

专题: 光学超构材料

外尔超构材料里频率分离外尔点的数值设计*

周萧溪¹⁾ 胡传灯^{2)†} 陆伟新¹⁾ 赖耘³⁾ 侯波^{1)‡}

1) (苏州大学物理科学与技术学院, 苏州纳米科技协同创新中心, 苏州 215006)

2) (深圳市环波科技有限责任公司, 深圳 518000)

3) (南京大学固体微观结构国家实验室, 物理学院, 人工微结构科学与技术协同创新中心, 南京 210093)

(2020年2月9日收到; 2020年3月11日收到修改稿)

外尔半金属是指三维能带结构具有手性拓扑点简并特征的无能隙固体材料, 并且简并点附近的色散关系遵从外尔方程的描述. 它具有很多独特的电子输运性质, 比如: 费米弧表面态、负磁阻效应、手性朗道能级等. 类比电子系统的外尔半金属材料, 人们设计出理想外尔超构材料, 在电磁波体系里实现了频率一致的外尔点简并. 本文打破这种超构材料的镜面对称性, 通过数值计算发现了原本频率一致的外尔点出现了依赖手性的频移, 频移的正负由外尔点的手性决定, 因此实现了手性不同的外尔点在频率上的分离, 同时也检验了(001)晶面上外尔点之间的费米弧表面态.

关键词: 外尔点, 手性, 频移, 费米弧

PACS: 42.70.QS, 78.67.PT

DOI: 10.7498/aps.69.20200195

1 引言

为研究固体材料的导电性质, 人们采用电子能带理论, 根据费米能级处是否存在能带或能隙, 将材料分为金属或绝缘体. 如果一个材料的费米能级处仅出现若干能带的交叉简并, 那么它被称为半金属^[1]. 近来, 人们在一些材料的三维能带结构里发现由两个能带线性交叉形成的色散关系在交叉点附近满足相对论性外尔方程, 这样的能带简并点被称做外尔点, 其色散关系具有手性外尔费米子的准粒子激发特征, 相应的材料因此被称为外尔半金属^[2–10]. 另外, 根据能带交叉简并的形态, 这类材料还可以分为第一类与第二类外尔半金属^[9,10]. 作为同常规金属相区别的一个重要特征是外尔半金属具有开放的表面态, 在材料的表面能带结构里, 电子色散关系表现为一段开放的弧态, 连接着不同

手性外尔点的投影位置, 也叫费米弧表面态, 弧上的任意一点都是拓扑非平庸的, 受拓扑保护的, 具有稳定和低损的传输性质^[6].

类比电子材料能带的拓扑结构, 人们也把这些动量空间的简并特征推广至电磁波、声波、弹性波等经典体系, 在传统光子/声子晶体和超构材料的基础上形成了拓扑光学、拓扑声学等新方向^[11–19]. 例如, 在2015年人们首先在双螺旋体介质结构的光子晶体中实验观察到了外尔点简并^[12]; 2018年, 英国伯明翰大学和深圳大学等课题组, 提出一种以马鞍形金属超构原子组成的电磁晶体, 发现能带结构在一定的频率范围仅存在两对手性相反且频率相同的外尔点(也被称为理想外尔点)^[19].

外尔半金属等拓扑材料的出现也为人们在晶体材料里模拟强相对论粒子效应和引力物理提供了理想的平台^[20,21], 这类研究需要对外尔点在能量-动量空间里的位置进行精确的调控(包括对外

* 国家自然科学基金(批准号: 11474212)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chuac@connect.ust.hk

‡ 通信作者. E-mail: houbo@suda.edu.cn

尔点频率的调节), 理论上可通过控制对称性破缺的程度并进行空间调制来实现 [22]. 然而由于固体晶格的微观尺度, 在电子系统里实施特定对称性破缺的空间调制场具有非常大的技术挑战. 相比之下, 超构材料等人工电磁晶体允许人们在从原胞尺度到晶格尺度上任意修改结构参数 [23], 因此能准确定制对称性的破缺及其程度大小, 进而研究对能带简并的效应和对相关光学性质的影响 [24].

本文利用数值仿真研究了理想外尔材料里超构原子的镜面对称性破缺的效果. 通过对超构原子的几何形状施加一个微小的变形, 打破了它关于 x - z 面和 y - z 面的镜面对称性, 发现了原本频率一致的外尔点出现了依赖手性的频移, 频移的正负同手性相关, 频移的大小可以由镜面对称性破缺的程度控制, 因此实现了手性不同的外尔点在频率上的分离. 这样的设计为在电磁波体系里研究外尔手性物理提供了超构材料的模拟平台. 另外, 也检验了 (001) 晶面上外尔点之间的费米弧表面态.

2 数值研究

2.1 频率分离的外尔点

在满足时间反演对称的理想外尔超构材料系统里 [19], 超构原子被设计为马鞍形金属结构 (如图 1(a)), 具有磁电耦合的有效电磁参数. 来自于磁电耦合特性和 D_{2d} 的结构对称性, 由超原子排列而成的近立方晶格体系展现满足时间反演对称性的最少数目 (4 个) 的外尔点, 手性不同的两对外尔点分别位于动量空间的 ΓM 和 $\Gamma M'$ 方向, 具有相同

的频率. 理想外尔点的实现来自于超构材料里电磁纵模能带和横模能带的双带简并 (沿 ΓM 和 $\Gamma M'$), 它们的稳定性受到 D_{2d} 操作中沿这些方向的二度旋转对称性 C_2^z 保护——电磁纵模和横模的二度旋转算符的本征值分别是 +1 和 -1; 相同手性的外尔点的频率一致是沿 z 方向的 C_2 对称性和时间反演对称性的结果; 不同手性的外尔点的同频特性受 D_{2d} 操作中关于 x - z 面和 y - z 面的镜面对称性保护 [19]. 因此, 为设计频率分离的外尔点, 将马鞍形结构进行一定程度的变形, 保持旋转对称性但破坏其镜面对称性, 如图 1 所示. 不过时间反演对称性的存在限制我们不能在频率上分离手性相同的外尔点. 为了清晰表达形变微扰, 在图 1(a) 里画出一个晶胞, 从中取一个 z 方向截面, 得到图 1(b), l_1 与 l_2 标记截面里对角线方向上两个圆柱的距离, 当 $l_1 = l_2$, 四个圆柱在截面上的分布为正方形 (即参考文献 [19] 里的结构); 然后, 沿 l_1 方向把圆柱向内部挤压, 保持 l_2 长度不变就可以得到一个菱形分布, 如图 1(c) 所示; 用 l_2 方向上的菱形内角 θ 来标记不同程度的形变, 可以看到 l_1 方向的挤压导致 $\theta < 90^\circ$, 而拉伸导致 $\theta > 90^\circ$, 正方形分布对应于 $\theta = 90^\circ$.

接下来计算形变之后的超构材料的能带结构. 在图 2(a) 所示的晶胞中, 晶格常数 $a_x = a_y = 3$ mm, $a_z = 4.5$ mm, 金属圆柱的高度 $h = 4$ mm, 直径 $d_1 = 0.5$ mm, 直径 $d_2 = 1$ mm, 金属连接线沿 y 方向的长度 $D = d_1$, 圆柱的菱形分布里对角线 $l_1 = 1.70$ mm, 对角线 $l_2 = 2.12$ mm, 对应角度 $\theta = 77.31^\circ$, 原胞里金属部分近似为没有损耗的完

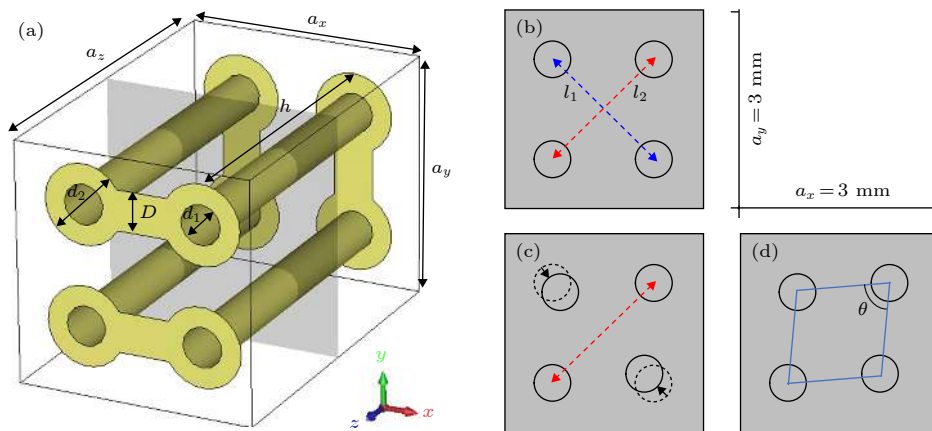


图 1 (a) 马鞍形超构原子, 灰色阴影为 z 方向的截面; (b)—(d) 圆柱在截面上的正方形分布到菱形分布的变化过程

Fig. 1. (a) Unit cell where the gray surface is a cut plane along z direction; (b)–(d) the process of changing the positions of four metallic rods from square to rhombus structure.

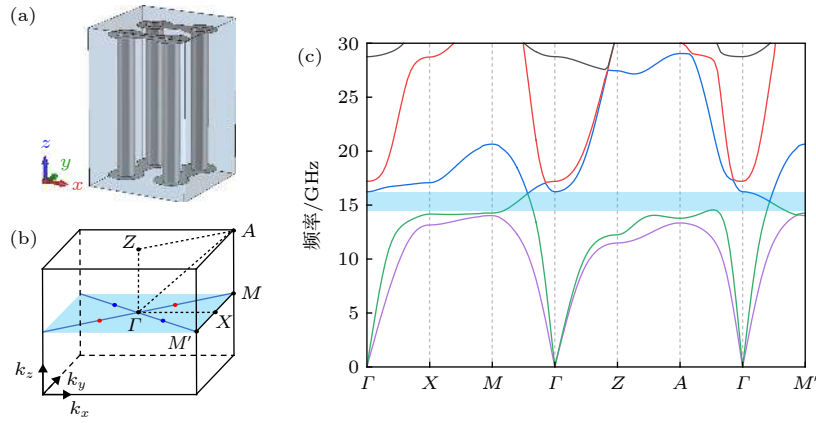


图 2 (a) $\theta = 77.31^\circ$ 的晶胞结构; (b) 第一布里渊区示意图, 蓝色点和红色点代表不同手性的外尔点, 分布在 $k_z = 0$ 的切面; (c) 数值计算的能带结构, 蓝色阴影代表只有外尔点简并能带出现的频率区间

Fig. 2. (a) Unit cell where $\theta = 77.31^\circ$; (b) the first Brillouin zone where blue dots and red dots represent, respectively, the Weyl points of different chirality; (c) the numerically calculated band structure, where shaded region denotes the frequency range with only Weyl degenerate bands appears.

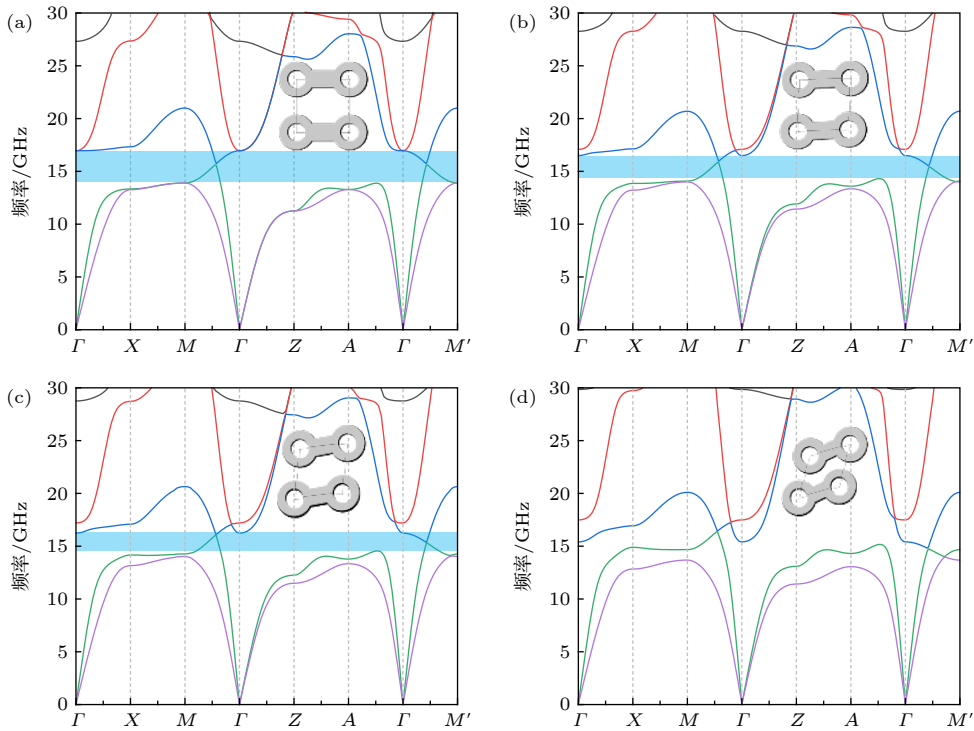


图 3 (a)—(d) 不同 θ 角度下的能带结构, 分别对应 $\theta = 90^\circ, 81.18^\circ, 77.31^\circ, 60^\circ$, 其中示意插图是超构原子的顶视图, 蓝色阴影代表只有外尔点简并能带出现的频率区间

Fig. 3. (a)–(d) Band structure with $\theta = 90^\circ, 81.18^\circ, 77.31^\circ$ and 60° , respectively. The inset is the top view of meta-atom, and the shaded region denotes the frequency range with only Weyl degenerate bands appears.

美电导体 (PEC), 其余部分均为空气. 图 2(b) 是晶胞的第一布里渊区, k_x 和 k_y 及 k_z 代表布洛赫波矢 (后文出现的数值已默认为被 $\pi/a_x, \pi/a_y, \pi/a_z$ 归一化的值), 蓝点和红点表示为不同手性的外尔点的位置. 图 2(c) 展示了通过 CST 数值仿真软件计算得到的能带结构, 蓝色阴影代表只有外尔点简并能带出现的频率区间, 简称带宽. 对比镜面对称保

持的超构原子 (图 3(a)), 可以清晰看到不同手性的外尔点在频率轴上发生了分离, 沿 $\Gamma \rightarrow M$ 方向的外尔点发生蓝移, 沿 $\Gamma \rightarrow M'$ 方向的外尔点发生红移, 两个外尔点出现的位置与频率分别为: $k_x = k_y = 0.432, k_z = 0, f_1 = 16.07$ GHz 和 $k_x = -k_y = 0.432, k_z = 0, f_2 = 15.33$ GHz, 可以看到, 不同手性外尔点在动量空间中的位置到 Γ 点

的距离是一致的, 它们的频率存在一个 0.7 GHz 左右的分离. 由于形变后的超构原子依然保留 D_{2d} 操作里 C_2 (沿 z 方向) 和 $2C_2'$ (C 分别沿 ΓM 方向和 $\Gamma M'$ 方向) 的旋转对称性, 四个外尔点仍然出现在 ΓM 和 $\Gamma M'$ 对角线上. 也在四个简并点附近做了详细的数值计算, 确认了外尔点是稳定存在的.

2.2 外尔点频移的调控

为了研究外尔点的频移效应随形变大小的变化, 对比了四个不同的 θ 角度 ($90^\circ, 81.18^\circ, 77.31^\circ, 60^\circ$) 时的能带结构, 如图 3 所示. 从图 3 所示能带图可以清晰地看到, 随着角度的减小, 外尔点之间的频差增大. 另外, 不同手性的外尔点到 Γ 点的距离随 θ 角有一个非常微弱的变化, 在四个角度里只有 $\theta = 60^\circ$ 的情况显示出距离有差别, 坐标分别是 $k_x = k_y = 0.450$, $f_1 = 16.40$ GHz 和 $k_x = -k_y = 0.418$, $f_2 = 14.77$ GHz. 值得注意的是带宽随 θ 角逐渐减小, 外尔简并能带同其他方向的体能带在频率上重叠在一起. 为了更清晰地对比外尔点的频移效应, 把每个角度下外尔点出现的频率、频差和带宽总结在表 1 中, 发现两个异频外尔点的中心频率等于 90° 超构原子的外尔点的频率. 表 1 的结果说明了镜面对称性破缺的程度影响不同手性外尔点的频移大小.

表 1 外尔点的频移效应
Table 1. Frequency shift of Weyl points.

角度/ $^\circ$	外尔点频率/GHz			频差/GHz	带宽/GHz
	f_1	中心频率	f_2		
90	15.70	15.70	15.70	0	3.07
81.18	15.90	15.69	15.48	0.43	2.29
77.31	16.07	15.70	15.33	0.74	1.93
60	16.40	15.585	14.77	1.63	0

2.3 费米弧表面态

为了研究拓扑表面态, 在 z 方向设置了 10 层超胞结构用来模拟 z 方向有限厚度的样品, z_{\max} 和 z_{\min} 表面定义为 PEC (z_{\max} 和 z_{\min} 分别表示计算模型在 z 方向的最大坐标和最小坐标), 距离超胞均为 3 mm, x 和 y 方向设为周期边界, 这样就构建出两个 $\langle 001 \rangle$ 表面. 如果在周期边界条件里设定 $k_x = 0.432$ 和 $k_y \in [-1, 1]$, 可以计算得到这个有限厚度的超胞结构的本征频率, 这些本征频率包括有限厚

度引起的对 k_z 求和的投影能带和 $\langle 001 \rangle$ 表面态. 为了消除 z 方向有限厚度效应并减轻计算负担, 用一个晶胞来计算 $k_x = 0.432$ 并沿 k_z 方向投影的体能带结构, 整合两种方式的计算结果, 不但可以有效地改善超胞的有限厚度效应, 还可以方便地辨别位于体投影能带之外的表面态. 图 4(a) 给出了第一布里渊区里 $k_x = 0.432$ 的切面, 图 4(b) 是单胞运算的体投影能带和有限厚度超胞运算的 $\langle 001 \rangle$ 表面态. 因为 $k_x = 0.432$ 的切面经过手性相反的外尔点, 因此图 4(b) 清楚地显示了它们在频率轴上的分离 (15.33 和 16.07 GHz). 另外, 拓扑表面态也确定性地出现在带隙里并且把外尔点连接起来. 通过计算本征模式的电场分布确定了这些表面态出现的空间位置, 图 4(b) 的红色曲线表示在 z_{\min} 端面的表面态, 蓝色曲线表示 z_{\max} 端面的表面态, 图 4(c) 显示了几个代表性的电场分布图. 虽然在某些 k_y 区间里表面态和体态融合在一起, 但表面态色散曲线可以从 $k_y = -1$ 一直延伸到 $k_y = 1$, 这是理想外尔超构材料所具有的螺旋表面态的特征 [19].

我们也沿 $\Gamma \rightarrow M$ 方向进行了计算, 具体结果如图 4(d)–(f) 所示. 因为 $k_x = k_y$ 的切面通过相同手性的外尔点, 因此图 4(e) 里的外尔点简并出现在相同的频率上 (16.07 GHz). 表面态也清楚地出现在外尔点之间的区间并且把外尔点连接起来. 值得注意的是, 图 4(e) 里的表面态曲线是二重简并的, 分别对应于两个 $\langle 001 \rangle$ 表面上的场分布, 如图 4(f) 所示, 这是因为在 $k_x = k_y$ 条件下, 位于 z_{\max} 和 z_{\min} 的两个 $\langle 001 \rangle$ 表面是等价的.

3 讨论

近来, 费米弧表面态和外尔体态的相互联系日渐引起研究者的关注, 在外尔半金属材料里, 人们通过施加磁场可以实现由表面态 + 体态构成的新型电子轨道——外尔轨道, 因此进一步实现三维量子霍尔效应 [25,26]. 在这里, 从本征模式的电场分布可知, 当表面态越接近外尔点, 对应的本征模在超构材料里的衰减长度也越大, 当位于外尔点时, 相应的本征模分布在整个体材料里, 见图 4(c) 和图 4(f) 所示, 当进一步离开外尔点, 表面态重新出现在相对的表面.

在这项工作里, 随着镜面对称的破缺, 手性不同的外尔点的频率从中心位置 f_0 发生分裂, 根据手性分别蓝移至 f_1 和红移至 f_2 , 而且在带宽区间内

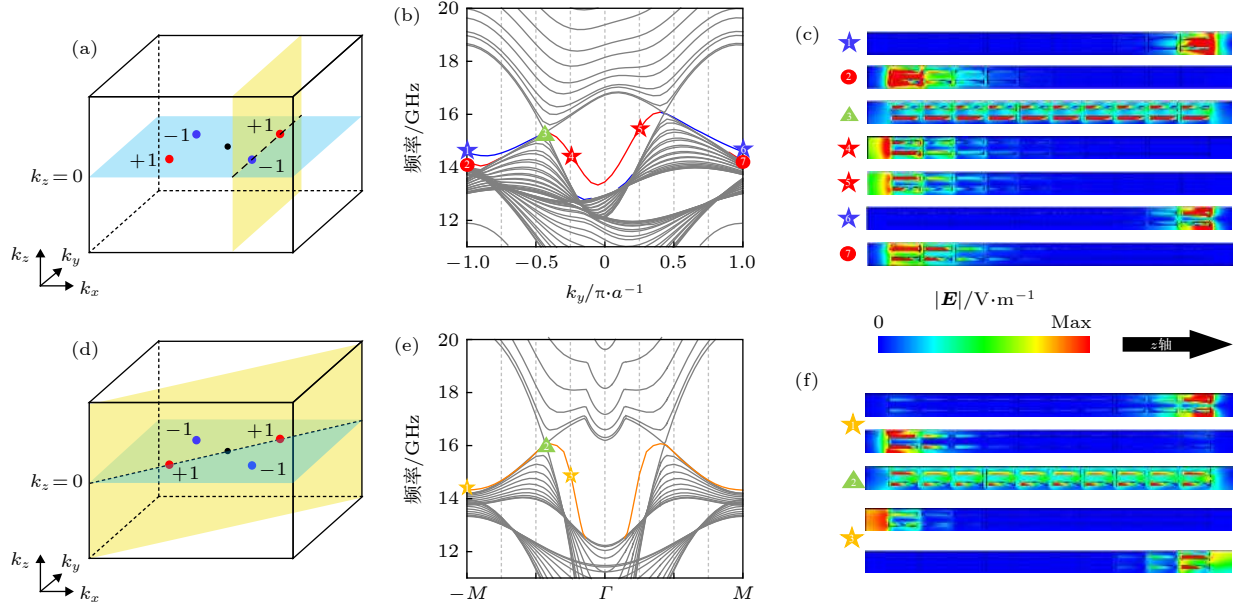


图4 (a) 第一布里渊区内两个切面示意图, 黄色平面代表 $k_x = 0.432$ 的切面, 虚线代表两个切面的交线; (b) $k_x = 0.432$ 时的体投影能带 (灰色曲线) 和 (001) 晶面的表面态 (蓝色和红色曲线); (c) 相应的电场强度剖面图, 标记对应于 (b) 里的位置, 水平方向为 z 方向; (d) 第一布里渊区内两个切面示意图, 黄色平面代表 $k_x = k_y$ 的切面, 虚线代表两个切面的交线; (e) $\Gamma \rightarrow M$ 方向的体投影能带 (灰色曲线) 和 (001) 晶面的表面态 (橙色曲线); (f) 相应的电场强度剖面图, 标记对应于 (e) 里的位置, 水平方向为 z 方向

没有其他体能带仅有外尔能带出现. 由于外尔点处的态密度为零, 当频率为 f_1 或 f_2 的电磁波在这样的超构材料里传播时可以呈现出类似外尔费米子的“ $-$ ”手性或“ $+$ ”手性效应, 可用来模拟手性相关的克莱因隧穿物理^[20]. 另外, 频率蓝移和红移的大小能够由 θ 角度调控, 因此进一步在超构材料的晶格尺度上设计空间非均匀的角度调制场 $\theta(\mathbf{r})$, 可用来模拟应变工程对能带的调控, 甚至实现手性相关的变换光学器件^[21–24].

4 结 论

从镜面对称的马鞍状超构原子出发, 通过结构变形打破镜面对称性, 将手性不同的同频外尔点调控为不同频外尔点, 并且通过调节对称性破缺的程度, 即 θ 角度, 调控了外尔点频移的变化大小. 我们发现当角度越小时手性不同的外尔点之间的频率差值越大, 可以在有限带宽里获得异频外尔点, 这样的结构可用于研究手性依赖的输运现象.

感谢苏州大学蒋建华教授和江华教授的讨论.

参考文献

- [1] Ashcroft N W, Mermin N D 1976 *Solid State Physics* (New York: Holt, Rinehart and Winston) pp284–311
- [2] Zhang Z Q, Jiang Q D, Chen C Z, Jiang H 2018 *Progr. Phys.* **38** 101 (in Chinese) [张智强, 蒋庆东, 陈垂针, 江华 2018 *物理学进展* **38** 101]
- [3] Wan X G, Turner A M, Vishwanath A, Savrasov S Y 2011 *Phys. Rev. B* **83** 205101
- [4] Burkov A A, Balents L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 127205
- [5] Xu G, Weng H M, Wang Z J, Dai X, Fang Z 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 186806
- [6] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015001
- [7] Xu S Y, Belopolski I, Alidoust N, Neupane M, Bian G, Zhang C L, Sankar R, Chang G Q, Yuan Z J, Lee C C, Huang S M, Zheng H, Ma J, Sanchez D S, Wang B K, Bansil A, Chou F C, Shibaev P P, Lin H, Jia S, Hasan M, Zahid 2015 *Science* **349** 613
- [8] Weng H M, Fang C, Fang Z, Bernevig B A, Dai X 2015 *Phys. Rev. X* **5** 0110291
- [9] Soluyanov A A, Gresch D, Wang Z J, Wu Q S, Troyer M, Dai X, Bernevig B A 2015 *Nature* **527** 495
- [10] Huang L N, McCormick T M, Ochi M, Zhao Z Y, Suzuki M T, Arita R, Wu Y, Mou D X, Cao H B, Yan J Q, Trivedi N, Kaminski A 2016 *Nat. Mater.* **15** 1155
- [11] Lu L, Joannopoulos J D, Soljačić M 2014 *Nat. Photonics* **8** 821
- [12] Lu L, Wang Z Y, Ye D X, Ran L X, Fu L, Joannopoulos J D,

- Soljagic M 2015 *Science* **349** 622
- [13] Chen W J, Xiao M, Chan C T 2016 *Nat. Commun.* **7** 13038
- [14] Noh J, Huang S, Leykam D, Chong Y D, Chen K P, Rechtsman M C 2017 *Nat. Phys.* **13** 611
- [15] Yang B, Guo Q H, Tremain B, Barr L E, Gao W L, Liu H C, Beri B, Xiang Y J, Fan D Y, Hibbins A P, Zhang S 2017 *Nat. Commun.* **8** 7
- [16] Yang Y H, Gao Z, Xue H R, Zhang L, He M J, Yang Z J, Singh R J, Chong Y D, Zhang B L, Chen H S 2019 *Nature* **565** 622
- [17] Xie B Y, Su G X, Wang H F, Su H, Shen X P, Zhan P, Lu M H, Wang Z L, Chen Y F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 233903
- [18] Zhang X J, Wang H X, Lin Z K, Tian Y, Xie B Y, Lu M H, Chen Y F, Jiang J H 2019 *Nat. Phys.* **15** 582
- [19] Yang B, Guo Q, Tremain B, Liu R, Barr L E, Yan Q, Gao W, Liu H, Xiang Y, Chen J, Fang C, Hibbins A, Lu L, Zhang S 2018 *Science* **359** 1013
- [20] Nguyen V H, Charlier J C 2018 *Phys. Rev. B* **97** 235113
- [21] Guan S, Yu Z M, Liu Y, Liu G B, Dong L, Lu Y, Yao Y, Yang S A 2017 *NPJ Quantum Mater.* **2** 23
- [22] Westström A, Ojanen T 2017 *Phys. Rev. X* **7** 041026
- [23] Pendry J B, Schurig D, Smith D R 2006 *Science* **312** 1780
- [24] Urzhumov Y A, Smith D R 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 163901
- [25] Lu H Z 2019 *Natl. Sci. Rev.* **6** 208
- [26] Zhang C, Zhang Y, Yuan X, Lu S H, Zhang J L, Narayan A, Liu Y W, Zhang H Q, Ni Z L, Liu R, Choi E S, Suslov A, Sanvito S, Pi L, Lu H Z, Potter A C, Xiu F X 2019 *Nature* **565** 331

SPECIAL TOPIC—Optical metamaterials

Numerical design of frequency-split Weyl points in Weyl metamaterial*

Zhou Xiao-Xi¹⁾ Hu Chuan-Deng^{2)†} Lu Wei-Xin¹⁾ Lai Yun³⁾ Hou Bo^{1)‡}

1) (*Collaborative Innovation Center of Suzhou Nano Science and Technology, School of Physical Science and Technology, Soochow University, Suzhou 215006, China*)

2) (*Shenzhen Fantwave Tech. Co., Ltd., Shenzhen 518000, China*)

3) (*National Laboratory of Solid State Microstructures, School of Physics, Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China*)

(Received 9 February 2020; revised manuscript received 11 March 2020)

Abstract

Weyl semimetal has the massless and chiral low-energy electronic excitation characteristic, and its quasi-particle behavior can be described by Weyl equation, and may lead to appealing transport properties, such as Fermi arc surface state, negative magnetic resistance, chiral Landau level, etc. By analogous with Weyl semimetal, one has realized Weyl point degeneracy of electromagnetic wave in an ideal Weyl metamaterial. In this article, by breaking the mirror symmetry of the saddle-shaped meta-atom structure, we theoretically investigate chirality-dependent split and shift effect of Weyl point frequencies which would otherwise be identical. The frequency shift can be tuned by the symmetry-broken intensity. Finally, we study the Fermi arc surface state connecting two Weyl points on $\langle 001 \rangle$ crystal surface.

Keywords: Weyl point, Chiral, frequency shift, Fermi arc

PACS: 42.70.QS, 78.67.PT

DOI: 10.7498/aps.69.20200195

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474212).

† Corresponding author. E-mail: chuae@connect.ust.hk

‡ Corresponding author. E-mail: houbos@suda.edu.cn