

三角晶系 PtBi₂ 中电流方向依赖的面内磁输运性质*

蔡方齐¹⁾ 徐珮芝¹⁾ 孙梦佳¹⁾ 胡颖捷¹⁾ 任伟^{1)2)†} 敬超^{1)‡}

1) (上海大学理学院, 上海 200444)

2) (上海大学材料基因组工程研究院, 上海 200444)

(2026 年 1 月 23 日收到; 2026 年 2 月 8 日收到修改稿)

本文制备了 PtBi₂ 三角晶系单晶样品, 并对其电、磁输运性质进行系统研究. 实验发现, PtBi₂ 单晶在 a , b 轴方向表现出各向异性磁阻和平面霍尔效应的高阶特征. 相较于 a 轴, b 轴方向呈现出较低的对称性. 进一步分析表明, 这些高阶特征依赖于磁场与晶格特定方向之间的夹角, 意味着费米面的对称性对磁输运性质具有潜在的影响. 此外, 还采用第一性原理方法计算了电流沿 PtBi₂ 单晶 b 轴方向各向异性磁阻, 从理论上排除了其他因素对各向异性磁输运信号的干扰.

关键词: 三角晶系 PtBi₂, 平面霍尔效应, 各向异性磁阻, 第一性原理计算

DOI: 10.7498/aps.75.20260120

CSTR: 32037.14.aps.75.20260120

1 引言

拓扑半金属 (topological semimetals) 中非平庸电子态在凝聚态物理领域引起了人们的广泛关注. 根据其电子结构特征, 拓扑半金属主要可分为狄拉克半金属 (Dirac semimetals) 和外尔半金属 (Weyl semimetals)^[1]. 在外尔半金属中, 当施加平行于电流方向的磁场时, 会引起特定手性的粒子数量的不守恒^[2], 即手性异常现象 (chiral anomaly)^[3]. 手性异常会引发一系列独特的物理特性, 其中负磁阻效应 (negative magnetoresistance effect) 被视为识别拓扑半金属的关键输运特征^[4-6]. 然而, 随着研究的深入, 研究者们发现, 其他因素也可能导致负磁阻效应, 如电流喷射 (current jetting)^[7] 和克努森效应 (Knudsen effect)^[8] 等. 最近的研究表明, 拓扑半金属中的手性异常将导致平面霍尔效应

(planar Hall effect, PHE)^[9,10], 这一特征有望成为判别拓扑半金属的新型输运特征手段.

平面霍尔效应发生于外加磁场与电流处于同一平面内的情况下, 具有典型的二重对称性, 这一点与各向异性磁阻 (anisotropic magnetoresistance, AMR) 相似. 然而在单晶材料中, 各向异性磁阻行为往往与晶轴取向密切相关. 具体而言, 除了磁场方向之外, 电流相对晶轴的取向同样对电阻率具有显著的影响. 最近, 我们在三角晶系 PtBi₂ 中也发现了磁输运性质相对于电流取向的强烈依赖性. 作为一种非磁性的 I 型外尔半金属, 三角晶系 PtBi₂ 可以直接排除其中各向异性磁散射的影响^[11], 并且其手性异常也不具备电流依赖性^[12,13]. 此外, 三角晶系 PtBi₂ 具有复杂的电子结构, 这使其各向异性磁阻与平面霍尔效应具备一些高阶特征^[14,15], 这些高阶特征对电流的取向较为敏感. 这些特点为更好观察与研究三角晶系 PtBi₂ 中电流取向对磁输

* 国家自然科学基金 (批准号: 12274278, 52130204, 12311530675) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: renwei@shu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: cjing@staff.shu.edu.cn

运性质的影响提供了有利条件.

本工作中生长出高质量的三角晶系 PtBi₂ 单晶, 并分别在电流沿 *a* 轴与 *b* 轴的情况下进行磁输运测量. 测量结果表明, 沿 *b* 轴晶向存在更弱的带间散射与更小的载流子速度. 此外, 对比了两个晶向的各向异性磁阻与平面霍尔效应, 二者整体上呈现出二重对称性. 但是通过进一步分析表明, 当电流沿 *b* 轴时, 其高阶对称的成分相比于 *a* 轴更低, 这与两种晶向下费米面的不同的对称性密切相关.

2 实验与计算方法

样品制备采用助熔剂法生长方法, 获得高质量的三角晶系 PtBi₂ 单晶样品. 首先将铂粉 (阿尔法, 99.98%) 和铋粉 (伊诺凯, 99.999%) 按 1:8 的比例在手套箱里充分混合, 装在氧化铝坩埚中, 并将坩埚置于石英管中, 塞上石英棉与玻璃塞. 利用真空封管机和高温氢氧机将样品真空密封在石英管中. 将石英管放置在马弗炉中, 在 12 h 之内加热到 800 °C, 并在此温度保持 24 h. 然后以 2 °C/h 的速度缓慢冷却至 430 °C. 在该温度下, 用离心机分离熔剂. 最后, 使用综合物性测量系统 (physical property measurement system, PPMS) 测量三角晶系 PtBi₂ 的各向异性磁输运性质. 需要注意的是, 在实验过程中, 磁场无法严格沿面内旋转, 这将导致面内测量的过程中有面外霍尔信号混入. 为了分离面内与面外的信号, 分别测量了正负磁场下的运输信号. 由于面内霍尔与磁阻对磁场为偶函数而面外霍尔对磁场为奇函数, 通过将正负磁场下的数据相加取平均可得面内信号^[16].

本文中的电子结构计算是采用基于密度泛函理论的维也纳从头算模拟软件包 (VASP)^[17]. 其中, 交换关联势采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函^[18], 平面波函数的截断能设置为 500 eV. 在结构弛豫过程中, 体系的能量和力的收敛标准设置为 10⁻⁷ eV 和 0.0001 eV/Å. 通过 Monkhorst-Pack 方法, 将布里渊区中的 *k* 点网格设置为 9×9×5. 使用 Wannier90 代码获得紧束缚模型^[19], 并通过 WannierTools 执行各向异性磁阻的数值模拟计算^[20]. 在生成最大局域化 Wannier 函数的过程中, 选择 Bi 的 p 轨道和 Pt 的 d 轨道作为初始轨道投影.

3 结果与讨论

实验获得的 PtBi₂ 单晶, 属于三角晶系, 是一种层状材料, 其空间群为 *P31m*. PtBi₂ 的晶体结构及其 X 射线衍射图可参见先前研究结果^[15], 本文所用单晶尺寸约为 5 mm×3 mm, 厚度约 0.2 mm. 图 1(a) 是关于电流沿 PtBi₂ 单晶 *a* 轴时, 磁场在 *ab* 面内转动示意图. *a* 轴代表的晶向如图 1(a) 中晶体结构所示, 电流沿 *a* 轴时, 以 ρ_{35} 作为各向异性磁阻 ρ_{xx} , ρ_{34} 为平面霍尔 ρ_{xy} . 反之, 电流沿 *b* 轴时, 以 ρ_{34} 作为 ρ_{xx} , ρ_{35} 为 ρ_{xy} . 图 1(b) 是在 2—300 K 温度范围内, 电流平行于 PtBi₂ 单晶 *b* 轴时的零场电阻率, 与电流沿 *a* 轴时一样, 二者均表现出金属性质. 沿这两个方向的电阻率各向异性并不明显. 根据剩余电阻比率 (residual resistance ratio, RRR) 的定义, 即 $RRR = R(300\text{ K})/R(2\text{ K})$ 可知, 当电流平行于 *a* 轴时, $RRR_a \approx 150$, 而当电流平行于 *b* 轴时, $RRR_b \approx 147$, 二者几乎一致, 其各向异性并不明显. 这也侧面反映出单晶的高质量. 此外, 还通过 Bloch-Grüneisen-Mott (BGM) 公式对电阻率进行拟合^[21], 拟合公式为

$$\rho(T) = \rho_0 + A_{ep} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^5 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{x^5}{(1 - e^{-x})(e^{-x} - 1)} dx - A_{ee} T^3, \quad (1)$$

其中, ρ_0 是剩余电阻率 (residual resistivity), A_{ee} 是电子-电子散射系数, A_{ep} 是电子-声子散射系数, Θ_D 是 Debye 温度. 通过拟合发现, 当电流平行 *a* 轴时, $\rho_0 = 1.46 \mu\Omega\cdot\text{cm}$, $A_{ee} = 2.96 \times 10^{-7} \mu\Omega\cdot\text{cm}\cdot\text{K}^{-3}$, $A_{ep} = 304.64 \mu\Omega\cdot\text{cm}$, $\Theta_D = 143.9\text{ K}$; 而电流平行 *b* 轴时, $\rho_0 = 0.81 \mu\Omega\cdot\text{cm}$, $A_{ee} = 3.06 \times 10^{-7} \mu\Omega\cdot\text{cm}\cdot\text{K}^{-3}$, $A_{ep} = 193.64 \mu\Omega\cdot\text{cm}$, $\Theta_D = 129.4\text{ K}$. 在这两种情况下, A_{ee} 值均远低于 A_{ep} 值. 这表明在高温时, 电阻主要是由电子-声子散射机制主导, 而电子之间的相互作用非常弱. 电流沿 *a* 轴晶向时的 A_{ep} 值较大, 这说明此方向上具有更强的带间散射^[22].

接下来, 我们还测量了在不同温度下外加磁场平行与垂直样品 *ab* 面时, 面内电流方向的磁输运性质. 如图 1(c) 所示, 当电流平行于 *b* 轴时, 可以观察到非常明显的负磁阻现象. 在 $T = 2\text{ K}$ 时, 负磁阻可以达到 -66%, 随着温度升高, 这一现象逐渐减弱, 在 $T = 40\text{ K}$ 左右负磁阻现象消失. 而先前研究结果表明当电流平行于 *a* 轴时同样出现了负磁阻现

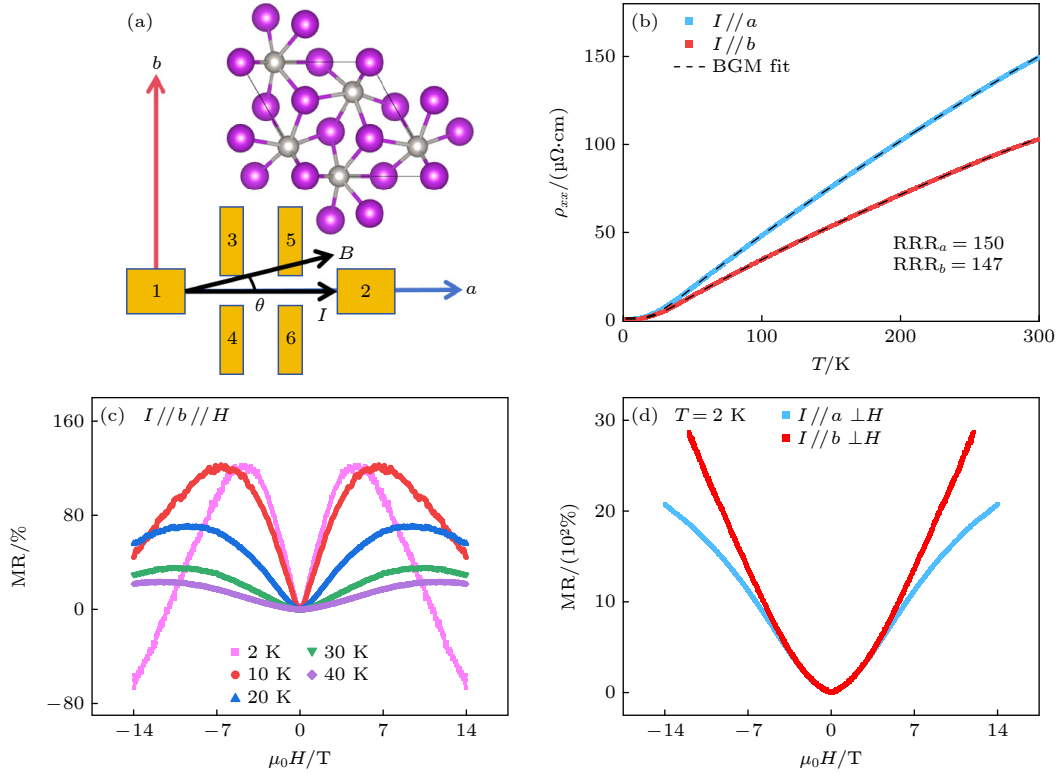


图 1 三角晶系 PtBi₂ 在电流沿不同晶向时的基本性质 (a) PtBi₂ 的面内晶体结构以及电极设计示意图; (b) 电流沿不同晶向的零场电阻率与温度的依赖关系; (c) 磁场平行电流, 电流沿 b 轴时的电阻率与磁场依赖关系; (d) 磁场平行 c 轴时, 电流沿不同晶向的电阻率与磁场依赖关系; 图 1(b) 中沿 a 轴的电流数据源自以前的研究^[15]

Fig. 1. Basic properties of trigonal PtBi₂ when currents are in different crystal orientations: (a) The in-plane crystal structure of PtBi₂ and schematic diagram of electrode design; (b) the dependence of the zero-field resistivity and temperature when the current along different crystal orientations; (c) the magnetic field is parallel to the current, and the dependence of resistivity and magnetic field when the current is along the b -axis; (d) when the magnetic field is parallel to the c -axis, the dependence of the resistivity and magnetic field when the current is along different crystal orientations; the current data along the a -axis in Fig. 1(b) is derived from previous research^[15].

象^[15]. 考虑到三角晶系 PtBi₂ 是 I 类外尔半金属, 这种不依赖电流方向的负磁阻现象是合理的^[12,13].

当磁场垂直于面内时, 磁阻表现明显异于磁场平行于面内的情况. 对于电流平行于 a 轴的磁阻, 其在高场下呈现饱和趋势; 而当电流平行于 b 轴时, 表现为不饱和磁阻, 如图 1(d) 所示, 这与文献^[23,24] 中的结果相符合. 也就是说, 这种差异来源于电流与晶格之间方向的不同.

饱和磁阻现象可以通过已有的费米面计算结果来解释^[25]. 以 γ 带为例, 其费米面口袋呈类球形, 排列在平面上的蜂窝状晶格中, 并通过倾斜的颈部相互连接. 在每个平面中, 位于蜂窝结构一侧的类球体相互连接, 但与另一侧的球体没有连接. 当磁场垂直于平面时, 电子沿闭合轨道运动, 这与文献^[24] 的研究结果一致. 轨道的开放与闭合对磁阻有显著影响. 例如, 在具有单个电子带的金属中, 特定角度的磁场形成的开放轨道会导致磁阻的

二次行为, 而在没有开放轨道的角度形成一般的饱和磁阻^[26].

对于电流沿 b 轴的情况, 磁场的方向不变, 这意味着对应的电子轨道不变. 因此, 磁阻的饱和与否不仅与电子轨道的开闭有关, 可能还需要考虑载流子速度^[27]. 当电流平行 b 轴时, 其载流子速度若小于电流平行于 a 轴对应的速度, 则可能导致这一现象.

理论研究结果表明拓扑材料中的手性异常会诱导平面霍尔效应^[9,10]. 因此进一步测量了电流沿 b 轴时的平面霍尔效应与各向异性磁阻. 图 2(a), (b) 表示在温度为 2 K 时, PtBi₂ 单晶样品在不同面内磁场下电阻率的角度依赖关系, θ 为磁场与电流的夹角, 0° 对应于磁场与电流平行的方向. 纵向电阻率和横向电阻率分别通过 (2) 式和 (3) 式进行拟合^[9,10], 即:

$$\rho_{xx} = \rho_{\perp} - \Delta\rho\cos^2\theta, \quad (2)$$

$$\rho_{xy} = -\Delta\rho\sin\theta\cos\theta. \quad (3)$$

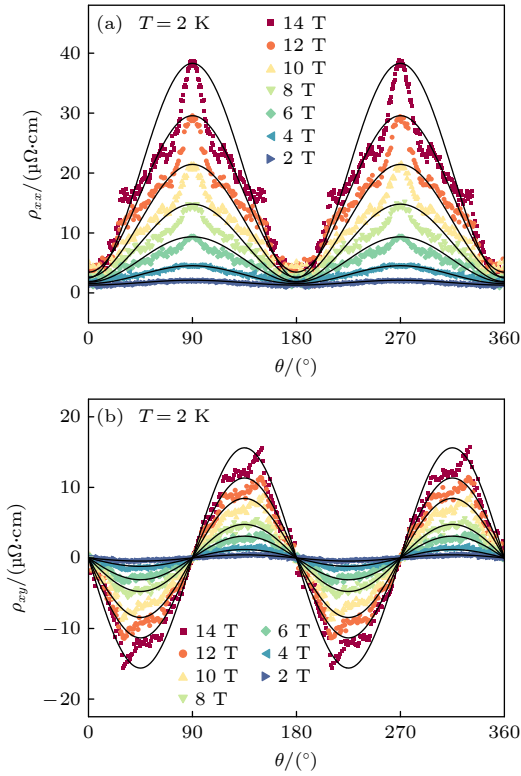


图2 不同磁场下,三角晶系 PtBi₂ 中电流沿 *b* 轴的各向异性磁阻 (a) 和平面霍尔效应 (b), 黑色实线为拟合曲线
Fig. 2. The AMR (a) and PHE (b) of current along the *b*-axis in trigonal PtBi₂ under different magnetic fields, and the solid black lines are the fitting curves.

拟合结果如图 2(a), (b) 中的黑色实线所示. 并由此可分别得到 $\Delta\rho_{xx}$ 与 $\Delta\rho_{xy}$ 的磁场依赖关系, 如图 3 所示. 提取出的 $\Delta\rho_{xx}$ 与 $\Delta\rho_{xy}$ 可给出二者与磁场的指数依赖关系分别为 1.87 与 1.97. 这表明手性异常对平面霍尔效应的贡献仍然占据主导地位, 这一结果与上述负磁阻的测量结果相吻合.

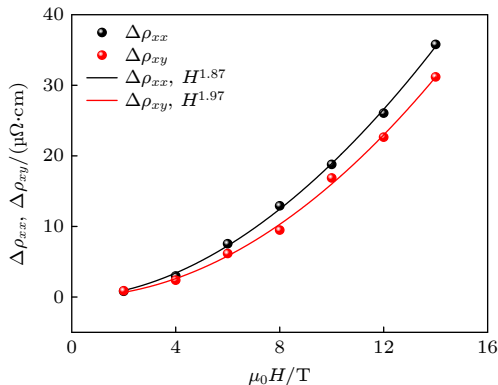


图3 三角晶系 PtBi₂ 中电流沿 *b* 轴的各向异性磁阻和平面霍尔效应: 提取的各磁场下的 $\Delta\rho_{xx}$ 和 $\Delta\rho_{xy}$
Fig. 3. The AMR and PHE of current along the *b*-axis in trigonal PtBi₂: extracted $\Delta\rho_{xx}$ and $\Delta\rho_{xy}$ under each magnetic field, respectively.

图 4 进一步给出了在不同磁场下 ρ_{xx} 与 ρ_{xy} 的轨道参数图. 与电流平行于 *a* 轴的情况类似, 在低场下的轨道参数图几乎被 14 T 的曲线包围, 呈现出“准同心圆”形状. 随着磁场的增大, 轨道参数图整体向右扩散, 表明存在轨道磁阻的贡献. 此外, 在轨道参数图中, 随着磁场的增大, 除主峰外还出现了 4 个尖锐的峰, 证实了高阶特征峰的存在.

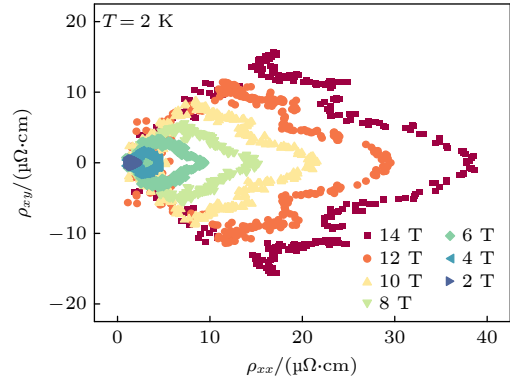


图4 温度 $T = 2$ K, 电流沿 *b* 轴时, PtBi₂ 在不同磁场下的轨道参数图

Fig. 4. Orbital parameter diagram under different magnetic fields when $T = 2$ K and the current is parallel to *b*-axis.

从图 2—图 4 可以看出, 各向异性磁阻与平面霍尔效应的高阶特征随磁场的增大逐渐变得明显. 为了更直观地展示电流沿 *a* 轴与 *b* 轴时的区别, 以 $T = 2$ K, $\mu_0H = 14$ T 的测量曲线为例, 如图 5 所示. 图 5(a), (b) 分别展示了 *a*, *b* 两个轴向的各向异性磁阻, 当电流沿 *a* 轴时, 在 0° — 180° 的周期内, 极值对应的角度分别为 60° , 90° 和 120° , 更详细的测量细节可参见以前的研究 [15]. 而在电流沿 *b* 轴的情况下, 极值对应的角度从电流沿 *a* 轴的 60° 和 120° 转变为 90° , 在 30° , 60° , 120° 和 150° 位置均观察到微弱的高阶特征峰. 并且, 相应的特征曲线明显偏离余弦函数形状, 在高场下主峰越来越尖锐. 对于平面霍尔效应, 如图 5(c), (d) 所示, 沿两个轴向的结果均可以观察到明显的高阶特征峰, 并且极值对应角度同样偏离理想情况下的 45° , 只不过 *a* 轴对应的角度分别为 60° 和 120° , 而 *b* 轴对应的角度分别为 30° 和 150° . 也就是说, 当电流与晶向之间的相对位置改变时, 高阶特征依然存在, 只是极值对应的角度发生了改变, 这也与轨道参数图像对应.

在各向异性磁阻中, 可以区分非晶体和晶体两部分贡献 [28]. 非晶体部分具有二重对称性, 仅取决

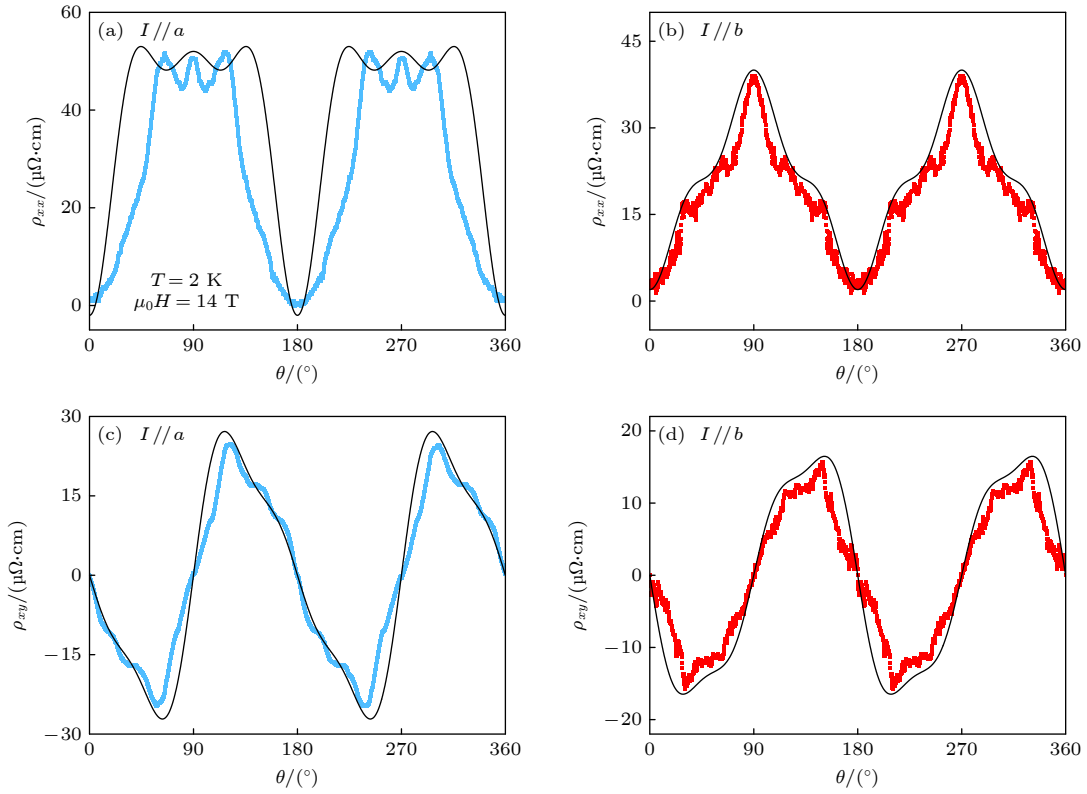


图 5 $T = 2 \text{ K}$, $\mu_0 H = 14 \text{ T}$ 时, PtBi_2 中电流沿不同晶向的各向异性磁阻与平面霍尔效应 (a), (b) 分别为电流沿 a 轴和 b 轴的各向异性磁阻; (c), (d) 分别为电流沿 a 轴和 b 轴的平面霍尔效应, 黑色实线为拟合曲线. 图 (a), (c) 中拟合曲线所选取的数据源自电流沿 a 轴的实验数据^[15]

Fig. 5. When $T = 2 \text{ K}$ and $\mu_0 H = 14 \text{ T}$, the anisotropic magnetoresistance and planar Hall effect of current in PtBi_2 along different crystal orientations: (a), (b) The AMR of current along the a -axis and b -axis, respectively; (c), (d) the PHE of current along the a -axis and b -axis, respectively, and the solid black lines are the fitting curves. The fitting curves in panels (a), (c) are derived from the experimental data of the current along the a -axis^[15].

于磁场和电流之间的角度; 也就是说, 这部分贡献与磁场和晶体轴之间的角度无关^[28]. 相比之下, 晶体部分需要考虑磁场与晶格之间的角度. 在本文结果中, 尽管电流沿 a 轴与 b 轴的各向异性磁阻都主要表现为二重对称, 但是都含有一些高阶对称的成分. 通过对图 5 中的曲线进行拟合, 拟合公式分别为

$$\text{AMR} = R_0 - C_2 \cos 2\theta - C_4 \cos 4\theta - C_6 \cos 6\theta, \quad (4)$$

$$\text{PHE} = -S_2 \sin 2\theta - S_4 \sin 4\theta - S_6 \sin 6\theta, \quad (5)$$

拟合结果如表 1 所示, 发现相比于电流 a 轴的结果, 电流沿 b 轴时, 四重对称的成分明显降低, 这可以用费米面的对称性来解释^[27,29]. 即当电流沿 a 轴时, 电流沿晶格的高对称轴向, 因此具有更高的对称性.

需要进一步强调的是: 尽管两种晶向下的测试结果存在显著差异, 但它们的最大值对应的角度却一致. 具体而言, 当电流方向旋转 30° 时, 各向异性磁阻最大值角度也对应的旋转 30° . 这表明最大值

的角度取决于磁场与晶格之间的角度, 从而证实了晶体结构对磁阻的重要贡献. 这种现象可能与样品的费米面构型有关. 已有研究表明, 费米面垂直磁场的截面面积^[30]与磁场沿费米面的轴向长度^[27]会影响磁阻行为.

表 1 拟合所得对应不同对称性的贡献项

Table 1. The contributing terms corresponding to different symmetry obtained by fitting.

$\rho/(\mu\Omega\text{-cm})$	C_2	C_4	C_6	S_2	S_4	S_6
$I // a$	40	28	14	24	-7	3.5
$I // b$	30	0	4	17	2	2.5

对于平面霍尔效应, 与各向异性磁阻结果类似, 二者极值的位置都取决于磁场与晶格之间的角度, 这可能揭示了平面霍尔效应与费米面之间的联系. 这种最大值角度随磁场与晶向角度变化的现象在其他文献中也被观察到^[31,32]. 此外, 通过第一性原理计算, 并结合玻尔兹曼输运理论, 计算了电流沿 b 轴的各向异性磁阻. 考虑弛豫时间近似, 可将

电阻率与弛豫时间乘积 ρt 看作磁场与弛豫时间乘积 $\mu_0 H t$ 的函数. 如图 6 所示, 沿 b 轴的各向异性磁阻随磁场表现出明显的二重周期性行为. 与沿 a 轴的情况不同, 电流沿 b 轴时, 各向异性磁阻最大值出现在磁场与电流垂直的方向. 随着磁场强度的增大, 峰变得更加尖锐, 且在两侧看到轻微隆起. 而在低磁场下, 各向异性磁阻的曲线整体更加平滑. 这些特征与实验结果一致, 进一步表明本文实验结果反映了三角晶系 PtBi_2 的本征特性, 而不是由不均匀电流或 Bi 杂质等其他因素所引起 [33,34].

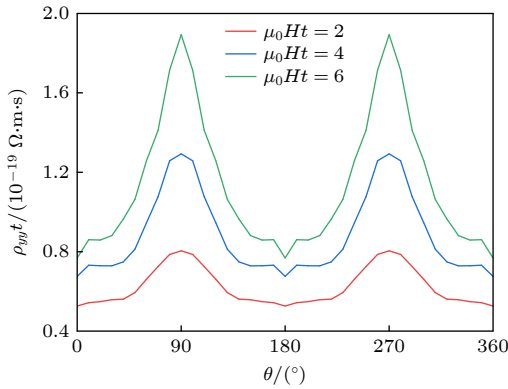


图 6 磁场在 ab 面内旋转时, 电流沿 b 轴的各向异性磁阻计算结果

Fig. 6. As the magnetic field rotates in the ab -plane, the calculated AMR of the current along the b -axis.

4 结 论

本文系统地研究了 PtBi_2 单晶样品的电磁输运性质, 揭示了样品的零场电阻率相对于温度的依赖性, 以及磁场在平行和垂直于电流方向时的磁场依赖性. 零场电阻率的拟合结果表明, 当电流沿 a 轴时存在较强的带间散射, 当磁场垂直于电流时, b 轴与 a 轴的磁阻在强磁场下分别表现出不饱和与饱和现象, 这表明除了闭合轨道外, 载流子速度的影响也不容忽视. 与电流沿 a 轴时相比, 电流沿 b 轴时的各向异性磁阻与平面霍尔效应呈现出更低的对称性. 此外, 极值出现的角度取决于磁场与晶向之间的夹角, 这可以归因于费米面的特殊构型. 我们还通过第一性原理计算研究了电流沿不同晶向的各向异性磁阻, 排除了不均匀电流等外在因素对实验结果的影响. 研究结果表明, 费米面构型与磁阻的角度依赖性之间存在紧密联系.

特别感谢首都师范大学物理系王贺老师与刘赫尧同学在单晶样品制备方面给予的热心帮助.

参考文献

- [1] Weng H M, Fang C, Fang Z, Dai X 2017 *Nat. Sci. Rev.* **4** 798
- [2] Nielsen H B, Ninomiya M 1983 *Phys. Lett. B* **130** 389
- [3] Adler S L 1969 *Phys. Rev.* **177** 2426
- [4] Son D T, Spivak B Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104412
- [5] Huang X C, Zhao L X, Long Y J, Wang P P, Chen D, Yang Z H, Liang H, Xue M Q, Weng H M, Fang Z, Dai X, Chen G F 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031023
- [6] Li Q, Kharzeev D E, Zhang C, Huang Y, Pletikosić I, Fedorov A V, Zhong R D, Schneeloch J A, Gu G D, Valla T 2016 *Nat. Phys.* **12** 550
- [7] Arnold F, Shekhar C, Wu S C, et al. 2016 *Nat. Commun.* **7** 11615
- [8] Moll P J W, Nair N L, Helm T, Potter A C, Kimchi I, Vishwanath A, Analytis J G 2016 *Nature* **535** 266
- [9] Burkov A A 2017 *Phys. Rev. B* **96** 041110
- [10] Nandy S, Sharma G, Taraphder A, Tewari S 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 176804
- [11] Tang H X, Kawakami R K, Awschalom D D, Roukes M L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 107201
- [12] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z J, Wu Q S, Troyer M, Dai X, Bernevig B A 2015 *Nature* **527** 495
- [13] Udagawa M, Bergholtz E J 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 086401
- [14] Zhu A K, Chen Z, Han M L, Liu X, Chen X G, Han Y Y, Zheng G L, Zhu X D, Gao W S, Tian M L 2024 *Phys. Rev. B* **110** 125148
- [15] Cai F Q, Chi M X, Hu Y J, Liu H Y, Chen Y Y, Jing C, Ren W, Wang H 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 233101
- [16] Wei B Y, Bu H J, Zhang S, Song F Q 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 227203 (in Chinese) [韦博元, 步海军, 张帅, 宋凤麒 2019 物理学报 **68** 227203]
- [17] Hafner J 2008 *J. Comput. Chem.* **29** 2044
- [18] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1396
- [19] Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, Souza I, Vanderbilt D, Marzari N 2008 *Comput. Phys. Commun.* **178** 685
- [20] Wu Q S, Zhang S N, Song H F, Troyer M, Soluyanov A A 2018 *Comput. Phys. Commun.* **224** 405
- [21] Grimvall G 1999 *Thermophysical Properties of Materials* (Amsterdam, Netherlands New York: Elsevier)
- [22] Bai Z H, Tu Z J, Wu R, Lei H C, Xue Q K, Zhang D 2024 *Phys. Rev. B* **110** 214507
- [23] Xu C Q, Xing X Z, Xu X F, Li B, Chen B, Che L Q, Lu X, Dai J H, Shi Z X 2016 *Phys. Rev. B* **94** 165119
- [24] Wu B L, Barrena V, Suderow H, Guillamón I 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 022042
- [25] Gao W S, Zhu X D, Zheng F W, Wu M, Zhang J L, Xi C Y, Zhang P, Zhang Y H, Hao N, Ning W, Tian M L 2018 *Nat. Commun.* **9** 3249
- [26] Huberman M, Overhauser A W 1982 *Phys. Rev. B* **25** 2211
- [27] Zhang S N, Wu Q S, Liu Y, Yazyev O V 2019 *Phys. Rev. B* **99** 035142
- [28] Kriegner D, Výborný K, Olejník K, et al. 2016 *Nat. Commun.* **7** 11623
- [29] Collaudin A, Fauqué B, Fuseya Y, Kang W, Behnia K 2015 *Phys. Rev. X* **5** 021022
- [30] Balduini F, Molinari A, Rocchino L, Hasse V, Felser C, Zota

- C, Schmid H, Gotsmann B 2024 *Phys. Rev. B* **109** 045148
- [31] Zeng F L, Zhou C, Jia M W, Shi D, Huo Y, Zhang W, Wu Y Z 2020 *J. Magn. Magn. Mater* **499** 166204
- [32] Miao Y, Sun J W, Gao C X, Xue D S, Wang X R 2024 *Phys. Rev. Lett.* **132** 206701
- [33] Yang J, Zhen W L, Liang D D, Wang Y J, Yan X, Weng S R, Wang J R, Tong W, Pi L, Zhu W K, Zhang C J 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 014201
- [34] Yang S Y, Chang K, Parkin S S P 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 022029

Current-dependent in-plane magnetotransport in trigonal PtBi₂*

CAI Fangqi¹⁾ XU Peizhi¹⁾ SUN Mengjia¹⁾ HU Yingjie¹⁾
REN Wei^{1)2)†} JING Chao^{1)‡}

1) (*College of Sciences, Shanghai University, Shanghai 200444, China*)

2) (*Materials Genome Institute of Shanghai University, Shanghai University, Shanghai 200444, China*)

(Received 23 January 2026; revised manuscript received 8 February 2026)

Abstract

A magnetic field parallel to the current in topological semimetals can induce chiral anomaly, which in turn triggers the planar Hall effect (PHE)- a characteristic regarded as a key transport signature for identifying topological semimetals. As a non-magnetic type-I Weyl semimetal, trigonal PtBi₂ is inherently free from the interference of anisotropic magnetic scattering, and its chiral anomaly is independent of current direction. Furthermore, its complex electronic structure endows the material's anisotropic magnetoresistance (AMR) and PHE with high-order features which are sensitive to current orientation, making it an ideal research system for investigating the effect of current direction on magnetotransport properties.

In this work, high-quality layered single crystals of trigonal PtBi₂ were prepared via the self-flux method, and systematic electrical and magnetic transport measurements were conducted on the crystals. Meanwhile, first-principles calculations based on density functional theory (DFT) were performed using the Vienna *ab initio* Simulation Package (VASP) to simulate the AMR with current along the *b*-axis.

Experimental results show that the *a*-axis and *b*-axis of PtBi₂ exhibit obvious high-order features in both AMR and PHE. The fitting results of AMR and PHE show that the symmetry of the *b*-axis is lower than that of the *a*-axis. This phenomenon is closely related to the unique configuration of the PtBi₂ Fermi surface, which means the potential impact of Fermi surface symmetry on magnetic transport properties. In addition, the AMR when the current flows along the *b*-axis was calculated through first-principles calculations. The calculated results are in good agreement with the experimental data, verifying that the observed magnetic transport characteristics are the intrinsic characteristics of trigonal PtBi₂.

This work reveals the effect of current direction on the in-plane magnetic transport properties of PtBi₂ and demonstrates the close correlation between the Fermi surface configuration and the angular dependence of magnetoresistance. It thus provides experimental and theoretical evidence for understanding the physical mechanism of anisotropic magnetotransport in Weyl semimetals.

Keywords: trigonal PtBi₂, plane Hall effect, anisotropic magnetoresistance, first-principles calculations

DOI: [10.7498/aps.75.20260120](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260120)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260120](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260120)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12274278, 52130204, 12311530675).

† Corresponding author. E-mail: renwei@shu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: cjing@staff.shu.edu.cn

三角晶系PtBi₂中电流方向依赖的面内磁输运性质

蔡方齐 徐珮芝 孙梦佳 胡颖捷 任伟 敬超

Current-dependent in-plane magnetotransport in trigonal PtBi₂

CAI Fangqi XU Peizhi SUN Mengjia HU Yingjie REN Wei JING Chao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 100705 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260120

CSTR: 32037.14.aps.75.20260120

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260120>

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

拓扑材料中的平面霍尔效应

Planar Hall effect in topological materials

物理学报. 2023, 72(20): 207201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230905>

单层Janus MoSSe在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles

物理学报. 2025, 74(16): 166201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437>

非辐射多声子跃迁理论的发展与前沿: 从物理思想到第一性原理计算

Development and frontiers of the theory on non-radiative multi-phonon transitions: From physical insights to first-principles calculations

物理学报. 2026, 75(8): 166201 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251621>

基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>

Er³⁺掺杂TiO₂的局域结构及电子性质的第一性原理研究

First-principles calculations of local structure and electronic properties of Er³⁺-doped TiO₂

物理学报. 2022, 71(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221847>

基于机器学习与第一性原理计算的高居里温度Janus预测

Prediction of high Curie temperature Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2025, 74(22): 220201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251026>