月9日收到; 2019年11月4日收到修改稿)

拓扑节线与节面金属指的是在费米能附近存在能带交叉, 并且这些交叉点在动量空间分别形成一维曲线和二维曲面的金属材料. 这种特殊的能带结构可以带来很多奇异的物理性质, 使得这两类体系在近几年得到了广泛关注. 本文着重讨论了节线与节面金属相关概念的发展, 回顾了有关的研究工作, 包括节线与节面的特征与分类以及相应材料的预测.

关键词: 拓扑材料, 节线, 节面, 能带结构

PACS: 71.20.-b, 73.20.-r

DOI: 10.7498/aps.68.20191538

1 引言

拓扑材料是当前物理学中发展极为迅速的一个领域, 并且其影响也扩展到了化学、材料学以及电子工程学等学科. 从概念上来说, 这一领域的研究至少可以追溯到量子霍尔效应的发现. 1980年, von Klitzing 等^[1]在具有高迁移率的二维电子气系统中施加强磁场, 发现霍尔电导呈现出一系列的平台, 其对应的值是基本物理常数 e^2/h 的整数倍. 尤其惊人的是所观测到的量子化的平台数值达到了极高的精度 (可达十亿分之一), 使得这个效应后来成为了电阻单位的度量标准. 固体系统不可避免地会有杂质、缺陷和热扰动的影响, 为什么这些电导平台竟然可以达到如此高的精度呢? 1982年, Thouless, Kohmoto, Nightingale 和 den Nijs 指出这些霍尔电导平台对应的整数其实是一个拓扑不变量, 其在数学中被称为 Z (在凝聚态物理中也被称为 TKNN 不变量)^[2]. 拓扑不变量是用来对各种

抽象的结构进行刻画分类的整数. 比如一个二维封闭曲面上孔洞的数目就是一个拓扑不变量. 正因为这个不变量一定是整数而不能连续取值, 所以这些霍尔电导平台才会有这么高的量子化精度.

量子霍尔效应的实现需要有一个外加磁场使电子的能谱形成朗道能级, 有没有可能不需要外场, 固体本身就具有拓扑性呢? 1988年, Haldane 通过构建一个具体的理论模型, 说明了即使没有外磁场, 体系本身的能带也可以有非平庸的 (即不为 0 的) 陈数, 形成了后来被称为量子反常霍尔效应的拓扑态^[3]. 这里研究的模型是在一个类似石墨烯的二维六角晶格模型中加入了破坏时间反演对称性的一些跃迁相位. 或许是因为这种情况在实际材料中很难实现, 所以这项研究在发表后的十多年间并未受到很多关注.

近年来拓扑材料领域的蓬勃发展发端于 Kane 和 Mele^[4,5] 在 2005 年的两篇报道. 他们从理论上提出了量子自旋霍尔效应的概念 (后来也被称为二维拓扑绝缘体). 在最简单的图像中, 这个态可

* 东南大学至善青年学者计划 A 类和 Singapore Ministry of Education Academic Research Fund Tier 2 (Grant No. MOE-2017-T2-2-108) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 101012564@seu.edu.cn

以看作是把具有相反陈数的两个 Haldane 模型结合到了一起, 每个模型对应着一个电子自旋, 从而整个系统仍然保持了时间反演对称性. 当系统处于量子自旋霍尔效应态时, 它的内部是一个绝缘体, 系统的低能电子激发发生在边界: 在边界上存在无能隙的一对边缘态能带. Kane 和 Mele 使用的模型基于石墨烯, Haldane 模型中所需要的跃迁相位在这里自然地对应着一种自旋轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC) 作用, 因此他们提出: 2004 年在实验上被实现的石墨烯^[6,7]就是一种二维拓扑绝缘体^[5]. 但是由于碳是一种轻元素, 石墨烯中的 SOC 非常微弱, 导致其在体能带中打开的带隙太小, 在实验上很难观测到量子自旋霍尔效应的特征^[8,9]. 2006 年, Bernevig 等^[10]提出利用 HgTe 量子阱结构中的能带反转可以实现量子自旋霍尔效应, 成为第一个被实验验证的二维拓扑绝缘体^[11]. 随后, 拓扑绝缘体的概念又从二维被推广到三维^[12,13], 并衍生出了拓扑晶体绝缘体^[14]、轴子绝缘体等许多概念^[15].

对于拓扑绝缘体可以有几种不同视角的理解. 一种是从能带反转的角度. 每个孤立原子具有分立的原子轨道能级, 当原子规律地聚集到一起形成晶体时, 它们的原子轨道由于互相交叠作用从而演化为能带. 在这个过程中很可能能级的能量次序发生了改变, 比如在某个原子中 p 轨道比 s 轨道能量高, 但是在其形成的晶体中 s 轨道形成的能带却高于 p 轨道形成的能带 (当然在晶体中通常每个能带都有不止一种轨道成分, 这里说的是其主要的轨道成分), 这种情况就被称为能带发生了反转. 能带反转本身就体现了一种拓扑性: 它表示这个能带和原子极限下的能级 (有时也被称为原子绝缘体的能带) 是截然不同的, 如果想从一个平滑地变成另一个, 就一定要发生能级间的简并. 以上是一个过于简单的图像, 这里还有两点需要注意. 一是因为能带具有色散, 反转不一定在整个布里渊区 (Brillouin zone) 上发生, 而往往只发生在其中的部分区域, 那么此时能带是否还具有全局上的拓扑性就需要更加仔细地分析. 有时经过负负得正, 在两个区域发生的反转反而带来一个拓扑上平庸的态. 二是发生反转的能带需要是费米能级上下的两个能带才有意义, 因为这样才会带来下面要讨论的在体能隙中存在的拓扑边缘态, 而固体的多数物理性质都是由这些低能电子态所决定的.

第二种视角是体和边缘的对应关系 (bulk-boundary correspondence), 也就是体能带的拓朴性质对应着系统边界上存在的无能隙边缘态. 这一点可以从上面讨论的能带反转的图像有一个直观的理解. 如图 1 所示, 固体的外部真空可以等价于一个原子绝缘体 (拓朴平庸的态), 那么从能带反转的内部过渡到不反转的外部, 能带会在边界处交叉而关闭能隙, 也就形成了无能隙的边缘态. 因为这个边界分开了两个具有不同拓朴性的区域, 它也被称为一个拓朴畴壁 (topological domain wall), 而这个边缘态也就对应着一个拓朴畴壁中的局域态. 这里值得注意的是: 在量子力学中, 能级总是倾向于互相排斥, 要保证图中在边界上的能级交叉往往需要有额外的对称性的保护. 比如在 (通常所说的) 拓朴绝缘体中, 这个交叉就是由时间反演对称所保护的.

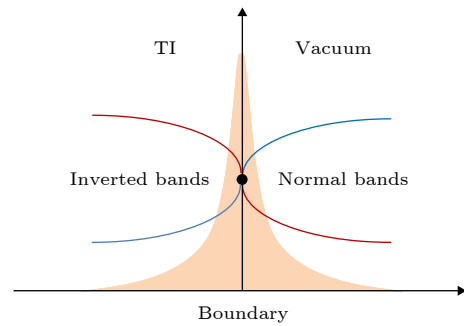


图 1 关于拓朴绝缘体中拓朴边缘态的简单图像
Fig. 1. A schematic figure for the topological boundary state in a topological insulator.

第三种视角是从数学上用拓朴不变量来刻画拓朴绝缘态. 前面提到过, 拓朴不变量 (比如陈数) 是一个整数, 它由所有被占据的能带 (也就是价带) 所决定. 具有相同拓朴不变量的两个态在拓朴上是等价的. 对一个系统的拓朴分类依赖于系统所具有的对称性和维度, 不同的对称性和维度会带来不同的拓朴类以及不同的拓朴不变量. 例如破坏时间反演的二维系统可以由陈数来刻画, 但是当时间反演对称存在的时候, 陈数总是 0, 那就要用到 Z_2 不变量 (也就是说该系统只有两种拓朴类) 来进行刻画^[4]. 对什么样的体系该有什么样的分类在数学上已有不少成熟的判定标准和结果^[16,17]. 在物理研究中也发展了很多不同的方法来计算一个给定体系的拓朴数. 在这些方法中常常会用到贝利联络 (Berry connection) 和贝利曲率 (Berry curvature)

这样的概念^[18]. 它们体现的是电子波函数在动量空间中的几何性质^[19].

随着对拓扑绝缘体理解的深入, 人们意识到拓扑的概念也可以拓展到金属态. 比如考虑一个三维金属, 其体能带不具有能隙, 但如果在三维的布里渊区中取一个二维的封闭曲面且使得曲面上没有穿越费米面的能带, 那可以认为它对应着一个二维的绝缘体, 也就可以用二维绝缘体的拓扑分类来刻画它^[20,21]. 那么什么样的曲面会是拓扑非平庸的呢? 通常这样的曲面会包裹住一些能带的简并点. 例如在外尔半金属 (Weyl semimetal) 中^[22], 能带在费米面附近的交叉形成了具有线性色散的二重简并点 (称为外尔点), 于是包裹住这种点的二维曲面就具有 ± 1 的陈数. 类比于电磁学中的高斯定律, 可以把外尔点看作是动量空间中的拓扑磁单极子, 它所产生的磁场就是贝利曲率, 而这个磁场在曲面上的磁通正对应着陈数, 也就是曲面包裹的净磁荷. 另一方面, 因为曲面上的拓扑数不能连续变化, 这说明里面的那个外尔点是拓扑稳定的, 其简并不能被轻易破坏.

就物理性质而言, 拓扑金属的重要性主要就来源于这些稳定存在的能带简并点. 这是因为当这些点靠近费米能的时候, 低能的电子会具有与传统材料中电子截然不同的性质. 除了色散会很不一样, 这些电子本征地具有一个衍生出的赝自旋 (pseudospin) 自由度. 比如一个外尔点附近的电子就具有一个 $1/2$ 的赝自旋, 对应着相交的两个能带的自由度. 而且这个赝自旋是和电子的动量耦合在一起的. 对一个外尔点附近的电子, 它遵循的有效模型就类似于量子场论中外尔费米子的模型. 这导致了外尔半金属以及其他的拓扑金属会具有很多奇异的物理性质, 并且很多高能物理中讨论的效应也可以在固体系统中进行研究^[23–25].

从上面这个观点来看, 石墨烯其实就是一个非常好的二维拓扑半金属. 在忽略 SOC 的情况下, 石墨烯的费米面就只由布里渊区角上的两个点 (K 和 K') 组成, 每个点附近的色散都呈线性, 低能电子由二维的外尔模型所描述. 这里我们需要厘清一个概念^[26]: 在有关石墨烯的早期文献中一般把这个简并点称为狄拉克点 (Dirac point), 这是因为如果把 K 和 K' 的模型写在一起, 那就像是一个 4×4 的由两个手性相反的外尔模型所组成的狄拉克模型. 但是需要注意这两个外尔模型的动量参

考点是不同的, 一个是 K , 另一个是 K' . 严格地说, 每个单个的简并点都应该被称为外尔点而不是狄拉克点. 这种对于外尔点和狄拉克点的区分在后来对三维拓扑半金属的讨论中是很明确的^[27]. 但是由于历史的原因, 在石墨烯和二维材料的研究领域中, 仍然有部分文献不加区分地将这些线性色散的简并点统称为狄拉克点.

对拓扑金属研究的真正兴起是在 2011 年, Wan 等^[22] 提出了拓扑半金属的概念, 预言了一类磁性的外尔半金属材料, 并证明了它会具有一种奇特的费米弧拓扑表面态. 之后不久, 在 2012 年, Young 等^[27] 讨论了三维狄拉克半金属的概念. 在这种材料的体能带中存在狄拉克型的能带交叉点, 即这个点可以看作是由两个手性相反的外尔点重合在了一起, 对应着无质量的狄拉克模型. 其后又有许多工作讨论了更多类型的能带简并点, 例如双重外尔点 (double Weyl point)^[28], 三度、六度和八度简并的节点^[29–33], 双折射狄拉克点 (birefringent Dirac point)^[34–36], 三次狄拉克点 (cubic Dirac point)^[37,38], 二次色散的简并点 (quadratic contact point)^[39] 等. 在这些简并点中, 外尔点是最稳定的: 只要不破坏晶格的平移对称性, 单个的外尔点就是稳定的. 而其他各种类型的点都需要额外的晶格对称性 (比如旋转、镜面等) 的保护.

对应于提出的各种拓扑金属概念, 迄今研究者们已经找到了不少真实材料. 这个领域的研究范式一般是首先提出概念 (新的拓扑态), 总结出实现这一概念对材料的要求 (如对称性), 然后通过材料数据库和第一性原理计算寻找满足要求的真实材料, 最后通过实验验证. 当然也有不少情况是首先在某种真实材料中恰巧发现了新奇的能带简并点, 继而再抽象出一般性的拓扑态的概念. 在这个领域中, 第一性原理计算已被证明是一个强有力的工具. 计算所预测的拓扑材料, 所得到的能带特征和表面态在非常多的例子中都被实验成功地验证. 其成功除了计算方法不断发展完善, 也归因于拓扑材料的很多性质 (比如简并点和表面态) 是由对称性和拓扑决定的而对计算的精度并不敏感.

就实验而言, 表征拓扑金属的最主要手段是角分辨光电子谱 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES). 拓扑金属的主要特征就是能带中的简并点, 利用 ARPES 可以直接探测固体内部和表面的能带结构并和第一性原理计算的结

果做比较. 某些种类的拓扑金属会存在受保护的表面态, 这些表面态可以用扫描隧道显微镜 (scanning, tunneling microscopy, STM) 等手段进行探测, 用扫描隧穿谱 (scanning, tunneling spectroscopy, STS) 和准粒子干涉 (quasiparticle interference, QPI) 的方法可以进一步得到表面态的能量和动量分布的信息. 输运性质也可以反映拓扑能带结构的某些特征, 比如在外尔半金属中会存在由手征反常 (chiral anomaly) 效应所带来的负磁阻贡献^[23,40]. 这里值得注意的是输运过程是相当复杂的, 会同时存在很多不同的相互竞争的机制^[41], 尤其是当费米面附近的能带并不简单的时候. 近期的研究证实了负磁阻可以有其他的来源, 也可以存在于非拓扑的材料中^[41-43]. 因此研究者在解释输运实验的结果时需要格外谨慎.

就具体材料而言, 最先在实验上得到验证的拓扑金属是 Wang 等^[44,45] 预测的三维狄拉克半金属材料 Na_3Bi 和 Cd_3As_2 . 对于三维外尔半金属, 首先被实验所验证的是翁红明等人^[46,47] 所预测的 TaAs 材料体系. 在近年来的研究中, 特别是最近利用对称性指标理论进行大规模数据库搜索的工作中^[48-50], 新的拓扑金属材料陆续被发现. 但是要找到一个“好”的拓扑金属材料仍然是目前这个领域面临的一大挑战. 那什么样的材料是“好”的呢? 这至少要包含以下几个方面: 第一, 我们关注的能带简并点要靠近费米面, 因为只有这样低能电子和大部分的固体性质才能体现出这个简并点的特征; 第二, 费米面附近的能带要足够干净, 没有其他无关的能带, 最理想的情况是低能只存在产生简并点的那些能带; 第三, 简并点附近的特征色散能量区间要足够大, 比如对于外尔点, 就要要求其线性色散的能量区间要大; 第四, 这个材料本身要稳定, 并且可以制备出高纯度的样品. 到目前为止, 恐怕除了石墨烯 (作为一个二维的外尔半金属), 还没有一个真实材料可以满足上面的四点要求. 所以对理想的拓扑金属材料的探索仍然是一个重要的研究课题.

本文要讨论的节线和节面金属是对外尔/狄拉克半金属概念的另一种推广. 对于一个三维体系, 其两个能带间的交点不仅可以是零维的点, 也可以形成一维的线或者二维的面. 由于简并的维度不同, 节线与节面金属会带来与节点金属不一样的物理特性. 其实这些简并结构在各种固体的能带中是

广泛存在的, 但是如上面所提到的, 有物理意义的情形是它们必须存在于费米面附近, 这在真实材料中就变得难得了. 对节线的研究始于 2014 年到 2015 年几个研究组发表的一系列工作^[51-58]. 对节面的研究更晚一些, 始于 2016 年 Zhong 等^[59] 和 Liang 等^[60] 的研究工作. 目前, 这个领域仍然处在快速发展的时期. 本文着重介绍节线与节面金属的相关概念, 它们的分类、物理性质, 以及材料预测.

2 节线金属

2.1 节线的概念

我们对节线可以有一个很直观的理解. 如图 2(a) 所示, 当固体中的两个能带相交的时候, 就在布里渊区中形成了一个一维的节线. 对单粒子系统, 这个线总是闭合的, 因此很多研究也把它称为一个节环 (nodal loop). 通常碰到的节线都是由两个能带线性交叉而形成的. 在线上的任意一点 P 的附近, 可以给出一个低能有效模型^[61]:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}) = v_1 q_1 \sigma_x + v_2 q_2 \sigma_y + \mathbf{w} \cdot \mathbf{q}, \quad (1)$$

这里 \mathbf{q} 是从 P 出发的波矢, q_i ($i = 1, 2$) 是其在 (过 P 点) 垂直于节线的平面中的两个分量, v_i 是相应的费米速度, 泡利矩阵 σ_i 代表了相交的两个能带的自由度 (这个模型展开到 \mathbf{q} 的一阶项, 沿着线的切线方向的色散至少是二阶, 因此没有包括在内). 由这个模型, 可以得到节线附近的色散关系. 对应于两个本征态 $u_{\pm}(\mathbf{q})$ 的能量本征值是:

$$E_{\pm} = \mathbf{w} \cdot \mathbf{q} \pm \sqrt{v_1^2 q_1^2 + v_2^2 q_2^2}. \quad (2)$$

如果考虑图 2(b) 中在 q_1 - q_2 平面里的一个闭合路径 ℓ (它上面处处有局部的能隙, 可以被看作是一个一维的绝缘体), 当 ℓ 足够靠近节线的时候, 沿着它

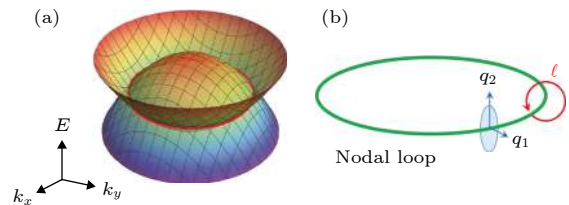


图 2 节线的示意图 (a) 由两条能带交叉所形成的节线; (b) 绿色的环代表节线, ℓ 是环绕节线一个路径, 沿着 ℓ 走一圈的贝利相为 π ^[61]

Fig. 2. Schematic figure of a nodal loop: (a) Nodal loop formed by two crossing bands; (b) the Berry phase of a closed path ℓ circling the nodal loop (green circle) is π ^[61].

走一圈的贝利相位为 π , 即:

$$\oint_{\ell} \mathcal{A}(\mathbf{q}) \cdot d\mathbf{q} = \pi, \quad (3)$$

这里 $\mathcal{A}(\mathbf{q}) = \langle u_- | i\nabla_{\mathbf{q}} u_- \rangle$ 是价带的贝利联络. 这一点也很容易理解, 可以看到当沿着 ℓ 走一圈时, 赝自旋 σ 是怎么旋转的. 这里需要注意的是 (3) 式中的相等是近似的. 当包括了高阶项时, 这个值一般会偏离 π . 不过当体系具有一些特殊的对称性时, 这个等式是严格的. 比如当体系同时具有时间反演和空间反演对称性, 并且没有 SOC(即具有自旋的旋转对称性) 时, 沿着任一闭合路径的贝利相位都要求是 π 的整数倍. 在这种情况下, (3) 式也就要求这个节线不能打开能隙; 因为一旦打开能隙, 贝利相就会偏离 π 而违反量子化的条件.

模型 (1) 给出了节线的一个局部描述. 这里再给出一个简单的、可以整体描述一个节线的模型. 当然, 与模型 (1) 不同, 这个模型不具有普适性, 但是它可以增进我们对节线概念的理解, 也可以作为计算节线物理性质的一个出发点. 我们考虑一个在 k_x - k_y 平面上的一个圆形的节环 (如图 2(b)), 从而给出下面这个模型^[61]:

$$H = \frac{1}{2m} k_{\rho}^2 + \frac{1}{2\eta} (k_{\rho}^2 - k_0^2) \sigma_x + v_z k_z \sigma_y, \quad (4)$$

这里 $k_{\rho} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, k_0 代表这个环的半径; m , η , 和 v_z 是模型的参数. 可以看到当在环上某一点展开的时候, 这个模型可以化简为模型 (1).

2.2 节线的对称性保护

前面已经提到, 除了外尔点可以有一个很强的拓扑保护, 其他的能带简并都需要一些额外的对称性保护. 下面讨论可以保护节线的几种对称性. 它们也代表了形成节线的几种机制.

1) 手征对称性 (chiral symmetry). 手征对称性指的是存在一个与系统哈密顿量反对易的幺正 (unitary) 对称操作. 用 Π 代表这个对称操作, 那么

$$\Pi H(\mathbf{k}) \Pi^{-1} = -H(\mathbf{k}). \quad (5)$$

这个对称性在系统能谱上的反映特别明显: 能谱是上下对称的样子. 对于固体系统, 这个对称性通常在两种情况下可以遇到: 一个是在超导系统中, 在利用 Nambu 表象描述超导准粒子激发谱时, 由于人为地引入了空穴自由度 (当时间反演对称性被保持时), 对应的 BdG 模型自然的会有一个手征对称

性; 另一种情况是系统的晶格是一种二分的 (bipartite) 类型, 即可以分成两套子晶格 (sublattice), 每一个子晶格中的轨道只与另一个子晶格中的轨道有耦合, 对于这种情况, 手征对称性也被称为子晶格对称性 (sublattice symmetry); 就具体材料而言, 这种对称性一般在单质材料中出现; 并且一般对轻元素, 比如碳, 硼等所组成的结构, 会保持的比较好^[56,62,63].

当系统具有手征对称性时, 对于大多数情况我们都可以一个动量空间的一维的闭合路径上定义一个拓扑绕数 (winding number)(见文献 [16] 中的具体讨论). 类似于图 2(b) 中的情况, 一个节线可以被绕着它的路径 ℓ 上的非平庸 (即不为零的) 拓扑绕数所刻画和保护. 只要系统的对称性不被破坏, 这个节线就不会被任何微扰打开能隙.

2014 年, 我们在反常超导的准粒子激发谱中讨论了这类节线的拓扑性质^[51]. 该项研究预言了一种叫作狄拉克超导的拓扑相 (可能存在于 Cu 掺杂的 Bi_2Se_3 , 或者 UPt_3 之中). 当体系的一种中心反演对称性被破坏时, 原本激发谱中四重简并的狄拉克点就会演化成一个手征对称所保护的节环 (见图 3(a)). 研究在体系的表面上, 这个体能带中的节环投影为表面布里渊区中的一个环, 在环内会出现鼓膜状的表面态 (drumhead surface state) 能带^[51]. 值得注意的是, 由于存在手征对称性, 这里的节环和鼓膜表面态都被限制于零能. 在这个例子中, 体

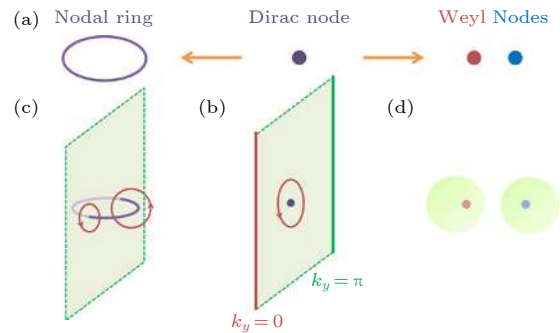


图 3 在狄拉克超导体中出现的由手征对称性保护的节线 (a) 当空间反演或者时间反演破坏时, 一个狄拉克点会变为一个节环或两个外尔点; (b)–(d) 刻画了 (a) 中几种简并点的拓扑保护机制, 其中节环是由拓扑绕数所保护^[51]
Fig. 3. Chiral symmetry protected nodal line in a Dirac superconductor: (a) A Dirac node can evolve into a nodal ring or two Weyl nodes under different symmetry breaking; (b)–(d) illustrate the different topological protection for the degeneracies in (a). Here, the nodal ring is protected by the winding number^[51].

系具有强 SOC. 需要指出的是手征对称所保护的节线也可以存在于没有 SOC 的系统中^[56].

2) 时空反演 (PT) 对称性. 当一个系统具有空间反演 (P) 和时间反演 (T) 的联合操作的对称性, 并且 SOC 可以忽略时, 布里渊区中的任何一条闭合路径上贝利相位都必须是量子化的 (π 的整数倍, 这个整数就是一个拓扑绕数). 如图 2 所示, 路径 ℓ 上的非平庸的 (π) 贝利相位为节线提供了一个保护.

因为这里的对称性要求没有 SOC, 所以这种节线一般是在 SOC 比较弱的轻元素材料中出现. 2015 年, 几个研究组分别在不同的碳的同素异形体中发现了这种节线 (见图 4)^[52,53,56]. 在一些例子中, 节线还同时受到手征对称性的双重保护^[56]. 在早期的研究中, Yu 等^[54] 和 Kim 等^[55] 也发现反钙钛矿材料 Cu_3PdN 中当不考虑 SOC 时也会有这种类型的节环; 当考虑 SOC 时, 节环被破坏而只留下一对狄拉克型的简并点. 之后找到的不少节线材料是属于这一类的, 比如 Ca_2As ^[64], CaP_3 家族^[65], Ca_3P_2 材料^[66], CaTe 材料^[67], BaSn_2 ^[68], CuTeO_3 ^[69] 和碱土金属单质^[70].

3) 镜面对称性. 这种情况是最容易理解的. 假定系统具有一个镜面对称性 M_z , 即垂直于 z 轴的一个镜面, 那么布里渊区中的 $k_z = 0$ 和 $k_z = \pi$ 平面便是在这个对称操作下的不变子空间: 在这两个面上每个 k 点的能量本征态同时也是 (当存在简并时, 总可以选为) 镜面的本征态. 如果两个能带在

其中一个平面上的镜面本征值相反, 那么它们在这个面上的交点就被镜面对称所保护. 而在一个二维平面, 两个能带一般都会交出一个一维的节线. 需要注意的是, 镜面保护的节线既可以出现在没有 SOC 的系统, 也可以出现在有 SOC 的系统, 并且与系统存在的其他对称性 (比如 P 和 T) 有关^[71].

4) 滑移镜面 (glide mirror) 对称性. 滑移镜面是一种非简单的 (nonsymmorphic) 晶格对称性. 它也是一种镜面操作, 但要额外加上一个分数晶格矢量的平移. 这里我们对滑移镜面单独进行分析, 因为它所导致的节线有其独特的性质. 我们考虑一个具有时间反演对称但没有空间反演对称的三维系统. 在布里渊区中, 存在八个时间反演不动点 (time reversal invariant momenta, TRIM), 即满足 $k = -k + G$ 的点, 这里 G 是某个倒格矢. 在这些 TRIM 点上, 能带要满足 Kramers 双重简并. 如果晶格具有一个包含平移半个晶格矢量的滑移镜面, 那么可以发现这个对称操作的本征值在 TRIM 点可以是以下两种类型: 在四个 TRIM 点是 ± 1 , 在另外四个 TRIM 点是 $\pm i$. 由于时间反演操作要取复共轭, 所以在 ± 1 的 TRIM 点, Kramers 双重简并的配对是 $(+1, +1)$ 和 $(-1, -1)$; 而在 $\pm i$ 的 TRIM 点, 配对必须是 $(+i, -i)$. 这两种配对类型的不同, 导致从一类 TRIM 点到另一类 TRIM 点的路径上, 随着 k 值得变化, 能带本征值也跟着变化, 在中间过程中, 能带必然发生了交

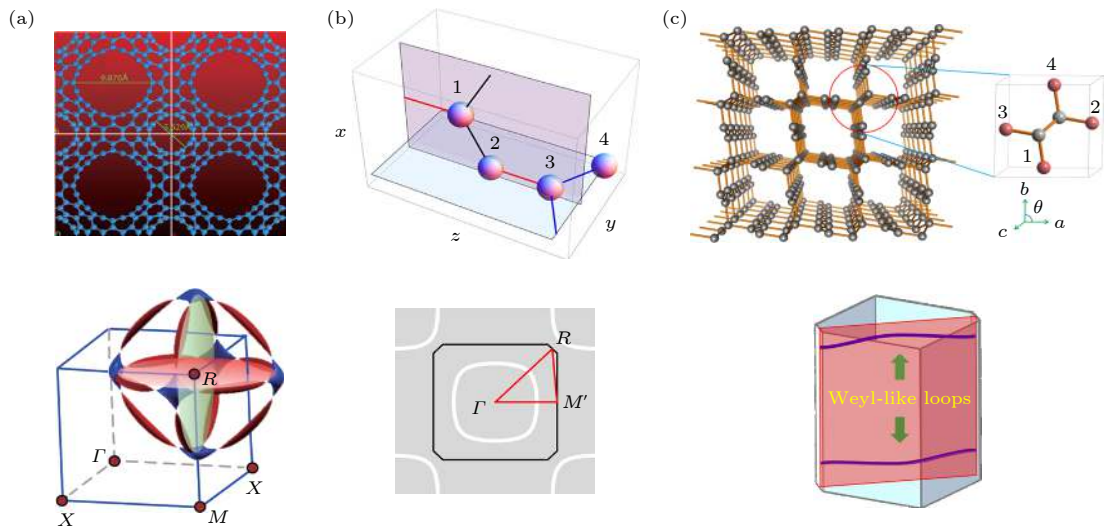


图 4 在三种碳材料中发现的节线 (a) Mackay-Terrones 结构的三维碳和节线在动量空间的表示^[52]; (b) hyperhoneycomb 结构的三维碳和节线在动量空间的表示^[53]; (c) 三维的石墨烯网络结构和节线在动量空间的表示^[56]

Fig. 4. Nodal lines found in three carbon allotropes: (a) 3D carbon with Mackay-Terrones crystal structure^[52]; (b) 3D hyperhoneycomb carbon^[53]; (c) 3D graphene network structure^[56].

换, 从而导致一种沙漏状的色散 (如图 5(b)). 沙漏脖子处的交点是一个二重简并点, 为滑移镜面所保护. 由于这里连接两个 TRIM 点的路径可以是保持滑移镜面对称的平面上的任何一条路径, 所以不同路径上的二重简并点会最终形成一个外尔型的

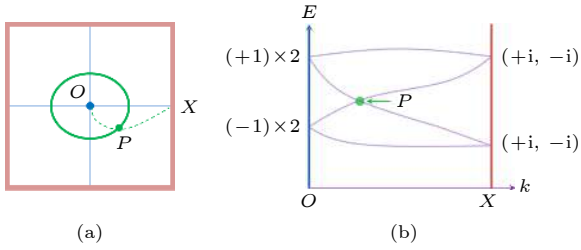


图 5 滑移镜面所保护的节线 (a) O 和 X 是滑移镜面上对应两个不同配对类型的 TRIM 点; (b) 展示了沿着连接 O 和 X 的一条路径 L 上的能带特征, 这里每四条能带都会形成一种沙漏形的结构; 沙漏脖子处的交叉点 P 在滑移镜面上会形成一条节线

Fig. 5. Nodal line protected by the glide mirror symmetry: (a) Shows the glide-mirror-invariant plane in Brillouin zone, O and X are two TRIM points with different glide mirror eigenvalues; (b) shows the band structure along a path L connecting O and X (as in (a)); it displays an hourglass shaped spectrum. The degeneracy point P in the hourglass traces out a nodal loop in the glide mirror plane.

节环, 见图 5(a).

上面的讨论中假定了空间反演是破缺的. 当系统同时还具有空间反演时, 图 5(b) 中的每条能带都因为 PT 对称而有一个额外的二度简并. 一般来说, 由于引入了额外的简并度, 沙漏脖子处的交点会被破坏. 但是当空间反演和滑移镜面满足某种特定的代数关系时 (见文献 [72] 中的讨论), 这个交点也有可能仍然被保持, 而成为一个四度简并的狄拉克点. 这样的话, 在保持滑移镜面不变的面上就会出现一个狄拉克型的节环 [73,74].

就材料而言, Bzdusek 等 [75] 提出滑移镜面保护的外尔型节环有可能在 IrF_4 的高温顺磁相中实现. Wang 等 [73] 和 Li 等 [74] 提出上面讨论的狄拉克型节环可能在真实材料 ReO_2 和 X_3SiTe_6 ($X = \text{Ta}, \text{Nb}$) 中实现, 见图 6. 最近, 几个研究组的 ARPES 实验和输运实验都给出了 Ta_3SiTe_6 和 Nb_3SiTe_6 具有拓扑性质的证据 [76,77].

2.3 节线的特征和分类

一个概念可以按照它的特征来进行分类. 对于节线来说, 它的主要特征包括以下几个方面: 简并

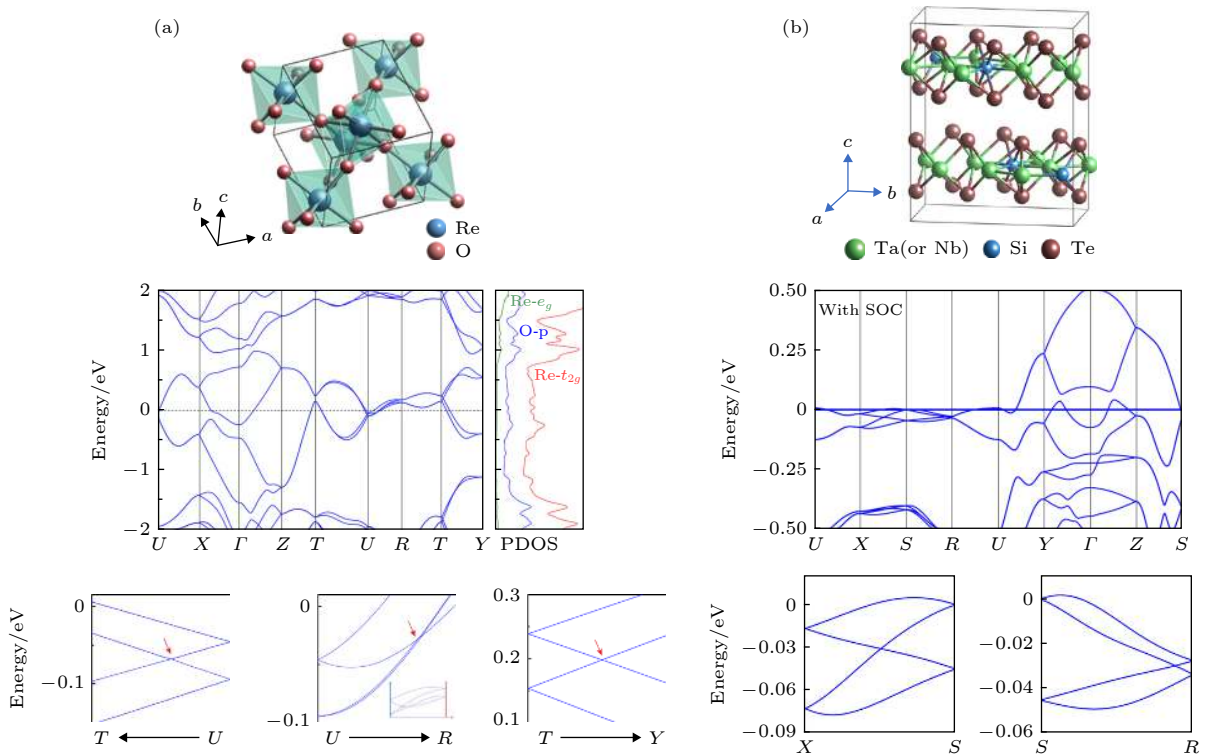


图 6 具有滑移镜面所保护的节线的例子 (a) ReO_2 的晶体结构和能带结构, 可以看到高对称线上的沙漏型色散 [73]; (b) X_3SiTe_6 ($X = \text{Ta}, \text{Nb}$) 的晶体结构和能带结构, 以及在高对称线上的沙漏型能量色散 [74]

Fig. 6. Material examples with glide-mirror-protected nodal rings: (a) ReO_2 [73]; (b) X_3SiTe_6 ($X = \text{Ta}, \text{Nb}$) [74], the hourglass dispersions can be observed in their band structures.

度、色散和形状. 对节线的分类也正是从这几个方面展开.

1) 按照简并度分类: 外尔型和狄拉克型节线. 在对节点的定义中, 外尔点指的是满足外尔模型的二度简并点; 狄拉克点指的是满足狄拉克模型的四度简并点. 对节线来说, 虽然没有可以直接对应的基本粒子模型, 大家仍简单沿用了外尔和狄拉克这两个名词来说明节线的简并度, 即二度简并的节线被称为外尔节线 (Weyl nodal line), 四度简并的节线被称为狄拉克节线 (Dirac nodal line).

狄拉克型节线一般出现在具有 PT 对称性、考虑了 SOC 的体系中. 对于 SOC 可以忽略的 (SOC-free) 材料, 一些文献把两个能带相交得到的节线也称为狄拉克型节线, 这可能是考虑到每个态都有一个自旋自由度, 所以简并度要乘以二 (对非磁性材料). 但是, 对于这种情况, 自旋是一个不起作用的自由度, 低能的电子为一个两带模型所描述, 所以将其称为外尔型是更加合适的.

2) 按照色散的类型分类: type-I, type-II, 和 hybrid 节线. 在对外尔点的研究中, 依据节点附近色散的不同, 把节点分成 type-I 和 type-II 两类^[78,79]. type-I 类型的色散就是通常见到的立着的锥状色散. 而对于 type-II 色散, 这个锥是倒下来的. 也就是说在动量空间的某个方向上, 两条相交能带的斜率有相同的符号 (一些研究工作中还定义了所谓 type-III 的色散, 意指在某个方向上, 其中一条能带的色散是完全平的; 但是, 这个态对应的是 type-I 和 type-II 两个相区之间的边界, 其本身并不是一个稳定存在的相).

2017 年, Li 等^[61]将这种分类推广到节线, 提出了 type-II 和 hybrid 节线的概念. 考虑节线上某个点 P 附近的色散, 前面的 (2) 式刻画了相交的两条能带在过 P 点垂直于节线的 q_1 - q_2 平面里的色散. 如果这两个能带的斜率反号, 定义点 P 是 type-I 的; 如果这两个能带的斜率同号, 则定义点 P 是 type-II 的. 节线由这些点组成. 如果组成节线的点都是 type-I 的, 这个节线就被定义为 type-I 节线. 类似地, 可以定义 type-II 节线. 还有第三种情况, 即节线既包括 type-I 点也包括 type-II 点, 这被称为 hybrid 节线. 这三种类型可以比较直观地在图 7 中反映出来. type-I 节线可以看作是由一个电子型能带和一个空穴型能带相交产生; type-II 节线可以看作是由两个电子型 (或两个空穴型) 能

带相交产生; 而一个 hybrid 节线可以由一个电子型 (或空穴型) 能带和一个马鞍型能带相交产生 (图 7 中给出的是几个典型例子, 当然还存在别的情况).

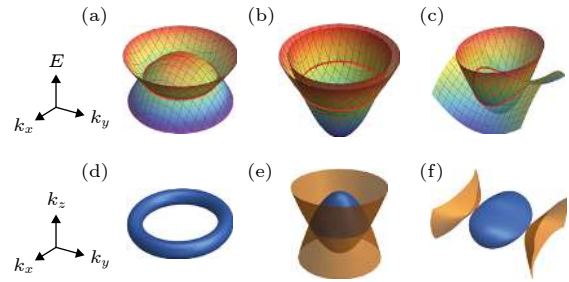


图 7 三种不同色散类型的节线 (a) type-I 节线; (b) type-II 节线; (c) hybrid 节线; (d)–(f) 三种节线的等能面^[64]

Fig. 7. Three types of nodal lines classified by the energy dispersion: (a) Type-I nodal line; (b) type-II nodal lines; (c) hybrid nodal lines; (d)–(f) show the typical shapes of the constant energy surface for the three types^[64].

上面这种分类的意义在于不同类型的节线会有不同的费米面结构, 进而可以导致一系列物理性质的不同. 图 7(d)–(f) 给出了三种类型节线对应的等能面, 可以看出它们之间有非常大的差别. 基于这个认识, 文献 [61] 中讨论了 type-II 节线在磁振荡、磁响应、光响应和输运性质上的特征, 指出相比于 type-I 节线, type-II 节线会使得光吸收到抑制, 同时会使材料有更高的迁移率 (图 8(a)). 之后, Zhang 等^[64]从理论上研究了 hybrid 节线的磁响应性质, 发现它会具有一个零场的磁坍塌 (zero-field magnetic breakdown) 效应以及磁共振中显著的各向异性 (图 8(b)).

就材料而言, 大多数被报道的节线材料属于 type-I 类型. 具有 type-II 节线的材料包括 K_4P_3 ^[61], Mg_3Bi_2 ^[80,81]. 具有 hybrid 节线的材料包括 Ca_2As ^[64] 和 Be_2Si ^[82].

3) 按照色散的次数分类: 线性、二次 (quadratic) 和三次 (cubic) 节线. 材料中发现的节线绝大多数都具有线性的色散, 即它们是由两条能带线性交叉所产生. (1) 式反映的就是这种情况. 那么有没有可能存在具有高次色散的节线呢? 2019 年, Yu 等^[83]回答了这一问题. 通过对晶体空间群对称性的分析, 他们得到了下面的结果: 1) 在所有高次色散节线中, 只有二次和三次节线 (quadratic/cubic nodal line, QNL/CNL) 能够被对称性所保护 (图 9(a)), 这里需要指出的是我们总

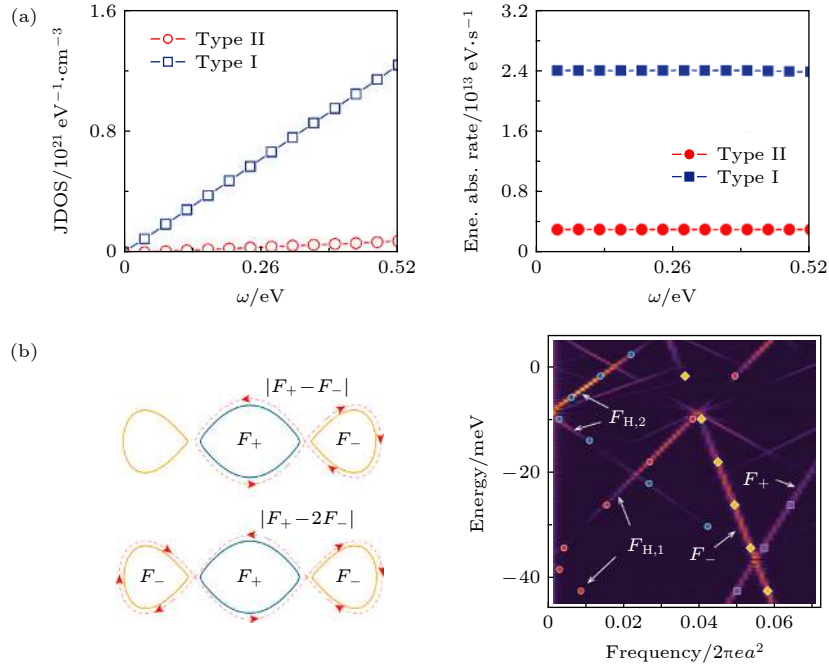


图 8 Type-II 节线和 hybrid 节线的特殊物理性质 (a) Type-II 节线和 type-I 节线的光学性质的比较^[61]; (b) hybrid 节线导致的磁坍塌效应和磁振荡中的各向异性^[64]

Fig. 8. Unique properties of type-II and hybrid nodal lines: (a) Comparison between type-I and type-II nodal lines in terms of JDOS and optical absorption rate^[61]; (b) the magnetic breakdown and its feature in anisotropic magnetic oscillation for a hybrid nodal loop^[64].

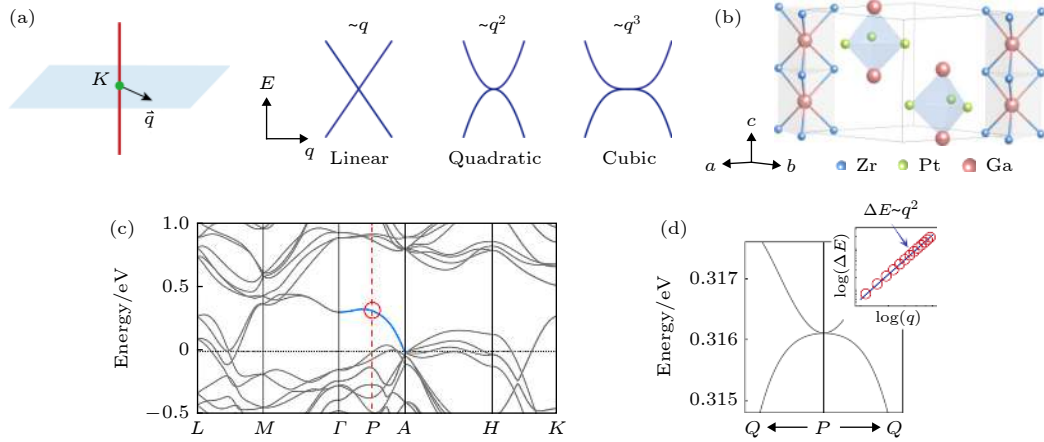


图 9 (a) 按照节线的色散次数进行分类的示意图; (b)—(d) 展示了一个具有二次节线的材料 ZrPtGa, (c) 是 ZrPtGa 的能带结构, 蓝色实线标记了二次节线, (d) 是这个节线在垂直于 Γ -A 的平面上的色散, 可以清楚地看到是二次色散^[83]

Fig. 9. (a) Schematic figure for the higher order nodal lines; (b)–(d) show the quadratic nodal line in ZrPtGa: (c) the band structure of ZrPtGa, the blue solid curve indicates the quadratic nodal line; (d) shows the band dispersion in the plane perpendicular to Γ -A, which clearly demonstrates a quadratic dispersion^[83].

可以写出一个有高次色散的节线模型, 关键是这个节线有没有对称性保护; 如果没有保护, 那么任何微扰都会破坏这个线, 这个线就不能够稳定存在; 2) 高次的节线的简并度只能是二重的; 3) 所有的高次节线都分布在布里渊区的主旋转轴上。

文献 [83] 中给出了二次和三次节线附近的低能有效模型. 类似 (1) 式, 对二次节线,

$$\mathcal{H}_{\text{QNL}}(\mathbf{q}) = \alpha q^2 \sigma_+ + \text{H.c.}, \quad (6)$$

这里 α 是一个取复数值的模型参数, $q_{\pm} = q_x \pm iq_y$, $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$. 三次节线的模型则有下面的形式:

$$\mathcal{H}_{\text{CNL}}(\mathbf{q}) = i(\alpha q_-^3 + \beta q_+^3) \sigma_+ + \text{H.c.}, \quad (7)$$

这里的 α 和 β 是取实数值的模型参数. 色散次数的不同自然的带来物理性质的巨大差异. 文献

[83] 具体的讨论了二次和三次节线在磁振荡行为、朗道能级的结构和光学响应方面的特征。

就材料而言, 具有二次节线的材料包括 WC 族的一类材料, ZrPtGa(图 9(b)—(d)), $V_{12}P_7$, 和 ZrRuAs^[83]. 具有三次节线的材料包括 CaAgBi (这也是一个具有多种狄拉克点的材料^[36]). 目前找到的材料在费米面附近的能带都不理想. 因此通过材料搜索和设计来得到具有高次节线的材料仍是将来的一个重要研究课题。

4) 按照形态的拓扑分类. 图 10 中展示了两个真实材料中的二类节线的例子. 图 10(a) 中的是一个三维的碳结构中出现的节线, 在布里渊区的一个镜面上有两条时间反演操作所联系的节线, 每一条都从左到右穿越了整个布里渊区^[56]. 图 10(b) 中展示的是材料 $CuTeO_3$ 中的节线^[69], 这个节线是围绕着布里渊区的中心 Γ 点的一个圈. 从图中可以直观地感觉到这两个节线是不一样的: 一个穿越了布里渊区, 而另一个则局域在布里渊区中的某个点附近. 那么怎样刻画这种不同呢? 2017 年, Li 等^[61] 指出这里的区别反映的是一条节线缠绕布里渊区的拓扑结构的不同. 我们知道, 因为布里渊区有周期性的结构, 它等价于一个三维的环面 (3D torus). 一条在布里渊区里的节线的拓扑可以由它的基本同伦群 (fundamental homotopy group) 来刻画, 对应着三个整数, 分别代表节线在三个方向上穿越布里渊区的次数. 比如图 10(b) 中的节线没有穿越布里渊区, 所以它对应的类就是 (0, 0, 0), 而图 10(a) 中的节线在一个方向 (定义为 x 方向) 上穿越了一次, 所以它对应着 (1, 0, 0). 这个拓扑性质在物理上的一个直接影响是: 在不破坏系统对称性的前提下, 图 10(b) 中的节线可以 (通过调节系统参数, 如

施加应变等) 连续的变成一个点然后消失; 而图 10(a) 中的节线不可以. 图 10(a) 中的节线必须要和另一条相配对, 才可以一起湮灭掉。

以上的讨论是对于三维系统进行的, 对二维系统也可以做类似讨论. 此时一条单独的节线可以由它沿着两个方向穿越布里渊区的次数来刻画. 这方面的讨论可以参考近期关于氧化硼烯 (B_2O)^[84] 和单层 MnN 中的节线的工作^[85].

以上的分类都是对单个节线进行的. 在一些材料中会存在多个节线, 并且它们还会互相连接形成复杂的结构. 对这些情况很难有一个系统的分类. 下面我们主要讨论一些典型的例子。

1) 环绕布里渊区中同一个高对称点的几个节环可以互相交叉, 形成一个笼子状的结构, 或者称为 crossed nodal rings. 比如图 11(a) 中所示, 在 $LiOsO_3$ 的铁电相中, 环绕布里渊区中 T 点的三个节环在高对称轴上相交, 每一个环都处在一个镜面里^[38]. 类似的其他例子还包括 Cu_3PdN ^[54,55], LaN 系列材料^[86], YH_3 ^[87], 以及一类层状的 BN 和 SiC 结构^[88]. 这里需要指出的是, 在 $LiOsO_3$ 中讨论的节线结构是在考虑 SOC 下稳定存在的^[38]. 而在后面的几个例子中的节线是在没有考虑 SOC 时才会有; 当加入 SOC 后, 这些节线会被完全打开能隙或只留下某些节点。

2) 由几个能带互相交叉所产生的节线也可能形成一个骨架状的结构. 比如在 $CuAgSe$ 中, Sheng 等^[89] 发现四个低能能带间的相交会在一个镜面上形成蝴蝶形状的节线. 体系存在多个互相联系的镜面, 因此这些节线会组成图 11(b) 中所显示的结构, 被作者们称为一个 nodal box。

3) 两个节环还可以扣在一起, 形成一个结. 例

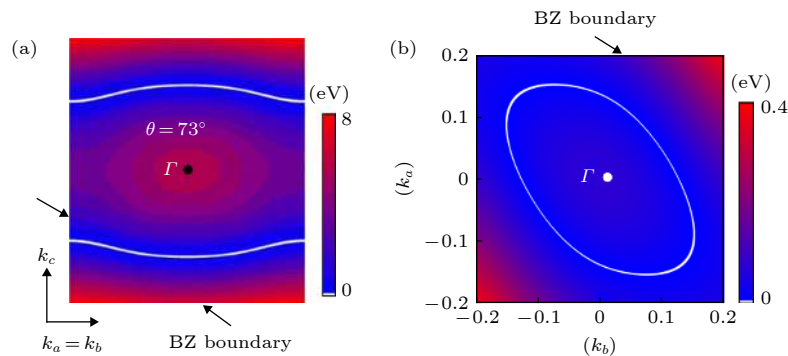


图 10 具有不同形态的节线 (a) 穿越布里渊区的一对节线^[56]; (b) 局域在布里渊区某个点周围的节线^[69]

Fig. 10. Nodal lines with different kinds of distribution in Brillouin zone: (a) Nodal lines in a carbon allotrope, which traverse the Brillouin zone^[56]; (b) nodal line in $CuTeO_3$, which is located around a point in Brillouin zone^[69].

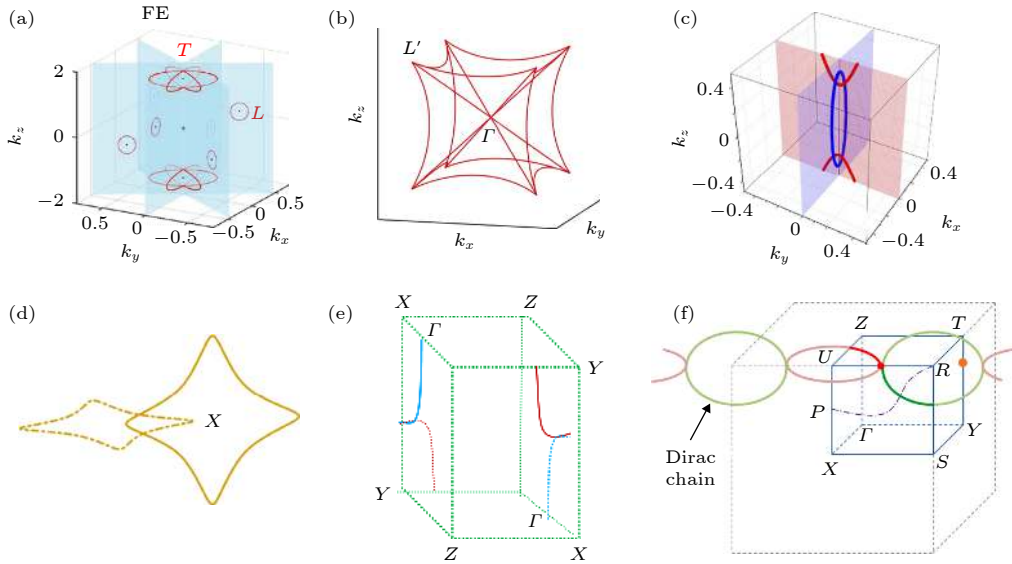


图 11 节环可以形成的一些复杂结构 (a) 笼子状的结构^[38]; (b) 骨架状的结构^[89]; (c) 三能带形成的结状节线^[90]; (d) Hopf 链环^[91]; (e) 外尔链; (f) 狄拉克链^[73]

Fig. 11. Different structures formed by nodal lines: (a) Crossed nodal rings^[38]; (b) nodal box^[89]; (c) inter-connected nodal loops^[90]; (d) nodal Hopf link^[91]; (e) weyl chain; (f) dirac chain^[73].

如图 11(c) 所示在三维的五边形碳 (pentagon carbon) 材料中由三条能带交叉形成的节线结构^[90]. 图 11(d) 展示的是在 Co_2MnGa 中存在的 Hopf 链环 (Hopf link) 类型的节线结构^[91].

4) 几个节环可以接在一起, 形成在动量空间延展的一条链. Bzdusek 等^[75]的工作中提出了在空间反演对称性破缺的系统中存在的外尔链 (Weyl chain). 如图 11(e) 中所示, 这个链由两个在不同的滑移镜面上的外尔节环相接而成, 并且沿着一个方向延展 (注意到布里渊区的周期性). 这里每一个节环的形成对应着图 5 中所讨论的机制. 之后, Wang 等^[73]提出了狄拉克链 (Dirac chain) 的概念, 指出当空间反演保持并且与滑移镜面满足某种特定的代数关系时, 四重简并的节环所组成的链 (见图 11(f)) 就有可能在某些空间群实现. 该研究还预言了一个真实材料 ReO_2 是含有这种狄拉克链的材料.

2.4 二维材料中的节线

上面的讨论都是关于三维非磁性材料的. 近期对节线的研究开始拓展到两个新的方向: 一是二维材料中的节线, 二是磁性材料中的节线. 在这一节中, 我们先讨论二维材料中的节线.

二维材料指的是由有一层或几层原子组成的可单独稳定存在的材料. 二维材料是伴随着

2004 年石墨烯的实现而发展起来的^[7], 如今已成为一个跨学科的庞大研究领域. 相比于传统的三维材料, 二维材料具有以下优势: 首先由于其厚度很薄, 它们的性质可以很容易地在大范围内进行调控, 比如二维材料中的载流子浓度可以有效地用栅极控制; 第二, 二维材料大多具有优异的力学性质, 比如石墨烯可以承受超过 10% 的应变, 而施加的应变也可以有效的调控材料的性质^[92,93]; 第三, 二维材料具有极大的表体比 (surface-to-volume ratio), 这对于催化和储能等应用都非常有利; 第四, 二维材料本身提供了具有原子级别平整的界面, 由二维材料构建出的异质结可以有效地解决传统三维材料异质结中界面上无序所带来的问题. 因此, 假如可以在二维材料中实现拓扑态, 我们可以预期这将带来很多基础研究和应用上的突破.

在实际的二维材料中实现拓扑态也面临着几方面的挑战. 首先, 由于维度的降低, 在三维体系中稳定的能带拓扑结构往往到了二维变得不再稳定. 比如一个单独的外尔点在三维具有陈数保护的拓扑稳定性, 而到了二维则失去了这种拓扑保护, 因此实现二维材料中的外尔点需要找到额外的对称性保护 (关于二维材料中外尔点的实现, 可以参考近期对单层 GaTeI ^[94] 和 PtCl_3 ^[95] 的两个工作). 第二, 维度的降低也带来了对称性的减少. 一个直观反映就是对应于三维非磁性材料的空间群有 230 个, 而对应于二维非磁性材料的空间群 (也称

为 layer group) 则减少到了 80 个. 因此, 要在二维材料中实现受对称性保护的能带简并就变得更为困难, 特别是当材料中的 SOC 不可忽略的时候. 例如三维系统中的狄拉克点可以由多种对称性来保护 (例如 BiO_2 ^[27] 和 Na_3Bi 中的狄拉克点^[44]), 但是在二维系统中要得到 (SOC 作用下) 稳定的狄拉克点变得非常困难 (注意石墨烯和很多二维材料中所讨论的狄拉克点在有 SOC 时都是不稳定的). Young 和 Kane^[72] 指出二维中的狄拉克点需要有特殊的非简单对称操作, 如二度螺旋轴或滑移镜面, 才可以被保护. Guan 等^[96] 在单层的 HfGeTe 族材料中找到了这种在 SOC 作用下仍然稳定的狄拉克点. 第三, 在近年来的研究中, 虽然新的二维材料不断被发现, 但相比于三维材料, 二维材料的数目特别是其晶格种类还是有限的. 这也加大了在真实材料中找到合适的能带拓扑结构的难度. 在这个方面, 我们不仅要利用实验的进展, 也可以利用结构搜索和高通量计算等理论方法构建满足对称性要求的新二维材料来实现想要的拓扑相.

具体到节线的情况, 在早期的研究工作中零星报道过一些在忽略 SOC 时具有节线的二维材料. 例如 Jin 等^[97] 预言的 PdS 一族有褶皱的二维节线材料, Li 等^[74] 在 $X_3\text{SiTe}_6$ ($X = \text{Ta}, \text{Nb}$) 的单层中发现的处于布里渊区边界的节线, 以及 Zhou 等^[98] 和 Zhong 等^[84] 分别在单层 B_2C 和 B_2O 中预言的

节线. 在实验上, 单层 Cu_2Si 和 CuSe 中存在的节线也为 ARPES 方法所观测到^[99,100].

在上面这些例子中, 节线只有在忽略 SOC 时可以稳定存在. 加上 SOC 后, 这些节线或者完全打开能隙, 或者部分打开能隙, 只留下几个孤立的节点. 那么在二维是否可以存在 SOC 作用下仍然稳定存在的节线呢? 近期文献^[85, 94] 给出了肯定的答案. 首先是 Wu 等^[94] 分析了一类在二维系统由滑移镜面所保护的节线, 给出了所需要的对称性条件. 这种节线的形成机制类似于文献^[75] 在三维中所讨论的情况 (见图 5(a)). 滑移镜面和时间反演对称导致了在连接两个 TRIM 点的路径上能带会出现沙漏型的色散. 这个沙漏脖子处的二度简并在布里渊区里形成了一条节线, 见图 12(a)—(c). 由于这个分析的出发点就包含了 SOC, 因此得到的节线本征的具有在 SOC 下的稳定性. 该工作进一步在 GaTeI 一族的单层材料中找到了这种节线^[94]. 与此同时, Wang 等^[85] 在单层 MnN 中发现了由镜面对称性保护的节线, 见图 12(d)—(f). 尤其值得注意的是这里的系统基态具有铁磁序, 形成一个半金属态 (half metal), 即费米面附近只存在属于一个自旋的能带. 因为基态的磁化方向垂直于材料所在的平面, 因此水平镜面在形成铁磁序之后仍然得以保持, 进而保护了能带在费米面附近形成的两个节环 (见图 12(f)). 在这里, SOC 的作用并不影响

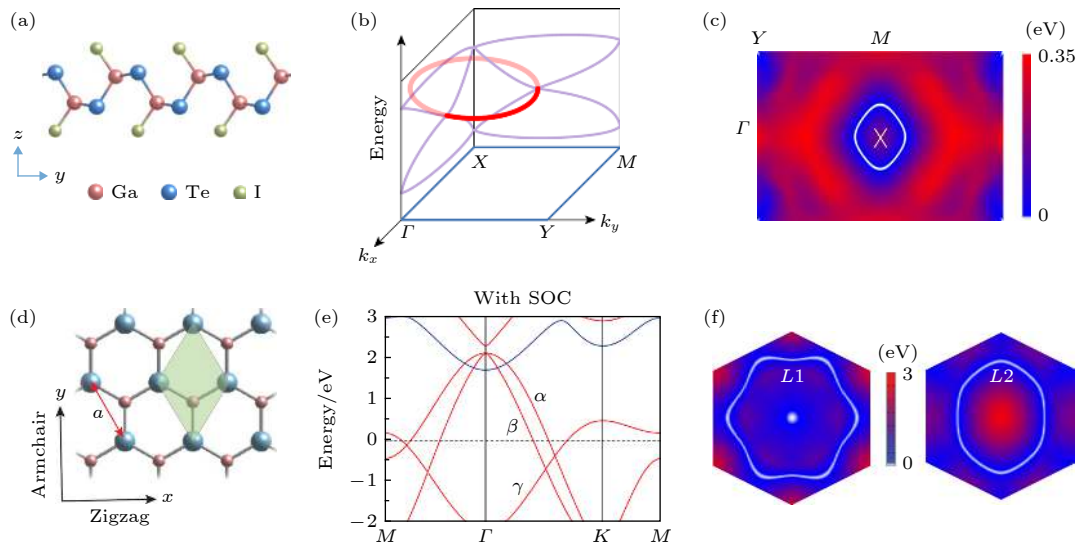


图 12 二维材料中在 SOC 作用下仍然稳定的节线 (a)—(c) 二维 GaTeI 中的节线^[94]; (d)—(f) 单层 MnN 中的节线, 单层 MnN 是一个铁磁材料, 在费米面处只存在一个自旋通道, 因此这里的节线是完全自旋极化的^[85]

Fig. 12. Stable nodal lines under SOC in 2D: (a)—(c) GaTeI family materials^[94]; (d)—(f) MnN monolayer, here MnN is a half metal, so the nodal loops are fully spin^[85].

相交能带具有相反的镜面本征值, 因此两个节环在考虑 SOC 时仍然是稳定的.

2.5 磁性材料中的节线

拓扑材料的另一个发展方向是将拓扑能带结构和其他的长程序 (如铁电序, 铁磁序等) 相结合. 这样一方面可以通过调节长程序来达到控制能带拓扑的目的, 另一方面低能的电子 (作为拓扑演生费米子, 如外尔费米子) 也可以具有如自旋极化等特殊性质. 将拓扑金属态与铁电序结合不是很容易, 因为铁电序通常是在绝缘体中实现. 但是也存在特例. 比如 Li 等^[101] 预言了 HgPbO_3 是一种铁电金属, 并且在铁电相具有外尔点. 这种铁电金属相是伴随着晶格从非极化结构到极化结构的一个相变而产生, 最先在 LiOsO_3 中为实验证实^[102]. 之后, Yu 等^[38] 通过理论分析和计算发现其实 LiOsO_3 的铁电相和非铁电相都具有拓扑能带结构: 它的非铁电相 (即高温相) 具有三次狄拉克点 (即在面内的色散是三次的四重简并点); 而在铁电相 (即低温相), 这个三次狄拉克点则变化为三个相交的节环.

相比较而言, 将拓扑金属态与磁性结合会容易一些. 在之前的工作中, 已经找到了几种具有节线的磁性材料. 例如铁磁材料 Co_2TiX ($X = \text{Si}, \text{Ge}, \text{or Sn}$)^[103], MnF_3 ^[104], 具有立方晶格的氧化物磁性材料 (如 Fe_3O_4 和 CrO_2)^[105], 和 $\text{Li}_3(\text{FeO}_3)_2$ ^[106]. 值得注意的是 Wang 等^[105] 指出在 Fe_3O_4 和 CrO_2 中的节线受到镜面对称性保护, 是可以在 SOC 作用下仍然稳定存在的. 另外, 节线也可以在反铁磁材料中存在. Wang^[107] 从理论上对 (考虑 SOC 的) 反铁磁节线的形成机制进行了探讨, 提出了两类不同的节线: 一类是由于能带反转所导致, 可以被称为 accidental nodal line; 另一类是由某些磁性空间群所完全决定的, 因此被称为 essential nodal line. 在实验上, 最近的报道了在反铁磁材料 GdSbTe 中利用 ARPES 观测到的节线的证据^[108].

以上的讨论都是关于三维的磁性材料. 关于二维, 2.4 节提到了在单层铁磁半金属 MnN 中存在完全自旋极化的在 SOC 下也稳定的节环 (见图 12(d)—(f))^[85]. Zhou 等^[109] 在单层的 CsS 一族材料中也找到了类似的节环, 但是这个节环不是出现在基态, 而是需要将磁化方向转到垂直于易磁化平面的方向. Feng 等^[110] 在铁磁单原子层 GdAg_2 中观察到了自旋极化的外尔节线, 该节线受镜面对称性保护, 不同的磁化方向可以调节节线.

2.6 节线对应的拓扑表面态

体态的拓扑能带结构往往对应着系统边界上存在的拓扑表面态. 例如在三维强拓扑绝缘体 (strong topological insulator) 的表面上存在外尔锥形式的无能隙表面能带^[111]. 又如在三维外尔半金属的表面上存在费米弧 (Fermi arc) 形式的拓扑表面态^[22]. 这里, 表面态的“拓扑”指的是任何局域的满足体系对称性要求的微扰都不能破坏无能隙表面态的存在.

节线也对应着其特有的表面态, 即所谓鼓膜状表面态. 我们在 2014 年的工作中指出了这种表面态的存在 (图 13(a))^[51]. 在二维的表面布里渊区内, 这些表面态分布于 (体里的) 外尔节线在该表面的投影区域内 (也可能在外部, 取决于边界条件). 对于超导的准粒子谱, 由于粒子空穴对称性的存在, 这些态的能量严格为零, 形成一个没有色散、完全平的表面能带. 对于金属材料来说则没有这个对称性的限制, 表面能带一般会具有色散, 导致这个鼓膜在能量上不是平的. 这种节线金属中的鼓膜状表面态已经在很多例子中被证实 (如图 13(b))^[52].

当节线是四度简并的狄拉克型节线时, 对应的鼓膜状表面态往往也会翻倍, 被称为双鼓膜表面态 (double drumhead surface state)^[73]. 图 13(c) 和图 13(d) 展示了两个这样的例子. ReO_2 ^[73] 和 Ta_3SiTe_6 ^[74] 是含有狄拉克型节线的材料, 在它们的表面能谱中都可以发现存在着两个鼓膜状表面能带.

在 2.3 节第 3) 部分的讨论中, 我们提到除了线性色散的节线, 还存在二次和三次色散的节线. 对应这些特别种类节线的表面态也是大不相同的. 余智明等^[83] 指出二次节线一般不对应着受保护的表面态, 而三次节线则对应着一种非常奇特的表面能带. 如图 13(e) 所示, 与之前的鼓膜状表面态不同, 这个表面能带覆盖了整个的表面布里渊区. 由于表面布里渊区是一个二维的环面 (或者叫轮胎面), 这种表面态也可以被称为是环面表面态 (torus surface state).

在实验上, 这些拓扑表面态可以用 ARPES 或者 STS 来进行探测. Li 等^[70] 的工作指出早在碱土金属 Be 单质中 ARPES 观测到的表面能谱对应着体内节线产生的拓扑鼓膜状表面态. 他们还进一步指出之前实验中观察到的 $\text{Be}(0001)$ 表面上的巨大的 Friedel 振荡也是源自这个表面能带. 如果这

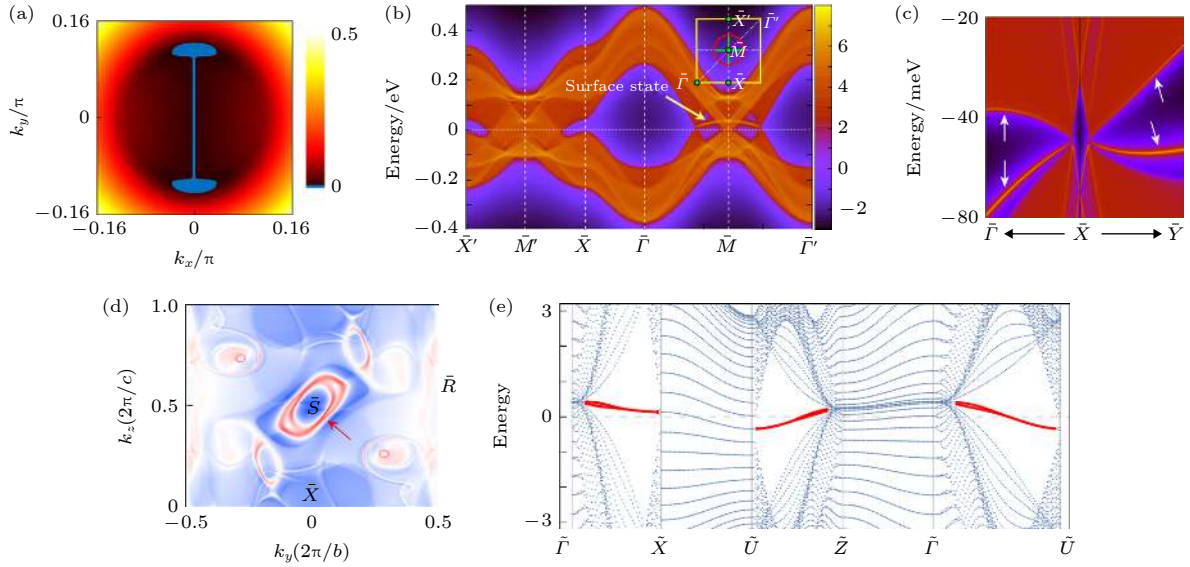


图 13 节线对应的拓扑表面态 (a) 狄拉克超导体中节线导致的鼓膜态^[51]; (b) 碳的同素异形体中的鼓膜态^[52]; (c), (d) ReO_2 ^[73] 和 Ta_3SiTe_6 ^[74] 中的双鼓膜态; (e) 对应着三次节线的遍布布里渊区的环面表面态^[83]

Fig. 13. Surface states of nodal line metals: (a) Drumhead surface states for nodal rings in superconductors^[51]; (b) drumhead surface states in a 3D carbon allotrope^[52]; (c), (d) show the double drumhead surface states in ReO_2 ^[73] and Ta_3SiTe_6 ^[74]; (e) surface states of cubic nodal line, which spreads over the whole BZ^[83].

个表面能带色散比较小 (这也要求体内的节线在能量上比较平) 并且接近费米面的话, 它会在费米能处引起一个表面态密度 (surface density of states) 的尖峰. 在考虑相互作用的影响后, 这有可能会导致一个相变, 产生表面超导或者表面磁性^[111,112].

3 节面金属

3.1 节面的概念

对于一个三维的系统, 它的能带筒并点原则上也可以形成一个二维曲面. 2016 年, 这种节面的存在首先在两个理论工作中被提出. Zhong 等^[59] 预言了一类稳定的三维碳材料, 其中每一个都在费米面附近有一对由两条能带线性交叉形成的节面, 如图 14(a) 所示. Liang 等^[60] 在六角结构的 BaMX_3 ($M = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}; X = \text{S or Se}$) 材料中发现存在于布里渊区边界 $k_z = \pi$ 面上的一个节面, 如图 14(b) 所示. 值得注意的是, 在最早的这两个例子中, 节面的稳定存在都要求 SOC 是可忽略的. 比如对于 BaTaS_3 , 在考虑 SOC 后, 节面上的简并会被打开, 只留下一些沿着高对称线的节线^[60]. 在 2016 年后, 对节面有一些利用理论模型的研究工作. 例如 Bzdusek 和 Sigrist^[113] 讨论了在具有中心反演对称的体系中实现节面的可能性. Xiao 和 Fan^[114] 提出

了一个具有拓扑电荷的节面的模型, 并设计了一种用声学超材料来实现的方案.

2018 年, Wu 等^[63] 对节面进行了系统的研究, 揭示了之前发现的节面的拓扑性质, 并将它们归入两种不同的类型. 他们还进一步将节面推广到具有 SOC 的系统以及具有磁性的系统, 扩展了可能出现节面的材料体系. 基于理论分析得到的对称性条件, 在这个工作以及后续的工作中, 又有不少具有节面的真实材料被发现, 例如 K_6YO_4 , Ta_3TeI_7 , CsCrI_3 , 和 Ti_3Al 等^[63,115].

3.2 节面的分类

图 14(a) 和图 14(b) 中的节面是很不相同的: 图 14(a) 中的节面出现在布里渊区的内部, 而图 14(b) 中的节面则固定在布里渊区边界的平面上. 文献^[63] 提出了两种类型的节面, 分别对应着图 14 中的两种情况 (注意: 这里的两个节面都要求没有 SOC, 因此在这一小节的讨论考虑没有 SOC 的情况).

3.2.1 第一类 (class-I) 节面和 Z_2 拓扑电荷

第一类节面对应着三维碳材料 (图 14(a)) 中的节面. 这个体系具有时间反演和中心反演对称性, 因此也就有 PT 对称性. 同时, 这里还有一个非常重要的对称性, 即 2.2 节中提到过的子晶格对称性. 对图 14(a) 中的具体例子来说, 这表示可以

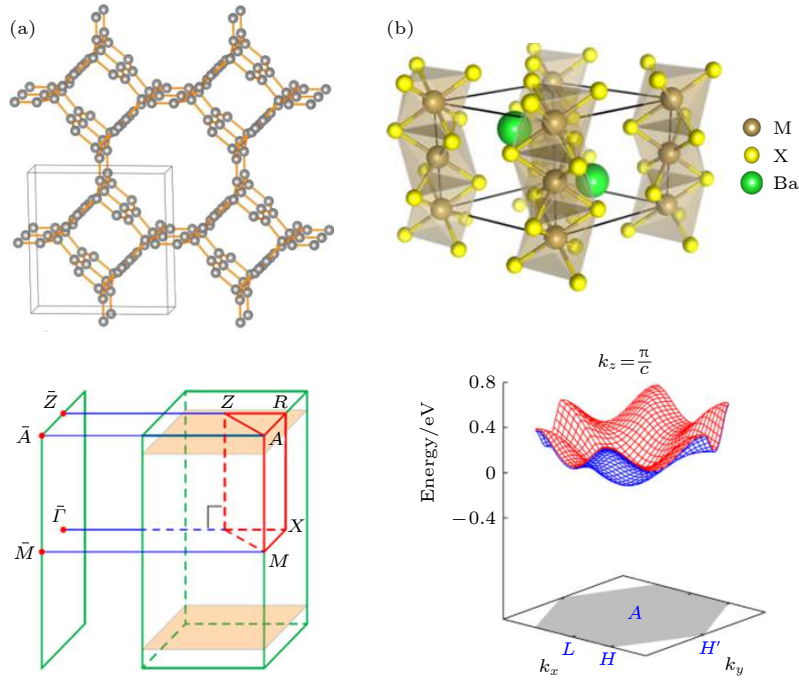

 图 14 两种不同的节面 (a) 三维碳材料中的节面^[63]; (b) $BaMX_3$ 中的节面^[60]

 Fig. 14. Two kinds of nodal surfaces: (a) Nodal surfaces in a 3D carbon allotrope^[63]; (b) nodal surface in $BaMX_3$ ^[60].

把晶格分成两组, 每一组中的原子都只和另一组中的有耦合. 在能谱上, 这个对称性表现为能带结构是上下对称的. 当然, 在真实体系中, 这个子晶格对称性不可能是严格的: 总是多少存在次近邻原子轨道之间的跃迁, 材料的能谱也不可能是严格上下对称的. 但是在不少材料中, 这个对称性在低能 (即费米能附近) 是一个很好的近似. 特别在很多单质轻元素材料中, 例如图 14(a) 对应的碳材料中, 子晶格对称性可以保持得非常好.

当存在子晶格对称性时, 系统的哈密顿量总可以化为如下的块矩阵形式:

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} & Q(\mathbf{k}) \\ Q^\dagger(\mathbf{k}) & \end{bmatrix}. \quad (8)$$

因为又存在 PT 对称性 (并且无 SOC), Q 总可以通过么正变换化为一个实矩阵. 在拓扑上, 对应着一个 k 点的哈密顿量可以分为两类, 由 Q 的行列式的符号 $\text{sgn}[\text{Det } Q(\mathbf{k})]$ 所决定 (这里考虑的是存在能隙, 即不在节面上的 k 点; 在节面上时, Q 的行列式为零). 因此, 布里渊区内存在能隙的 k 点可以分为两类, 对应着两种区域, 而这两种区域之间的边界 (畴壁) 则对应着节面. 基于这一理解, 我们可以对第一类节面定义一个 Z_2 的拓扑电荷:

$$\nu = (\text{sgn}[\text{Det } Q(\mathbf{k}_1)] - \text{sgn}[\text{Det } Q(\mathbf{k}_2)]) \bmod 2, \quad (9)$$

这里 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 是节面两边的两个点. 对图 14(a) 中碳材料的模型计算验证了图 14(a) 中节面具有的非平庸拓扑电荷.

3.2.2 第二类 (class-II) 节面

第二类节面是由体系非简单对称性所要求的一种必要的 (essential) 能带结构. 图 14(b) 对应的材料具有一个二度的螺旋轴 (screw axis) $S_{2z} : (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, z + 1/2)$, 同时还有时间反演对称性. 这两者的联合对称操作满足

$$(TS_{2z})^2 = e^{-ik_z}. \quad (10)$$

在布里渊区的边界 $k_z = \pi$ 平面的每一个 k 点上, 都有 $(TS_{2z})^2 = -1$, 因而就会产生一个 Kramers 二度简并. 所有这些简并点就组成了一个节面. Zhao 等^[116] 指出这种非简单对称性导致的简并对应着一种莫比乌斯带形式的能带拓扑结构, 可以与用对称性算符相联系的一个绕数来刻画.

这里对两类节面做一个比较. 由于子晶格对称性, 第一类节面在能量上是平的, 并且固定在费米面处. 而它们在布里渊区中的位置则不固定. 图 14(a) 中的情况有一对由时间反演 (或空间反演) 操作联系的节面. 通过调节系统参数, 这两个节面的位置和形状都可以变化, 也可能合并成一个单独的球状节面. 对于第二类节面, 它们的能量不固定, 节面

上的点一般都会有能量的起伏 (而且也不一定在费米面附近), 然而它们在布里渊区中的位置是固定的, 总是出现在边界的平面上. 前面提到第二类节面是一种必要的能带简并, 是完全由对称性所决定的. 在这个意义上, 第一类节面就是一种偶然的能

带简并, 它的产生需要在布里渊区的某些区域中出现能带反转. 由于这个原因, 也由于子晶格对称性在真实材料中比较难得, 第一类节面比较少见, 而第二类节面的材料则比较容易寻找 (如文献 [63] 中讨论的 K_6YO_4 和 $TlMo_3Te_3$, 见图 15).

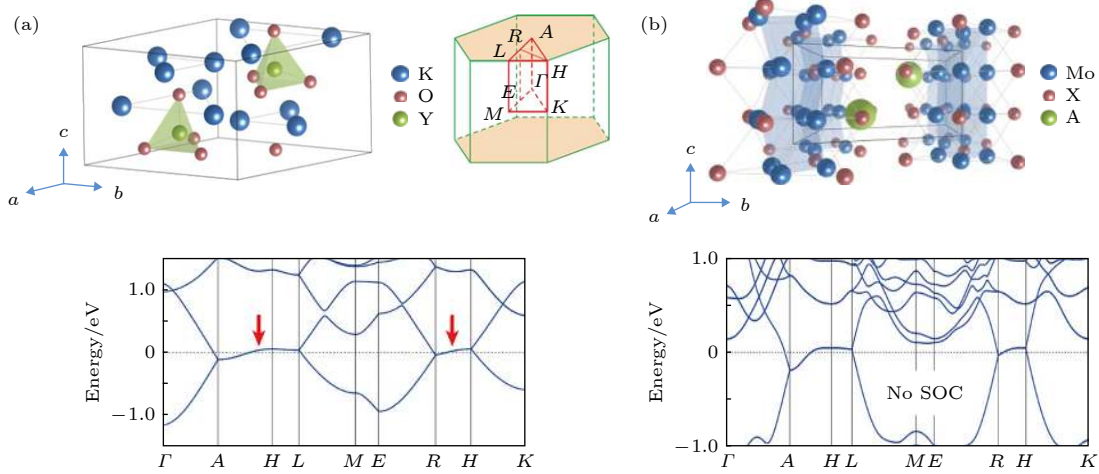


图 15 具有第二类节面的材料 (a) K_6YO_4 ; (b) $TlMo_3Te_3$ ^[63]

Fig. 15. Materials with Class-II nodal surfaces: (a) K_6YO_4 ; (b) $TlMo_3Te_3$ ^[63].

3.3 自旋轨道耦合作用下稳定的节面

上面讨论的那些例子都是在没有 SOC 的系统中才可以稳定存在的. 当加入 SOC 后, 这些节面会全部或者部分地打开能隙. 比如对图 15 中的 $TlMo_3Te_3$, 加上 SOC 后, 节面上的大部分点都会解除简并. 对第一类节面, 如图 14(a) 中那个碳材料的节面, 也有类似的结果. 只是由于碳本身的 SOC 非常小, 在节面处打开的能隙通常可以忽略不计.

那么在 SOC 作用下是否仍然存在稳定的节面呢? Wu 等^[63] 给出肯定的答案, 指出当体系具有第二类节面的 TS_{2z} 对称性, 同时 PT 对称性破缺的时候, 就可以存在 SOC 下稳定存在的节面. 这里, PT 对称性破缺是一个必要条件, 因为如果具有 PT

对称性, 那么每个能带都至少是二重简并的, 于是节面就必须是四重简并, 但是没有对称性可以保证在一个面上的每一点都有四重简并, 所以节面的稳定存在就必须要求 PT 被破坏. 图 16(a) 和图 16(b) 中展示了在半导体材料 Ta_3TeI_7 中的这种节面.

3.4 磁性材料中的节面

注意到对第二类节面 (3.2 节) 的讨论中, 真正重要的是 TS_{2z} 这个联合对称性, 而并不要求单独的 T 或 S_{2z} 被保持. 而且 TS_{2z} 本身就属于一种磁性空间群的对称操作. 因此第二类节面的概念可以很自然地推广到磁性材料中.

文献 [63] 中分别讨论了体系没有 SOC 和有 SOC 的情况下存在节面的一组充分条件. 当体系

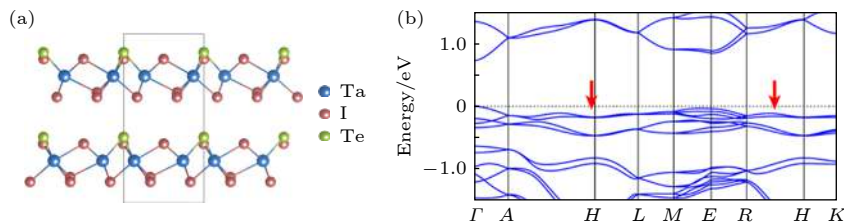


图 16 SOC 作用下稳定的节面 (a) 展示了 Ta_3TeI_7 晶体结构; (b) 是 Ta_3TeI_7 在考虑 SOC 时的能带结构; 能带在考虑 SOC 时没有打开能隙^[63]

Fig. 16. Nodal surface robust against SOC: (a) Crystal structure of Ta_3TeI_7 ; (b) is the band structure of Ta_3TeI_7 in the presence of SOC with no gap opening^[63].

没有 SOC(或 SOC 可以忽略) 时, 那么 S_{2z} 螺旋轴的存在就可以保证在 $k_z = \pi$ 平面上出现的节面. 当体系具有 SOC 时, 这个条件变为: TS_{2z} 对称性被保持, 同时 PT 对称性必须破缺. 图 17 给出了一个铁磁节面金属 CsCrI_3 的例子. 它的晶格具有

S_{2z} 对称性. 在不考虑 SOC 时, 它的能带在 $k_z = \pi$ 平面上出现节面. 考虑 SOC 后, 依赖于磁化方向, 当 TS_{2z} 对称性被保持时, 节面就被保持 (图 17(c)); 当 TS_{2z} 被破坏时, 节面也就被破坏 (图 17(d)). 在以上这些情况中, PT 对称性总是破缺的.

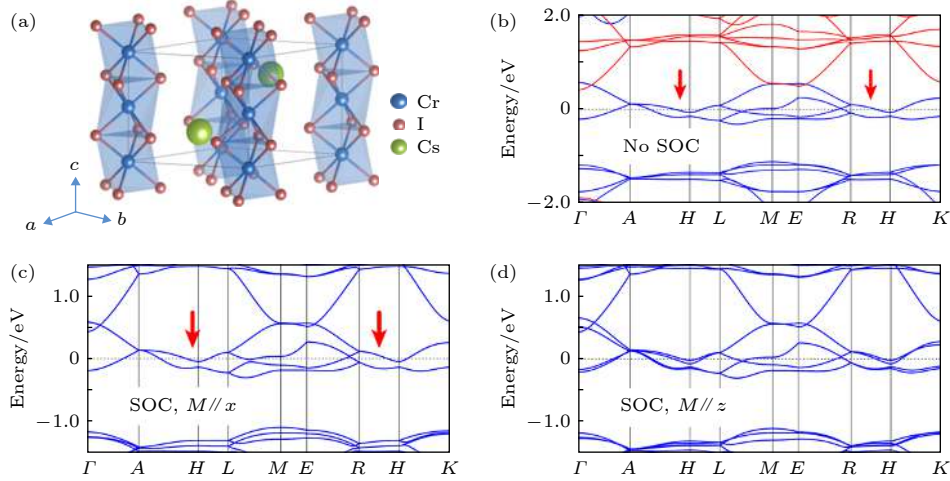


图 17 磁性材料中的节面 (a) CsCrI_3 晶体结构; (b) 不考虑 SOC 时的能带结构; (c), (d) 考虑 SOC 时, 磁矩分别沿面内和面外的能带结构^[63]

Fig. 17. Nodal surface in magnetic materials: (a) The crystal structure of CsCrI_3 ; (b) the band structure of CsCrI_3 without SOC; (c) and (d) band structures with magnetic moment along x and z directions respectively^[63].

3.5 多节面金属和不可行定理

在上面的讨论中看到, 在很多情况下, TS_{2z} 对称性都保证了在 $k_z = \pi$ 平面上的节面. 那么假如同时具有两个或三个 TS_{2i} 对称性 ($i = x, y, z$), 系统就会在布里渊区的多个边界上存在节面. 图 18 显示了这样的具有多个节面的例子.

这种多节面金属会带来什么样的特殊性质呢? 在近期工作中^[117], Yu 等^[118,119] 给出了一个有趣的结果: 它可以用来绕过 Nielsen-Ninomiya 不可行定理 (no-go theorem). 对于这个定理, 大多数文献中的表述是: 无相互作用的格子模型 (lattice model) 的能带中的外尔点必须要成对出现, 也就

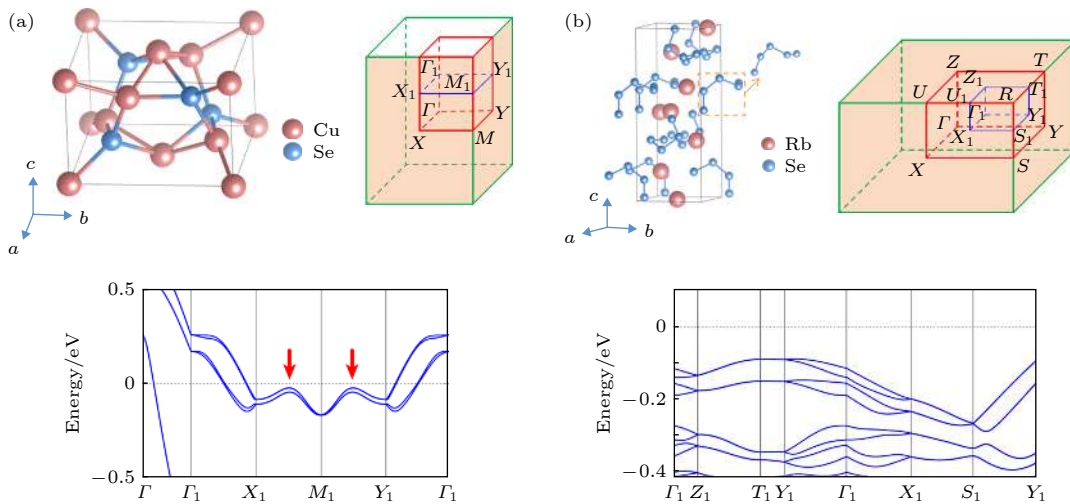


图 18 存在多个节面的材料 (a) Cu_3Se_2 ; (b) Rb_2Se_5 ; 布里渊区中的节面分布用橙色标记^[63]

Fig. 18. Materials with multiple nodal surfaces: (a) Cu_3Se_2 ; (b) Rb_2Se_5 . The location of the nodal surfaces is indicated by the orange color^[63].

是说不可能存在单独的外尔点. 这个定理的一个直接后果就是在系统表面上会存在连接外尔点的投影的费米弧. 这些要求在迄今为止所有具有外尔点的材料中都得到了验证. 而余智明等发现, 在一个所有布里渊区的边界都是节面的多节面金属中, 布

里渊区内部允许存在单独的外尔点 (如图 19 所示). 并且在表面上, 也可以不存在任何从这个外尔点发出的费米弧 (图 19(c) 和图 19(d)). 文献 [117] 中给出了具体的格子模型, 分别在有 SOC 和没有 SOC 的情况下验证了这两点结论.

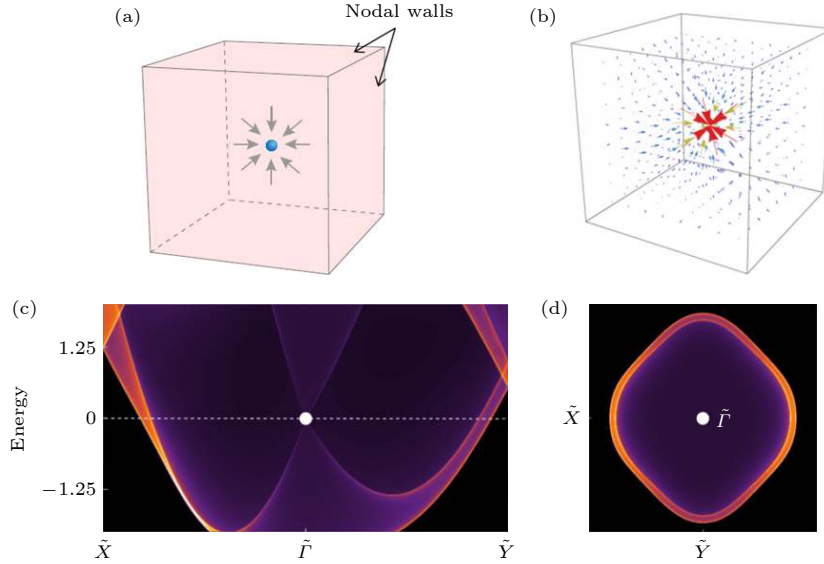


图 19 绕过 Nielsen-Ninomiya 不可行定理的方法 (a) 一个单独外尔点的示意图; (b) 贝利曲率分布; (c), (d) 显示了在表面上不存在连接单外尔点的费米弧表面, 白色点标记了体内外尔点在表面的投影^[117]

Fig. 19. A method to circumvent the Nielsen-Ninomiya no-go theorem: (a) Schematic figure showing the single Weyl point; (b) Berry curvature distribution; (c), (d) show that there is no surface Fermi arc emitted from the Weyl point, the white dot labels the surface projection of the Weyl point^[117].

需要指出的是, 上面的结果并不代表 Nielsen-Ninomiya 不可行定理被违反了. 这个定理其实有一个隐含的前提条件, 即体系无能隙激发必须只包含外尔点. 在文献 [117] 的例子中, 由于节面的存在, 费米面处除了外尔点, 必定要包含其他穿过费米面的能带, 因此不满足这个隐含的前提. 在大部分文献的讨论中, 这个前提条件都没有得到重视, 可能是因为现有的外尔半金属材料中能带本身就很复杂 (因而不满足这个前提). 这里的多节面金属的例子无疑加深了我们对这个基本定理的理解.

4 总 结

本综述介绍了节线和节面的基本概念、它们的特征和分类、以及相应的材料实现. 对于节线, 近几年还有不少工作从理论上预言了其可能具有的物理性质. 例如外加磁场会导致特殊的朗道能级结构, 进一步在磁光电导上或者在磁振荡上出现反映节线 (以及费米面) 形状的特征^[61,64,120]. 在光学响

应上, 节线的能带结构会导致光吸收对频率的特殊标度关系, 即介电函数的虚部 $\text{Im } \epsilon(\omega) \sim 1/\omega$ ^[121]. 限于篇幅, 本文未做详细介绍. 而对于节面的研究则刚刚起步, 仍然有很多问题值得探索.

应当指出的是, 到目前为止, 大部分对节线金属的理论预言还没有得到确切的实验证实. 其主要原因可能还是在于材料. 现有的拓扑金属材料 (包括节点, 节线和节面金属) 都不够理想. 在理论模型计算中, 研究者们大多假设所有能带筒并点都在同一个能量并且靠近费米面. 但是在实际材料中, 它们往往在能量上有较大的起伏, 有的离费米面距离较远, 有的在费米面附近还存在其他能带的干扰, 这些都会导致实验结果不能完全体现筒并点的性质. 这也指明了今后研究的两个重要方向: 一是在理论模型的工作中, 需要考虑到真实材料能带不够理想的因素对计算结果所产生的影响; 二是在材料搜索和实验中, 需要寻找和设计更加合适的真实材料.

感谢北京航空航天大学物理学院的胜献雷、新加坡科技与设计大学的刘影在文章写作过程中给予的建议和帮助。

参考文献

- [1] von Klitzing K, Dorda G, Pepper M 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 494
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
- [3] Haldane F D M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2015
- [4] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [5] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 226801
- [6] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [7] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [8] Min H, Hill J E, Sinitsyn N A, Sahu B R, Kleinman L, MacDonald A H 2006 *Phys. Rev. B* **74** 165310
- [9] Yao Y, Ye F, Qi X L, Zhang S C, Fang Z 2007 *Phys. Rev. B* **75** 041401
- [10] Bernevig B A, Hughes T L, Zhang S C 2006 *Science* **314** 1757
- [11] König M, Wiedmann S, Brüne C, Roth A, Buhmann H, Molenkamp L W, Qi X L, Zhang S C 2007 *Science* **318** 766
- [12] Fu L, Kane C L, Mele E J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 106803
- [13] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [14] Fu L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 106802
- [15] Essin A M, Moore J E, Vanderbilt D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 146805
- [16] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, Ludwig A W 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195125
- [17] Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P, Ryu S 2006 *Rev. Mod. Phys.* **88** 035005
- [18] Xiao D, Chang M C, Niu Q 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1959
- [19] Niu Q, Chang M C, Wu B, Xiao D, Cheng R 2017 *Physical Effects of Geometric Phases* (Singapore: World Scientific)
- [20] Hořava P 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 016405
- [21] Zhao Y X, Wang Z D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 240404
- [22] Wan X, Turner A M, Vishwanath A, Savrasov S Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205101
- [23] Nielsen H B, Ninomiya M 1983 *Phys. Lett. B* **130** 389
- [24] Volovik G E 2003 *The Universe in A Helium Droplet* (Vol. 117) (Oxford: Oxford University Press on Demand)
- [25] Guan S, Yu Z M, Liu Y, Liu G B, Dong L, Lu Y, Yao Y, Yang S A 2017 *npj Quant. Mater.* **2** 23
- [26] Yang S A 2016 *SPIN* **6** 1640003
- [27] Young S M, Zaheer S, Teo J C, Kane C L, Mele E J, Rappe A M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 140405
- [28] Xu G, Weng H, Wang Z, Dai X, Fang Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 186806
- [29] Weng H, Fang C, Fang Z, Dai X 2016 *Phys. Rev. B* **93** 241202
- [30] Zhu Z, Winkler G W, Wu Q, Li J, Soluyanov A A 2016 *Phys. Rev. X* **6** 031003
- [31] Chang G, Xu S Y, Huang S M, Sanchez D S, Hsu C H, Bian G, Yu Z M, Belopolski L, Alidoust N, Zheng H, Chang T R, Jeng H T, Yang S A, Neupert T, Lin H, Hasan M Z 2017 *Sci. Rep.* **7** 1688
- [32] Bradlyn B, Cano J, Wang Z, Vergniory M G, Felser C, Cava R J, Bernevig B A 2016 *Science* **353** aaf5037
- [33] Wieder B J, Kim Y, Rappe A M, Kane C L 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 186402
- [34] Kennett M P, Komeilizadeh N, Kaveh K, Smith P M 2011 *Phys. Rev. A* **83** 053636
- [35] Roy B, Smith P M, Kennett M P 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235119
- [36] Chen C, Wang S S, Liu L, Yu Z M, Sheng X L, Chen Z, Yang S A 2017 *Phys. Rev. Mater.* **1** 044201
- [37] Liu Q, Zunger A 2017 *Phys. Rev. X* **7** 021019
- [38] Yu W C, Zhou X, Chuang F C, Yang S A, Lin H, Bansil A 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 051201
- [39] Zhu Z, Liu Y, Yu Z M, Wang S S, Zhao Y X, Feng Y, Sheng X L, Yang S A 2018 *Phys. Rev. B* **98** 125104
- [40] Son D T, Spivak B Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104412
- [41] Gao Y, Yang S A, Niu Q 2017 *Phys. Rev. B* **95** 165135
- [42] Luo Y, McDonald R D, Rosa P F S, Scott B, Wakeham N, Ghimire N J, Bauer E D, Thompson J D, Ronning F 2016 *Sci. Rep.* **6** 27294
- [43] Li Y, Li L, Wang J, Wang T, Xu X, Xi C, Cao C, Dai J 2016 *Phys. Rev. B* **94** 121115
- [44] Wang Z, Sun Y, Chen X Q, Franchini C, Xu G, Weng H, Dai X, Fang Z 2012 *Phys. Rev. B* **85** 195320
- [45] Wang Z, Weng H, Wu Q, Dai X, Fang Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125427
- [46] Weng H, Fang C, Fang Z, Bernevig B A, Dai X 2015 *Phys. Rev. X* **5** 011029
- [47] Huang S M, Xu S Y, Belopolski I, Lee C C, Chang G, Wang B K, Alidoust N, Bian G, Neupane M, Zhang C, Jia S, Bansil A, Lin H, Hasan M Z 2015 *Nat. Commun.* **6** 7373
- [48] Tang F, Po H C, Vishwanath A, Wan X 2019 *Nature* **566** 486
- [49] Zhang T, Jiang Y, Song Z, Huang H, He Y, Fang Z, Weng H, Fang C 2019 *Nature* **566** 475
- [50] Vergniory M G, Elcoro L, Felser C, Regnault N, Bernevig B A, Wang Z 2019 *Nature* **566** 480
- [51] Yang S A, Pan H, Zhang F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 046401
- [52] Weng H, Liang Y, Xu Q, Yu R, Fang Z, Dai X, Kawazoe Y 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045108
- [53] Mullen K, Uchoa B, Glatzhofer D T 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 026403
- [54] Yu R, Weng H, Fang Z, Dai X, Hu X 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 036807
- [55] Kim Y, Wieder B J, Kane C L, Rappe A M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 036806
- [56] Chen Y, Xie Y, Yang S A, Pan H, Zhang F, Cohen M, Zhang S 2015 *Nano Lett.* **15** 6974
- [57] Bian G, Chang T R, Sankar R, Xu S Y, Zheng H, Neupert T, Chiu C K, Huang S M, Chang G, Belopolski I, Sanchez D S, Neupane M, Alidoust N, Wang B, Lee C C, Jeng H T, Bandil A, Chou F, Lin H, Hasan M Z 2015 arXiv: 1505.03069
- [58] Fang C, Chen Y, Kee H Y, Fu L 2015 *Phys. Rev. B* **92** 081201
- [59] Zhong C, Chen Y, Xie Y, Yang S A, Cohen M L, Zhang S B 2016 *Nanoscale* **8** 7232
- [60] Liang Q F, Zhou J, Yu R, Wang Z, Weng H 2016 *Phys. Rev. B* **93** 085427
- [61] Li S, Yu Z M, Liu Y, Guan S, Wang S S, Zhang X, Yao Y, Yang S A 2017 *Phys. Rev. B: Rapid Comm.* **96** 081106
- [62] Lu Y, Zhou D, Chang G, Guan S, Chen W, Jiang Y, Jiang J, Wang X S, Yang S A, Feng Y P, Kawazoe Y, Lin H 2016 *npj Comput. Mater.* **2** 16011
- [63] Wu W, Liu Y, Li S, Zhong C, Yu Z M, Sheng X L, Zhao Y X, Yang S A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 115125

- [64] Zhang X, Yu Z M, Lu Y, Sheng X L, Yang H Y, Yang S A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 125143
- [65] Xu Q, Yu R, Fang Z, Dai X, Weng H 2017 *Phys. Rev. B* **95** 045136
- [66] Chan Y H, Chiu C K, Chou M Y, Schnyder A P 2016 *Phys. Rev. B* **93** 205132
- [67] Du Y, Tang F, Wang D, Sheng L, Kan E J, Duan C G, Savrasov S Y, Wan X 2017 *npj Quantum Mater.* **2** 3
- [68] Huang H, Liu J, Vanderbilt D, Duan W 2016 *Phys. Rev. B* **93** 201114
- [69] Li S, Liu Y, Fu B, Yu Z M, Yang S A, Yao Y 2018 *Phys. Rev. B* **97** 245148
- [70] Li R, Ma H, Cheng X, Wang S, Li D, Zhang Z, Li Y, Chen X Q 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 096401
- [71] Bian G, Chang T R, Sankar R, Xu S Y, Zheng H, Neupert T, Chiu C K, Huang S M, Chang G, Belopolski I, Sanchez D S, Neupane M, Alidoust N, Liu C, Wang B, Lee C C, Jeng H T, Zhang C, Yuan Z, Jia S, Bansil A, Chou F, Lin H, Hasan M Z 2016 *Nat. Commun.* **7** 10556
- [72] Young S M, Kane C L 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 126803
- [73] Wang S S, Liu Y, Yu Z M, Sheng X L, Yang S A 2017 *Nat. Commun.* **8** 1844
- [74] Li S, Liu Y, Wang S S, Yu Z M, Guan S, Sheng X L, Yao Y, Yang S A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045131
- [75] Bzdusek T, Wu Q, Rüegg A, Sigrist M, Soluyanov A A 2016 *Nature* **538** 7623
- [76] Sato T, Wang Z, Nakayama K, Souma S, Takane D, Nakata Y, Iwasawa H, Cacho C, Timur K, Takahashi T, Ando Y 2018 *Phys. Rev. B* **98** 121111
- [77] An L, Zhang H, Hu J, Zhu X, Gao W, Zhang J, Xi C, Ning W, Mao Z, Tan M 2018 *Phys. Rev. B* **97** 235133
- [78] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z, Wu Q, Troyer M, Dai X, Bernevig B A 2015 *Nature* **527** 495
- [79] Xu Y, Zhang F, Zhang C 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 265304
- [80] Zhang X, Jin L, Dai X, Liu G 2017 *J. Phys. Chem. Lett.* **8** 4814
- [81] Chang T R, Pletikoscic I, Kong T, Bian G, Huang A, Denlinger J, Kushwaha S K, Sinkovic B, Jeng H T, Valla T, Xie W, Cava R J 2018 *Adv. Sci.* **6** 1800897
- [82] Li Z H, Wang W, Zhou P, Ma Z S, Sun L Z 2019 *New J. Phys.* **21** 033018
- [83] Yu Z M, Wu W, Sheng X L, Zhao Y X, Yang S A 2019 *Phys. Rev. B: Rapid Comm.* **99** 121106
- [84] Zhong C, Wu W, He J, Ding G, Liu Y, Li D, Yang S A, Zhang G 2019 *Nanoscale* **11** 2468
- [85] Wang S S, Yu Z M, Liu Y, Jiao Y, Guan S, Sheng X L, Yang S A 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 084201
- [86] Zeng M, Fang C, Chang G, Chen Y A, Hsieh T, Bansil A, Lin H, Fu L 2015 arXiv: 1504.03492
- [87] Kobayashi S, Yamakawa Y, Yamakage A, Inohara T, Okamoto Y, Tanaka Y 2017 *Phys. Rev. B* **95** 245208
- [88] Gong C, Xie Y, Chen Y, Kim H S, Vanderbilt D 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 106403
- [89] Sheng X L, Yu Z M, Yu R, Weng H, Yang S A 2017 *J. Phys. Chem. Lett.* **8** 3506
- [90] Zhong C, Chen Y, Yu Z -M, Xie Y, Wang H, Yang S A, Zhang S 2017 *Nat. Commun.* **8** 15641
- [91] Chang G, Xu S Y, Zhou X, Huang S M, Singh B, Wang B, Belopolski I, Yin J, Zhang S, Bansil A, Lin H, Hasan M Z 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 156401
- [92] Kim K S, Zhao Y, Jang H, Lee S Y, Kim J M, Kim K S, Ahn J H, Kim P, Choi J Y, Hong B H 2009 *Nature* **457** 706
- [93] Lee C, Wei X, Kysar J W, Hone J 2008 *Science* **321** 385
- [94] Wu W, Jiao Y, Li S, Sheng X L, Yu Z -M, Yang S A 2019 *Phys. Rev. Materials* **3** 054203
- [95] You J Y, Chen C, Zhang Z, Sheng X L, Yang S A, Su G 2019 *Phys. Rev. B* **100** 064408
- [96] Guan S, Liu Y, Yu Z M, Wang S S, Yao Y, Yang S A 2017 *Phys. Rev. Materials* **1** 054003
- [97] Jin Y J, Wang R, Zhao J Z, Du Y P, Zheng C D, Gan L Y, Liu J F, Xu H, Tong S Y 2017 *Nanoscale* **9** 13112
- [98] Zhou P, Ma Z S, Sun L Z 2018 *Journal of Materials Chemistry C* **6** 1206
- [99] Feng B, Fu B, Kasamatsu S, Ito S, Cheng P, Liu C C, Feng Y, Wu S, Mahatha S K, Sheverdyevaeva P, Moras O, Arita M, Sugino O, Chiang T C, Shimada K, Miyamoto K, Okuda T, Wu K, Chen L, Yao Y 2017 *Nat. Commun.* **8** 1007
- [100] Gao L, Sun J T, Lu J C, Li H, Qian K, Zhang S, Zhang Y Y, Qian T, Ding H, Lin X, Du S, Gao H J 2018 *Adv. Mater.* **30** 1707055
- [101] Li R, Xu Y, He J, Ullah S, Li J, Liu J M, Li D, Franchini C, Weng H, Chen X Q 2016 arXiv: 1610.07142
- [102] Shi Y, Guo Y, Wang X, Princep A J, Khalyavin D, Manuel P, Michiue Y, Sato A, Tsuda K, Arai M 2013 *Nature Mater.* **12** 1024
- [103] Chang G, Xu S Y, Zheng H, Singh B, Hsu C H, Bian G, Alidoust N, Belopolski I, Sanchez D S, Zhang S, Lin H, Hasan M Z 2016 *Sci. Rep.* **6** 38839
- [104] Zhang R W, Zhang Z, Liu C C, Yao Y 2019 arXiv: 1907.01130
- [105] Wang R, Zhao J Z, Jin Y J, Du Y P, Zhao Y X, Xu H, Tong S Y 2018 *Phys. Rev. B* **97** 241111
- [106] Chen C, Yu Z M, Li S, Chen Z, Sheng X L, Yang S A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 075131
- [107] Wang J 2017 *Phys. Rev. B* **96** 081107
- [108] Hosen M M, Dhakal G, Dimitri K, Maldonado P, Aperis A, Firoza K, Christopher S, Riseborough P, Oppeneer P M, Kaczorowski D, Durakiewicz T, Neupane M 2018 *Sci. Rep.* **8** 13283
- [109] Zhou X, Zhang R W, Zhang Z, Ma D S, Feng W, Mokrousov Y, Yao Y 2019 *J. Phys. Chem. Lett.* **10** 3101
- [110] Feng B, Zhang R W, Feng Y, Fu B, Wu S, Miyamoto K, He S, Chen L, Wu K, Shimada K, Okuda T, Yao Y 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 116401
- [111] Heikkilä T T, Kopnin N B, Volovik G E 2011 *JETP Lett.* **94** 233
- [112] Liu J, Balents L 2017 *Phys. Rev. B* **95** 075426
- [113] Bzdusek T, Sigrist M 2017 *Phys. Rev. B* **96** 155105
- [114] Xiao M, Sun X Q, Fan S 2019 *Phys. Rev. B* **99** 094206
- [115] Zhang X, Yu Z M, Zhu Z, Wu W, Wang S S, Sheng X L, Yang S A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 235150
- [116] Zhao Y X, Schnyder A P 2016 *Phys. Rev. B* **94** 195109
- [117] Yu Z M, Wu W, Zhao Y X, Yang S A 2019 *Phys. Rev. B* **100** 041118
- [118] Nielsen H B, Ninomiya M 1981 *Nucl. Phys. B* **185** 20
- [119] Nielsen H B, Ninomiya M 1981 *Nucl. Phys. B* **193** 173
- [120] Rhim J W, Kim Y B 2015 *Phys. Rev. B* **92** 045126
- [121] Liu Y, Yang S A, Zhang F 2018 *Phys. Rev. B* **97** 035153

SPECIAL TOPIC—The frontiers and applications of topological physics

Progress on topological nodal line and nodal surface*

Wang Shan-Shan^{1)†} Wu Wei-Kang²⁾ Yang Sheng-Yuan²⁾

1) (*School of Physics, Southeast University, Nanjing 211189, China*)

2) (*Research Laboratory for Quantum Materials, Singapore University of Technology and Design, Singapore 487372, Singapore*)

(Received 9 October 2019; revised manuscript received 4 November 2019)

Abstract

Electronic band crossing can not only form zero-dimensional nodal points, but also one dimensional nodal lines and two dimensional nodal surfaces. These topological band features have been attracting significant research interest, as they may lead to many special physical properties. In this article, we review the progress in this field, including the conceptual development, the character and classification of these nodal structures, and the material realization.

Keywords: topological materials, nodal line, nodal surface, band structure

PACS: 71.20.-b, 73.20.-r

DOI: [10.7498/aps.68.20191538](https://doi.org/10.7498/aps.68.20191538)

* Project supported by the Excellent Scholar Project of Southeast University, Class A, China and the Singapore Ministry of Education Academic Research Fund Tier 2 (Grant No. MOE-2017-T2-2-108).

† Corresponding author. E-mail: 101012564@seu.edu.cn