

## 拓扑半金属的红外光谱研究

许兵 邱子阳 杨润 戴耀民 邱祥冈

### Optical properties of topological semimetals

Xu Bing Qiu Zi-Yang Yang Run Dai Yao-Min Qiu Xiang-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 227804 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20191510

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191510>

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>

拓扑半金属ZrSiSe器件中面内霍尔效应的观测

Observation of planar Hall effect in topological semimetal ZrSiSe device

物理学报. 2019, 68(22): 227203-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191501>

拓扑节线与节面金属的研究进展

Progress on topological nodal line and nodal surface

物理学报. 2019, 68(22): 227101-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191538>

专题：拓扑物理前沿与应用

## 拓扑半金属的红外光谱研究\*

许兵<sup>1)</sup> 邱子阳<sup>1)</sup> 杨润<sup>1)</sup> 戴耀民<sup>2)†</sup> 邱祥冈<sup>1)‡</sup>

1) (中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家研究中心, 北京 100190)

2) (固体微结构国家重点实验室, 南京大学物理学院, 南京 210093)

(2019年10月7日收到; 2019年11月11日收到修改稿)

拓扑半金属是一类全新的拓扑电子态, 展现出丰富而有趣的物理性质. 这类材料不仅在未来电子器件方面具有潜在的应用价值, 同时也是目前量子材料领域研究的热点和前沿. 根据在三维动量空间中能带结构特点的不同, 拓扑半金属可以分为 Dirac 半金属、Weyl 金属和 Nodal-line 半金属等. 人们已经利用各种实验技术手段对这些材料的物理性质进行了系统的研究. 例如: 角分辨光电子能谱可以直接观测到 Weyl 半金属表面态上连接两个具有相反手性的 Weyl 费米子的费米弧; 软 X 射线的角分辨光电子能谱还可以直接观测到这些拓扑半金属体态中的 Dirac 点, Weyl 点以及 Nodal-line; 电输运测量验证了拓扑半金属中由手性反常导致的负磁阻现象; 圆偏振光产生光电流的实验证明了 Weyl 半金属 TaAs 中存在相反手性的 Weyl 费米子; 此外, 人们还发现 Weyl 半金属具有非常强的非线性效应, 主要表现为很强的二次谐波产生和 THz 发射效应等. 红外光谱是一种体敏感的实验手段. 该手段不仅覆盖很宽的能量范围 (meV 到几个 eV), 而且具有很高的能量分辨率 (最高可达几十个  $\mu\text{eV}$  量级), 因此适合研究拓扑半金属体态的电子结构以及晶格振动行为. 研究拓扑半金属材料的红外光谱学性质不仅可以帮助人们更深入理解这类材料的物理性质以及发现新的物理现象, 还可以为拓扑半金属在光学领域的研究和应用奠定基础. 本文介绍了近年来上面提到的几类拓扑半金属材料的红外光谱研究的进展情况.

关键词: 红外光谱, Dirac 半金属, Weyl 半金属, Nodal-line 半金属

PACS: 78.20.-e, 78.30.-j, 78.40.Kc

DOI: 10.7498/aps.68.20191510

## 1 引言

Thouless, Haldane 和 Kosterlitz 三位美国物理学家由于在拓扑相变以及拓扑相理论方面的贡献分享了 2016 年的诺贝尔物理学奖. 拓扑材料按照费米能级附近是否存在能隙可以归类为拓扑绝缘体<sup>[1,2]</sup>和拓扑半金属<sup>[3]</sup>. 而拓扑半金属按照三维动量空间中能带的交叉与简并情况, 又可以分为 Dirac 半金属<sup>[4-6]</sup>、Weyl 半金属<sup>[7-13]</sup>和 Nodal-line 半金属<sup>[14-18]</sup>. 对于 Dirac 半金属<sup>[4-6]</sup>, 在三维动量空

间中, 自旋简并的能带在费米面附近线性交叉形成 Dirac 点. 然而, 这类 Dirac 点通常是不稳定的, 很容易打开一个能隙, 因此, Dirac 半金属需要额外的空间群对称性的保护. 目前, 已经被理论预言并实验证实的 Dirac 半金属有  $\text{Na}_3\text{Bi}$ <sup>[5,19]</sup>,  $\text{Cd}_3\text{As}_2$ <sup>[6,20]</sup>等. 在 Dirac 半金属中打破时间反演或空间反演对称性, Dirac 点劈裂成一对具有相反手性的 Weyl 点, 可以得到 Weyl 半金属<sup>[7]</sup>. Weyl 半金属展现出许多奇特的性质, 比如, 其表面态存在费米弧连接着两个具有相反手性的 Weyl 点在表面的投影<sup>[7-12]</sup>; 在平行的磁场和电场的作用下, 电子会从一个

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11874206) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: 020414380095) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ymdai@nju.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xgqiu@iphy.ac.cn

Weyl点被抽运到另一个手性相反的Weyl点, 这个现象被称为手性反常. 手性反常会导致输运上的负磁阻现象<sup>[21-23]</sup>. 理论预言并被实验证实的Weyl半金属有TaAs家族<sup>[8-12,24]</sup>, WTe<sub>2</sub><sup>[13]</sup>等. 拓扑Nodal-line半金属中线性的Dirac能带交叉形成一条线或圈<sup>[14,15]</sup>, 这不同于Dirac和Weyl半金属中能带交叉形成的点. 目前已证实的Nodal-line半金属有PbTaSe<sub>2</sub><sup>[16]</sup>, ZrSiS<sup>[17]</sup>, ZrSiSe/Te<sup>[18]</sup>以及NbAs<sub>2</sub><sup>[25]</sup>等.

迄今, 人们已经利用各种实验手段对拓扑半金属进行了详细的研究. 例如, 角分辨光电子能谱直接观测到Dirac半金属<sup>[19,20]</sup>, Weyl半金属<sup>[9,11,12,24]</sup>和nodal-line半金属<sup>[16,17]</sup>体态中的线性色散能带, 以及Weyl半金属表面态上连接两个相反手性的Weyl费米子的费米弧<sup>[9-12,24]</sup>; Weyl以及Dirac半金属中由手性反常引起的负磁阻现象也已经被电输运测量所观察到<sup>[22,23,26,27]</sup>; 光电流对圆偏振光的响应研究证明了Weyl半金属TaAs中具有手性的Weyl费米子的存在<sup>[28]</sup>; 非线性光谱研究发现Weyl半金属具有非常强的非线性效应, 主要表现为很强的二次谐波产生<sup>[29]</sup>以及THz发射<sup>[30]</sup>等. 此外, 拓扑半金属的红外光谱研究也被大量的课题组报导. 例如, Dirac半金属ZrTe<sub>5</sub><sup>[31]</sup>和Weyl半金属TaAs<sup>[32]</sup>中观测到的线性光电导被认为是Dirac

或Weyl点附近线性色散的能带导致; 对Dirac半金属ZrTe<sub>5</sub><sup>[33]</sup>, Cd<sub>3</sub>As<sub>2</sub><sup>[34]</sup>以及Weyl半金属NbAs<sup>[35]</sup>磁场中的红外光谱研究揭示了不同朗道能级之间的电子跃迁, 并通过研究这些跃迁的磁场依赖, 进一步证实了这些材料中无质量Dirac, Kane或Weyl费米子的存在; Nodal-line半金属ZrSiS<sup>[36]</sup>和NbAs<sub>2</sub><sup>[25]</sup>分别表现出不随频率变化的和随频率线性增加的光电导, 这两种行为分别代表了长度不随频率变化和长度随频率变化的Dirac nodal line的光谱特征.

本文主要回顾相关的几种拓扑半金属材料的远红外光学性质研究. 文章分为三个部分, 从第2节到第4节. 第2节介绍红外光谱测量技术, 包括傅里叶变换光谱仪的基本原理和测量绝对反射率使用的原位镀金技术; 第3节以我们近几年的工作为例, 介绍如何利用红外光谱技术对拓扑半金属材料进行研究, 其中包括Dirac半金属, Weyl半金属以及Nodal-line半金属, 并探讨光学性质研究中获得的重要信息; 最后, 第4节对本文进行总结.

## 2 光谱测量技术

光是一种电磁波, 并且有很宽的波长范围, 包括THz波、红外线、可见光、紫外线、X射线等, 其中只有可见光范围可以被人眼看到. 如图1所示,

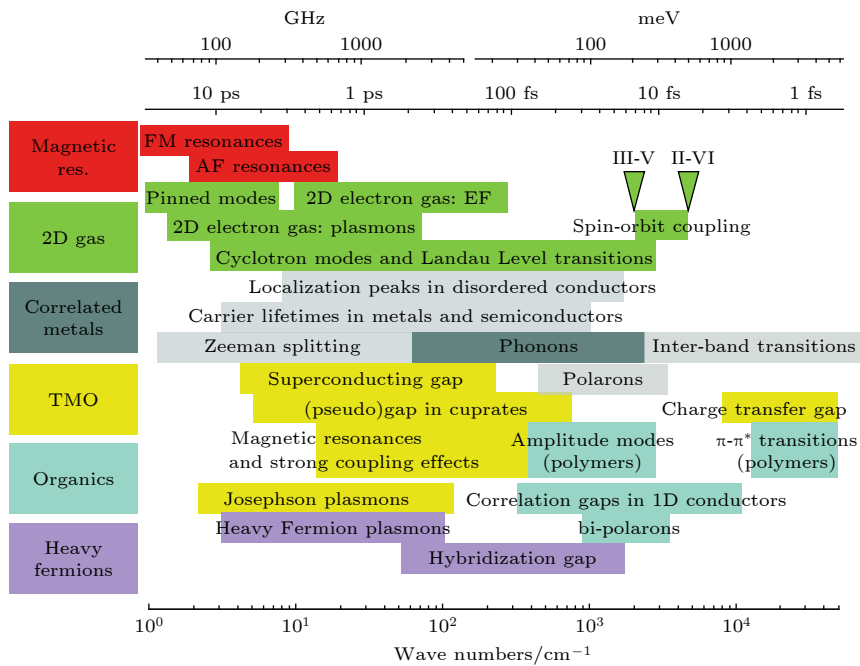


图1 固体材料中集体激发模式的特征能量<sup>[37]</sup>

Fig. 1. Characteristic energy scales of collective excitations in solids<sup>[37]</sup>.

固体材料中集体激发模式的特征能量大多分布在 meV 到几个 eV 之间. 例如: 超导材料的超导能隙一般是几个到十几个 meV; 拓扑半金属中 Dirac 或 Weyl 点附近的电子激发通常在几个到几十个 meV 的范围; 固体中晶格振动的能量大约在几个到几百个 meV; 绝缘体材料中的带隙宽度可达到几个 eV. 这相当于 THz 波到紫外线的范围, 恰好适合利用光谱技术进行研究. 因此, 光谱发展成为凝聚态物理研究的重要手段.

迄今人们已经发展出各种光谱测量技术, 包括光栅分光仪, 傅里叶变换红外光谱, 椭圆偏振光谱仪, 时域 THz 光谱, 拉曼光谱, 泵浦-探测超快光谱, 非线性光谱, 磁光克尔等. 其中光栅分光仪, 傅里叶变换红外光谱, 椭圆偏振光谱仪, 拉曼光谱等常用来研究材料中的平衡态光学特性, 例如固体材料中的带内、带间跃迁以及晶格振动; 时域 THz 光谱, 泵浦-探测超快光谱等常用来研究材料中的非平衡态过程, 比如受光激发后产生的热载流子回到平衡态的过程; 而非线性光谱, 磁光克尔等则可以得到材料中对称性破缺等重要信息, 例如二次谐波产生可以研究空间反演对称破缺的系统, 克尔旋转对应于时间反演对称破缺等. 本文只介绍傅里叶变换红外光谱及其在拓扑半金属研究中的应用.

### 2.1 傅里叶变换光谱仪

傅里叶变换光谱仪是基于迈克耳孙干涉仪设计的, 这是一种测量材料光学常数的频率依赖关系的常用手段. 由迈克耳孙干涉仪的光路示意图 (图 2) 可见, 光源发出的光在分束镜处分成强度相等的两束. 其中一束透过分束镜到达定镜, 然后被定镜反射返回分束镜; 而另外一束由分束镜反射后到达动镜, 经动镜反射后也返回分束镜. 两束返回的

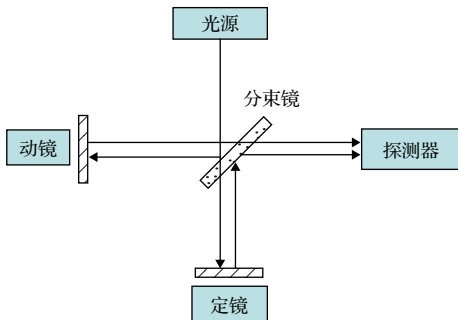


图 2 迈克耳孙干涉仪的光路示意图

Fig. 2. Schematic beam path of a Michelson interferometer.

光在分束镜处发生干涉后进入探测器.

我们以一束波长为  $\lambda$  的单色光 (例如: 激光) 为例来介绍傅里叶变换光谱仪的基本原理. 当我们改变动镜的位置时, 迈克耳孙干涉仪两臂的光程差也会发生变化. 根据光的干涉条件, 当两臂的光程差是半波长  $\lambda/2$  的偶数倍时, 两束光干涉相涨; 而当两臂的光程差是  $\lambda/2$  的奇数倍时, 两束光干涉相消. 因此, 连续改变动镜的位置, 探测器处接收到的光强会随动镜的位置而连续变化. 我们将动镜的位置用  $x$  表示, 于是可以得到一条光强和动镜位置的关系曲线, 记做  $I(x)$ . 将  $I(x)$  做傅里叶变换, 即可得到光强和频率  $\nu$  的依赖关系曲线  $I(\nu)$ .  $I(\nu)$  也被称为功率谱. 虽然这里以单色光为例来介绍基本原理, 然而对于含有各种波长的复色光, 这种方法也同样有效. 由于我们感兴趣的功率谱  $I(\nu)$  是由  $I(x)$  经过傅里叶变换而来, 因此, 这种方法被称为傅里叶变换光谱. 图 3 右侧面板展示了利用傅里叶变换光谱仪测得的  $I(x)$ ; 左侧面板是经过傅里叶变换之后得到的相应的  $I(\nu)$ .

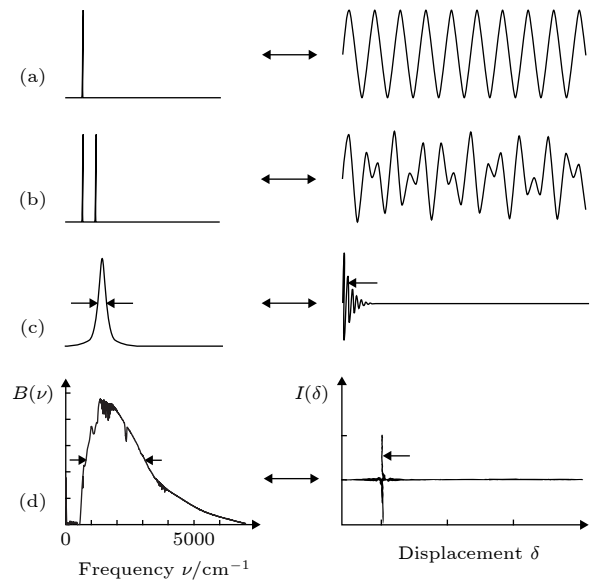


图 3 右侧表示光强随动镜位置的变化曲线  $I(x)$ ; 左侧是功率谱  $I(\nu)$ . 左侧的  $I(\nu)$  均由右侧对应的  $I(x)$  傅里叶变换得到 [38]

Fig. 3. Right panels portray the intensity as a function of the displacement of the moving mirror  $I(x)$ ; Left panels show the power spectra  $I(\nu)$ , which are calculated from  $I(x)$  through a Fourier transform [38].

### 2.2 原位镀金技术

凝聚态物理研究中使用的样品通常是单晶形式, 大部分情况下光无法透过样品, 因此, 实验中

比较可行的方法是测量其反射率. 而绝对反射率的测量需要一个反射率已知的材料作参比. 反射率比较高的金属, 比如, 金、银或铝, 通常被用来做参比. 用测得的材料相对于参比的相对反射率乘以参比的绝对反射率, 便可以得到材料的绝对反射率. 绝对反射率测量的另一个难点是要求待测样品必须大于光斑尺寸, 和参比具有相同的表面形貌, 并且样品和参比严格平行, 从而保证样品和参比反射的光经历完全相同的光路. 这些条件对于单晶样品的测量几乎无法满足, 因为单晶样品通常比较小, 并且形状不规则, 表面也可能存在解理产生的台阶, 如果使用表面平整的金镜或铝镜做参比的话, 由于样品和参比表面形貌的差异, 会产生严重的几何效应, 从而难以测得准确的绝对反射率.

Homes 等人发展的原位镀金技术解决了测量小而不规则样品的绝对反射率的难题<sup>[39]</sup>. 该技术的核心思想是先测量样品反射的信号, 然后原位在样品的表面蒸镀一层金膜, 并用这个被金膜覆盖的样品作为其自身的参比来测量绝对反射率. 利用该技术不必要求样品大于光斑尺寸, 因此可以测量较小的样品. 另外, 由于样品表面形成的金膜和样品具有完全相同的表面形貌, 这样几乎可以完全消除几何效应, 从而测得非常准确的绝对反射率.

图 4 展示了原位镀金技术测量材料绝对反射率的装置示意图. 整个系统处于  $10^{-9}$  mbar 的超高真空下. 中心处是方形的冷头, 利用液氦连续流, 温度可以降至 4.2 K. 方形冷头的两侧装有两个铜圆锥, 样品就固定在其中一个铜锥上, 这样可以保证只有样品反射的光会进入探测器. 另一个铜锥上装有不锈钢的小镜片, 作为中间参比以消除温度漂移的影响. 冷头处于表面抛光过的防辐射罩中, 可

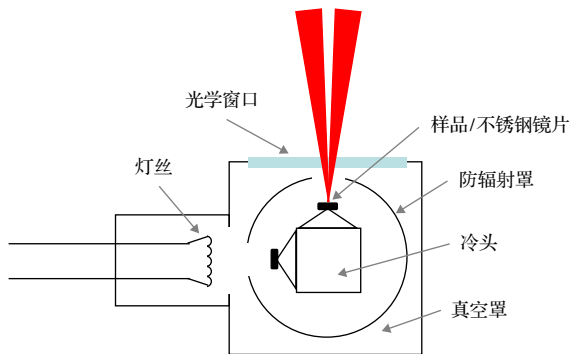


图 4 原位镀金技术测量材料绝对反射率的装置示意图  
Fig. 4. Schematic plot of the *in situ* gold evaporation system.

以有效阻止外界的辐射到达冷头, 从而使冷头可以降到最低温度. 左侧的电极上装有用 0.25 mm 直径的钨丝绕制的灯丝, 镀金使用的金丝就挂在这段灯丝上. 冷头和防辐射罩部分可以 90 度旋转而不破坏超高真空, 从而可以实现超高真空下很方便地切换样品和不锈钢镜片.

利用原位镀金技术测量材料绝对反射率的实验过程可分为以下几步: 首先分别测不锈钢镜片和样品的功率谱并相除, 得到  $I_{\text{Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)$ ; 其次, 转动样品杆, 使样品正对镀金灯丝, 给灯丝加 2 V 电压, 可以看到灯丝被点亮, 金在高温下熔化并被蒸出去, 大约 1 分钟的时间便可以在样品的表面形成一层微米厚度的金膜; 然后, 测不锈钢镜片和被金膜覆盖的样品的功率谱并相除, 得到  $I_{\text{Coated Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)$ ; 最后, 样品的绝对反射率可以如下计算得到:

$$R_{\text{Sam}}(\omega) = \frac{I_{\text{Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)}{I_{\text{Coated Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)} \times R_{\text{gold}}(\omega). \quad (1)$$

图 5 是用原位镀金技术测量  $\text{YbMnSb}_2$  产生的远红外波段的数据. 粉色的曲线和蓝色的曲线分别表示  $I_{\text{Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)$  和  $I_{\text{Coated Sam}}(\omega)/I_{\text{Mirror}}(\omega)$ , 红色曲线是两者相除得到的  $\text{YbMnSb}_2$  的绝对反射率.

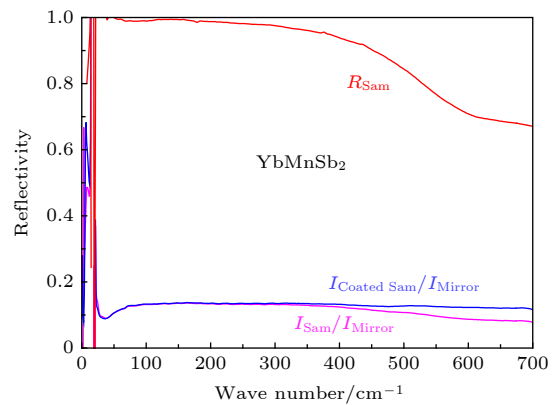


图 5 利用原位镀金技术测量的  $\text{YbMnSb}_2$  的绝对反射率以及原始数据

Fig. 5. Reflectivity and raw data of  $\text{YbMnSb}_2$  measured using the *in situ* gold evaporation technique.

### 2.3 光电导谱和 Kramers-Kronig 关系

在凝聚态物理研究中, 人们通常对光电导的实部  $\sigma_1(\omega)$  更感兴趣, 因为  $\sigma_1(\omega)$  可以直接表示为联合态密度的函数:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^2 \omega} |p_{s's}(\omega)|^2 D_{s's}(\omega), \quad (2)$$

其中,  $D_{s's}(\omega)$  表示联合态密度;  $p_{s's}(\omega)$  表示  $s$  和  $s'$  态之间的电偶极子跃迁矩阵元. 这个公式通常被称为 Kubo-Greenwood 公式<sup>[40]</sup>.

材料的光学响应函数都是复函数, 由实部 (幅值) 和虚部 (相位) 组成. 我们实验测量得到的绝对反射率  $R(\omega)$  是复反射率函数的幅值, 同时, 复反射率函数还需要一个相位  $\phi_r(\omega)$  才能完全描述. Kramers 和 Kronig 通过研究光学常数的实部和虚部之间的关系, 发现它们都不是彼此独立的, 而是存在一系列的重要关系将实部和虚部联系在一起, 这些关系基于因果律, 被称为 Kramers-Kronig 关系或 KK 关系.  $R(\omega)$  和  $\phi_r(\omega)$  的 KK 关系在傅里叶变换光谱中最常用, 其表达式如下:

$$\phi_r(\omega) = -\frac{\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\ln R(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (3)$$

由该表达式可以看出, 如果在很宽的频率范围内测得  $R(\omega)$ , 再加上适当的低频和高频的外推, 就可以计算出  $\phi_r(\omega)$ . 如果同时获得了某个光学响应函数的实部和虚部, 就可以通过简单的关系式计算出所有的光学响应函数, 比如光电导的实部  $\sigma_1(\omega)$  和虚部  $\sigma_2(\omega)$ , 介电函数的实部  $\epsilon_1(\omega)$  和虚部  $\epsilon_2(\omega)$  等等.

### 3 几种拓扑半金属的红外光谱研究

目前已经存在大量拓扑半金属的红外光谱研究. 例如, 典型的 Dirac 半金属  $\text{Cd}_3\text{As}_2$ <sup>[34,41]</sup>,  $\text{Na}_3\text{Bi}$ <sup>[41]</sup> 以及  $\text{ZrTe}_5$ <sup>[31,33,42,43]</sup>, Weyl 半金属 TaAs 家族<sup>[44,45]</sup> 以及第二类 Weyl 半金属  $\text{WTe}_2$ <sup>[46]</sup>, Nodal-line 半金属  $\text{ZrSiS}$ <sup>[36]</sup> 和  $\text{NbAs}_2$ <sup>[25]</sup> 等. 这些研究揭示了拓扑半金属中许多特有的光学响应. 本部分以我们近期的工作为例, 重点介绍 Dirac 半金属  $\text{ZrTe}_5$ , Weyl 半金属 TaAs 以及新发现的 Nodal-line 半金属  $\text{YbMnSb}_2$  的红外光谱研究.

#### 3.1 $\text{ZrTe}_5$ 中温度驱动的拓扑相变

过渡金属五碲化合物  $\text{ZrTe}_5$  是一种具有二维层状结构特点的 van der Waals 材料. 它最初由于具有大的热电势作为热电材料被大家广泛研究, 而最近由于其新奇的拓扑性质大家对它的研究兴趣又被重新点燃. 理论研究表明<sup>[8]</sup>, 单层  $\text{ZrTe}_5$  是一种具有大能隙的良好量子自旋霍尔绝缘体. 对于块

体材料,  $\text{ZrTe}_5$  的拓扑性质则被认为是可以处于强拓扑绝缘体和弱拓扑绝缘体之间. 强和弱拓扑绝缘体都具有拓扑非平庸性, 两者的区别在于表面态的不同. 弱拓扑绝缘体类似于用二维拓扑绝缘体一层一层堆叠起来的拓扑相, 其拓扑立方体无能隙的拓扑表面态只有周围的四个面, 而顶面和底面是绝缘的. 不同于弱拓扑绝缘体, 强拓扑绝缘体所有的表面都是具有非平庸拓扑表面态的. 值得注意的是, 据预测这种强-弱拓扑绝缘态之间的转变可以通过晶格参数的微小变化来诱导, 例如, 改变温度或施加压力. 这样的拓扑相变也必然涉及到能带的翻转, 因此在能隙闭合的中间态会伴随一个 Dirac 半金属态的出现. 因而关于  $\text{ZrTe}_5$  体材料的拓扑本质其究竟是拓扑绝缘体还是 Dirac 半金属目前尚没有定论. 同时,  $\text{ZrTe}_5$  的上述性质也使其成为一个研究拓扑相变的优秀平台.

在先前的实验研究中, 针对  $\text{ZrTe}_5$  的输运和角分辨光电子能谱测量表明该材料是属于三维 Dirac 半金属. 随后的红外光谱测量也表明该材料具有三维 Dirac 半金属的光谱特征. 对于三维 Dirac 半金属材料, 由于其具有线性能带色散的特性, 它的带间跃迁响应在光电导谱上则体现为光电导随频率线性增加的行为, 具体依赖关系为  $\sigma_1(\omega) = \frac{NG_0}{24} \frac{\omega}{v_F}$ , 其中  $N$  是 Weyl 节点个数,  $G_0$  是量子电导,  $v_F$  是费米速度. 如图 6(a) 所示, Chen 等人的红外光谱测量发现  $\text{ZrTe}_5$  的光电导在较宽的能量区间都表现出随频率线性增加的行为<sup>[31]</sup>, 而这种特征也恰恰是我们上面提到的三维 Dirac 半金属材料的标志性行为. 随后, Chen 等人进行了磁场下的红外光谱测量<sup>[33]</sup>. 他们从反射光谱上明确观察到磁场诱导的朗道能级之间的跃迁. 这些跃迁的能量依次满足  $1 : (1 + \sqrt{2}) : (\sqrt{2} + \sqrt{3}) : \dots$  的比例, 并且低场时与场强的平方根成正比, 如图 6(b) 所示. 这些特征无疑是无质量 Dirac 费米子的证据, 进一步表明  $\text{ZrTe}_5$  属于三维 Dirac 半金属材料.

然而, 正如理论预测表明  $\text{ZrTe}_5$  的拓扑性质对具体的晶格参数和样品的干净程度非常敏感, 因此后续的实验在  $\text{ZrTe}_5$  的拓扑本质上表现出很多的争议. 比如最近的扫描隧道谱研究发现  $\text{ZrTe}_5$  具有 80—100 meV 的体能隙, 而且可以把它归为弱的拓扑绝缘体一类<sup>[47]</sup>. 另一方面, 最近高精度的角分辨光电子能谱实验揭示了  $\text{ZrTe}_5$  表面态的金属

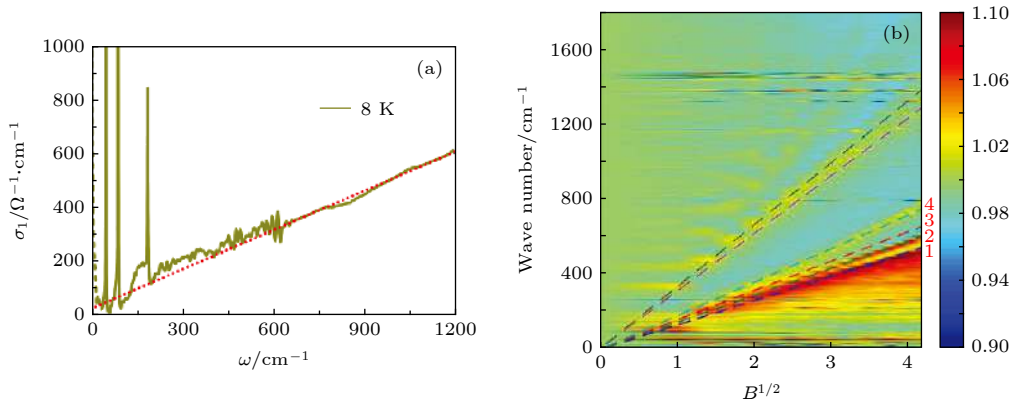


图 6 (a) ZrTe<sub>5</sub> 在 8 K 时的光电导谱. 红色虚线对应为数据的线性拟合. (b) 波数和场强平方根标度下的相对反射率. 虚线对应为峰值的线性拟合 [31,33]

Fig. 6. (a) The optical conductivity of ZrTe<sub>5</sub> at 8 K. The red dotted line is the linear fitting of  $\sigma_1(\omega)$ . (b) The pseudocolor photograph of the and relative reflectivity  $R(B)/R(0)$  as functions of wave number and  $\sqrt{B}$ . The dashed lines are linear fittings of the peak energies dependent on  $\sqrt{B}$  [31,33].

特性, 因此表明 ZrTe<sub>5</sub> 是强拓扑绝缘体一类 [48]. 对于解决 ZrTe<sub>5</sub> 的拓扑本质争议, 一个重要的线索来自最近的磁输运测量, 它表明一个拓扑相变可能发生在电阻峰对应的温度, 而这个电阻峰温度 ( $T_p$ ) 具有很强的样品依赖, 可以在 10—160 K 之间变化.

为了研究这样一个温度依赖的拓扑相变, 我们在一个具有足够高的  $T_p$  温度的 ZrTe<sub>5</sub> 单晶上进行了详细的温度依赖的红外光谱测量 [42]. 图 7(b) 是利用红外光谱得到的能隙随温度的变化, 这个结

果表明能隙随温度改变是一个逐渐闭合然后再打开的行为. 这正是拓扑相变对应的能带闭合翻转的过程, 因此表明 ZrTe<sub>5</sub> 经历了一个温度驱动的拓扑相变. 能隙闭合的状态刚好与电阻峰温度  $T_p$  重合, 并且显示了三维 Dirac 半金属的特性, 即光电导随频率线性增加并且低频外推通过原点, 如图 7(a) 所示. 这样的温度驱动的拓扑相变和理论预测是相一致的, 其预测为一个强-弱拓扑绝缘体转变可以通过晶格参数的微小变化来诱导. 因此, 考虑到  $T_p$  温度在不同 ZrTe<sub>5</sub> 样品中的变化, 其拓扑性质在不同实验中的不同表现也就可以被调和了.

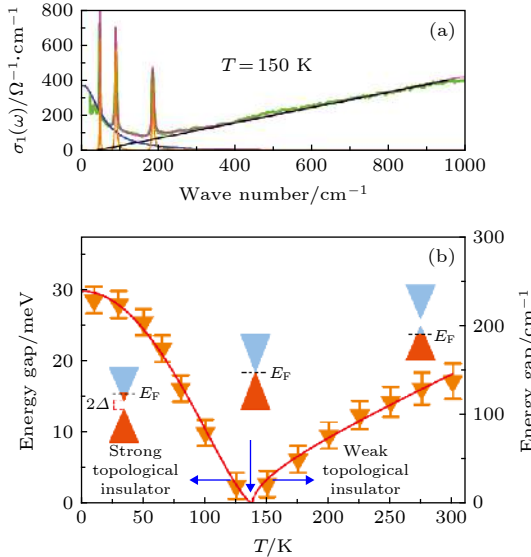


图 7 (a) ZrTe<sub>5</sub> 在 150 K 时的光电导谱以及相应的数据拟合. (b) 温度依赖的能隙值 [42]

Fig. 7. (a) Fit of  $\sigma_1(\omega)$  at 150 K. Thin solid lines represent the Drude (blue), phonon modes (orange), and interband (black) terms. (b) Experimentally obtained value of the band gap for ZrTe<sub>5</sub> at different temperatures [42].

### 3.2 Weyl 半金属 TaAs 中 Weyl 费米子的光学特征

三维 Weyl 半金属是一种新型拓扑量子材料, 其体态电子可以用无质量的手性 Weyl 方程来描述. Weyl 半金属在体态和表面态上都展现出许多有趣的特性 [7,49]. 在体态中, 自旋非简并的能带在费米面附近线性交叉, 这些交叉点被称为 Weyl 点. Weyl 点具有手性, 而且必须相反手性的 Weyl 点成对出现. 表面态的典型特征是费米弧, 每条费米弧连接着两个相反手性的 Weyl 点在表面态上的投影. 另外, Weyl 半金属在平行的磁场和电场共同的作用下, 还会出现电子从一个手性的 Weyl 点被抽运到另一个具有相反手性的 Weyl 点上, 这个现象叫做手性反常 [21,50,51]. 手性反常会导致很大的负磁阻出现 [21].

要获得 Weyl 半金属, 需要在晶体中打破时间

反演对称性或空间反演对称性<sup>[7]</sup>. 2015年, Weng等人<sup>[52]</sup>通过理论计算提出 TaAs, TaP, NbAs 和 NbP 等不具有空间反演对称性的材料是 Weyl 半金属. 他们的理论方案表明这一系列 TaAs 家族材料能自然合成, 无需进行掺杂等细致繁复的调控. 更重要的是, 这类材料没有中心反演但保持时间反演对称, 因此没有磁性材料带来的复杂性, 使得在实验上来研究 Weyl 半金属态成为可能. 正因如此, 随后许多研究组迅速开展了实验工作, 很快角分辨光电子能谱研究发现了 TaAs 和 NbAs 体内的三维 Weyl 点以及表面态的费米弧<sup>[9-12,24]</sup>. 手性反常所导致的负磁阻现象也被观测到<sup>[22,23]</sup>. Weyl 半金属在 TaAs 家族中的发现具有重要的科学和技术意义. 它不仅为我们研究 Weyl 半金属态提供了合适的平台, 而且由于其独特的量子输运特性, 也使得其为未来新型电子器件的应用提供了可能的材料基础.

理论预测表明 Weyl 半金属态也会引起一些有趣的光学响应<sup>[53]</sup>. Weyl 点附近的带间跃迁导致的光电导谱可以由下式描述,

$$\sigma_1(\omega) = \frac{NG_0\omega}{24v_F} \Theta(\omega - 2|\mu|), \quad (4)$$

其中,  $N$  表示 Weyl 点的数量,  $G_0$  表示量子电导,  $v_F$  是费米速度,  $\mu$  表示化学势. 这个方程表明, Weyl 点附近的带间跃迁导致的光电导随频率是线性变化的, 并且这个线性的光电导低频外延至原点, 这和 Dirac 半金属的性质是完全相同的. 另一个特征是随频率线性变化的光电导终止于  $\omega = 2|\mu|$  处, 低于这个频率时, 光电导骤降至零, 从而在  $\omega = 2|\mu|$  形成一个台阶. 此外, 理论预言 Weyl 半金属的费米面表现出很强的温度依赖, 从而导致光电导谱上的 Drude 分量的谱重随  $T^2$  变化.

为了从实验上验证 Weyl 半金属的这些光学性质, 我们在 TaAs 单晶中进行了详细的红外光谱测量<sup>[32]</sup>. 图 8 蓝色的实心三角形是从测量的光电导谱得到的 Drude 分量的谱重随温度的变化. 可见其随温度的降低而逐渐减小, 并且很好的符合  $T^2$  关系 (红色实线), 这与理论预言的 Weyl 半金属中 Drude 分量的谱重和温度的依赖关系完全相符.

为了进一步探索 Weyl 半金属的光学特性, 图 9 展示了 TaAs 在  $T = 5$  K 的光电导谱, 其表现出两段明显的线性特征, 这也是理论预言的 Weyl 半金属的典型光学响应. TaAs 具有两类不同的 Weyl 点, 一类是 W1, 共有 4 对, 在  $k_z = 0$  的平面内, 费

米能级以上 2 meV; 另一类是 W2, 共有 8 对, 不在  $k_z = 0$  平面, 处于费米能级以下约 21 meV. 由于 Weyl 点附近的带间跃迁在  $2|\mu|$  以上才会产生, W2 附近的带间跃迁在  $\omega < 42$  meV ( $336$  cm<sup>-1</sup>) 是不存在的, 因此, 我们可以断定低能的线性光电导是由 W1 附近的带间跃迁产生, 而高能部分的线性光电导响应则包括所有 Weyl 节点以及其他平庸能带的贡献.

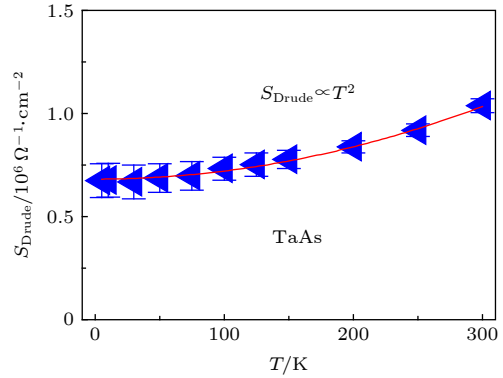


图 8 TaAs 光电导谱上的 Drude 分量谱重随温度的变换<sup>[32]</sup>  
Fig. 8. Drude weight as a function of temperature for TaAs<sup>[32]</sup>.

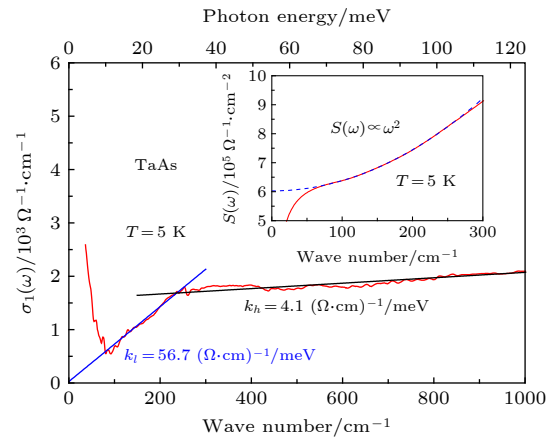


图 9 TaAs 在 5 K 时的光电导谱. 蓝线和红线代表两个不同能量范围内的线性. 插图是对应的频率依赖的谱重, 如蓝色虚线所示, 它遵循频率的平方依赖关系<sup>[32]</sup>  
Fig. 9. Optical conductivity for TaAs at 5 K. The blue and black solid lines through the data are linear guides to the eye. The inset shows the spectral weight as a function of frequency at 5 K (red solid curve), which follows an  $\omega^2$  behavior (blue dashed line)<sup>[32]</sup>.

### 3.3 Weyl 半金属 TaAs 中 Weyl 费米子与声子的耦合

关于 TaAs 的理论和实验结果都表明 Weyl 节点非常靠近费米面, 因此 Weyl 费米子相关的带间



跃迁可以发生在很低的能量范围. 这个能量和红外活性声子的能量范围交叠, 因此 Weyl 费米子和声子之间可能发生很强的耦合作用. 而两者之间如果存在比较强的耦合作用就会导致声子线型变得不对称, 也就是所谓的 Fano 共振. Fano 共振在双层或多层石墨烯<sup>[54-56]</sup>, 拓扑绝缘体<sup>[57,58]</sup>, 以及一些强关联体系<sup>[44,59]</sup>中被观测到过. TaAs 中如果声子和 Weyl 费米子的耦合引起 Fano 共振, 我们不仅可以研究声子的行为了解到更多 Weyl 费米子的信息, 还可以通过调制 Weyl 费米子来调控声子的线型和线宽等.

图 10(a) 是 TaAs 的 (107) 面测得的不同温度的反射率谱, 我们注意到  $253 \text{ cm}^{-1}$  附近有一个尖锐的特征, 反射率上的尖锐特征通常是红外活性的

声子. 这个特征在 (112) 面也可以观测到, 而在 (001) 面消失, 通过对称性分析以及与理论计算相比较, 可以得知这是 TaAs 的  $A_1$  声子模式, 振动方向在  $c$  方向. 为了进一步研究这个声子模式, 我们利用 KK 关系计算得到了 TaAs 不同温度的光电导谱, 如图 10(b) 所示. 光电导谱上的红外活性的声子表现为一个尖峰. 通过研究这个尖峰的共振频率、线型、线宽等可以获得更多的信息.

图 11(a) 是扣除电子背景之后的  $A_1$  声子的线型. 有趣的是该声子在高温 (300 K) 表现出对称的 Lorentz 线型, 而随着温度的降低, 线型逐渐变的不对称. 在 5 K 表现出非常明显的不对称的 Fano 线型. 这说明该  $A_1$  声子和材料中某种连续的电子激发存在很强的耦合. 为了定性研究声子的线

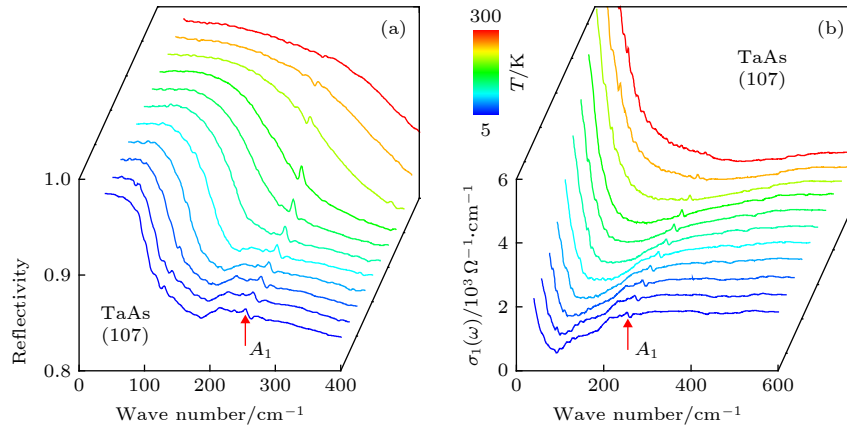


图 10 (a) TaAs (107) 面测得的不同温度的反射率. (b) TaAs (107) 面的不同温度的光电导谱<sup>[45]</sup>

Fig. 10. (a) Reflectivity of TaAs (107) surface at different temperatures. (b) Optical conductivity of TaAs (107) surface at different temperatures<sup>[45]</sup>.

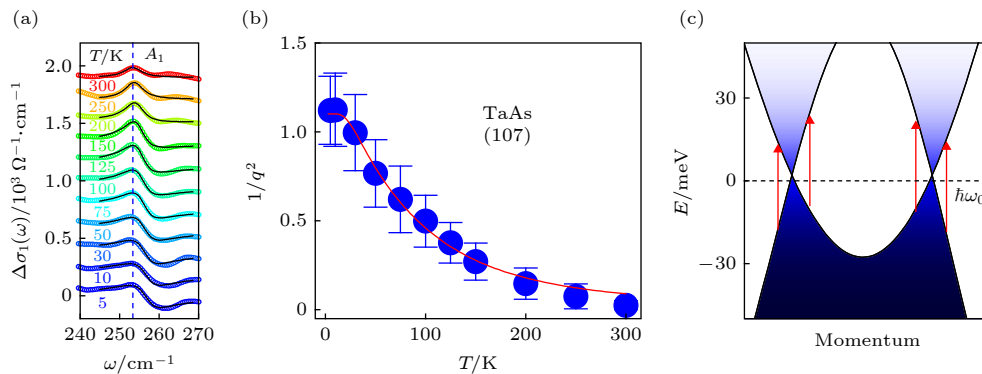


图 11 (a) 不同温度下的  $A_1$  声子线型. 黑线是对应的 Fano 拟合结果. (b) Fano 参数  $1/q^2$  的温度依赖关系. 红线是基于模型的拟合结果. (c) Weyl 节点附近的能带结构. 红色箭头代表为声子能量大小的带间跃迁<sup>[45]</sup>

Fig. 11. (a) Line shape of the  $A_1$  phonon at different temperatures. The black solid lines through the data denote the Fano fitting results. (b) Temperature dependence of the Fano parameter  $1/q^2$ . The red solid line through the data represents the modelling result. (c) Band structure near the Weyl points W1 in TaAs. The red arrows represent the electronic transitions at the energy of the  $A_1$  mode  $\hbar\omega_0$ <sup>[45]</sup>.

型, 我们利用以下的 Fano 线型对该声子进行了拟合.

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi \Omega^2}{Z_0} \frac{q^2 + \frac{4q(\omega - \omega_0)}{\gamma} - 1}{\gamma \left( q^2 \left( 1 + \frac{4(\omega - \omega_0)^2}{\gamma^2} \right) \right)}, \quad (5)$$

这里  $Z_0$  是真空电导率,  $\omega_0$ ,  $\Omega$  和  $\gamma$  分别表示共振频率, 强度和共振线宽; 线型的不对称度由无量纲参量  $1/q^2$  描述.  $1/q^2$  越大表示线型的不对称度越大. 当  $1/q^2 = 0$  时, Fano 线型变成对称的 Lorentz 线型. 图 11(a) 中的黑色实线是 Fano 拟合的结果, 通过拟合 我们可以得到  $1/q^2$  的温度依赖, 如图 11(b) 中蓝色实心圆所示.  $1/q^2$  随温度的降低而增大, 准确的描述了  $A_1$  声子随温度的降低线型变的明显不对称的行为.  $A_1$  声子的能量大约是 31.6 meV, 而 W2 附近的电子跃迁高于 42 meV 才会发生, 说明  $A_1$  声子不可能和 W2 发生耦合. W1 附近的电子跃迁高于 4 meV 即可发生, 和  $A_1$  声子模式的能量正好交叠, 这说明 TaAs 中 W1 与  $A_1$  声子有很强的耦合.

为了进一步理解  $1/q^2$  的温度依赖, 图 11(c) 给出了 W1 的能带图. 图中红色箭头表示  $A_1$  声子能量 ( $\hbar\omega_0$ ) 处的电子跃迁, 蓝色的深浅表示由费米-狄拉克统计计算出来的 150 K 时电子态占据几率. 声子线型的不对称度和声子能量处的电子跃迁强度正相关. 在低温下, 费米面以下的电子态都是占据的, 而费米面以上的态都是空的, 能量处于  $\hbar\omega_0$  的电子跃迁比较强, 因此声子线型不对称度较高,  $1/q^2$  较大. 随着温度的升高, 由于热激发, 费米面以下出现空态而费米面以上的部分电子态被占据, 使得能量处于  $\hbar\omega_0$  的电子跃迁被压制, 因此, 声子线型逐渐向对称的 Lorentz 线型演化,  $1/q^2$  降低. 图 11(b) 中的红色实线是理论计算的结果, 和实验符合很好, 也证明了 TaAs 中 W1 与  $A_1$  声子有很强的耦合. 外尔费米子和声子之间这样的耦合机制也可以为研究外尔半金属的新奇量子特性提供新的有效途径.

### 3.4 Nodal-line 半金属 YbMnSb<sub>2</sub> 的光学特征

在寻找时间反演对称破缺的 Weyl 半金属过程中, YbMnBi<sub>2</sub> 吸引了科学家大量的注意. 该材料具有反铁磁序, 但由于 Mn 原子的磁矩存在向面外

的倾斜, 造成了时间反演对称性的破缺, 因此可能是时间反演对称破缺的 Weyl 半金属. 角分辨光电子能谱的结果在该材料中发现了体态中的 Weyl 点以及表面态中的费米弧, 证明该材料是时间反演对称破缺的第二类 Weyl 半金属<sup>[60]</sup>. 红外光谱的研究也观察到 Weyl 费米子的线性光电导响应<sup>[61]</sup>. 然而, Armitage 小组理论计算与红外光谱相结合却得到了完全不同的结论: YbMnBi<sub>2</sub> 只是强自旋轨道耦合的磁性半金属, 而体态中不存在 Weyl 点<sup>[62]</sup>.

YbMnBi<sub>2</sub> 姊妹化合物 YbMnSb<sub>2</sub> 相对研究的少一些. 和 Bi 原子相比, Sb 原子质量小一些, 引起的自旋轨道耦合 (SOC) 相对较弱一点, 在费米面上不容易打开 SOC 能隙, 因此可能更容易形成 Dirac 或 Weyl 点. 最近的量子振荡实验已经得到了 YbMnSb<sub>2</sub> 中存在 Dirac 费米子的证据<sup>[63]</sup>. 角分辨光电子能谱、电子输运以及量子振荡的综合研究也发现了 YbMnSb<sub>2</sub> 中的 Dirac 色散能带. 然而, 其拓扑属性仍然不清楚. 我们利用红外光谱对该材料进行了研究, 并结合理论计算, 证明该材料是 Dirac nodal-line 半金属<sup>[64]</sup>.

图 12 是 YbMnSb<sub>2</sub> 在  $T = 7$  K 的光电导谱, 低频有明显的 Drude 峰, 体现了该材料的金属性. 光电导谱上的一个非常显著的特征是 200 至 500  $\text{cm}^{-1}$  范围出现一个平台, 即不随频率变化的光电导. 计算光电导谱的积分  $S(\omega) = \int_0^\omega \sigma_1(\omega') d\omega'$  得到插图中的蓝色曲线, 可见  $S(\omega)$  在 200 至 500  $\text{cm}^{-1}$  范围

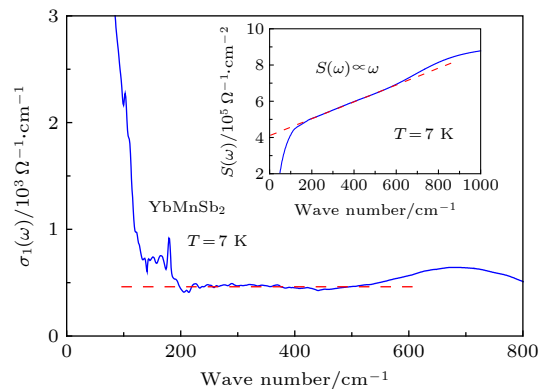


图 12 YbMnSb<sub>2</sub> 在 7 K 时的光电导谱. 红色实线示意了恒定光电导. 插图为随频率变化的光电导谱重, 其中红色虚线表明谱重在 200—500  $\text{cm}^{-1}$  范围内随  $\omega$  线性增加<sup>[64]</sup>.

Fig. 12.  $\sigma_1(\omega)$  for YbMnSb<sub>2</sub> at 7 K. The red dashed line through the data is constant guide to the eye. The blue solid curve in the inset displays the spectral weight as a function of frequency at 7 K, which follows an  $\omega$  behavior (red dashed line)<sup>[64]</sup>.

随频率线性增加, 图中红色虚线是线性拟合结果. 这里随频率线性增加的  $S(\omega)$  也说明不随频率变化的光电导行为的出现. 带间跃迁贡献的光电导和频率的依赖关系可以由下式给出<sup>[65]</sup>:

$$\sigma_1(\omega) \propto \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^{(d-2)/z}, \quad (6)$$

其中  $d$  和  $z$  分别表示系统的维度和能带色散的指数. 对于具有线性能带色散的二维材料  $d = 2$ ,  $z = 1$ , 比如石墨烯, 光电导表现出不随频率变化的行为<sup>[66]</sup>.  $\text{YbMnSb}_2$  具有很强的二维性, 其表现出来的不随频率变化的光电导说明该材料中存在线性的 Dirac 色散.

为了进一步理解  $\text{YbMnSb}_2$  的拓扑性质, 我们进行了理论计算. 图 13(a) 展示了  $\text{YbMnSb}_2$  在考虑 G 型反铁磁序和自旋轨道耦合作用下的能带图. 在费米能级附近, 大部分电子态都来自于 YbSb 层的 Sb  $p_{x/y}$  轨道. 由于晶体对称性, 低能的电子态分布沿着  $\Gamma \sim X$  和  $\Gamma \sim Y$  是非常相似的. 很明显, 沿着  $\Gamma \sim X$ ,  $\Gamma \sim Y$  和  $\Gamma \sim M$  方向, 有三个类似 Dirac 锥状电子态分布, 并在图中分别标记为 #1, #2 和 #3. 虽然  $\text{AMnSb}_2$  体系由于自旋轨道耦合, 会使得 Dirac 点打开一个能隙, 但在  $\text{YbMnSb}_2$  中, 由于自旋轨道耦合很弱, 我们观察到自旋轨道耦合打开的能隙只有大约 10 meV. 而这三个狄拉克锥状分布的电子态, 足以让我们怀疑在  $\text{YbMnSb}_2$  中是存在 Dirac nodal line 的.

为了证明在  $\text{YbMnSb}_2$  中存在 Dirac nodal line 的特殊能带分布, 我们随机选了其他两个方向, 计算了其能带结构. 如图 13(b) 和图 13(c), 分别展示了从  $\Gamma$  出发到  $X_1 = (1, 0.2, 0)$  和  $X_2 = (1, 0.5, 0)$  方向的能带图, 很明显在这两个方向上也存在 Dirac 点的分布. 结合光电导中观察到的不随频率依赖的光电导, 我们能充分的认为在  $\text{YbMnSb}_2$  中是存在 Dirac nodal line 的分布. 理论模拟给出了图 13(d) 来简单示意  $\text{YbMnSb}_2$  的三维能带分布. 中间由蓝色、红色和深红色组成的线段代表 Dirac nodal line.

最后, 我们需要注意, 在 Nodal-line 半金属中观察到的不随频率变化的光电导和石墨烯中具有不同的数值. 石墨烯中不随频率变化的光电导  $\sigma_1(\omega) = \pi G_0/4$ <sup>[66]</sup>, 其中  $G_0 = 2e^2/h$  为量子电导. 而对于 Nodal-line 半金属, 圆形的 nodal line 导致的不随频率变化的光电导由下式给出<sup>[36,67]</sup>

$$\sigma_1(\omega) = \sigma_{\text{flat}} = \frac{e^2 k_0}{16\hbar}, \quad (7)$$

其中,  $k_0$  表示 nodal line 在布里渊区中的长度. 这里假设圆形的 nodal line 形成的平面和光的电场分量垂直, 并且没有粒子-空穴非对称. 在  $\text{YbMnSb}_2$  中, nodal line 并不是圆形的, 而是不规则的. 由于 nodal line 形状的复杂性, 我们无法有效的利用 (7) 式对  $\text{YbMnSb}_2$  中不随频率变化的光电导的数值进行估算.

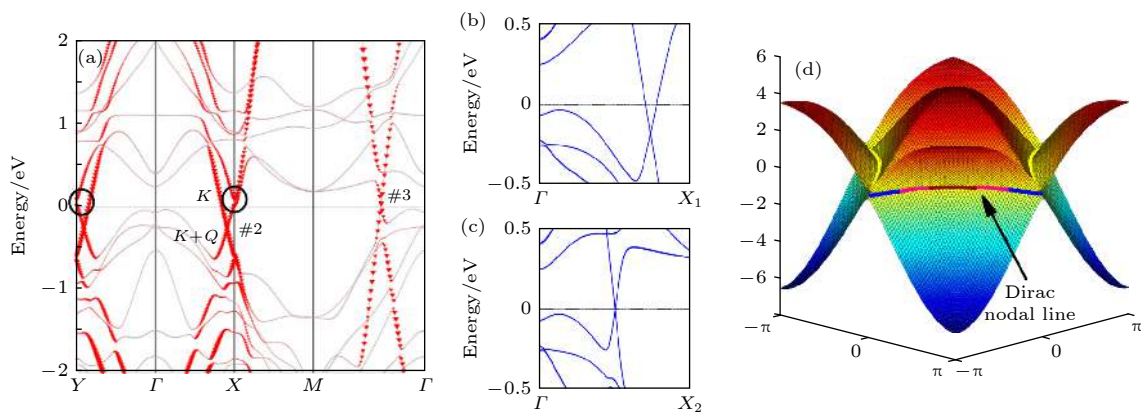


图 13 (a) 为考虑 G 型反铁磁序和自旋轨道耦合作用的  $\text{YbMnSb}_2$  能带分布图. 红色部分主要是  $\text{Sb}_1$  原子的  $p_{x/y}$  轨道电子. (b) 和 (c) 分别为从  $\Gamma$  到任意两个点  $X_1$  和  $X_2$  ( $M-X$  上) 的电子态分布. (d) 为  $\text{YbMnSb}_2$  在 Dirac nodal line 部分的三维能带分布示意图<sup>[64]</sup>.

Fig. 13. (a) Calculated band structure of  $\text{YbMnSb}_2$  with spin-orbital coupling in the G-type antiferromagnetic order. The red color denotes the  $p_{x/y}$  orbitals of  $\text{Sb}_1$  atom. The electronic structure from  $\Gamma$  to the two representative points  $X_1$  (b) and  $X_2$  (c) along  $M \sim X$ . (d) The sketch shows three-dimensional band structures of  $\text{YbMnSb}_2$  for the Dirac nodal-line<sup>[64]</sup>.

## 4 结 论

本文首先介绍了傅里叶变换光谱的基本原理和实验技巧, 然后以我们近几年的工作为主介绍了几种拓扑半金属的红外光谱研究. 我们在  $\text{ZrTe}_5$  中发现了随着温度的降低能隙先关闭再重新打开的过程, 这个过程体现了一个温度驱动从弱拓扑绝缘体, 到中间态的拓扑 Dirac 半金属, 再到强拓扑绝缘体的拓扑相变. 对 Weyl 半金属 TaAs 的红外光谱研究揭示了两段随频率线性变化的光电导, 通过和理论计算的能带结构对比, 我们发现低能段的线性光电导是 TaAs 中距离费米面较近的一类 Weyl 点附近的带间跃迁贡献, 而高能段的线性光电导则来自于所有的 Weyl 点和拓扑平庸带的贡献. 此外, TaAs 中红外活性的  $A_1$  声子模式低温表现出很强的 Fano 共振, 并且声子线型的不对称度随着温度的变化而剧烈改变, 这些现象清楚地展现了 TaAs 中 Weyl 费米子和声子的耦合效应. 最后, 对  $\text{YbMnSb}_2$  的红外光谱研究揭示了一段不随频率变化的恒定光电导, 表明该材料中存在线性的 Dirac 色散. 进一步的理论计算表明,  $\text{YbMnSb}_2$  是一个 Dirac nodal line 半金属. 这些研究表明红外光谱在拓扑半金属研究中是一种非常有用的技术手段, 可以得到这些材料中的很多信息. 同时, 这些研究结果也为将来拓扑半金属的光学响应研究 (例如超快光谱, 非线性光谱等) 提供了重要资料.

感谢中国科学院物理研究所的翁红明研究员、胡江平研究员、勒聪聪博士、瑞士 Fribourg 大学的 Christian Bernhard 的讨论, 以及中国科学院物理研究所的陈根富研究员和赵凌霄博士提供高质量单晶.

## 参考文献

[1] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045  
 [2] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057  
 [3] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015001  
 [4] Young S M, Zaheer S, Teo J C Y, Kane C L, Mele E J, Rappe A M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 140405  
 [5] Wang Z J, Sun Y, Chen X Q, Franchini C, Xu G, Weng H M, Dai X, Fang Z 2012 *Phys. Rev. B* **85** 195320  
 [6] Wang Z J, Weng H M, Fang Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 125427  
 [7] Wan X G, Turner A M, Vishwanath A, Savrasov S Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205101  
 [8] Weng H M, Dai X, Fang Z 2014 *Phys. Rev. X* **4** 011002

[9] Xu, S Y, Belopolski I, Alidoust N 2015 *Science* **349** 613  
 [10] Lv B Q, Weng H M, Fu B B, et al. 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031013  
 [11] Lv B Q, Xu N, Weng H M et al. 2015 *Nat Phys* **11** 724  
 [12] Xu S Y, Alidoust N, Belopolski I, et al. 2015 *Nat Phys* **11** 748  
 [13] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z J, et al. 2015 *Nature* **527** 495  
 [14] Burkov A A, Hook M D, Balents L 2011 *Phys. Rev. B* **84** 235126  
 [15] Fang C, Chen Y G, Kee H Y, Fu L 2015 *Phys. Rev. B* **92** 081201  
 [16] Bian G, Chang T R, Sankar R, et al. 2016 *Nat Commun* **7** 10556  
 [17] Neupane M, Belopolski I, Mofazzel M, et al. 2016 *Phys. Rev. B* **93** 201104  
 [18] Hu J, Tang Z J, Liu J Y, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 016602  
 [19] Liu Z K, Zhou B, Zhang Y, et al. 2014 *Science* **343** 864  
 [20] Borisenko S, Gibson Q, Evtushinsky D, et al. 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 027603  
 [21] Son D T, Spivak B Z 2013 *Phys. Rev. B* **88** 104412  
 [22] Huang X C, Zhao L X, Long Y J, et al. 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031023  
 [23] Zhang C L, Xu S Y, Belopolski I, et al. 2016 *Nat. Commun.* **7** 10735  
 [24] Yang L X, Liu Z K, Sun Y et al. 2015 *Nat Phys* **11** 728  
 [25] Shao Y M, Sun Z Y, Wang Y, et al. 2019 *Proceedings of the National Academy of Sciences* **116** 1168  
 [26] Li Q, Kharzeev D E, Zhang C, et al. 2016 *Nat Phys* **12** 550  
 [27] Xiong J, Kushwaha S K, Liang T, et al. 2015 *Science*  
 [28] Qiong M, Xu S Y, Chan C K, et al. Direct optical detection of Weyl fermion chirality in a topological semimetal. *Nature Physics*, 13: 842-, May 2017.  
 [29] Wu L, Patankar S, Morimoto T, et al. 2017 *Nat Phys* **13** 350  
 [30] Sirica N, Tobey R I, Zhao L X, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 197401  
 [31] Chen R Y, Zhang S J, Schneeloch J A, Zhang C, Li Q, Gu G D, Wang N L 2015 *Phys. Rev. B* **92** 075107  
 [32] Xu B, Dai Y M, Zhao L X, et al. 2016 *Phys. Rev. B* **93** 121110  
 [33] Chen R Y, Chen Z G, Song X Y, et al. 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 176404  
 [34] Akrap A, Hakl M, Tchoumakov S, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 136401  
 [35] Yuan X, Zhong B Y, Song C Y, et al. 2018 *Nature Communications* **9** 1854  
 [36] Schilling M B, Schoop L M, Lotsch B V, Dressel M, Pronin A V 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 187401  
 [37] Basov D N, Richard D A, Dirk M, Martin D 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 471  
 [38] Martin D, George G. *Electrodynamics of Solids*. Cambridge University press, 2002.  
 [39] Christopher C H, Reedyk M, Crandles D A, Timusk T 1993 *Applied Optics* **32** 2976  
 [40] Basov D N, Timusk T 2005 *Rev. Mod. Phys.* **77** 721  
 [41] Jenkins G S, Lane C, Barbiellini B, et al. 2016 *Phys. Rev. B* **94** 085121  
 [42] Xu B, Zhao L X, Marsik P, et al. 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 187401  
 [43] Martino E, Crassee I, Eguchi G, et al. 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 217402  
 [44] Xu B, Dai Y M, Shen B, et al. 2015 *Phys. Rev. B* **91** 104510  
 [45] Xu B, Dai Y M, Zhao L X, et al. 2017 *Nat. Commun.* **8** 14933

- [46] Homes C C, Ali M N, Cava R J 2015 *Phys. Rev. B* **92** 161109
- [47] Li X B, Huang W K, Lv Y Y, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 176803
- [48] Moreschini L, Johannsen J C, Berger H, et al. 2016 *Phys. Rev. B* **94** 081101
- [49] Xu G, Hongming Weng, Zhijun Wang, Xi Dai, and Zhong Fang 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 186806
- [50] Nielsen H B, Masao Ninomiya 1983 *Physics Letters B* **130** 389
- [51] Parameswaran S A, T Grover, D A. Abanin, D A. Pesin, and A Vishwanath 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031035
- [52] Weng H M, Fang C, Fang Z, B. Andrei Bernevig, and Xi Dai 2015 *Phys. Rev. X* **5** 011029
- [53] Phillip E C A, Carbotte J P 2014 *Phys. Rev. B* **89** 245121
- [54] Kuzmenko A B, Benfatto L, E. Cappelluti, I. Crassee, D. van der Marel, P. Blake, K. S. Novoselov, and A. K. Geim 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 116804
- [55] Tang T T, Zhang Y B, Cheol-Hwan Park, Baisong Geng, Caglar Girit, Zhao Hao, Michael C. Martin, Alex Zettl, Michael F. Crommie, Steven G. Louie, Y. Ron Shen, and Feng Wang 2010 *Nat Nano* **5** 32
- [56] Li Z Q, Lui C H, Emmanuele Cappelluti, Lara Benfatto, Kin Fai Mak, G. L. Carr, Jie Shan, and Tony F. Heinz 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 156801
- [57] LaForge A D, Frenzel A, Pursley B C, et al. 2010 *Phys. Rev. B* **81** 125120
- [58] Sim S W, Koirala N, Matthew Brahlek, Ji Ho Sung, Jun Park, Soonyoung Cha, Moon-Ho Jo, Seongshik Oh, and Hyunyoung Choi 2015 *Phys. Rev. B* **91** 235438
- [59] Homes C C, Dai Y M, J. Schneeloch, R. D. Zhong, and G. D. Gu 2016 *Phys. Rev. B* **93** 125135
- [60] Sergey B, Daniil E, Quinn G, Alexander Y, Klaus K, Timur Kim, Mazhar Ali, Jeroen van den Brink, Moritz Hoesch, Alexander Fedorov, Erik Haubold, Yevhen Kushnirenko, Ivan Soldatov, Rudolf Schäfer, and Robert J. Cava. Time-reversal symmetry breaking type-II Weyl state in YbMnBi<sub>2</sub>. *Nature Communications*, 10(1): 3424-, 2019.
- [61] Chinotti M, Pal A, Ren W J, Petrovic C, Degiorgi L 2016 *Phys. Rev. B* **94** 245101
- [62] Dipanjan C, Bing C, Alexander Y, Quinn D G 2017 *Phys. Rev. B* **96** 075151
- [63] Wang Y Y, Xu S, Sun L L, Xia T L 2018 *Phys. Rev. Materials* **2** 021201
- [64] Qiu Z Y, Le C C, Liao Z Y, et al. 2019 *Phys. Rev. B* **100** 125136
- [65] Ádám B, Attila V 2013 *Phys. Rev. B* **87** 125425
- [66] Mak K F, Matthew Y S, Yang W, et al. 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 196405
- [67] Mukherjee S P, Carbotte J P 2017 *Phys. Rev. B* **95** 214203

SPECIAL TOPIC—The frontiers and applications of topological physics

Optical properties of topological semimetals\*

Xu Bing<sup>1)</sup> Qiu Zi-Yang<sup>1)</sup> Yang Run<sup>1)</sup>  
 Dai Yao-Min<sup>2)†</sup> Qiu Xiang-Gang<sup>1)‡</sup>

1) (*Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics,  
 Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

2) (*National Laboratory of Solid State Microstructures and Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

( Received 7 October 2019; revised manuscript received 11 November 2019 )

Abstract

Topological semimetal represents a novel quantum phase of matter, which exhibits a variety of fascinating quantum phenomena. This class of materials not only have potential applications in electronic devices, but also represent one of the hottest topics in the field of quantum materials. According to the band structure of these materials in the three-dimensional momentum space, topological semimetals can be classified into Dirac semimetals, Weyl semimetals and nodal-line semimetals. Extensive studies on these materials have been conducted using various techniques. For example, angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) has directly observed the Fermi arc that connects two Weyl points with opposite chiralities in the surface states of Weyl semimetals; the Dirac points, Weyl points as well as the Dirac nodal line in the bulk states have also been revealed by soft X-ray ARPES; the observation of negative magnetoresistance in transport measurements has been taken as the evidence for the chiral anomaly in Weyl and Dirac semimetals; the chirality of the Weyl fermions have been detected by measuring the photocurrent in response of circularly polarized light; in addition, strong second harmonic generation and THz emission have been observed, indicating strong non-linear effects of Weyl semimetals. Infrared spectroscopy is a bulk-sensitive technique, which not only covers a very broad energy range (meV to several eV), but also has very high energy resolution (dozens of  $\mu\text{eV}$ ). Investigations into the optical response of these materials not only help understand the physics of the topological phase and explore novel quantum phenomena, but also pave the way for future studies and applications in optics. In this article, we introduce the optical studies on several topological semimetals, including Dirac, Weyl and nodal-line semimetals.

**Keywords:** Infrared spectroscopy, Dirac semimetal, Weyl semimetal, Nodal-Line semimetal

**PACS:** 78.20.-e, 78.30.-j, 78.40.Kc

**DOI:** 10.7498/aps.68.20191510

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874206) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. 020414380095).

† Corresponding author. E-mail: ymdai@nju.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xgqiu@iphy.ac.cn