



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

关联电子材料中的外尔半金属研究

作者姓名：徐远锋

指导教师：戴希 研究员，翁红明 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别：理学博士

学科专业：理论物理

培养单位：中国科学院物理研究所

2018 年 11 月

Weyl semimetals in correlated electronic materials

By

Yuanfeng Xu

A Dissertation Submitted to
The University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Doctor of Philosophy
in Condensed Matter Physics

Institute of Physics
Chinese Academy of Sciences

November, 2018

中国科学院大学 研究生学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：

日 期：

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：

摘要

拓扑材料是近几年凝聚态物理领域的研究热点之一。根据电子结构的不同，拓扑电子材料可以分为拓扑绝缘体和拓扑半金属两大类。两者均存在拓扑保护的无能隙表面态，不同之处在于拓扑绝缘体的体态是全能隙的绝缘态，而拓扑半金属的体态在费米面附近存在零能隙的简并点或线。目前，已经被发现的拓扑半金属包括Dirac半金属，Weyl半金属，Nodal-line 半金属以及具有三重简并度的“新费米子”等。本文主要通过第一性原理计算，在包括铁电和铁磁性材料的几种弱关联体系中，预测了外尔半金属态的存在。另外通过与多体技术相结合，我们第一次在重费米子材料中研究了外尔半金属的特征。

首先，基于第一性原理计算和有效模型分析，我们提出一类非中心反演对称体系 YCoC_2 是拓扑半金属。在不考虑自旋轨道耦合时，该体系在布里渊区中存在两个由镜面对称性保护的线节点。考虑到自旋轨道耦合，其中一个线节点完全打开能隙，另外一个线节点退化为十对外尔点，包括两对第一类外尔点和八对第二类外尔点。同时我们通过表面态计算，可以从表面态费米面清晰得看到连接外尔点的费米弧。 YCoC_2 同时也被报道是 $T_c = 4.2$ K的超导体，这将为研究拓扑超导体及其马拉约纳准粒子提供一个平台。

其次，我们与合作者提出了非磁性体系 HgPbO_3 在低温下是一种铁电极化的外尔半金属材料。在低温下，该材料发生铁电相变，由中心反演的 $R\bar{3}c$ 结构转变为非中心对称的 $R3c$ 结构。从两种结构的能带结构来看，都表现出半金属的特征。通过进一步计算分析，我们提出顺电相是平庸的半金属，铁电相在费米面附近存在六对外尔点。随后相关的中子散射实验和汇聚束电子衍射实验分别证实了我们的理论预测。在 HgPbO_3 中，铁电性与外尔半金属的拓扑性质共存现象为拓扑与铁电器件的基础研究提供了一个理想的平台。

磁性材料中反常霍尔效应（AHE）的起源是凝聚态物理学中最有趣的课题之一，并且长期以来一直存在争议。最近的研究表明，内在的AHE与占据态的Berry曲率密切相关。对于时间反演破缺的磁性Weyl半金属，由于外尔点周围的Berry曲率呈发散行为，这将导致很大的内禀反常霍尔电导。本工作中，我们提出了铁磁半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 是一类外尔半金属，并在实验上测得了很大的反常霍尔电导。基于第一性原理计算，我们得到了与实验一致的结果，证明了费米能量附近的Weyl费米子对于反常霍尔电导的贡献占主导地位。通过调节材料

中Co原子的内禀磁矩，我们重复了实验上反常霍尔电导与内禀磁矩的线性相关特征。

由弱关联电子形成的拓扑半金属态，理论计算和分析已经比较成熟。能否在强关联材料体系中寻找这类拓扑材料是理论和实验上都非常关心的问题，因为强关联效应可以带来很多有趣的物理。我们通过第一原理结合Gutzwiller方法，对重费米子材料CeRu₄Sn₆的拓扑性质进行了系统研究。我们利用Gutzwiller变分法结合第一性原理重新计算了该体系的准粒子电子结构。在考虑f电子强相互作用下，得到了该材料的准粒子能带和原子多重组态等。与GGA的计算结果相比，f电子的强关联效应对能带的修正主要表现为以下两点：(1)4f轨道形成的准粒子能带宽度减少了50%左右；(2)4f电子的 $j = 7/2$ 能带被推到了费米面上1.2eV左右，而费米能附近主要由4f的 $|j = 5/2, j_z = \pm 1/2\rangle$ 和4d电子占据。这导致4f电子和4d电子在费米能附近产生反带，并且计算得到的Ce的4f电子占据数与实验结果非常吻合。考虑到该体系没有空间反演对称性，因此在反带附近很可能存在外尔点。我们采用Wilson-loop计算方法，在布里渊区中一共找到八对外尔点，其中包括四对第二类外尔点。通过表面态计算，可以在(010)表面看到清晰的Weyl半金属独有的“费米弧”。与已知的弱关联拓扑半金属不同，CeRu₄Sn₆中的外尔费米子态对Ce的价态非常敏感。通过在小范围内调节4f电子的占据数，体系会经历多个拓扑相的变化，这将为以后强关联与拓扑之间的物理研究提供一个平台。

关键词： 拓扑绝缘体，外尔半金属，铁电半金属，反常霍尔效应，LDA+Gutzwiller，重费米子

Abstract

Topological materials have been studied for many years. From topological insulators and topological semimetals, the gapless surface state is the most important feature for them. The bulk states in topological insulators are gapped, but in topological semimetals there are some gapless nodes or lines in bulk states. The topological semimetals discovered in experiments include Dirac semimetals, Weyl semimetals, Nodal-line semimetals and the three-fold degeneracy "New fermion" semimetals. In this thesis, we have studied the properties of Weyl semimetals in ferroelectric and ferromagnetic materials, based on first principle calculations. We have also proposed the exist of heavy Weyl fermion states in a heavy fermion system.

Firstly, based on first-principles calculations and effective model analysis, we propose that a noncentrosymmetric material YCoC_2 is a topological semimetal. In the absence of spin-orbit coupling (SOC), it can host two intersecting nodal loops protected by two mirror planes. In the presence of SOC, one nodal loop is gapped totally while the other one evolves into ten pairs (three nonequivalent positions) of Weyl points, with two pairs of type-I and eight pairs of type-II Weyl nodes. Fermi arc surface states are observed on surface projected dispersions. This material was reported as a superconductor with a critical temperature of $T_c = 4.2$ K, and if so, it will provide a convenient platform to explore topological superconductivity hosting exotic Majorana states and may be used in topological quantum computers.

Secondly, by using first-principles calculations, we demonstrate that the experimentally synthesized nonmagnetic HgPbO_3 is a unique *Weyl ferroelectric semimetal*. Its centrosymmetric $R\bar{3}c$ phase will undergo a ferroelectric phase transition to the ferroelectric $R3c$ structure. Both phases are semimetallic and the ferroelectric phase owns a spontaneous polarization. Our further study proposed that the $R3c$ phase is a trival semimetal and the $R\bar{3}c$ phase is a Weyl semimetal, which hosts six pairs of Weyl nodes near the Fermi surface. In nice agreement with theoretical prediction, our neutron diffraction measurements and CBED ex-

periments further revealed the ferroelectric phase transition. The coexistence of ferroelectricity and Weyl nodes in HgPbO_3 is an ideal platform for exploring multiphase interaction and mutual control for potential applications of integrated topotronic and ferroelectric devices.

The origin of anomalous Hall effect (AHE) in magnetic materials is one of the most intriguing aspect in condensed matter physics and has been a controversial for a long time. Recent studies indicate that the intrinsic AHE is closely related to the Berry curvature of occupied electronic states. In a magnetic Weyl semimetal with broken time-reversal symmetry, there are significant contributions to Berry curvature around Weyl nodes, which would lead to a large intrinsic AHE. Here, we report the measurements of quite large AHE in the half-metallic ferromagnet $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ single crystal. By systematically mapping out the electronic structure of $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ both theoretically and experimentally, we demonstrate that the intrinsic AHE from the Weyl fermions near the Fermi energy is dominating. The intrinsic anomalous Hall conductivity depends linearly on the magnetization and can be reproduced by theoretical simulation, in which the Weyl nodes monotonically move with the constrained magnetic moment on Co atom.

The theory and first-principle calculations of weak correlated topological materials have been devolped quite completed. Because of the abundant interesting physical properties, more and more attentions have been moved to strongly correlated materials. In this work, we have studied the topological properties of heavy fermion system of CeRu_4Sn_6 by LDA+Gutzwiller method. Considering the strong interaction of $4f$ orbitals of Ce, we obtained the quipartical band structure and the many-body configurations from LDA+Gutzwiller calculations. Compared to the GGA band structure, there are two major corrections caused by the strong correlation effects. Firstly, the total bandwidth of the $4f$ bands have been suppressed by approximately two times. Secondly and more importantly for this particular material, the splitting among the $4f$ -orbitals has been greatly enhanced leading to two direct consequences, the bands with $|J = 5/2; J_z = \pm 1/2 >$ character are pushed down to mix strongly with the $4d$ bands from the Ru atoms and at meanwhile the bands with $|J = 7/2 >$ character are pushed up to about 1.2 eV above the Fermi level. Due to the lack of inversion centre, there may exist

Weyl points near the band inversion. We have found eight pairs of Weyl nodes in the whole Brillouin zone by using Wilson-loop method. From the calculations of (010) surface states, the long fermi arc can be easily indentified. Comparing to the topological semimetals found in weakly correlated materials, the properties of the heavy Weyl fermion state introduced here are much sensitive to the external fields that can modify the effective valence of Cerium, which provide great tunability in this system and make it a promising material platform for follow-up studies on the relationship between correlation and topology.

Keywords: Topological insulator, Weyl semimetal, Anomalous Hall effect, LDA+Gutzwiller, Heavy fermion

目录

摘 要	I
Abstract	III
目录	VII
第一章 绪论	1
1.1 拓扑绝缘体	2
1.1.1 Z_2 拓扑绝缘体	3
1.1.2 拓扑晶体绝缘体	5
1.1.3 $d-2$ 维拓扑晶体绝缘体	8
1.1.4 轴子绝缘体	9
1.2 拓扑半金属	11
1.2.1 外尔半金属	11
1.2.2 狄拉克半金属	12
1.2.3 Nodal-line等新型拓扑半金属	13
1.3 主要研究内容与论文结构	14
第二章 弱关联体系中的外尔半金属	19
2.1 YCoC ₂ 中的Nodal-line与外尔点	20
2.1.1 晶体结构与计算细节	20
2.1.2 Nodal-line半金属态	20
2.1.3 外尔半金属态	23
2.1.4 小结	24
2.2 铁电诱导的外尔半金属HgPbO ₃	26
2.2.1 铁电结构相变	26
2.2.2 电子结构	28
2.2.3 小结	29

2.3 铁磁外尔半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$	30
2.3.1 晶体结构与磁结构	30
2.3.2 电子结构与拓扑相	31
2.3.3 反常霍尔效应	32
2.3.4 小结	35
第三章 重费米子体系CeRu_4Sn_6中的外尔半金属态	39
3.1 LDA+Gutzwiller计算方法	40
3.1.1 强关联电子体系的哈密顿量	40
3.1.2 Gutzwiller变分法求基态总能量	40
3.2 CeRu_4Sn_6 中的外尔费米子态	42
3.2.1 晶体结构与计算细节	42
3.2.2 电子结构	44
3.2.3 外尔半金属态	45
3.2.4 拓扑相的稳定性	48
3.3 小结	48
第四章 总结与展望	51
参考文献	53
个人简历	65
发表文章目录	67
致谢	69

第一章 绪论

2016年的诺贝尔物理学奖授予给了D.J.Thouless, F.D.M.Haldane和 J.M.Kosterlitz三位物理学家, 以表彰他们在拓扑相变和拓扑相方面做出的重大理论贡献。拓扑这一几何学概念与物理学的结合也因此被大众所接受和认知。而在物理学史上, 拓扑相变和拓扑相的研究热潮开始于上个世纪八十年代。

1980年, K.V.Klitzing在研究低温强磁场下的二维电子系统时, 意外的发现其横向霍尔电导随着外加垂直磁场的改变并不是连续的, 而是量子化的, 即呈现出台阶型的跳变(Klitzing et al., 1980), 这一发现掀起了拓扑相变的第一次研究热潮。1982年, D. J. Thouless等人第一次把数学上拓扑的概念引入到凝聚态物理中, 提出了TKNN拓扑不变量(即第一陈数)的概念, 并完美地解释了整数量子霍尔效应中的霍尔电导平台(Thouless et al., 1982)。量子霍尔效应的意义非常重大, 它不仅完善了人们对相变理论的认识, 也为未来电子元器件发展指明了一条方向, 冯克里清因此获得了1985年的诺贝尔物理学奖。1982年, 华人物理学家崔琦, 德国物理学家Stormer等人在更低的温度和更强的磁场下观察到了分数量子霍尔效应(Tsui et al., 1982), 并由Laughlin 给出了比较令人信服的理论解释(Laughlin, 1983), 三位物理学家也因此获得了1998年的诺贝尔物理学奖。整数和分数量子霍尔效应的实现都需要外加很强的磁场, 工业上难以被应用。1988年, Haldane 提出了一个理论模型(Haldane模型)(Haldane, 1988), 该模型指出即使没有额外的外加磁场也可实现量子霍尔态, 即量子反常霍尔效应。由于Haldane模型中人为加入了一些磁通项, 并不能与真实的材料体系对应, 所以在很长一段时间里, 并没有在真实的材料体系中实现内禀量子反常霍尔态。

直到2005年左右, C.L.Kane和张守晟等人提出可以在某些具有时间反演对称性的二维材料里实现一类新的拓扑态——拓扑绝缘体(Kane and Mele, 2005b,a; Bernevig et al., 2006)。拓扑绝缘体是一种内部绝缘表面导电的特殊半导体材料, 其边界上存在两个量子化的导电通道, 包括自旋向上的正方向电流和自旋向下的反方向电流, 它们之间可以通过时间反演对称性联系起来, 因此它又可以被看成是整数量子霍尔效应的时间反演版本。拓扑绝缘体边缘上的两个导电通道电荷流相互抵消, 但是自旋流不为零, 又被称为量子自旋霍尔效应。在时间反演对称性保护下, 螺旋边界态对非磁性杂质引起的背散射是禁闭的, 理论上不存在电阻和导电发热的问题。很快, L.Fu等人又提出了三维拓扑绝缘体(Fu et

al., 2007), 开启了最近十几年对拓扑能带理论的研究热潮。随后, 由晶体对称性保护的拓扑晶体绝缘体(Fu, 2011; Hsieh et al., 2012)以及拓扑半金属理论(Wan et al., 2011; Wang et al., 2012, 2013; Yang and Nagaosa, 2014)也都相继被提出。

借助于上个世纪发展起来的密度泛函理论(Hohenberg and Kohn, 1964; Kohn and Sham, 1965), 计算物理学家很快预测出了一大批拓扑新材料。其中很多材料已被实验物理学家通过ARPES实验和输运实验所证实, 例如一些具有代表性的材料, 三维拓扑绝缘体 Bi_2Se_3 家族(Zhang et al., 2009; Xia et al., 2009; Hsieh et al., 2009; Chen et al., 2009)、准二维大能隙拓扑绝缘体 ZrTe_5 (Weng et al., 2014a; Chen et al., 2015b,a; Li et al., 2016a,c; Wu et al., 2016; Fan et al., 2017; Liang et al., 2018)、拓扑晶体绝缘体 SnTe (Hsieh et al., 2012; Tanaka et al., 2012) 和 KHgSb (Wang et al., 2016; Ma et al., 2017)、狄拉克半金属 Cd_3As_2 (Wang et al., 2013; Liu et al., 2014a) 和 Na_3Bi (Wang et al., 2012; Liu et al., 2014b) 以及外尔半金属 TaAs 家族(Weng et al., 2015; Lv et al., 2015; Xu et al., 2015a,b)等。以上这些拓扑材料都属于弱关联非磁性体系, 常规的第一性原理计算方法都可以比较准确地得到其基态电子结构, 在实验上也相对容易被证实。本文则主要研究一类关联电子体系中的外尔半金属材料, 对于这类材料费米面附近的低能部分主要是由 $3d$ 、 $4f$ 、 $5f$ 等相互作用比较强的局域轨道贡献, 理论上很难被常规的LDA(Ceperley and Alder, 1980)或GGA(Perdew et al., 1996a)计算方法准确描述, 须结合一些多体技术来修正关联电子对费米面附近带来的影响, 例如LDA+U(Anisimov et al., 1991, 1993; Liechtenstein et al., 1995)、LDA+Gutzwiller(Deng et al., 2009, 2008; Lanatà et al., 2012)和 LDA+DMFT方法(Georges et al., 1996; Kotliar et al., 2006)。本文通过第一性原理计算提出了几种特殊的外尔半金属候选者, 包括铁电材料 HgPbO_3 (Li et al., 2016b)、非磁性材料 YCoC_2 、铁磁层状材料 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ (Wang et al., 2018a)以及重费米子材料 CeRu_4Sn_6 (Xu et al., 2017)等。在下面几节中, 我们首先通过一些简单的模型和经典的拓扑材料来回顾拓扑绝缘体和拓扑半金属的理论和性质。

1.1 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体是指, 体态绝缘而表面态或者棱态导电的一类材料, 其中主要包括受时间反演对称性保护的 $\mathbb{Z}_2$ 拓扑绝缘体, 受晶体对称性保护的拓扑晶体绝缘体, 以及陈绝缘体。

考虑一个简单的二维周期系统，在倒空间中可以写出一个半满的两带狄拉克模型，

$$H(\mathbf{k}) = V \sum_{i=x,y} k_i \tau_0 \sigma_i + m \tau_j \sigma_z \quad (1.1)$$

式中泡利算符 σ_i 代表自旋空间， τ_j 代表轨道空间，前两项描述在 xy 面内 $k = 0$ 点附近的线性无能隙色散，最后一项是狄拉克质量项。三项互为反对易，可以很容易解出哈密顿量的本征值为 $\pm\sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ 。当质量项 m 等于0时，在 Γ 点存在零能解，当质量项 m 不为0的时候，体系在倒空间中所有 k 点都有能隙。考虑一个绝热演化过程，质量项 m 的符号不发生变化，那么系统的能隙将不会闭合，此时不发生拓扑相变；如果考虑一个 m 从正值到负值的连续演化过程，系统必然经历一次能隙闭合，产生拓扑相变。也就是说在拓扑相变点处，存在无能隙的激发态。定义真空态为拓扑平庸相，将非平庸的拓扑绝缘体置于真空中，那么在拓扑绝缘体与真空的某个方向的临界处必然有无能隙的表面态。

1.1.1 Z_2 拓扑绝缘体

2005年，Kane和Mele基于单层石墨烯的六角格子提出了Kane-Mele模型(Kane and Mele, 2005a)，第一次预言了量子自旋霍尔（QSH）态，

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \nu_{ij} c_i^\dagger s^z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij})_z c_j + \lambda_v \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i.$$

式中第一项代表最近邻跃迁动能项，第二项代表保持 z 方向镜面对称性的自旋轨道耦合项，第三项是破坏 z 方向镜面对称的Rashba型自旋轨道耦合，最后一项是中心反演破缺项。在该模型指出，在一定的参数范围内，系统可以处于两种不同的拓扑相。由于体系具有时间反演对称性，因此在时间反演不变点(TRIM)上每条能带都是二度简并。由表面态在TRIM点之间的连接方式就可以判断系统的拓扑相，如图1.1所示，图（a）代表系统处在量子自旋霍尔态，图（b）为平庸的绝缘态。当处在拓扑绝缘相时，材料的体态绝缘，两个边缘都存在受时间反演保护的螺旋表面态，即图（a）中的红色和绿色能带。

Kane-Mele模型的意义在于，第一次展示了时间反演体系中的量子自旋霍尔态，以及非平庸的螺旋表面态。但是由于石墨烯的自旋轨道耦合（SOC）强度很弱，所能打开的能隙太小，无法在实验上得到证实。

2006年，Bernevig等人提出在SOC较强的HgTe/CdTe量子阱结构中可以实现QSH态(Bernevig et al., 2006; König et al., 2007a)。基于BHZ模型，他们提出

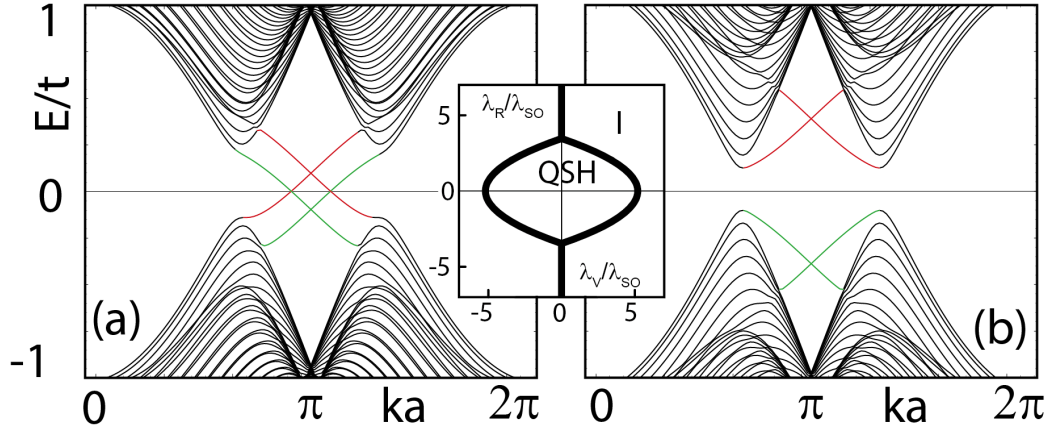


图 1.1: Kane-Mele模型的边缘态计算。(a)量子自旋霍尔相;(b)平庸能带绝缘相。图片取自文献(Kane and Mele, 2005a)

了能带反转机制对于形成QSH的重要意义。之后不久，德国实验组就在该量子阱结构中第一次实现了QSH效应(König et al., 2007b)。

对于QSH态这类非平庸拓扑相，Kane等人提出了 Z_2 的拓扑分类：当 $Z_2 = 0$ 时，系统为拓扑平庸相；当 $Z_2 = 1$ 时，系统为拓扑非平庸相。在表面态上反映为，当表面态在 $k \in [0, \pi]$ 路径上穿过费米面奇数次时（如图1.1(a)）， $Z_2 = 1$ ；当表面态在 $k \in [0, \pi]$ 路径上穿过费米面偶数次时（如图1.1(b)）， $Z_2 = 0$ 。

在数学上，Kane等人最早提出了Pfaffian的方法计算 Z_2 ，但是该方法计算复杂，且依赖波函数的规范。L.Fu等人指出，当系统具有空间反演对称性时， Z_2 可以由四个TRIM点上的占据态波函数的宇称乘积得到(Fu and Kane, 2007)，具体计算公式为，

$$(-1)^\nu = \prod_{n_j=01} \delta_{n_1 n_2} \quad (1.2)$$

$$\delta_{n_j} = \prod_{m=1}^N \epsilon_{2m}(\Gamma_{n_j}) \quad (1.3)$$

其中 N 等于占据态数目的一半， $\epsilon_{2m}(\Gamma_n)$ 代表第 n 个TRIM点上第 $2m$ 条占据态的宇称。当 ν 为偶数时， $Z_2 = 0$ ，为平庸拓扑相；当 ν 为奇数时， $Z_2 = 1$ ，为非平庸拓扑相。随着拓扑能带论的发展，这种计算拓扑不变量的形式被推广到了其它拓扑相的不变量计算，包括三维拓扑绝缘体的 Z_2 和部分拓扑晶体绝缘体的拓扑指标。三维拓扑绝缘体是QSH的推广(Fu et al., 2007)，其拓扑性质由四个 Z_2 拓扑数决定，包括一个强拓扑数和三个弱拓扑数，具体计算公式为，

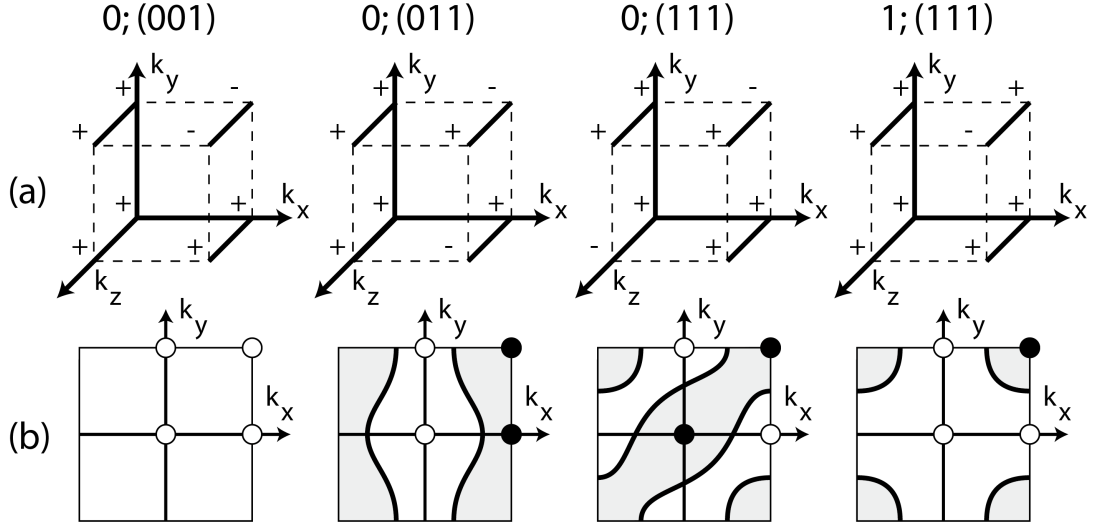


图 1.2: 由TRIM点宇称计算三维拓扑绝缘体的 z_2 。(a)TRIM点的宇称与对应的拓扑数；(b)与(a)图相对应的表面态连接方式。图片选自文献(Fu et al., 2007)

$$(-1)^{\nu_0} = \prod_{n_j=0,1} \delta_{n_1 n_2 n_3} \quad (1.4)$$

$$(-1)^{\nu_{i=1,2,3}} = \prod_{n_j \neq i=0,1; n_i=1} \delta_{n_1 n_2 n_3}. \quad (1.5)$$

ν_i 的奇偶性决定了四个 Z_2 拓扑数以及各个方向的表面态连接方式。例如图(1.2)，(a)图中的第一种情况沿 z 方向投影，(001)表面布里渊区的四个TRIM点宇称相同，因此不存在狄拉克锥型表面态；第二种和第三种情况的(001)表面布里渊区有偶数个宇称为负的TRIM点，为弱拓扑绝缘体，在宇称相反的两个TRIM点之间存在拓扑非平庸的表面态；最后一种情况八个TRIM点的宇称乘积为负，是强拓扑绝缘体，那么沿着任何一个方向投影，都会得到奇数个狄拉克锥型表面态。

对于没有中心反演的体系，我们依然可以采用另外一种更普适的计算方法，Wilson-loop方法(Yu et al., 2011)。可以通过计算占据态波函数的瓦尼尔函数心在封闭的布里渊区中的缠绕数，给出体系的拓扑不变量以及很直观地判断拓扑表面态的演化方式。

1.1.2 拓扑晶体绝缘体

除了时间反演对称性保护的 Z_2 拓扑绝缘体，还有一类非常重要的拓扑绝缘体由晶体对称性保护。第一种被发现的拓扑晶体绝缘体是SnTe(Hsieh et al.,

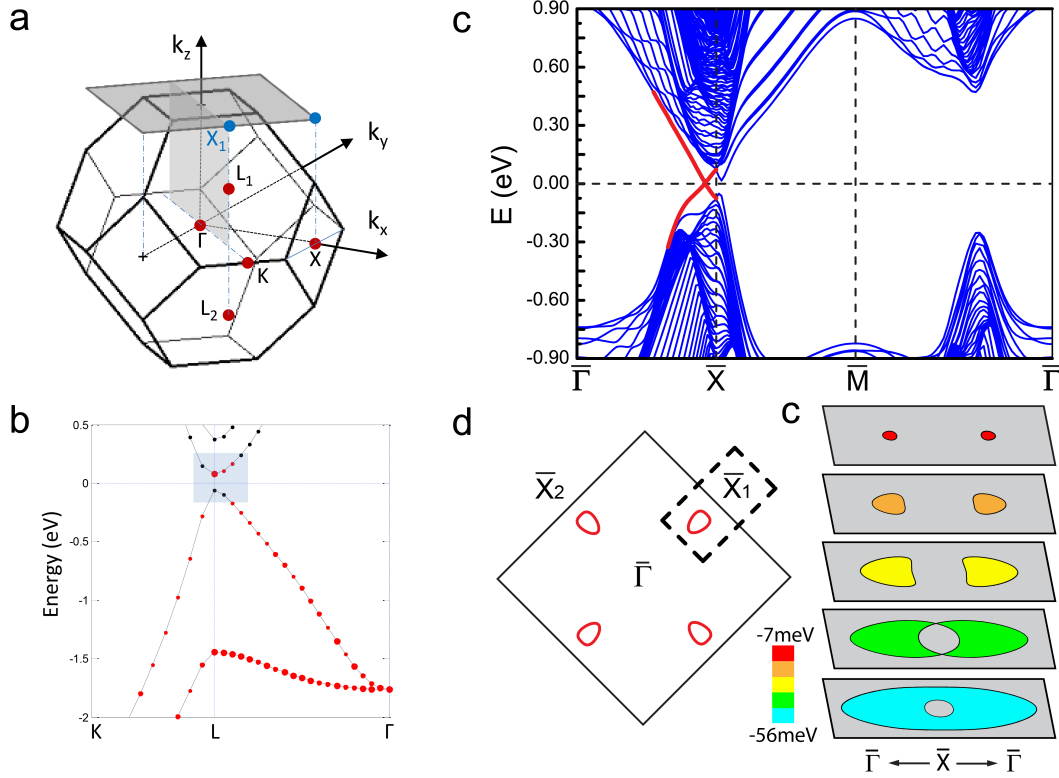


图 1.3: 拓扑晶体绝缘体SnTe的电子结构。(a)体布里渊区以及沿(001)投影的表面布里渊区；(b) L 点附近的体能带投影；(c)(001)方向的表面态slab计算结果；(d)(001)方向的表面态费米面,以及随着能量的变化费米面的lifshiz相变。图片选自文献(Hsieh et al., 2012)

2012; Tanaka et al., 2012), 它的拓扑是由镜面对称性保护的。从SnTe的费米面附近能带投影（图1.3 (b)）可以看出，在 L 点附近能带发生反转，通过计算时间反演不变点处的宇称本征值，发现它的 Z_2 拓扑不变量等于0，从 Z_2 的拓扑分类来讲是平庸的。这是很显然的事情，因为在整个布里渊区中存在四个 L 点。L.Fu等人发现在布里渊区的镜面上可以定义另外一种叫镜面陈数的拓扑不变量，镜面陈数由以下公式给出，

$$C_m = \frac{C^{(i)} - C^{(-i)}}{2} \quad (1.6)$$

即镜面本征值为 i 的占据态波函数与镜面本征值为 $-i$ 的占据态波函数陈数之差模2。对于有时间反演对称性的系统，时间反演算符会使得两个子空间的镜面陈数相差一个负号，因此系统的总陈数为零。通过计算发现SnTe的镜面陈数等于2，因此从晶体对称性的拓扑分类上来讲，该体系依然是拓扑非平庸的。从图1.3 (c) 的表面态计算结果来看，在镜面路径 $\bar{X}-\bar{\Gamma}-\bar{X}$ 上有两个Dirac锥型螺旋表面态，这与镜面陈数相对应。从图1.3 (d) 的不同能量费米面可以看到表

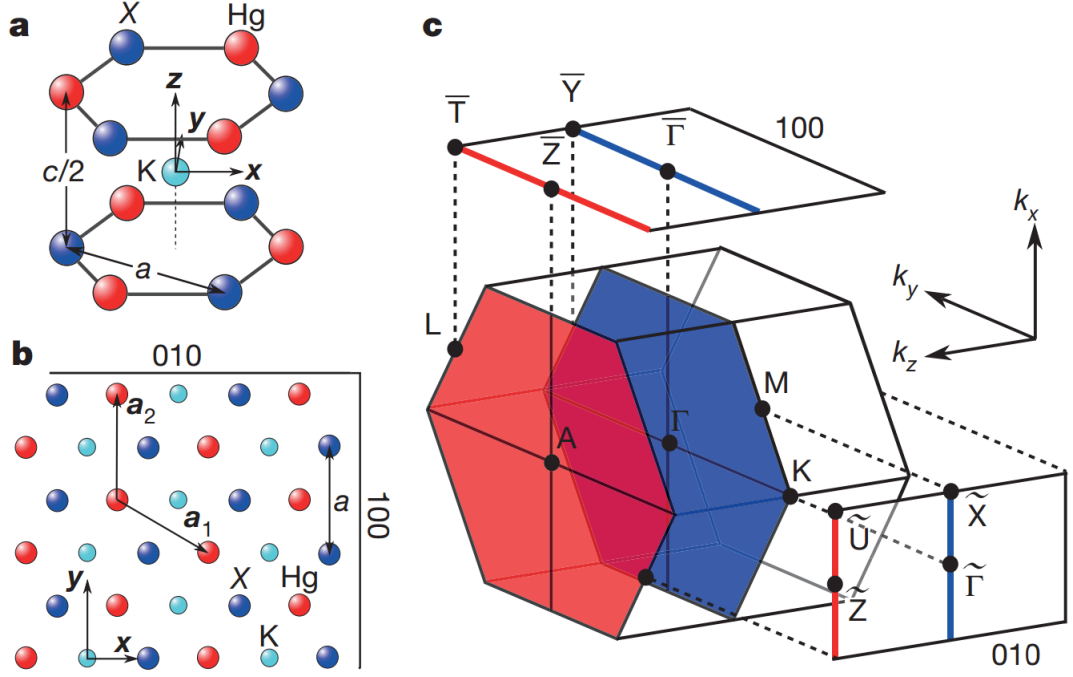


图 1.4: (a)KHgSb的沿z轴的半个晶胞结构；(b)晶体结构沿z方向的俯视图；(c)体布里渊区以及沿侧表面投影的表面布里渊区。图片选自文献(Wang et al., 2016)

面Dirac锥的Lifshitz相变。

2016年，王志俊等人提出了另外一种由非简单晶体对称性保护的拓扑绝缘体(Wang et al., 2016)，并提出KHgSb是实现该拓扑晶体绝缘体的理想材料，其拓扑表面态存在特殊的沙漏型结构。这一预言很快被ARPES实验所证实。

KHgSb体系的晶体结构如图1.4(a)所示，属于194号空间群($P6_3/mmc$)，其点群对称性为 D_{6h} 。空间群的生成元包括时间反演 T ，中心反演 I ，三度旋转 C_{3z} ，镜面反射 M_y ，滑移镜面反射 $\tilde{M}_x = M_x|(0, 0, 1/2)$ 。由第一性原理计算得到的电子结构显示在布里渊区的 Γ 点和 A 点附近能带发生反转，因此该体系很有可能处于拓扑非平庸态。通过计算(010)侧表面的表面态(如图1.5)，发现有类似于 Z_2 型的非平庸的拓扑表面态连接着价带和导带。与 Z_2 拓扑表面态不同的是，该拓扑表面态的连接方式还与晶体对称性有关。例如图1.5(a)中的 $\tilde{Z}-\tilde{\Gamma}$ 路径，在该路径上保持滑移对称性 $\tilde{M}_x = M_x|(0, 1/2)$ ，由于 $\tilde{M}_x^2 = -1|(0, 1)$ ，其本征值为 $\pm ie^{ik_z/2}$ 。在 $\tilde{\Gamma}$ 点 $k_z = 0$ ，时间反演操作使得Kramers对的滑移镜面操作本征值为 $+i$ 和 $-i$ 。同理，在 $\tilde{Z}$ 点Kramers对的滑移镜面本征值同为 $+1$ 或者 -1 。所以在该路径上的能带连接方式只能是图1.5中的(c)和(d)两种情况。(c)的连接方式类似于 Z_2 拓扑绝缘体的表面态，(d)的连接方式被称为沙漏型费米子。通过计算滑移面的上的wannier函数心演化，可以判断该路径上的表面态属于哪种连接方式。同理，

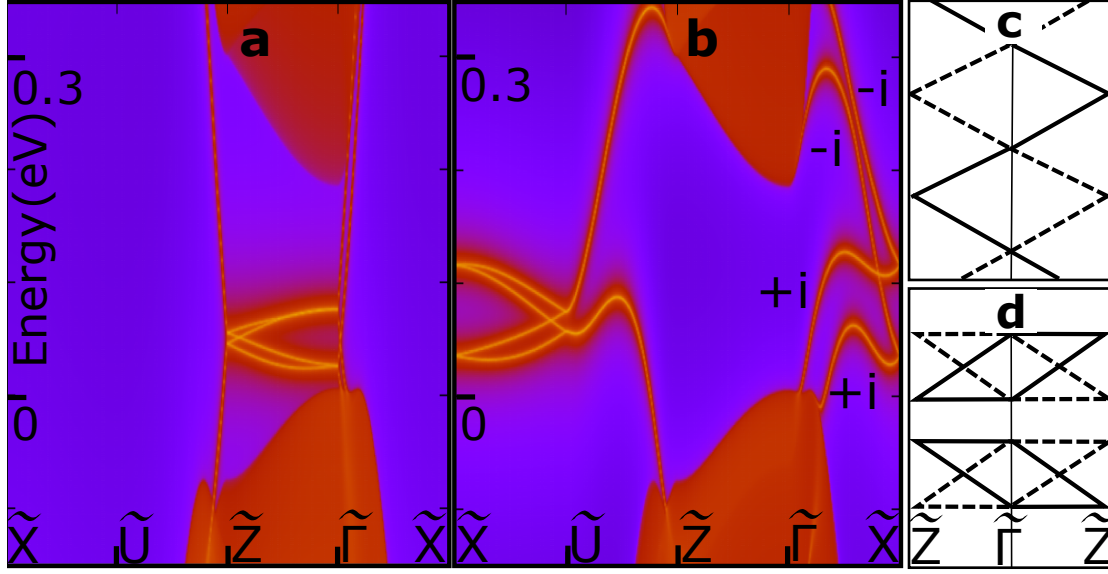


图 1.5: (a)KHgSb的(010)面表面态; (b)修正表面化学势之后的(010)表面态; (c)(d)分别是 $\tilde{Z} - \tilde{\Gamma}$ 路径上表面态的两种可能的连接方式。图片选自文献(Wang et al., 2016)

其它路径上的拓扑表面态演化方式也可以通过计算滑移面陈数得到。对于 $\tilde{Z} - \tilde{U}$ 路径，由于保持 $T\tilde{M}_x$ 对称性，且该算符为反么正的，类似于时间反演算符，所以在路径上任一k点都有Kramers简并。

1.1.3 $d - 2$ 维拓扑晶体绝缘体

Z_2 拓扑绝缘体和拓扑晶体绝缘体都是一类 d 维体态绝缘， $d - 1$ 维的边界或表面上导电的拓扑态。最近， $d - 2$ 维拓扑边界态的概念得到了广泛的研究(Song et al., 2017; Benalcazar et al., 2017a; Langbehn et al., 2017; Benalcazar et al., 2017b; Schindler et al., 2018b,a; Yue et al., 2018)，即体态和表面态都是有能隙的绝缘态，但是在棱上存在无能隙的拓扑导电态。已经被提出的材料包括拓扑晶体绝缘体SnTe，单质Bi，以及磁性掺杂Sm的 Bi_2Se_3 体系。对于这一类拓扑绝缘体，本质上也是由晶体对称性保护的。例如，SnTe的螺旋型棱态由时间反演对称性和四度旋转对称保护，如图1.6(a)，在四度旋转下表面态的质量项变号，在两个表面的棱上存在质量项为0的螺旋边界态(图1.6(b))。对于磁性掺杂Sm的 Bi_2Se_3 体系，如图1.6(c)，磁性破坏了时间反演对称性，在自旋极化方向的上下表面引入符号相反的质量项，TI的狄拉克锥形螺旋表面态打开能隙，在两个表面的交界处存在手征性棱态（如图1.6(d)）。最近，Frank Schindler等人通过第一性原理计算和STM实验首次在单质铋中证实了螺旋型一维棱态的存

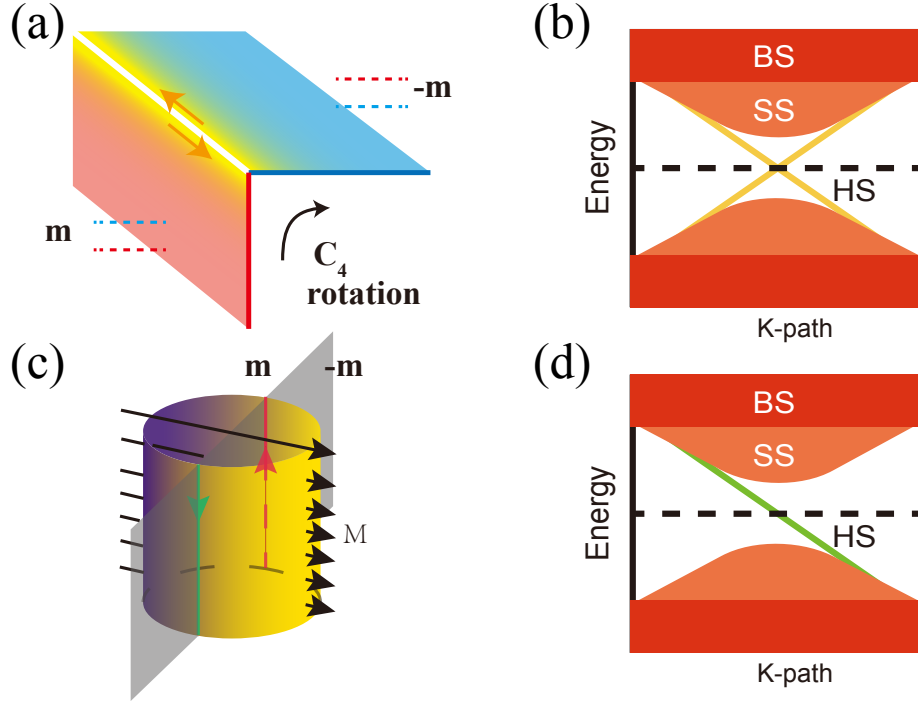


图 1.6: 在三维拓扑绝缘体中, 由对称性保护的一维棱态。(a)由四度旋转对称性保护的螺旋型拓扑棱态。(b)螺旋型棱态(HS)的能量色散示意图, 其中体态(BS)和表面态(SS)都存在能隙。(c)由镜面对称性保护的一维手征型棱态, 其中内禀磁矩方向垂直于镜面。(d)手征型棱态的能量色散示意图。图片选自文献(Song et al., 2017; Yue et al., 2018)

在。

1.1.4 轴子绝缘体

轴子绝缘体(Axion insulator) 是最近比较流行的另外一种拓扑绝缘体。轴子场最初是为了解决量子色动力学中的强CP破缺问题而引入的。而在凝聚态物理中, 轴子场可由拓扑量子场论的语言描述。其对应的拉矢量形式为,

$$S_\theta = \frac{\theta e^2}{4\pi^2} \int dt d^3x \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} \quad (1.7)$$

式中 E 和 B 是经典的电磁场。与经典的电动力学不同, 该项描述的是电磁场耦合项, 对应的物理效应是拓扑磁电响应(TME), 即纵向磁场在轴子绝缘体的表面将诱导纵向的电极化量, 而纵向的电场将诱导同向的自旋极化。其响应系数为上式中的 θ 角, 又被称为轴子场。除了TME, 轴子绝缘体的表面还可以存在半整数的量子霍尔效应。

对于一般的轴子绝缘体, θ 角具有 2π 的周期。由于 $E \cdot B$ 在时间反演或者空间反演下为奇函数, 所以对于时间反演或者空间反演体系, θ 角只能取0或 π 。 Z_2 拓扑绝缘体就是一种 $\theta = \pi$ 的特殊的轴子绝缘体, 当拓扑绝缘体的表面打开能隙时, 可以在实验上观察其表面的半整数量子霍尔效应。

θ 角在拓扑学上对应第二类陈数, 在固体物理中其具体计算形式由祁晓亮等人基于Chern-Simons场论导出。后来Ari M. Turner等人([Turner et al., 2012](#))在研究空间反演不变的磁性体系的拓扑分类时提出, θ 角可以简单的由八个空间反演不变点上占据态宇称的乘积得到。其分类形式如图(1.7)。对于某些轴子绝缘体, 当表面态打开能隙后, 可以在棱上存在由晶体对称性保护的一维棱态。

1.2 拓扑半金属

最近几年，拓扑半金属成为了凝聚态物理领域的研究热点。与拓扑绝缘体不同，拓扑半金属是指在费米面附近的最低非占据导带和最高占据价带之间存在零能隙的简并点或线，这些简并一般是由晶体对称性或者平移对称性保护的，在其表面也会存在非平庸的拓扑表面态。根据简并点附近的低能有效物理，拓扑半金属又可以分为外尔半金属、狄拉克半金属、Nodal-line半金属以及其它新型的存在高度简并点的半金属。本节将基于最简单的模型来分析几种半金属的特征。

1.2.1 外尔半金属

外尔半金属是指在三维布里渊区中费米面附近存在零能隙的二度简并点，一般情况下在简并点附近的两条能带是线性交叉。该交叉点的低能激发准粒子被称为外尔费米子，其低能哈密顿量为 $H = v\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ，式中 v 的符号代表外尔费米子的手征。很明显在式中无法加入任何微扰的质量项打开两条能带的能隙，微扰项只会引起外尔费米子位置的移动，所以在三维空间外尔半金属的拓扑是稳定的，只由平移对称性保护。相对来说，二维空间中的二度简并点是不稳定的，只要在二维平面的法向引入质量项就可以打开能隙。由外尔半金属的定义可知，形成简并点的两条能带均是单重简并，所以时间反演乘以空间反演对称性需被破缺，这也是筛选预测外尔半金属材料的重要原则。2011年，万贤刚等人认为在非磁性反铁磁材料 $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ 中存在外尔费米子(Wan et al., 2011)，并提出了外尔半金属的表面态存在独特的弧型费米面（即费米弧），这是外尔费米子存在的重要证据。随后，徐刚等人也在另外一种铁磁性材料 HgCr_2Se_4 中预言了高陈数外尔费米子的存在(Xu et al., 2011)。由于这两种材料的独特磁性结构，很难利用现有的ARPES实验条件准确验证其低能电子结构和费米弧。所以，从实验的可验证角度来讲，保留时间反演但破坏空间反演对称性显得非常重要。2014年底，翁红明等人通过计算提出在TaAs等四种非中心对称体系中可能存在外尔费米子(Weng et al., 2015)，并计算出了其表面态中连接外尔点的费米弧，TaAs等系列材料很快被ARPES实验组相继证实为外尔半金属体系。第一性原理计算表明，在不考虑SOC时，在TaAs的布里渊区的几个镜面上存在由对称性保护的线节点，加入SOC使线节点打开能隙，退化成了12对孤立的二度简并点，即外尔点，其分布如图1.8(a)所示。由经典电动力学可知，在实空间中磁单极子不存在。但是在参数空间中，比如周期性体系的倒格子空间，可以定义贝利曲率。

由外尔点的哈密顿量可以很容易证明，在外尔点附近贝里曲率发散，如果把倒空间中的贝里曲率当做磁场，那么外尔点可以等价为倒空间中的磁单极子，如图1.8(b)。此时在外尔点附近的布里渊区中可以定义一个有全能隙的封闭曲面，当该曲面包裹住一个手性为 n 的外尔点时，由高斯定理可知，贝里曲率对该曲面的积分等于 $2n\pi$ ，即该曲面的陈数为 n 。因此，外尔半金属又被称为陈半金属。如图（1.9），当外尔点投影在表面布里渊区时，同样可以定义一个圆环，当它包住一个外尔点时，绕着圆环将会有一条无能隙的手征表面态穿过费米面；当圆环同时包住两个手性相反的外尔点时，圆环内部的总陈数为零，没有或者有偶数条手性相反的表面态穿过费米面。所有这些圆环上的表面态都会贡献费米面上的一个点，所有的点连接起来就构成了连接两个外尔点的费米弧。

1.2.2 狄拉克半金属

狄拉克半金属是一种费米面为四度简并点的半金属体系，其低能激发谱由一个四乘四的无质量狄拉克方程描述。2012年，王志俊等人提出在 Na_3Bi 体系中存在由对称性保护的狄拉克费米子(Wang et al., 2012)。该准粒子的低能有效模型可以写为 $H = v \sum_{i=x,y,z} \tau_z k_i \sigma_i$ 。因此狄拉克费米子可以认为是两个手性相反的外尔费米子的直和，在费米能上是四度简并。一般情况下，两个外尔点之间有耦合质量项，因此该四度简并点不稳定，会被SOC等打开能隙。但是在一些特殊的对称性要求下，该耦合项是禁闭的，狄拉克点可以稳定存在。例如在 Na_3Bi 体系中，在三度旋转轴上形成反带的两支二度简并能带属于不同的不可约表示，因此他们之间的无法打开能隙，该狄拉克点 C_3 对称性保护。

与外尔半金属不同，狄拉克点是由一对手性相反的外尔点直和得到，其陈数等于0，所以狄拉克半金属的表面态费米面不会出现像外尔半金属那样的开放型费米弧。但是在额外的对称性要求下，其表面态费米面可以出现两支费米弧组成的封闭型费米面。如在 Na_3Bi 体系中，两个狄拉克点之间由镜面对称性联系， $k_z = 0$ 的镜面陈数等于1，在两个狄拉克点之间存在非平庸的表面态(如图1.10)。狄拉克半金属是研究拓扑相变的理想平台，对于 Na_3Bi 而言，引入中心反演破缺或者时间反演破缺都会使每条能带的Kramers简并解除，进而使Dirac点劈裂为两个Weyl点，费米面上形成两个开放的费米弧，如图1.10(d)所示。如果破缺 C_3 对称性的话，Dirac点将打开能隙，形成 Z_2 拓扑绝缘体。

1.2.3 Nodal-line等新型拓扑半金属

如图(1.11) (a) (b),外尔费米子是能带二度简并的准粒子,狄拉克费米子是能带四度简并的准粒子。当一条一维表示的能带和一条二维表示的能带发生偶然交叉时,其简并点必然打不开能隙,其形成的准粒子低能色散由图(1.11) (c)描述。最近这种新型费米子已经由ARPES实验在MoP(Lv et al., 2017)和WC(Ma et al., 2018)体系中得到证实。

另外,当费米面附近的能带发生交叉,同时两条能带在某个二维平面上属于不同的对称性表示时,同样打不开能隙,形成如图(1.11)(d)示意的节点线半金属(Nodal-line semimetal)或节点链半金属(Nodal-chain semimetal)等。对于Nodal-line半金属,围绕节点线的封闭路径 c ,可以计算得到非平庸的贝里相位 π 。其计算公式为(Yu et al., 2015),

$$\gamma = \oint_C \mathcal{A}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \quad (1.8)$$

而在nodal-line半金属的表面上存在形如图1.12鼓膜结构的拓扑表面态。

1.3 主要研究内容与论文结构

本文的主要研究内容为，关联体系中的外尔半金属。在第二章，我们主要介绍几种弱关联的外尔半金属材料，包括 YCoC_2 中的Nodal-line半金属性和外尔半金属性、钙钛矿结构材料 HgPbO_3 中铁电诱导的外尔半金属相和层状蜂窝结构的铁磁材料 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的外尔半金属性以及反常霍尔效应。在第三章，将介绍LDA+Gutzwiller计算方法和重费米子体系中的外尔半金属态。我们采用第一性原理结合Gutawiller方法对重费米子体系 CeRu_4Sn_6 进行了研究，发现该材料中可能存在另外一种比较特殊的外尔费米子态，并研究了相互作用对该准粒子态的影响。最后，在第四章对整篇论文进行总结。

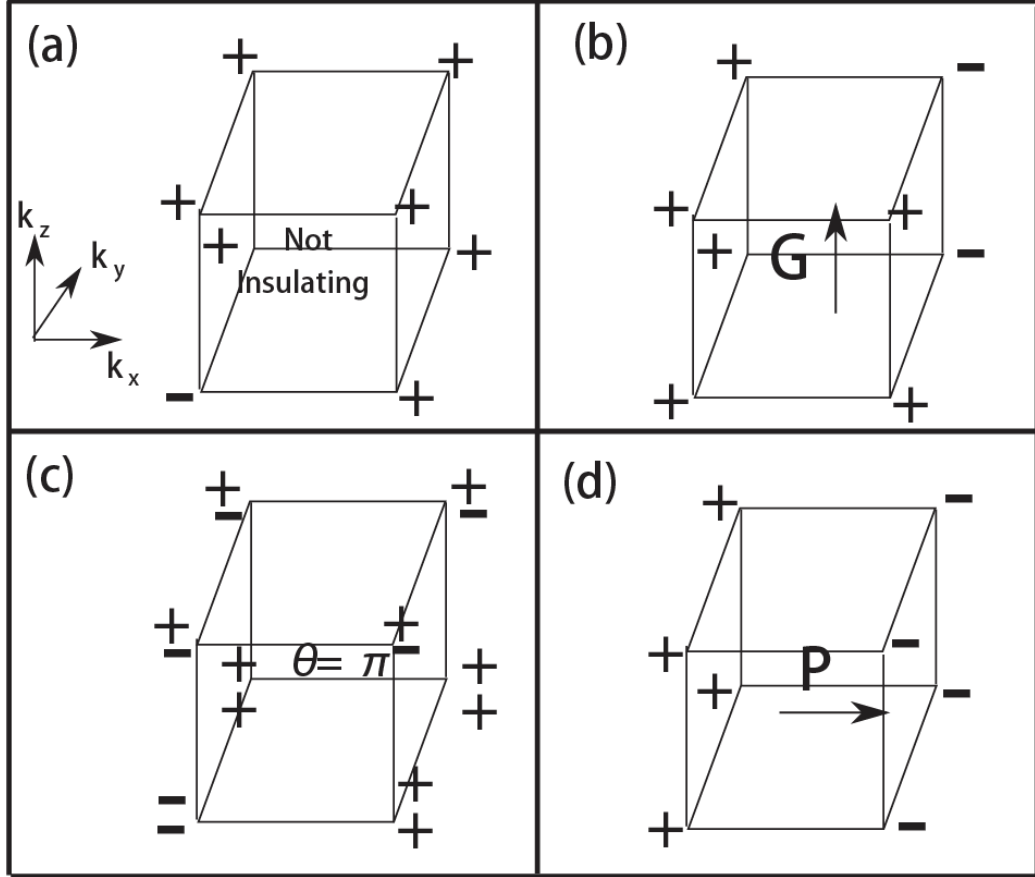


图 1.7: 磁性中心反演体系的拓扑分类。(a)当八个TRIM点上的宇称为-1的占据态总数为奇数时, 体系为金属或者外尔半金属态。(b)当 $k_z = 0$ 平面与 $k_z = \pi$ 平面的四个TRIM点的宇称分布相同, 并且宇称乘积都为-1, 体系在 xy 面上存在陈数为奇数的霍尔电导。(c)八个时间反演不变点处共奇数对宇称为-1的占据态, 体系为 $\theta = \pi$ 的轴子绝缘体。(d) $k_y = 0$ 平面四个TRIM点宇称与 $k_y = \pi$ 面内四个TRIM点宇称相反, 体系在 y 方向存在有限的电极化量。图片选自文献(Turner et al., 2012)

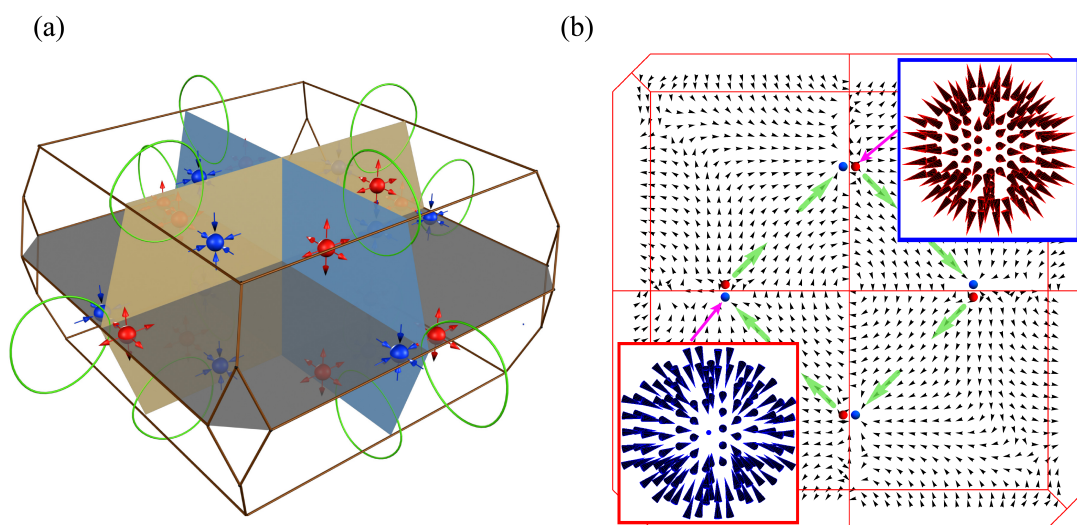


图 1.8: (a)TaAs的外尔点在布里渊区中的分布；(b)外尔点所在平面的贝里曲率分布，其中小插图是外尔点附近发散的贝里曲率。图片选自文献(Weng et al., 2015)

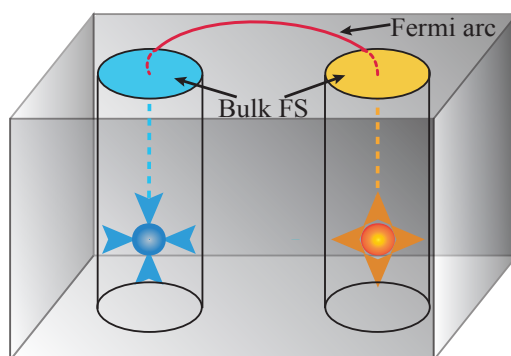


图 1.9: 在外尔半金属表面，手征表面态连接两个手性相反的外尔点，在费米面上形成费米弧。图片选自文献(Xu et al., 2017)

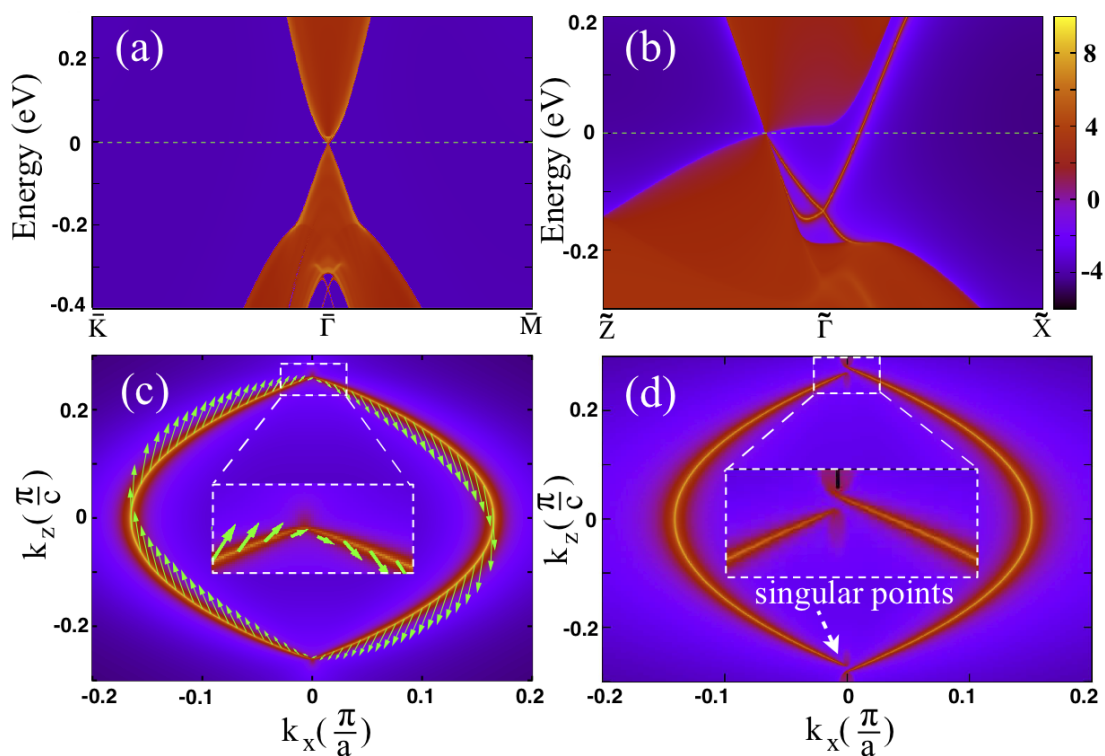


图 1.10: (a)(001)方向的表面态色散；(b) (010) 方向的表面态色散；(c)(010)表面的费米面和自旋分布情况；(d)Zeeman场破缺时间反演对称性之后的费米面。图片选自文献(Wang et al., 2012)

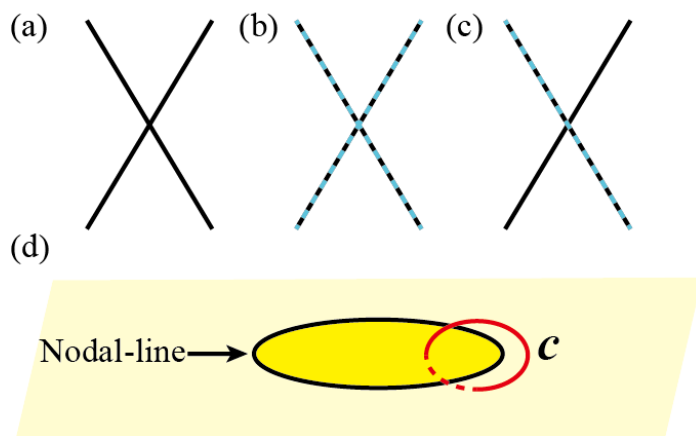


图 1.11: (a)二度简并的外尔点的低能线性色散；(b)四度简并的狄拉克点的低能线性色散；(c)由单重简并和二度简并的能带交叉形成的三重简并点；(d)Nodal-line半金属在高对称面上形成的节点线。

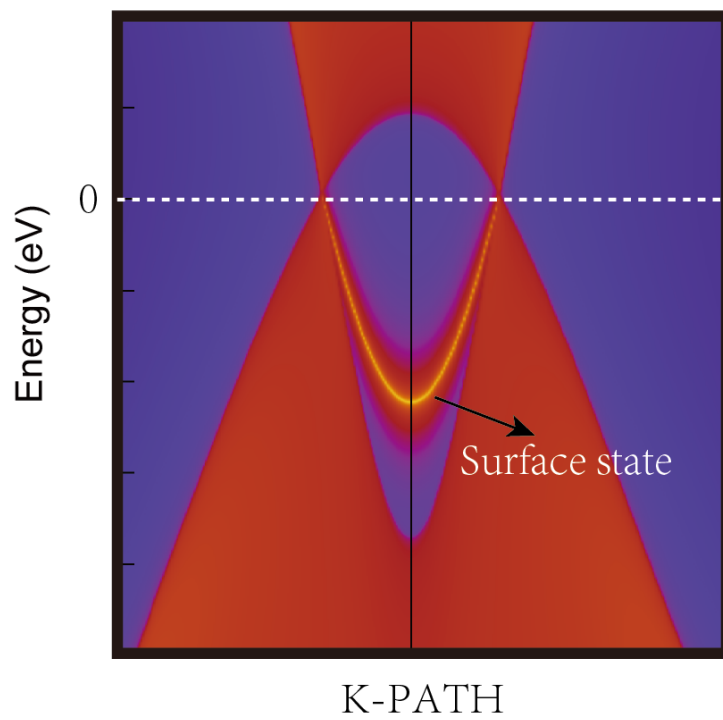
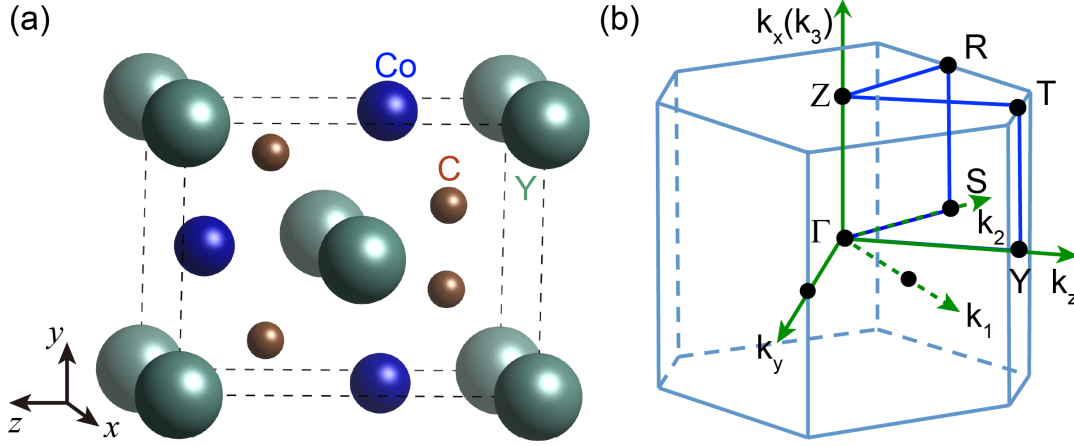


图 1.12: Nodal-line半金属的鼓膜状拓扑表面态。

第二章 弱关联体系中的外尔半金属

2014年, 我们组翁红明等人通过第一性原理计算, 预测非中心对称的TaAs家族是外尔半金属体系(Weng et al., 2015), 并给出了两类外尔点在三维布里渊区中的精确位置。他们计算了布里渊区中贝利曲率的分布(如图1.8), 可以看出在外尔点附近贝利曲率是发散的, 类似倒空间中的磁单极子。由于这类体系的电子关联比较弱, 平均场近似(LDA或GGA)即可以给出比较合理的基态电子结构, 所以该理论预言很快得到了实验的验证。目前, 国内外已有多个实验组通过ARPES实验测到了与理论计算相吻合的弧形表面态费米面(Lv et al., 2015; Xu et al., 2015b)。随后, 一系列外尔半金属材料相继被理论预测, 包括在光学超晶格体系(Lu et al., 2015)和声子晶体中的外尔玻色子态(Zhang et al., 2018c)。本章节, 我们主要介绍通过第一性原理计算预测的三种不同类型的弱关联外尔半金属材料。


 图 2.1: YCoC_2 的晶体结构和布里渊区

2.1 YCoC_2 中的Nodal-line与外尔点

2.1.1 晶体结构与计算细节

如图2.1, YCoC_2 (Jeitschko and Gerss, 1986) 属于底心正交晶系, 对称性为 $\text{Amm}2$, 38号空间群。我们在计算中采用实验提供的晶格参数 $a = 3.541\text{\AA}$, $b = 4.515\text{\AA}$, $c = 6.032\text{\AA}$ 。Y原子占据 $2a(0, 0, 0)$, Co原子占据 $2b(0.5, 0, 0.3856)$, C原子占据 $4e(0.5, 0.345, 0.2086)$ 。该空间群的生成元包括镜面 M_x 和 M_y 。在计算中我们基于VASP软件包 (Kresse and Hafner, 1993; Kresse and Furthmüller, 1996), 采用了GGA-PBE型交换关联势 (Perdew et al., 1996b)。基于第一性原理计算和模型分析, 我们提出非中心对称体系 YCoC_2 是一类很有意义的拓扑半金属材料。在不考虑SOC时, 该体系是一种X型的Nodal-line半金属态, 两个Nodal-line分别受两个互相垂直的镜面保护, 并且两个环相内切。在考虑SOC时, 与TaAs和HfC (Yu et al., 2017) 等材料类似, 两个Nodal-line分别打开能隙, 并退化成了十对外尔点。

2.1.2 Nodal-line半金属态

在不考虑SOC时, 体能带在Z点附近形成反带交叉, 主要成分为Co的3d轨道和C的2p轨道。通过计算, 我们得到两条能带在镜面 $k_3 = \pi$ 和镜面 $k_1 = k_2$ 上属于镜面本征值不同的两种不等价不可约表示, 因此在这两个镜面上, 反带交叉受到镜面对称性保护, 形成两个Nodal-line。

基于wannier90软件包 (Mostofi et al., 2008), 我们可以把费米面附近的体能带投影到了原子轨道上, 即Co的3d轨道、Y的4d轨道和C的2p轨道, 得到实空

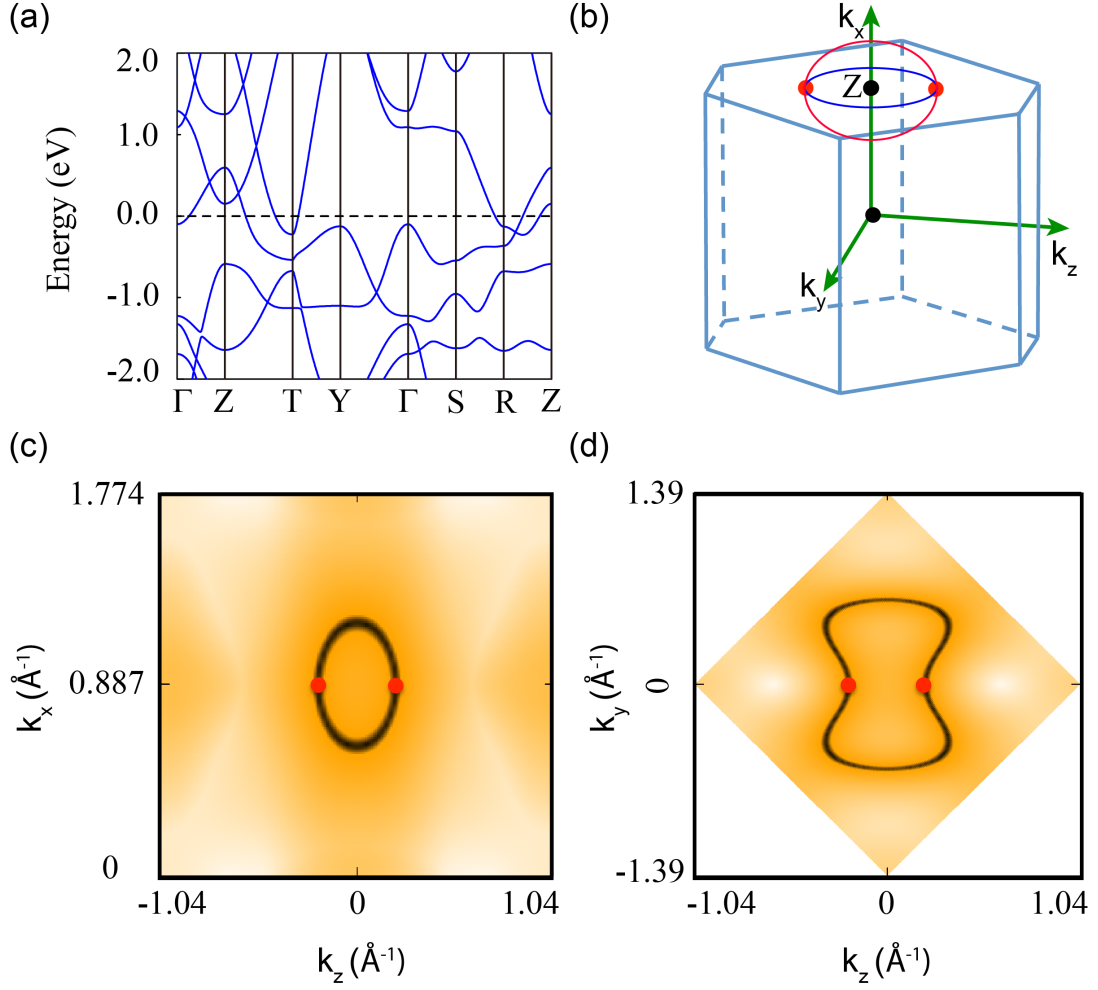


图 2.2: (a)YCoC₂的非soc能带结构; (b)两个Nodal-line在布里渊区中的示意图; (c)(d)基于紧束缚哈密顿量, 计算得到的Nodal-line在两个镜面(c) $k_1 = k_2$ (d) $k_3 = \pi$ 上的精确位置与形状。

间的紧束缚哈密顿量。通过简并点搜索, 可以得到两个Nodal-line在布里渊区中的精确位置 (如图2.2), 并且这两个环线在 $k_z = \pi$ 面上相切。为了验证这一点, 我们基于Z的点群对称性做了 $k \cdot p$ 展开。

$$\mathcal{H}_Z(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + d_1(\mathbf{k})\sigma_x + d_2(\mathbf{k})\sigma_y + d_3(\mathbf{k})\sigma_z, \quad (2.1)$$

Z点的小群是 C_{2v} , 包括镜面 $\mathcal{M}_x : (x, y, z) \rightarrow (-x, y, z)$, 和镜面 $\mathcal{M}_y : (x, y, z) \rightarrow (x, -y, z)$ 。在不考虑SOC时, 体系的时间反演算符可以写为 $\mathcal{T} = \mathcal{K}$, 此时满足 $\mathcal{T}^2 = 1$ 。在该点群的限制下, kp 哈密顿量满足如下关系,

$$\mathcal{T}\mathcal{H}_Z(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}_Z(-\mathbf{k}), \quad (2.2)$$

$$\mathcal{M}_x \mathcal{H}_Z(\mathbf{k}) \mathcal{M}_x^{-1} = \mathcal{H}_Z(-k_x, k_y, k_z), \quad (2.3)$$

$$\mathcal{M}_y \mathcal{H}_Z(\mathbf{k}) \mathcal{M}_y^{-1} = \mathcal{H}_Z(k_x, -k_y, k_z), \quad (2.4)$$

方程 (2.2) 要求 $d_2(\mathbf{k})$ 是关于 $\mathbf{k}$ 的奇函数, 而 $d_{1,3}(\mathbf{k})$ 是关于 $\mathbf{k}$ 的偶函数。由第一性原理计算可知, 形成反交叉的两条能带的不可约表示属于不同的镜面本征值, 因此镜面操作的矩阵表示可以写成 σ_z 。近似到 $\mathbf{k}$ 的二阶项, 哈密顿量可以写成,

$$H_Z(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \begin{pmatrix} d_3(\mathbf{k}) & bk_x k_y \\ bk_x k_y & -d_3(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

其中 $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = a_0 + a_1 k_x^2 + a_2 k_y^2 + a_3 k_z^2$, $d_3(\mathbf{k}) = c_0 + c_1 k_x^2 + c_2 k_y^2 + c_3 k_z^2$ 。式中的参数 a_i c_i and b 可以通过与第一性的能带拟合得到。

通过简单分析可以发现, 当系数 $c_0 > 0$ 并且 $c_{1,2,3} < 0$ 的时候, Z点的两条能带发生反交叉。在 $k_x = 0$ 平面上, 两条能带的交点由方程 (2.6) 的解给出,

$$c_0 + c_2 k_y^2 + c_3 k_z^2 = 0 \quad (2.6)$$

在 $k_y = 0$ 平面上, 两个能带的交点由方程 (2.7) 的解给出。

$$c_0 + c_1 k_x^2 + c_3 k_z^2 = 0 \quad (2.7)$$

这两个方程的解分别是 k_y - k_z 面和 k_x - k_z 面内的两个环线。同时, $(0, 0, k_z = \pm \sqrt{\frac{-c_0}{c_3}})$ 为两个方程共同的解, 即两条环线在这两个点处相连。基于以上 $k \cdot p$ 模型, 我们也很容易证明在布里渊区中, 不可能存在其它的能带交点。对于哈密顿量 (2.5), 其本征值的通解为,

$$E = \varepsilon_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{(d_3(\mathbf{k}))^2 + (bk_x k_y)^2} \quad (2.8)$$

能带交叉意味着 $(d_3(\mathbf{k}))^2$ 和 $(bk_x k_y)^2$ 都等于0。第二项要求 $k_x = 0$ 或 $k_y = 0$, 带入到第一项即可得到上面两个方程 2.6 2.7。根据与第一性计算的拟合结果, 模型的系数为: $a_0 = 0.3651$, $a_1 = 0.6704$, $a_2 = 0.5019$, $a_3 = -2.0301$, $b = 44.1078$, $c_0 = 0.2203$, $c_1 = -2.6212$, $c_2 = -0.5063$, $c_3 = -5.0572$ 。

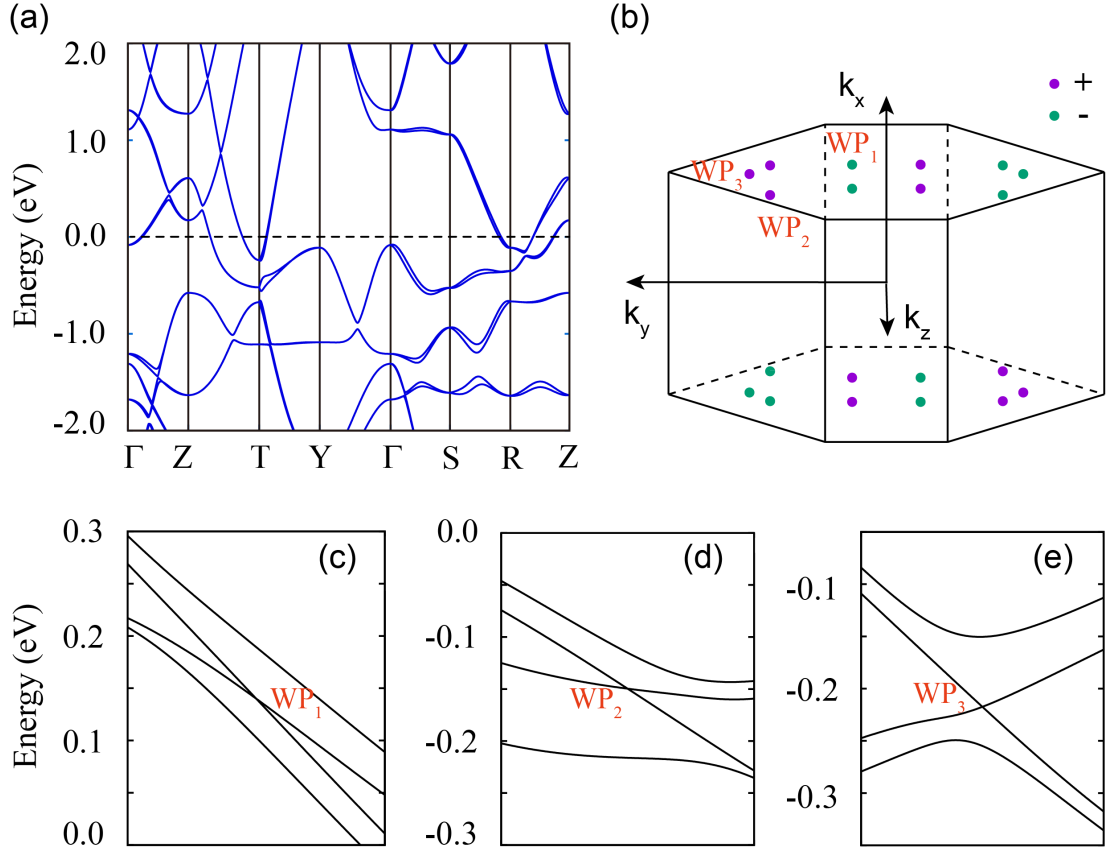


图 2.3: (a)YCoC₂的加soc能带结构；(b)十对外尔点在简约布里渊区中的位置示意图；(c)-(e)在三类外尔点附近的能带色散。

2.1.3 外尔半金属态

对于一般的Nodal-line半金属态，在考虑自旋轨道耦合之后，体系的拓扑性质有四种可能：（1）在特殊的镜面上，发生反交叉的两条能带在镜面上（包括滑移面）属于不同的双群表示，Nodal-line依然存在；（2）两条能带的双群表示相同，Nodal-line打开能隙形成拓扑绝缘体。（3）Nodal-line打开能隙形成平庸的绝缘体；（4）Nodal-line打开能隙，但是在一些孤立的点处存在简并，即外尔点。从LDA+SOC的计算结果2.3(a),我们可以看出在所有的高对称路径上能带都打开了能隙。基于wannier90得到的紧束缚哈密顿量，利用wanniertools软件包可以很快捷地确定整个布里渊区中是否存在外尔点。结果表明对于YCoC₂体系，在整个布里渊区中一共存在十对外尔点，这十对外尔点又可以分为互不等价的三类，每一类都可以通过对称性操作联系起来。另外，定义一个包裹外尔点的封闭曲面，通过计算该曲面的陈数可以得到每一个外尔点的手性。它们在布里渊区中的位置如图2.3(b)，坐标如表格2.1。

从这三类外尔点附近的能带色散图2.3(c-e)可以看出，第一种外尔点 WP_1 和第二种外尔点 WP_2 沿着某个方向的色散，价带和导带斜率相同，属于Type-II型外尔点。而第三种外尔点 WP_3 则属于Type-I型外尔点。Type-II型外尔点的特征在文献(Soluyanov et al., 2015)中已做了比较详细的研究，由于其破缺了洛伦兹不变性，在输运上表现为各向异性的手征反常现象。

表面态的费米弧型费米面是外尔半金属的最重要特征，同时也是实验上判断Weyl半金属的重要证据。我们采用格林函数方法(Wu et al., 2017)，分别计算了三类外尔点所在能量处的表面态，如图2.4所示。从费米面可以看出，Type-II型外尔点处在电子包和空穴包相接的位置，而Type-I型的外尔点是费米面上的一个孤立的点。所以从Type-I的表面态可以很清晰地看到费米弧连接着两个相反手性的外尔点。而Type-II的费米弧紧贴在电子包或者空穴包的边缘，在实验上很难与体态区分开。即便如此，我们依然可以在表面布里渊区定义一条路径，使得只在外尔点处有激发，而在外尔点附近存在能隙，如图2.4(a)(d)所示，这样就可以从表面态色散看到外尔点附近的狄拉克锥形体态以及形成费米弧的拓扑表面态。

考虑到在费米面附近，能带的主要成分包括Co的3d电子，具有一定的关联相互作用。为了验证该外尔半金属的拓扑稳定性，我们做了LDA+U+SOC计算。从能带结构（如图2.5）上可以看出，在很大的相互作用范围内，能带只发生了一些简单的变形，但是形成外尔点的反带依然存在，这说明外尔点并不会消失，只是在布里渊区中的位置发生了变化。

2.1.4 小结

通过第一性原理计算和模型分析，我们提出了关联体系 $YCoC_2$ 可能是一种拓扑半金属。在不考虑自旋轨道耦合时，体系属于由镜面保护的Nodal-line半金属。加入自旋轨道耦合项，Nodal-line退化为十对外尔点，包括Type-I和Type-II外尔点两种类型。从表面态可以看到Weyl半金属特有的费米弧，以及Weyl点

表 2.1: 三类外尔点在布里渊区中的坐标及能量

外尔点	位置 ($\text{\AA}^{-1}$)	能量 (eV)
WP_1	(0.8519, 0.1727, 0.2655)	0.1368
WP_2	(0.8250, 0.5804, 0.3265)	-0.1513
WP_3	(0.8715, 0.6826, 0.0000)	-0.2174

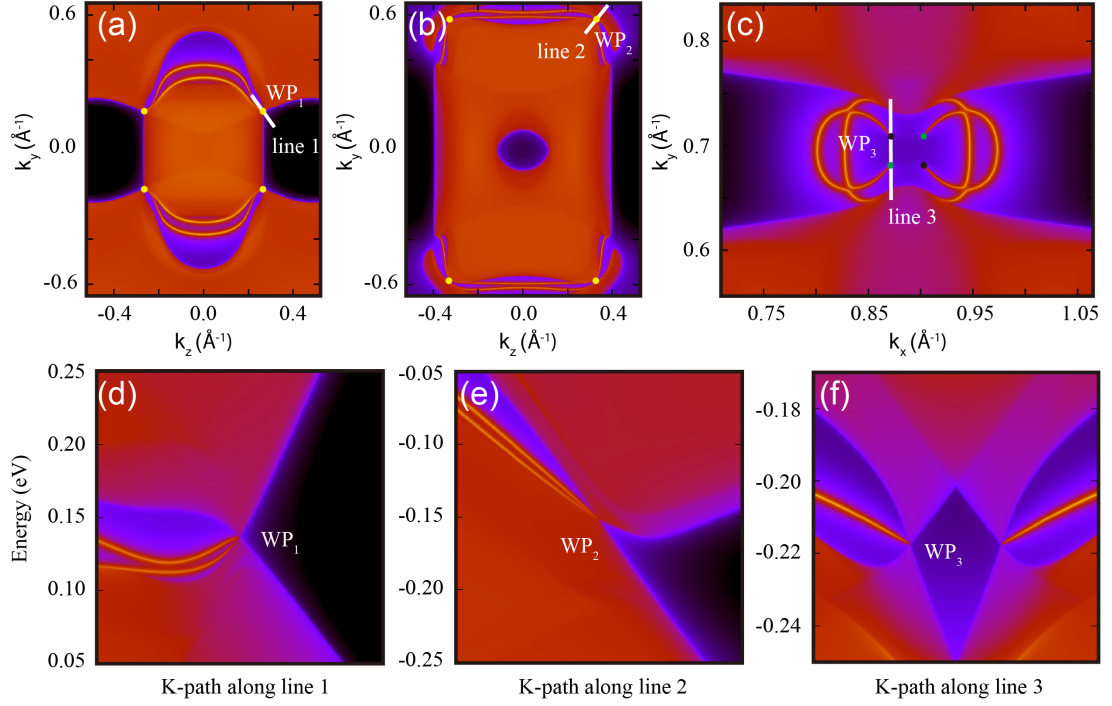


图 2.4: (a) WP_1 的能量处，沿着 x 方向投影的表面态费米面；(b) WP_2 的能量处，沿着 x 方向投影的表面态费米面；(c) WP_3 的能量处，沿着 z 方向投影的表面态费米面。(d)-(e) 分别为与上面三张图中白色路径所对应的表面态色散。

附近的狄拉克锥型色散。同时，该体系的拓扑物性对于很强的关联相互作用依然存在。另外实验上曾有报道称在 4.2K 左右该材料出现超导(Cigarroa et al., 2014)，所以它也可作为拓扑超导材料的候选者。

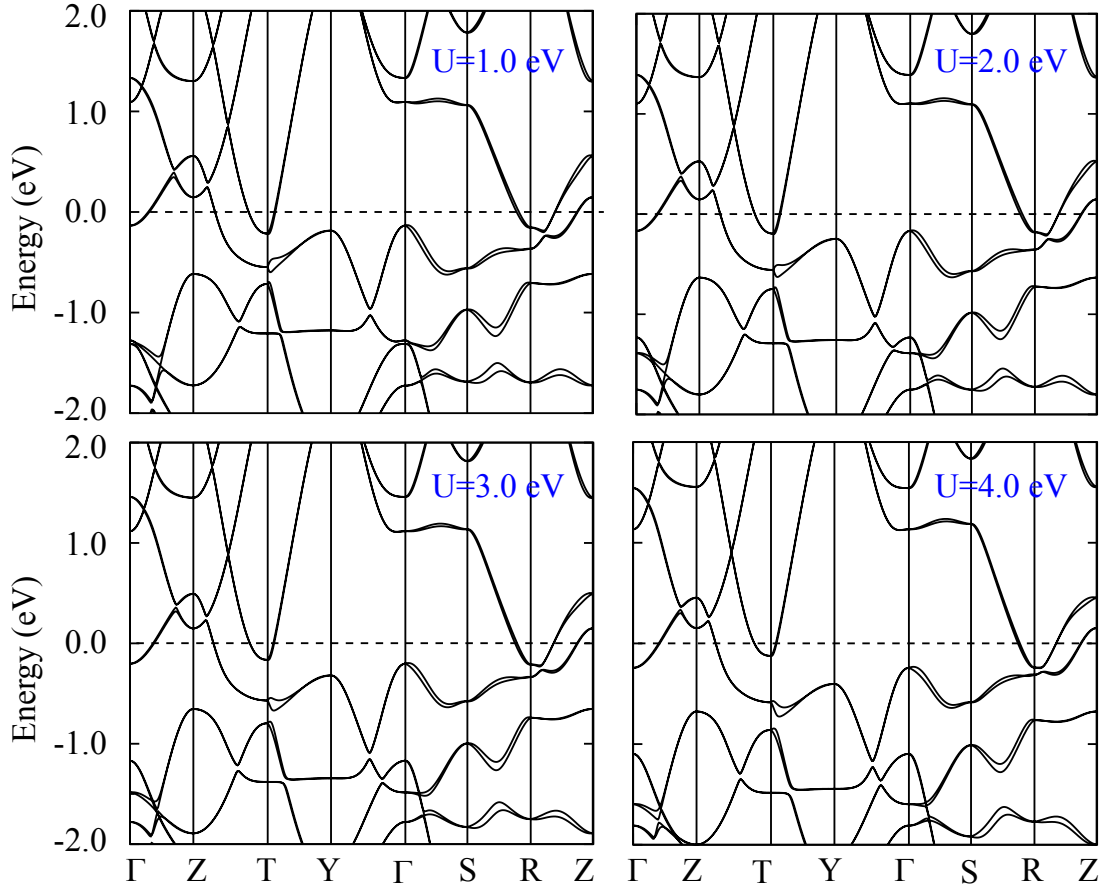


图 2.5: GGA+U+SOC计算的能带图。U的取值为1~4eV。

2.2 铁电诱导的外尔半金属HgPbO₃

铁电材料是一类在一定温度区间具有自发电荷极化的材料，由于电子的屏蔽作用，铁电性在金属中很难被实验探测。2013年，物理所石友国等人提出金属材料LiOsO₃在低温下发生了铁电相变(Shi et al., 2013)，此后关于铁电金属的研究一直备受关注。铁电材料在结构上的重要特征就是中心反演对称性破缺，这一特性与外尔半金属材料很相似。因此，是否存在一种铁电诱导的外尔半金属材料是一个很有意义的课题。2016年，我们与金属研究所陈星秋组合作，通过第一性原理计算提出了钙钛矿结构的HgPbO₃在低温下有可能是一种铁电半金属材料，并且该材料在发生铁电相变的同时也伴随着拓扑相变。通过进一步计算和实验验证，我们提出该体系是一种铁电诱导的外尔半金属。

2.2.1 铁电结构相变

1973年，HgPbO₃第一次在600-1000°C 和65千帕的高压下被合成。在高温下，HgPbO₃的顺电相为 $R\bar{3}c$ 对称性。通过声子谱计算，我们发现在低温下，

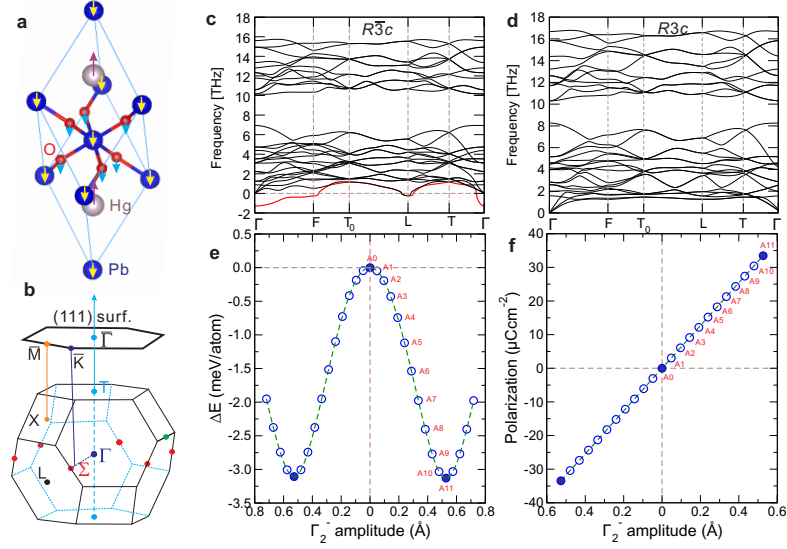


图 2.6: (a)晶体结构与(b)布里渊区(c)非铁电相的声子谱计算(d)铁电相声子谱计算(e)随着极化强度的增加，基态能量与非铁电相的能量差(f)计算得到的各铁电相的极化强度。

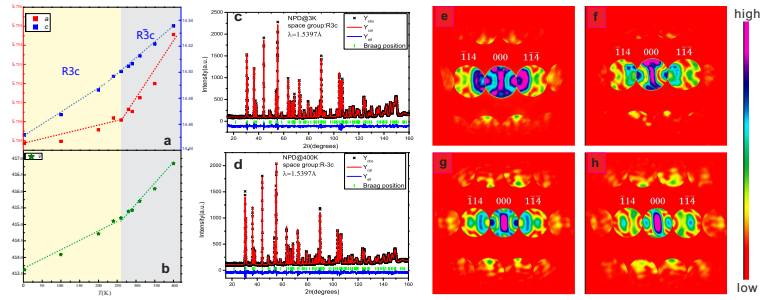


图 2.7: (a)-(d)中子散射实验测得的晶格常数和晶格体积随温度的变化。(e)-(h)在室温和92K时，测得的CBED图谱

$R\bar{3}c$ 结构的声子谱在 Γ 点附近出现了虚频（如图2.6(c)），即低温下该结构不稳定。与虚频对应的是 Γ_2^- 声子模式，它代表阴离子 O^{2-} 与阳离子 Hg^{2+} 沿 c 轴的振动模式。而 $R3c$ 结构在低温下是稳定的相，即铁电相。通过控制 Γ_2^- 声子模式的振幅，我们可以得到能量最低的铁电相，即图2.6中的A11号结构。该结构也被物理所相关实验组，通过中子散射实验(如图2.7(a)-(d))和汇聚束电子衍射(CBED)实验(如图2.7(e)-(h))所证实。

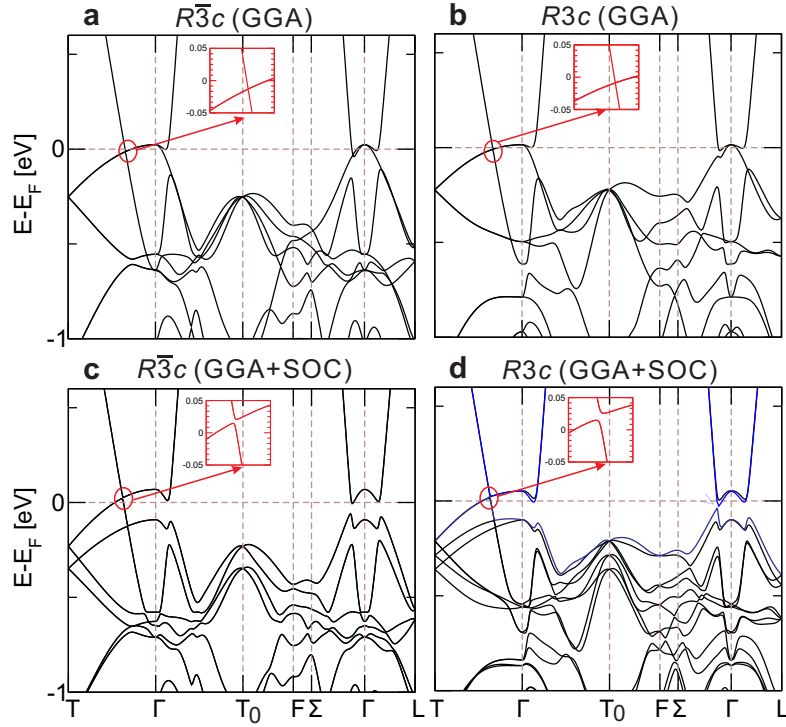


图 2.8: (a)(b)没有SOC时，顺电相和铁电相的能带结构。(c)(d)考虑SOC时，顺电相和铁电相的能带结构

2.2.2 电子结构

在不考虑自旋轨道耦合时，铁电相和顺电相的能带结构很相似，在费米面附近Hg原子的6s轨道与O原子的2p轨道交叉，在 $\Gamma - T$ 路径上形成三重简并点。考虑SOC时，该简并点打开能隙。对于 $R3c$ 结构，能隙大概有7meV。而对于 $R\bar{3}c$ 结构，能隙为5meV。由于铁电相破缺了中心反演对称性，在布里渊区中的Kramers简并被解除。能带的Rashba劈裂可以从能带图2.8(d)的 $\Gamma - \Sigma$ 或者 $\Gamma - L$ 路径看出。

对于顺电相，每条能带都是二度简并，我们通过计算得到体系的 Z_2 为0，即体系为平庸的半金属。对于铁电相，中心反演对称性破缺，体系很有可能是外尔半金属。我们基于Wannier90得到了与第一性结果吻合很好的紧束缚哈密顿量，并在整个布里渊区中搜索到了三对等价的Type-II型Weyl点。它们在布里渊区中的位置如图2.9(a)-(c)所示。我们还研究了外尔点的出现和位置随着极化强度的变化，如图2.9(d-e)，随着铁电性增强，外尔点逐渐出现，在布里渊区中的位置劈裂越来越大。

我们计算了外尔点能量附近的表面态能量色散和费米面，如图2.10，可以看到外尔点处在空穴包和电子包相接的位置，并有弧形表面态与它们相连。

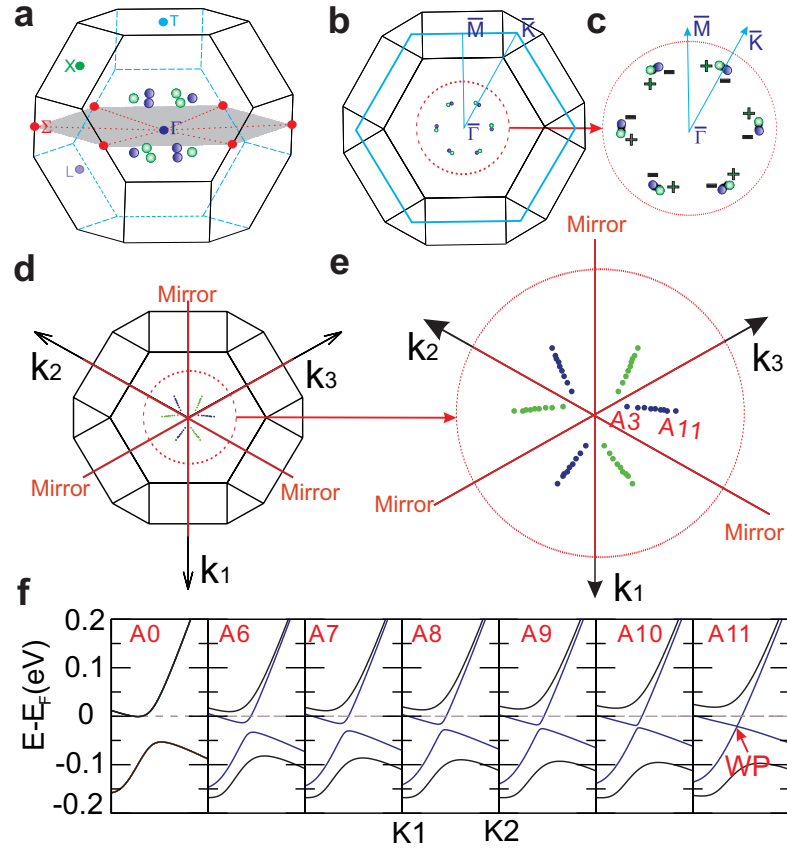


图 2.9: (a)(b)(c)铁电相HgPbO₃中，外尔点在布里渊区中的分布。(c)(d)外尔点随着极化强度的演化。(e)对应A11结构的外尔点位置附近的能带演化过程。

2.2.3 小结

通过第一性原理计算结合实验，我们提出了在低温下HgPbO₃是一类铁电与外尔点共存的半金属。当温度降低至250K时，HgPbO₃的对称性从 $R\bar{3}c$ 转变为 $R3c$ ，并产生三对外尔点。通过改变铁电极化强度，可以调控外尔点的位置，这为研究功能型拓扑材料或器件提供了一个很好的平台。

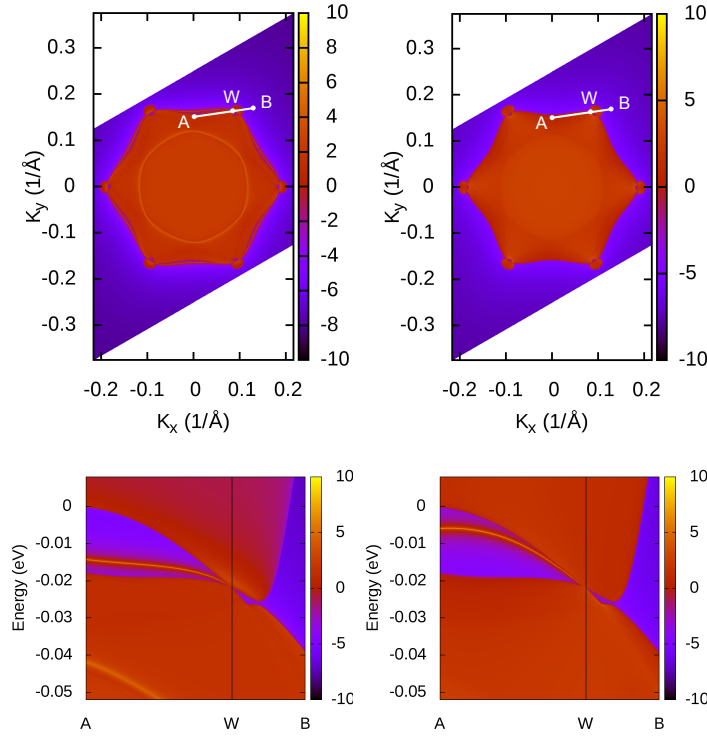


图 2.10: 铁电相 HgPbO_3 的表面态计算。(a)(b)(001)方向投影得到的表面态费米面与(c)(d)外尔点附近的色散。

2.3 铁磁外尔半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$

在已被理论预言的拓扑外尔半金属中，绝大多数都是非磁性体系。目前还没有一种磁性外尔半金属态被实验完全证实，一方面是由于磁性体系涉及到电子的关联作用，很难被传统的平均场近似准确描述；另一方面是由于磁性体系要求的实验条件更加苛刻，例如在ARPES实验过程中很难保证材料的磁矩不被破坏。然而，磁性材料又是一类非常重要和有研究价值的体系。在拓扑绝缘体的研究当中，磁性扮演了重要角色。实验上，已通过在拓扑绝缘体中掺杂磁性原子，实现了量子反常霍尔效应。理论上提出，磁性外尔半金属同样可以产生反常霍尔电导，只是反常电导并非量子化的，而是与外尔点的劈裂距离有关。我们通过理论计算和输运实验以及ARPES实验，首次提出了 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 是一类具有很大反常霍尔电导的磁性外尔半金属材料。

2.3.1 晶体结构与磁结构

$\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 是一种层状的六角结构，属于166号空间群 ($R-3m$)。如图2.11(a)所示， $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 中的Co原子与最近邻的4个Sn原子和两个S原子形成了畸变的正

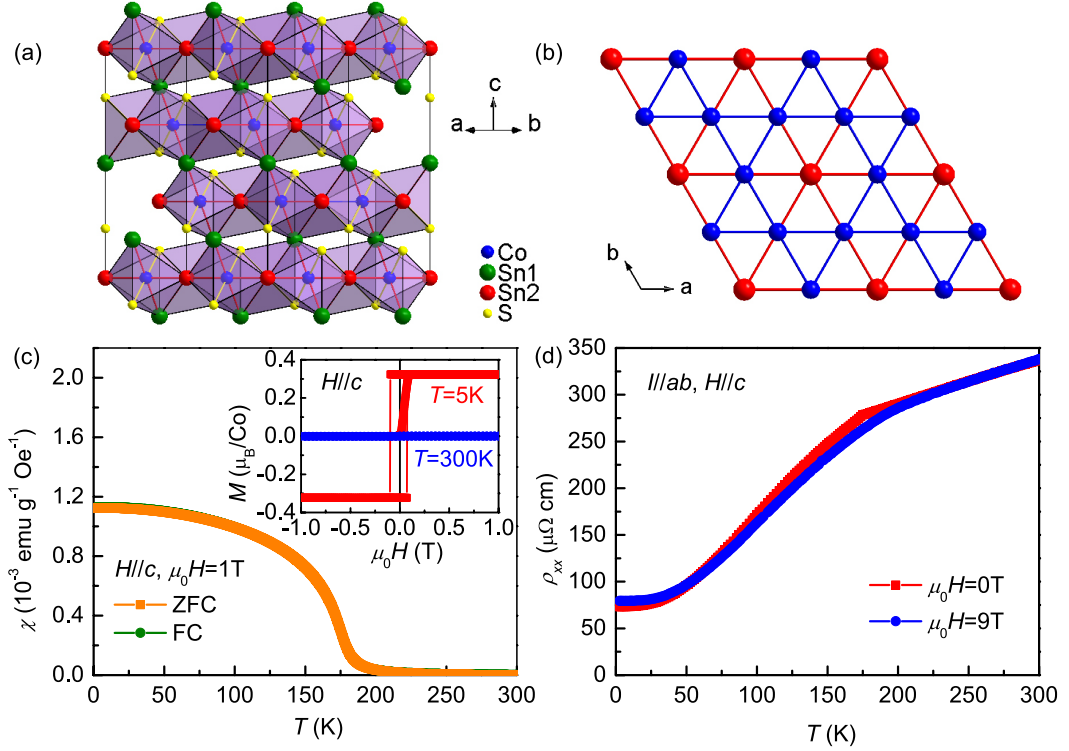


图 2.11: (a)(b) $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的层状kagome型结构(c)(d)输运实验测得的磁化率与横向电导率。

八面体构型。Co和S原子分别占位 $9e$ ($1/2, 0, 0$)和 $6c$ ($0, 0, 0.219$), 两种不等价的Sn原子分别占位 $3a$ ($0, 0, 0$)和 $3b$ ($0, 0, 1/2$)。 CoSn_4S_2 形成的八面体结构在 ab 面内共面相接并在 c 轴方向共点相接。同时Co原子在 ab 面内形成Kagome层状结构。

由图2.11(c)中的磁化率实验可以看出, 该材料在低温下 ($T < 174 \text{ K}$) 显示沿 c 轴极化的铁磁行为, 并且每个Co原子的磁矩大约为 $0.3\mu_B$ 。当 $T > 174 \text{ K}$ 时, 体系的磁化率转变为顺磁行为。另外在零场下的电输运测量实验显示, 在很宽的温度区间体系都表现出金属性质。

2.3.2 电子结构与拓扑相

我们通过第一性原理计算得到的原胞总磁矩大小约为 $1.0\mu_B$, 这与实验值非常吻合。在不考虑SOC时, 从能带结构图2.12(a)可以看出L点附近的能带发生了反转, 贡献费米面的能带自旋极化朝一个方向, 成分主要是Co的 $3d$ 轨道, 因此这是一个典型的磁性半金属(Half metal)体系。通过分析L点附近能带的不可约表示, 我们发现L点附近的能带反交叉受到镜面对称性保护, 形成了一个环

绕 L 点的Nodal-line。

当考虑SOC以后，Nodal-line不在受镜面对称性保护打开能隙，并在整个布里渊区中退化成了三对外尔点。这三对外尔点在三度旋转对称性和中心反演对称性的操作下互相联系在一起。通过计算(001)方向的表面态，我们可以看到连接外尔点的费米弧的一端，如图2.13。由于一些平庸体态的影响，(001)方向的表面态很难看出费米弧的连接方式。对此，我们通过定义弯曲费米面的方法，可以逐渐消除体态的影响进而判断费米弧的连接方式。在任意的 k 点，弯曲费米面的定义为最高占据态与最低非占据态的中点，

$$E_{fermi}(k) = \frac{\alpha}{2}[E_v(k) + E_c(k)] \quad (2.9)$$

其中 α 表示费米面的弯曲程度，当 $\alpha = 1$ 时，最高占据价带 E_v 与最低非占据导带 E_c 关于费米面对称。计算结果如图2.14所示。

与中心反演对称破缺引起的Rashba劈裂不同，磁性体系中的外尔点来源于自旋极化，即成对的外尔点来源于不同的能带形成的交叉，因此手性相反的外尔点在布里渊区中的距离可以很远。通过固定Co原子上的磁矩大小，我们计算了费米面附近等价外尔点的演化趋势，结果表明：随着自旋极化磁矩的减小，外尔点沿着 z 轴方向互相靠近（如图2.11(f)）。

2.3.3 反常霍尔效应

反常霍尔效应是目前凝聚态物理领域最活跃的课题之一，最近的理论研究指出反常霍尔电导与占据态电子波函数的贝利曲率有关(Fang et al., 2003; Yao et al., 2004; Yang et al., 2011; Sodemann and Fu, 2015)。对于非磁性体系，时间反演对称性使得 k 点处的贝利曲率与 $-k$ 处的贝里曲率相差一个负号，即 $\Omega(k) = -\Omega(-k)$ ，所以贝里曲率对整个布里渊区的积分等于0。而对于磁性体系，时间反演对称性破缺，贝里曲率对 k 的积分可以产生非零的反常霍尔电导。

对于磁性陈绝缘体，贝里曲率对整个布里渊区的积分为 2π 的整数倍，即其反常霍尔电导是量子化的。对于磁性外尔半金属，由于在外尔点附近的贝里曲率是发散的，所以当外尔点处在费米面附近时，将贡献很大的反常霍尔电导，而整个布里渊区中贝里曲率贡献的反常霍尔电导不再是量子化的，其大小与手性相反的外尔点之间的距离成正比(Burkov and Balents, 2011)。

基于wannier90得到的紧束缚模型，我们计算了 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 体系的反常霍尔电导(AHC)。计算公式为(Fang et al., 2003; Yang et al., 2011),

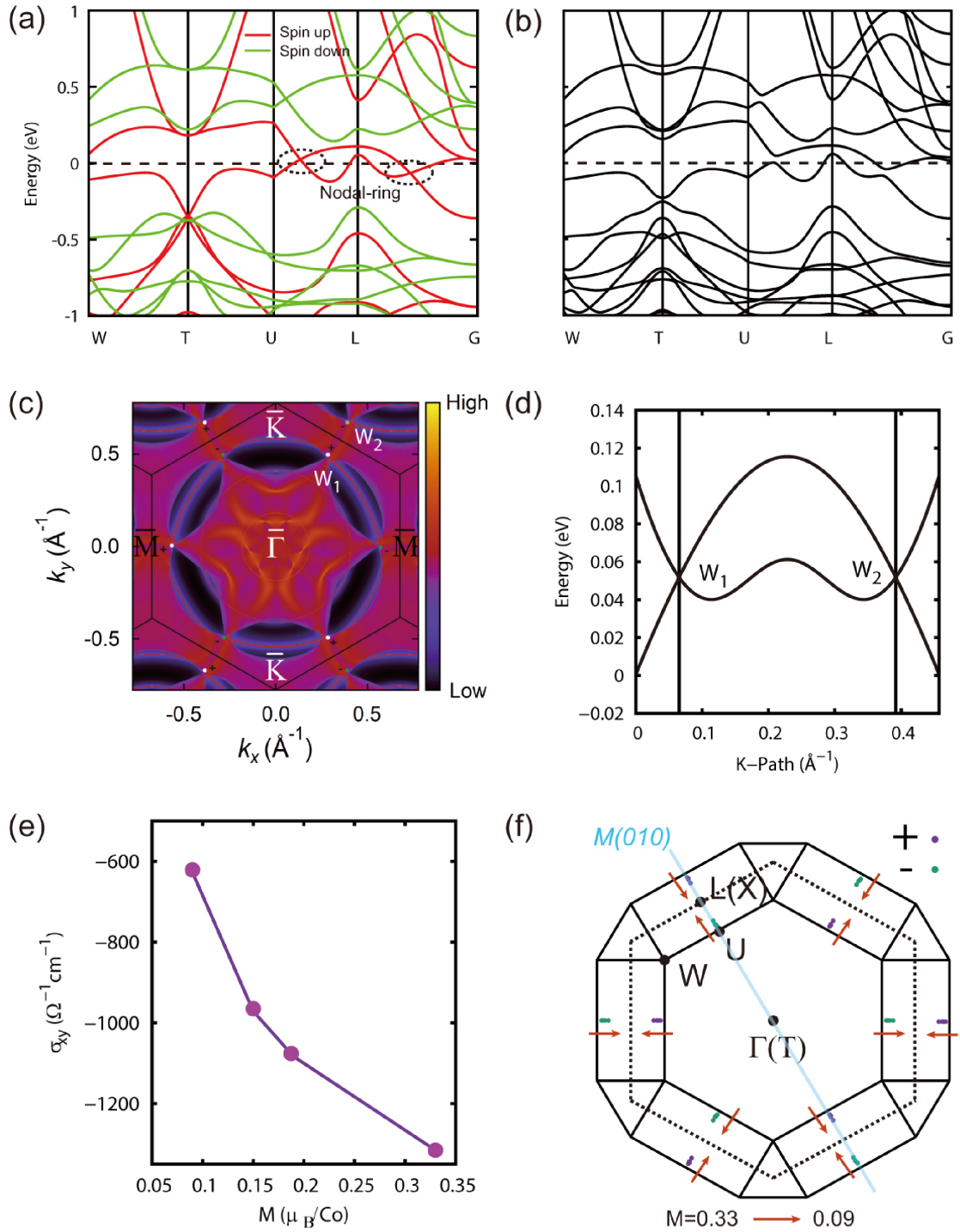


图 2.12: (a)LSDA计算得到的能带结构; (b)LSDA+SOC的能带结构; (c)采用结构优化的参数计算得到的(001)方向表面态费米面; (d)外尔点附近的能带色散; (e)计算得到的反常霍尔电导随局域磁矩的变化曲线; (f)外尔点在布里渊区中的位置随局域磁矩的变化。

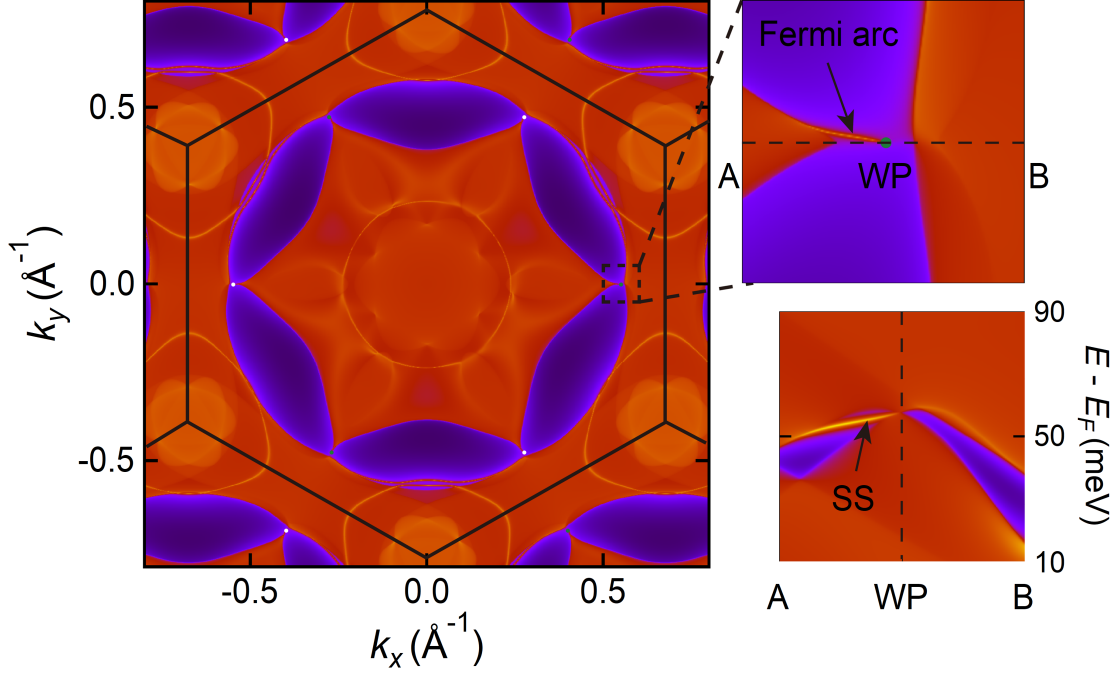


图 2.13: 在外尔点能量处的 (001) 方向表面态费米面, 以及在外尔点附近的表面态色散。

$$\sigma_{xy} = -\frac{2\pi e^2}{h} \int_{BZ} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \sum_n f_n(\vec{k}) \Omega_n^z(\vec{k}) \quad (2.10)$$

其中 $f_n(\vec{k})$ 为费米狄拉克分布函数, n 是占据态能带指标。贝里曲率由久保公式导出,

$$\Omega_n^z(\vec{k}) = -2\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \Psi_{n\vec{k}} | v_x | \Psi_{m\vec{k}} \rangle \langle \Psi_{m\vec{k}} | v_y | \Psi_{n\vec{k}} \rangle}{(E_m(\vec{k}) - E_n(\vec{k}))^2} \quad (2.11)$$

其中 $v_{x(y)}$ 是速度算符。计算中在布里渊区中的撒点密度为 $200 \times 200 \times 200$ 。

通过计算我们发现, $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的外尔半金属相具有非常大的反常霍尔电导, 数值达到 $-1310 \text{ } \Omega \text{ cm}^{-1}$ 。同时我们还研究了反常霍尔电导随着磁化强度的变化, 如图2.12(e)。结果表明: 在磁化强度比较弱时, AHC就已经非常强, 随着磁化增强, AHC近似线性增加, 这与外尔点之间沿着 z 轴的劈裂距离演化趋势一致。从AHC随费米能的变化来看(如图2.15), 在外尔点能量附近, 反常霍尔电导达到最大值, 这也从侧面反映了AHC主要来源于外尔点的贡献。

人民大学雷和畅研究组(Wang et al., 2018b)和德国马普所C.Felser研究组(Liu et al., 2018)分别对该材料进行了电输运测量, 其测量结果与第一性计算结果基本吻合。

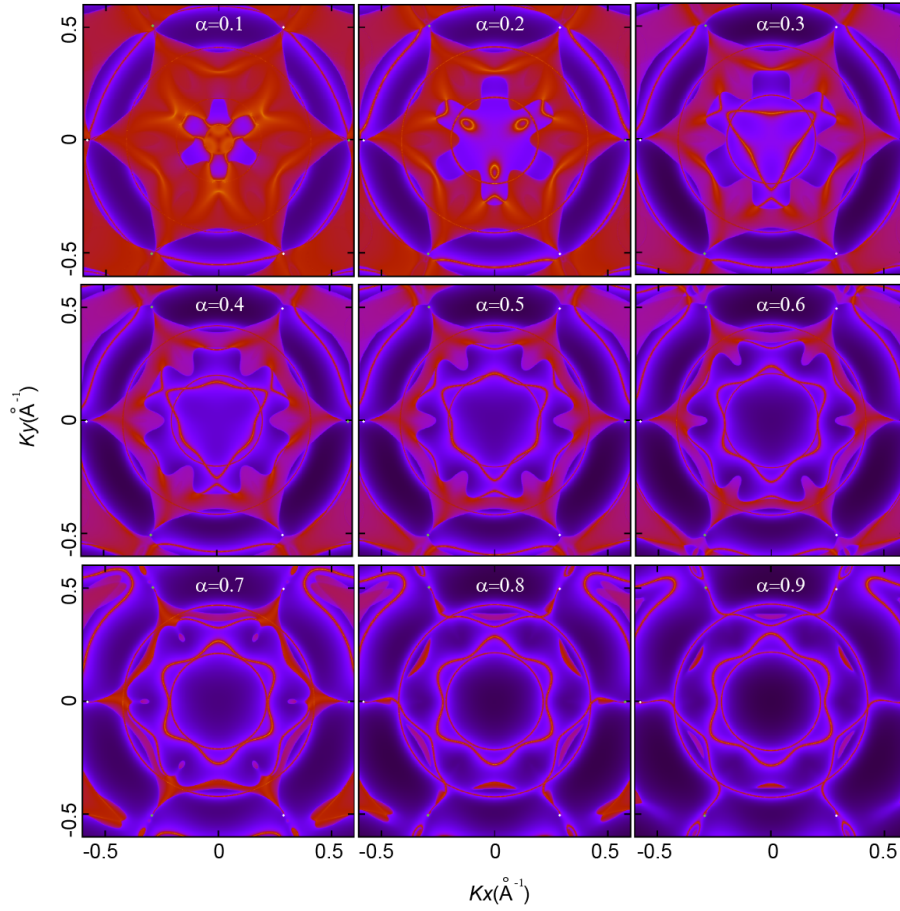


图 2.14: (001) 方向的表面态费米面随着参数 α 的演化。

2.3.4 小结

通过第一性原理计算，我们对磁性半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的电子结构、拓扑性质和反常霍尔效应进行了系统的研究。特殊的能带结构在布里渊区中一共存在三对外尔点，其附近发散的贝利曲率贡献了很大的反常霍尔电导。通过与实验组合作，这些结论已相继被实验证实。该工作将自旋电子学与拓扑紧密联系在一起，为磁性拓扑材料的基础研究提供了平台。

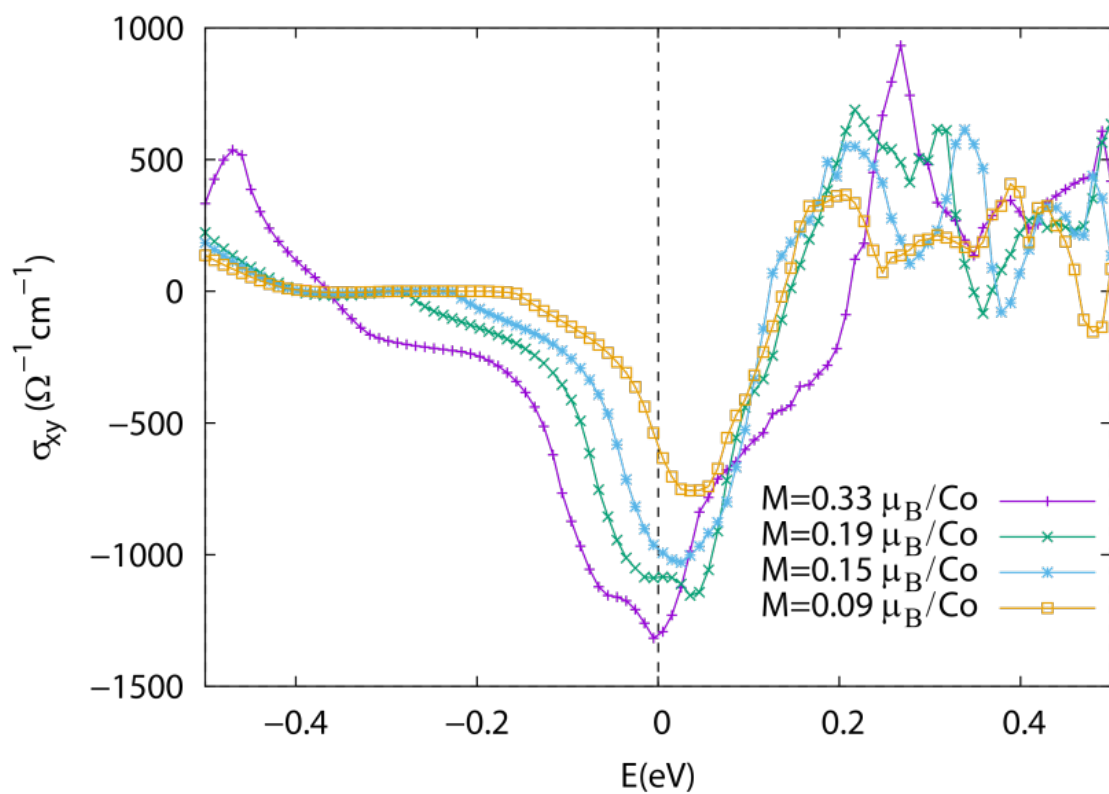


图 2.15: 费米能级附近1.0eV范围内的反常霍尔电导随局域磁矩的变化。

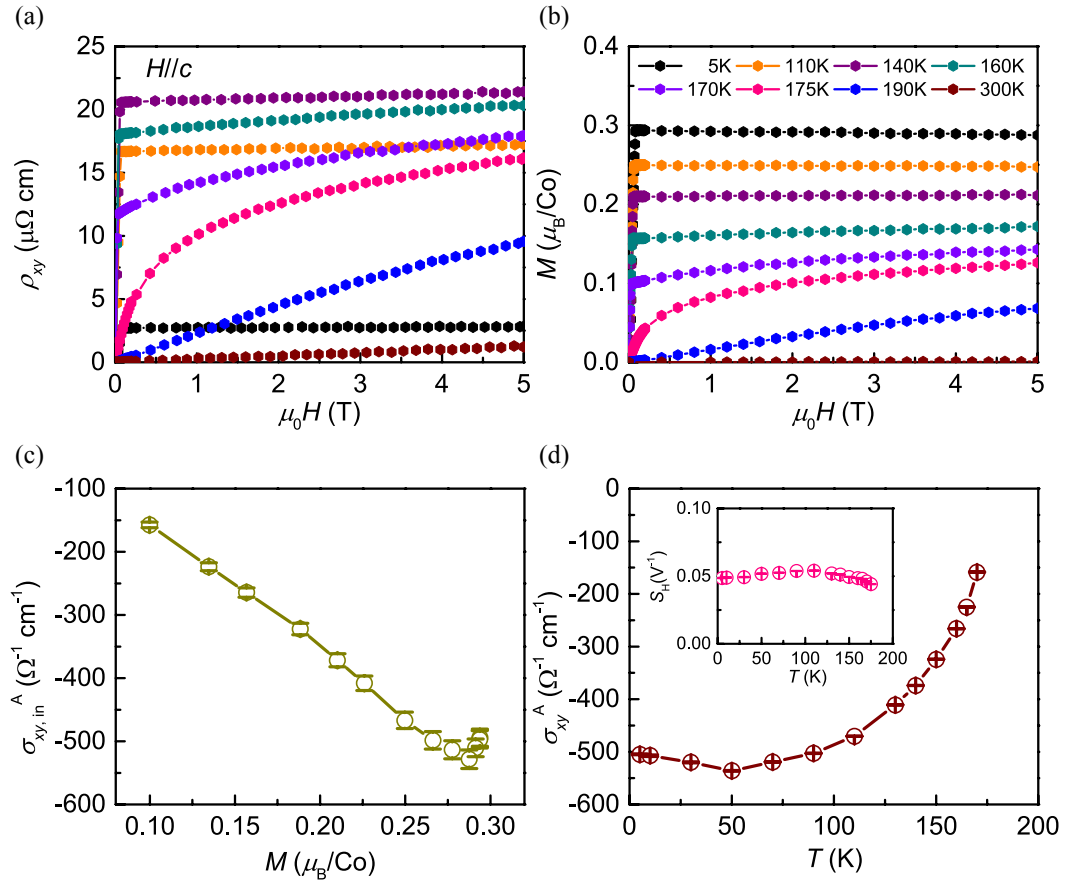


图 2.16: $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 的 AHC 测量。 $H//c$ 时, (a) 霍尔电阻 $\rho_{xy}(\mu_0 H)$ 和 (b) 磁化强度 $M(\mu_0 H)$ 曲线随温度的变化; 内禀 AHC 随磁 (c) 化强度和 (d) 温度的变化。

第三章 重费米子体系CeRu₄Sn₆中的外尔半金属态

最近十几年, 拓扑学在凝聚态物理中的应用取得了非常大的成就。理论预言、材料制备与实验探测相结合在拓扑绝缘体(Qi and Zhang, 2011; Hasan and Kane, 2010)、拓扑半金属(Armitage et al., 2018)和拓扑超导体(Wang et al., 2015; Zhang et al., 2018a)领域掀起了一次又一次研究热潮。其间, 弱关联电子体系在这些研究中扮演了重要的角色。由于弱关联电子材料的相互作用可以忽略, 基于单电子近似的第一性原理计算可以很准确的预测其基态电子结构。发展到目前阶段, 人们已经对单粒子拓扑图像有了很清晰的认识, 基于拓扑能带指标理论, 国内外分别已经有三个研究组对几乎所有已知的弱关联非磁性材料体系进行了高通量计算(Zhang et al., 2018b; Vergniory et al., 2018; Tang et al., 2018), 把它们像打标签一样进行了拓扑分类。弱关联材料的好处是理论计算和分析相对简单, 可以很好的指导实验的进行, 但是这一类材料中理想的拓扑体系毕竟有限, 也不能代表更一般的物理系统。对于物理学研究而言, 系统每多一个自由度就会衍生出更丰富多彩的物理现象。那么在更一般的强关联系统中是否存在其它的拓扑性质一直是一个开放性课题。在拓扑绝缘体发展的过程中, 人们在SmB₆体系中提出了Z₂的拓扑近藤绝缘体(Dzero et al., 2010, 2012; Lu et al., 2013), 在该材料中由f电子的强相互作用导致的奇异输运性质引起了人们很大的关注(Kim et al., 2012; Jiang et al., 2013; Xu et al., 2013; Dzero et al., 2016)。随后, 拓扑近藤晶体绝缘体也被理论预测(Weng et al., 2014b)。

强关联电子体系在一直以来都是凝聚态物理的研究重点和难点。考虑到电子的内禀自由度之间复杂的关联相互作用, 其单电子近似不再是有效的理论, 必须以多体波函数作为完备基才能刻画粒子之间的相互作用。随着所研究的原子数目或轨道数目的增加, 描述关联电子的波函数空间维度呈指数型增长。基于现有的计算资源, 想严格求解一个真实的强关联电子系统显得很现实。后来人们基于一些合理的近似发展了很多多体计算方法来处理强关联材料, 其中与第一性原理结合起来比较成功的方法包括LDA+U(Anisimov et al., 1991, 1993; Liechtenstein et al., 1995), 动力学平均场方法(DMFT)(Georges et al., 1996; Kotliar et al., 2006), 以及我们组提出的LDA+Gutzwiller方法(Deng et al., 2009, 2008)。本章主要介绍LDA+Gutzwiller计算方法及其在强关联拓扑材料计算中的应用。

3.1 LDA+Gutzwiller计算方法

Gutzwiller方法是一种通过变分求解多体哈密顿量基态的方法(Bünemann et al., 1997, 1998)。其大概流程为：(1)从局域的单粒子轨道出发，构造出一组完备的多粒子轨道基矢（即Fock基），并在这组基下写出带相互作用的原子部分的哈密顿量。(2)求解原子哈密顿量，得到多体自然基。(3)通过构造一组带权重的投影算符，把无相互作用的波函数投影在这组自然基上。(4)通过变分法调节投影算符上的权重系数，使得能量高的原子组态权重降低、能量低的原子组态权重升高，最终得到系统基态。(5)利用基态波函数求解物理量的期望值。下面我们将详细介绍这一流程。

3.1.1 强关联电子体系的哈密顿量

第一性原理计算结合多体技术的哈密顿量形式一般可以写为，

$$H_{LDA+X} = H_{LDA} + H_{int} - H_{dc} \quad (3.1)$$

其中单粒子部分为

$$H_{LDA} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha\beta} t_{ij}^{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta} \quad (3.2)$$

相互作用部分为，

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha\beta\gamma\delta\sigma\sigma'} U_{\alpha\sigma,\beta\sigma',\gamma\sigma,\delta\sigma'} \hat{c}_{\alpha\sigma}^\dagger \hat{c}_{\beta\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\delta\sigma'} \hat{c}_{\gamma\sigma}$$

H_{dc} 代表LDA计算中对关联电子重复考虑的相互作用项。

3.1.2 Gutzwiller变分法求基态总能量

对于最简单的单带的Hubbard模型，当不考虑关联相互作用时，其基态波函数为所有单粒子波函数所构成的Slater行列式给出，此时每个多体组态的权重相同。当考虑不同轨道直接的相互作用时，双占据组态的能量将高于两个单占据组态，此时系统的基态更倾向于选择单占据态。对于形如式3.1的哈密顿量，轨道内部的相互形式更加复杂，显然由LDA计算得到的单粒子波函数的Slater行列式不再是它的基态波函数。此时，我们需要借助于一个投影算子重新构造系统的基态波函数，即Gutzwiller波函数：

$$|\Psi^G\rangle = \hat{P}|\Psi^0\rangle \quad (3.3)$$

式中的投影算子 $\hat{P}$ 用来调节所有多体组态的权重大小，其定义为，

$$\hat{P} = \prod_{i\Gamma} \lambda_{i\Gamma} |i, \Gamma\rangle \langle i, \Gamma| \quad (3.4)$$

Γ 代表原子组态， $\lambda_{i\Gamma}$ 代表该原子组态的权重。那么在该试探波函数下，

$$\langle \hat{H}_G \rangle = \frac{\langle \psi_G | \hat{H} | \psi_G \rangle}{\langle \psi_G | \psi_G \rangle} = \frac{\langle \psi_0 | \hat{P}^\dagger \hat{H} \hat{P} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \hat{P}^2 | \psi_0 \rangle} \quad (3.5)$$

在Gutzwiller近似下，由文献(Deng et al., 2009)，哈密顿量的期望值表达式为，

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_G = & \sum_{i \neq j; \sigma, \sigma'} t_{i,j}^{\sigma, \sigma'} z_{i\sigma} z_{j\sigma'} \langle C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma'} \rangle_0 + \sum_{i; \sigma} \epsilon_{i\sigma} n_{i\sigma}^0 \\ & + \sum_{i, \Gamma} E_{i\Gamma} m_{i\Gamma} \end{aligned} \quad (3.6)$$

式中， $m_{i\Gamma}$ 是多体组态 Γ 的权重因子，

$$m_{i\Gamma} = \langle \Psi_G | \hat{m}_{i\Gamma} | \Psi_G \rangle \quad (3.7)$$

而 $z_{i\sigma}$ 是局域轨道相关的准粒子权重，其计算表达式为，

$$z_{i\sigma} = \sum_{\Gamma_i, \Gamma'_i} \frac{\sqrt{m_{\Gamma_i} m_{\Gamma'_i}} D_{\Gamma'_i \Gamma_i}^\sigma}{\sqrt{n_{i\sigma}^0 (1 - n_{i\sigma}^0)}} \quad (3.8)$$

其中， $D_{\Gamma' \Gamma}^\sigma = \langle \Gamma' | C_{i\sigma}^\dagger | \Gamma \rangle$, $0 \leq z_{i\sigma} \leq 1$

由以上方程可以看出，能量的期望值是单粒子波函数与多体组态权重的泛函形式，即 $E_G = \mathcal{F}(\Phi_0, m_\Gamma)$ 。基于能量的泛函表达式，对准粒子权重和单粒子波函数分别变分可得，

$$\frac{\partial E_G}{\partial f_{nk} \langle \psi_{nk} |} = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial E_G}{\partial m_\Gamma} = 0 \quad (3.10)$$

通过以上两个方程的自洽求解，我们可以得到系统的Gutzwiller基态波函数 $|\Psi\rangle_G$ ，进而可测得物理量的期望值，

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi_G|\hat{A}|\Psi_G\rangle \quad (3.11)$$

LDA+Gutzwiller的计算流程如图3.1,

3.2 CeRu₄Sn₆中的外尔费米子态

最近几年，人们对非磁性重费米子材料CeRu₄Sn₆的研究逐步升温 [Pöttgen et al. \(1997\)](#); [Das and Sampathkumaran \(1992\)](#); [Brüning et al. \(2010\)](#); [Guritanu et al. \(2013\)](#); [Sundermann et al. \(2015\)](#); [Wissgott and Held \(2016\)](#)，由于传统的平均场近似计算无法得到与实验一致的结果，国际上已有很多组通过多体技术对其进行进一步研究，并提出了该体系中可能存在拓扑非平庸相。

我们采用上一节介绍的LDA+Gutzwiller方法，考虑到 f 电子的强相互作用，对CeRu₄Sn₆进行了系统研究。提出CeRu₄Sn₆是一种关联外尔半金属体系。其费米面附近的能带主要由Ce原子的 $4f$ 电子和Ru的 $4d$ 电子贡献，因此该外尔半金属的外尔费米子有重费米子的特征。与弱关联外尔半金属相比，重费米子外尔半金属有更丰富的物理。首先，重费米子的准粒子激发发生在极低温下，极低温下的拓扑相变是一个很重要的课题。另外，与传统半导体相比，重费米子的能量尺度很小，这使得其电子结构和拓扑相对外场的影响非常敏感。

3.2.1 晶体结构与计算细节

CeRu₄Sn₆ ([Pöttgen et al., 1997](#))的晶体结构是体心四方格子，空间对称性为 $I\bar{4}2m$ (No. 121)，如图 3.2. 在计算中，我们采用实验晶格参数 $a=b=6.8810$ Å, $c=9.7520$ Å. Ce原子和Ru原子的位置分别为 $2a$ (0.0, 0.0, 0.0)和 $8i$ (0.82938, 0.82938, 0.42107)；两个不等价Sn原子的位置为 $8i$ (0.82134, 0.82134, 0.70476)和 $4c$ (0.0, 0.5, 0.0)。首先我们基于VASP软件包采用PBE-GGA 型交换关联势得到了原胞的单粒子基态。然后基于wannier90软件包投影得到了单粒子紧束缚哈密顿量，投影用到的局域轨道基矢为Ce原子的 $4f$ 和 $5d$ 轨道，Ru原子的 $4d$ 轨道，以及Sn原子的 $5p$ 轨道。基于紧束缚哈密顿量，通过与第一性的结果拟合，我们在Ce的 $4f$ 轨道、Ru的 $4d$ 轨道以及Sn的 $5p$ 轨道上手动加入了在位的自旋轨道耦合项，其大小分别为 0.096 eV, 0.160 eV 和 0.202 eV. 在LDA+Gutzwiller计

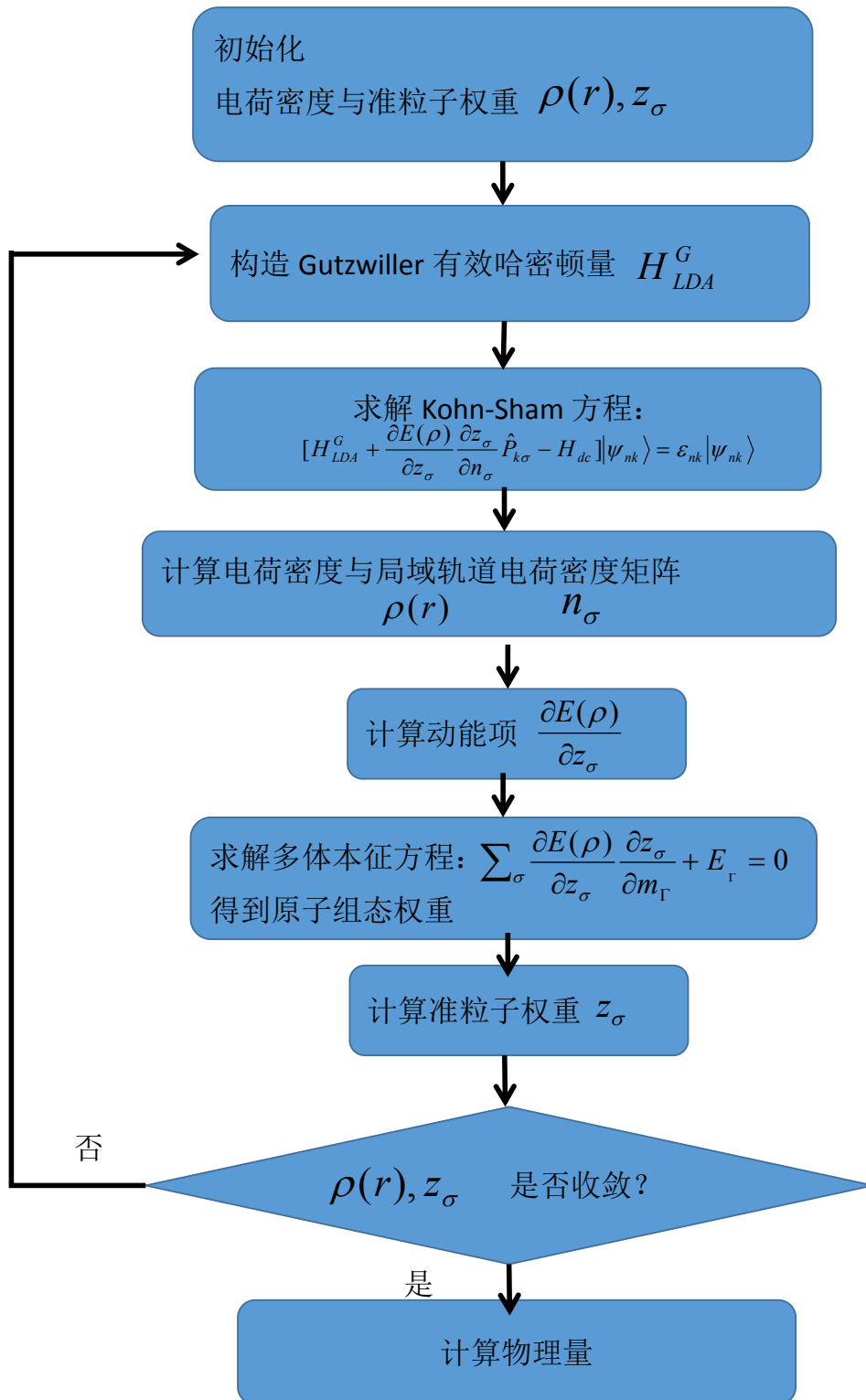


图 3.1: LDA+Gutzwiller的计算流程图。

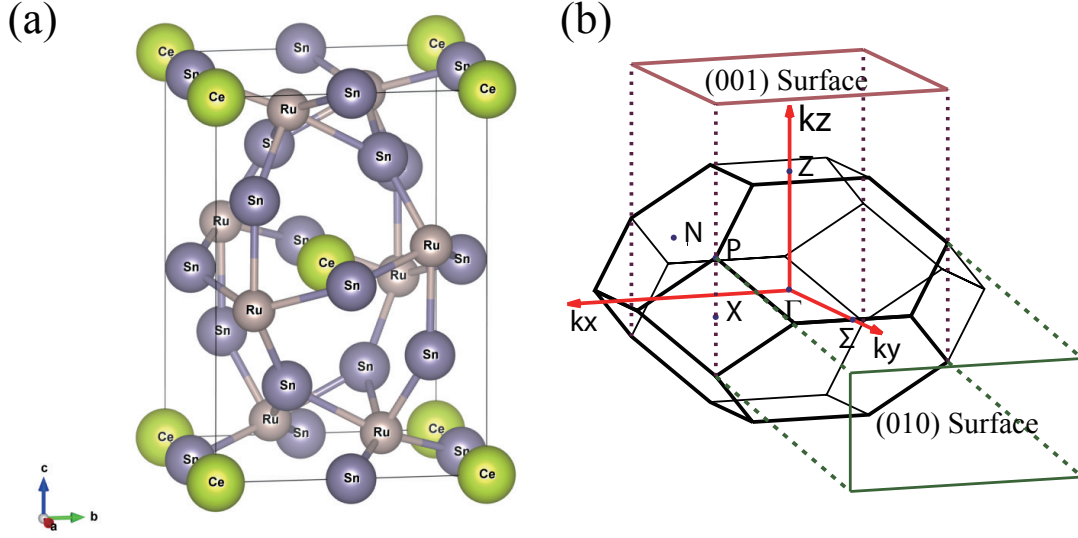


图 3.2: (a)CeRu₄Sn₆的晶胞结构与(b)三维布里渊区。

算中，我们考虑了Ce原子的4f轨道的在位相互作用，其大小为 $U_d = 5.0\text{eV}$ ，洪特耦合强度为 $J_h = 0.818\text{eV}$ (Thole et al., 1985)。系统的总的哈密顿量可以写为，

$$H_{total} = H_{GGA} + H_{SOC} + H_{int} + H_{DC} \quad (3.12)$$

3.2.2 电子结构

在不考虑电子的关联时，我们对CeRu₄Sn₆进行了简单的GGA+SOC计算，能带如图 3.4(a)。从其能带结构来看，费米面附近的导带和价带间接能隙为0，在整个布里渊区都存在直接能隙，是一种半金属或者半导体。我们计算了此时体系的拓扑指标，发现它是 $Z_2 = 0$ 的平庸体系。另外在费米面附近的能带成分主要是Ru的4d电子和Ce的4f电子，其中f电子的占据数与实验值不符。通过加入4f电子的关联相互作用，利用Gutzwiller变分法结合第一性原理重新计算了该体系的准粒子电子结构，得到了该材料的准粒子能带和原子多重组态等。能带如图3.4(b)所示。与GGA的计算结果相比，该结果主要由以下两方面修正：(1)4f电子的 $j=7/2$ 能带成分被推到了费米面以上1.2eV左右，而费米能附近主要由4f的 $-j=5/2, j_z=\pm 1/2$ 和4d电子占据；(2)4f轨道形成的准粒子能带宽度减少了50%左右。这导致4f电子和4d电子在费米能附近产生反带，并且计算得到的Ce的4f电子占据数大约为0.9，与实验结果（如图3.3）非常吻合。

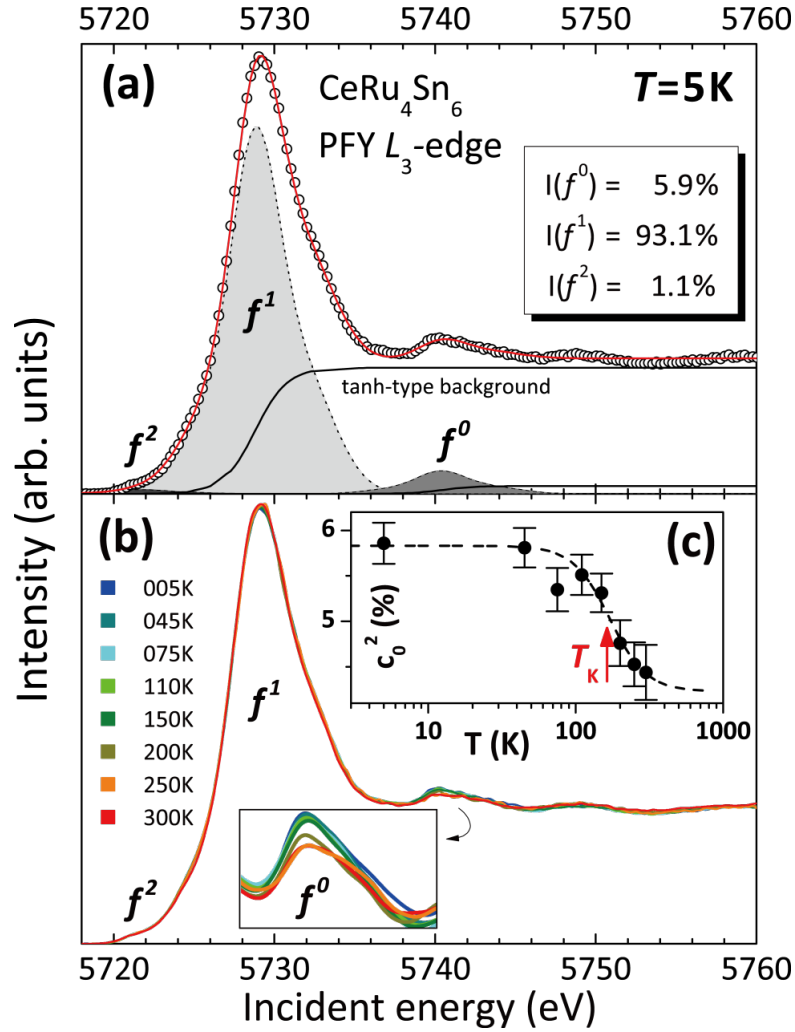


图 3.3: (a)PFY-XAS实验在低温下($T_k = 5\text{K}$)测得的CeRu₄Sn₆的 f 电子组态以及(b)其随温度的变化。图片选自文献(Sundermann et al., 2015)

3.2.3 外尔半金属态

考虑到该体系没有空间反演对称性，在反带附近很可能存在外尔点。我们利用Wilson-loop计算方法(Yu et al., 2011)，在布里渊区中一共找到八对Weyl点，它们在布里渊区中的分布位置如图3.5(b)-(d)。从外尔点附近的能带色散图3.5a可以看出，八对外尔点包括第一类和第二类外尔点。同时我们还计算了整个布里渊区中的贝里曲率分布，发现在八对外尔点所处的平面处贝里曲率是发散的(图3.5(e-f)),进一步确认了外尔点的存在。

基于LDA+Gutzwiller的准粒子哈密顿量，我们分别计算了在(001)和(010)表面的表面态。从图3.6的表面态结果可以看出，(001)表面的外尔点完全被体态掩盖，从这个方向看不到费米弧。在侧表面，即(010)表面，投影的外尔点被孤立的空穴包所掩盖，我们可以看到有弧形表面态从包内连出。如果在表

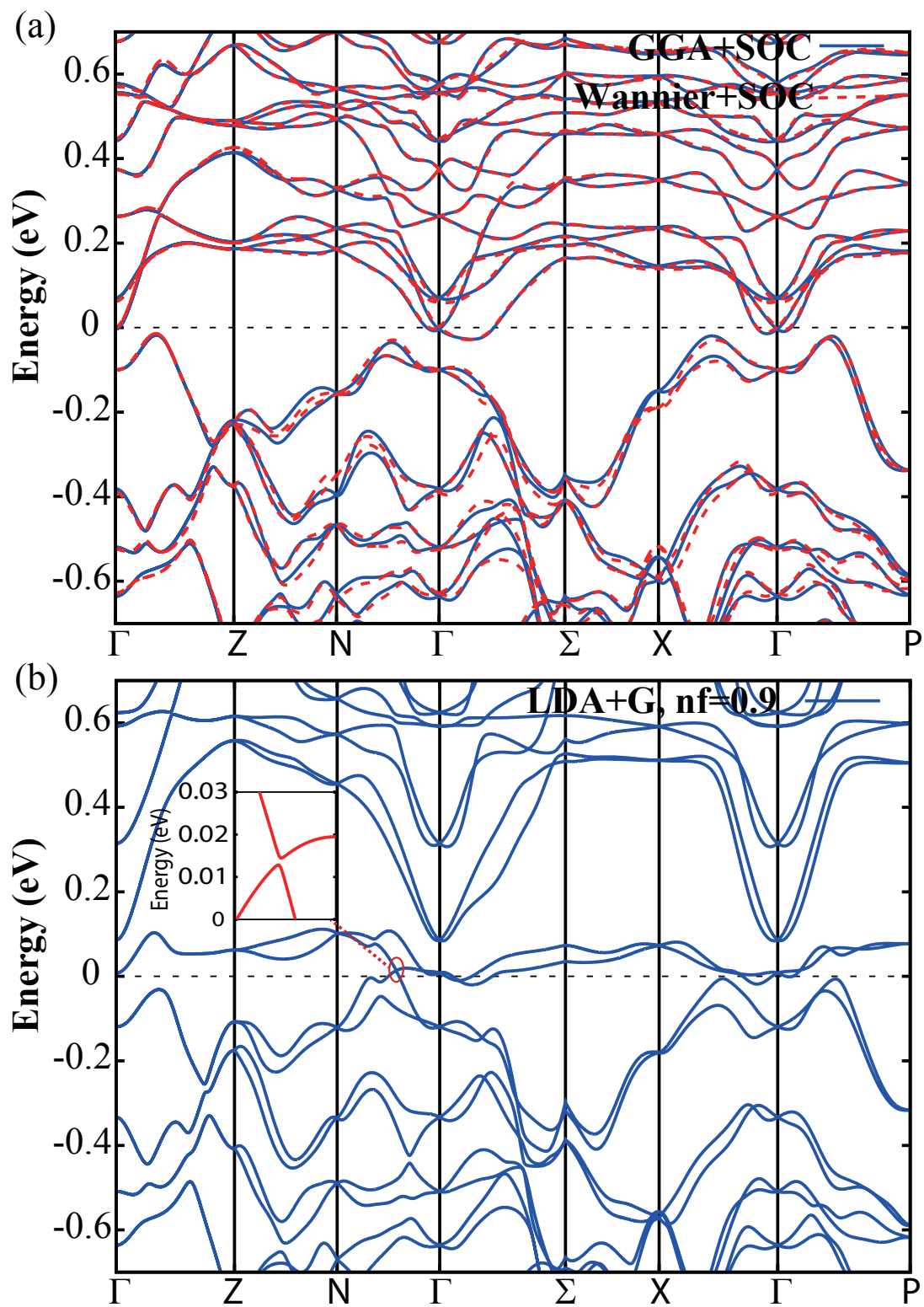


图 3.4: (a)GGA+SOC得到的能带结构与由紧束缚哈密顿量计算的能带对比;
(b)LDA+Gutzwiller计算的能带。

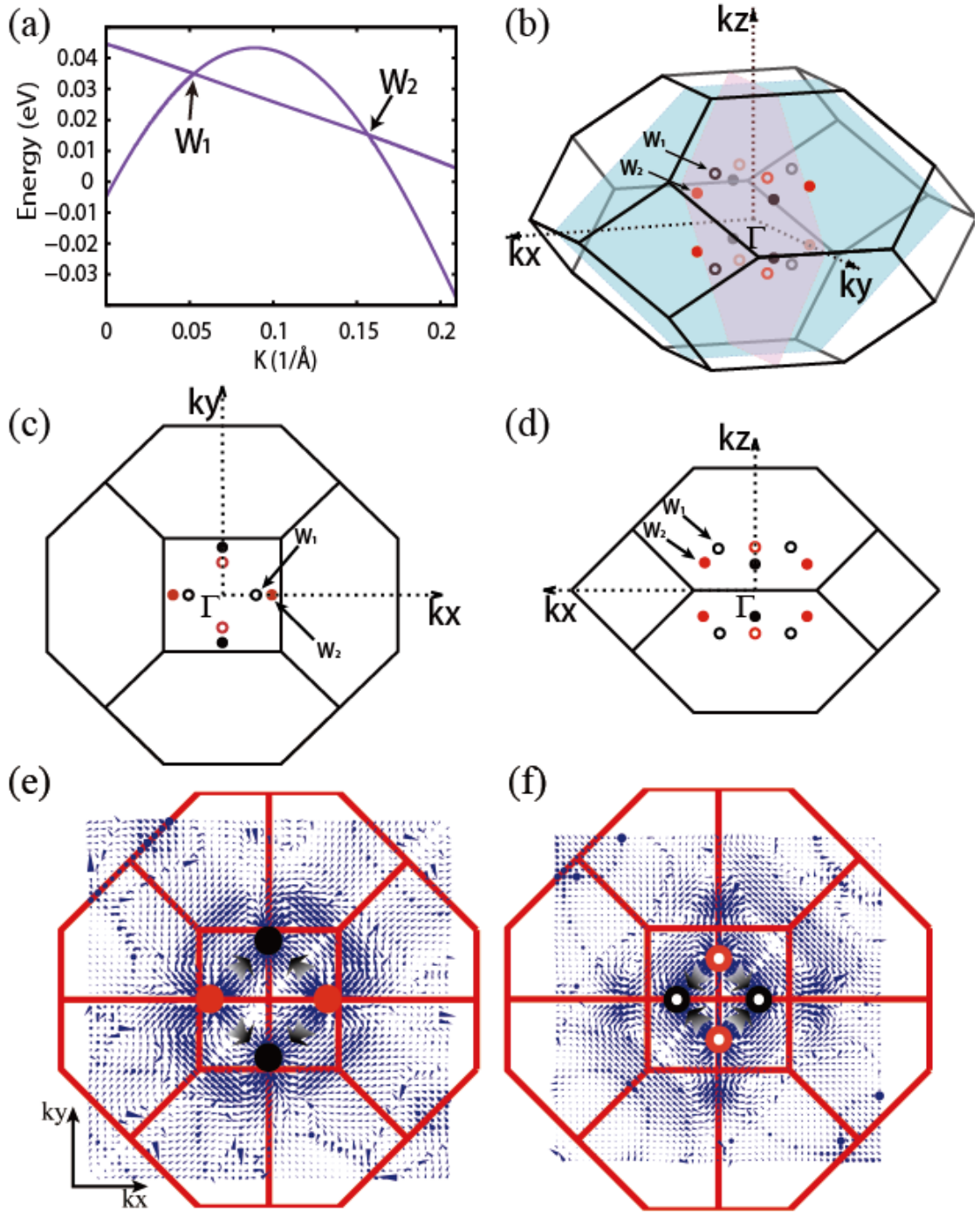


图 3.5: (a)外尔点附近的能带色散; (b)-(d)外尔点在三维布里渊区中的位置分布; (e)-(f)两类外尔点所在平面的贝里曲率分布情况。

面布里渊区的非激发区域定义一个封闭路径包裹住某一个内含外尔点的空穴包，那么从该封闭路径的表面态色散可以判断出空穴包内的外尔点手性。

3.2.4 拓扑相的稳定性

由于重费米子的能带很窄，尽管我们在计算中采用了合理的相互作用参数，并得到了与实验相吻合的局域轨道占据数，但是能带在很小的能量尺度内变化就有可能导致反带解除，带来拓扑相的变化。因此，有必要检验该体系的拓扑稳定性。相对于改变相互作用参数，准粒子能带结构对局域轨道占据数更加敏感。如图3.7所示，我们在实验值附近将局域轨道占据数固定在0.8~0.96之间，得到了该体系的拓扑相图和相应的准粒子权重。结果表明，局域轨道占据数的微小变化就可以使得体系的拓扑性质发生变化，但是在实验值 ($n_f = 0.93$) 附近,外尔点的存在比较稳定。

3.3 小结

基于第一性原理计算结合Gutzwiller变分方法，我们对重费米子体系的电子结构进行了研究。相对于单粒子近似，4f局域轨道的强相互作用对准粒子的能带进行了比较大的修正，并得到了与实验者吻合的Ce的价态。进一步研究表明，重整化之后的能带结构发生了拓扑相变，并在费米面附近产生了八对外尔点。从(010)方向的表面态计算结果，可以看到很明显的费米弧。另外，对于这一类特殊的重费米子半金属，其拓扑性质对准粒子能带的扰动很敏感，为实验上实现拓扑态的量子调控提供了平台。

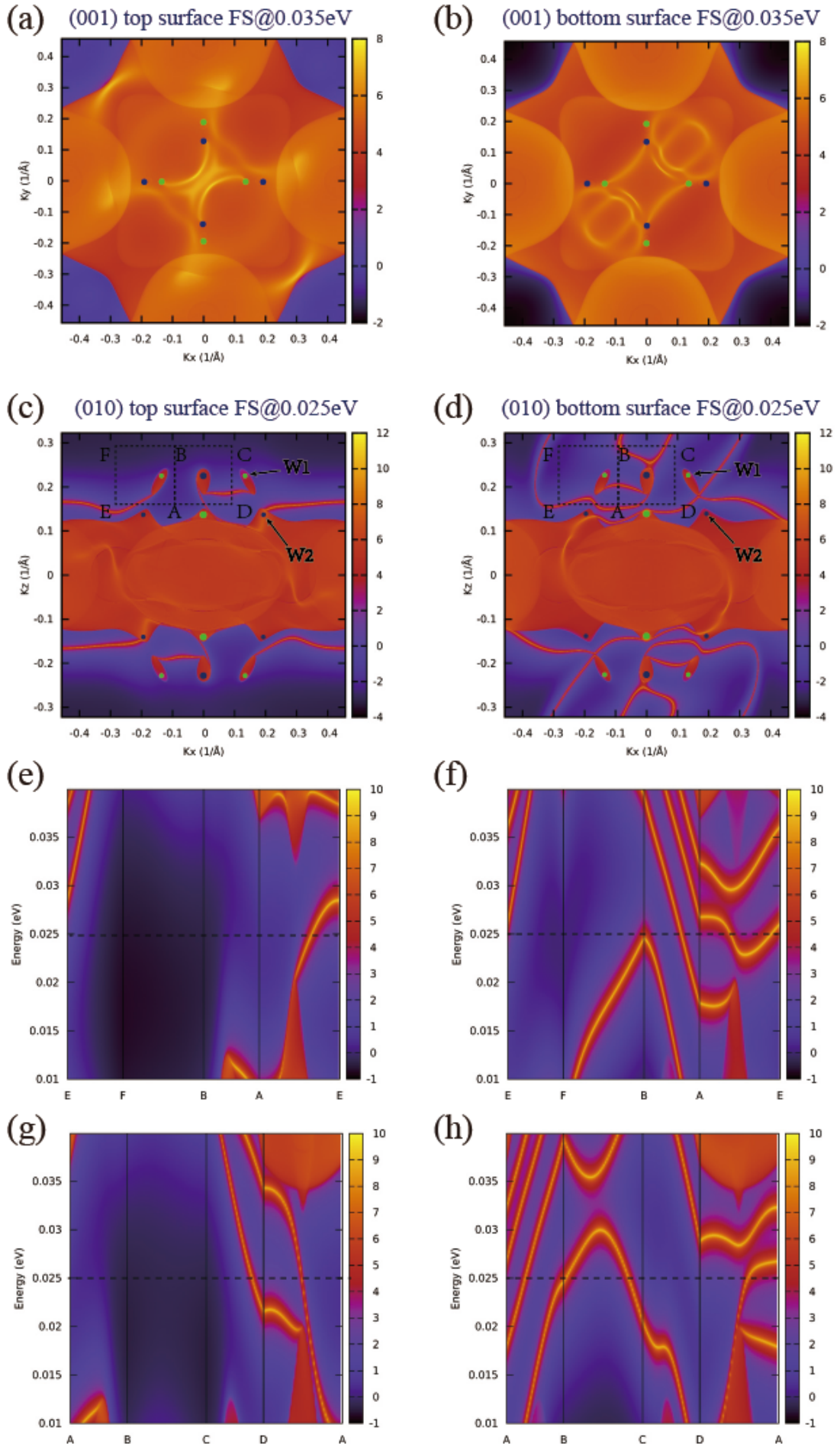


图 3.6: (a)(b)(001)表面的表面态费米面及外尔点在该方向的投影位置;

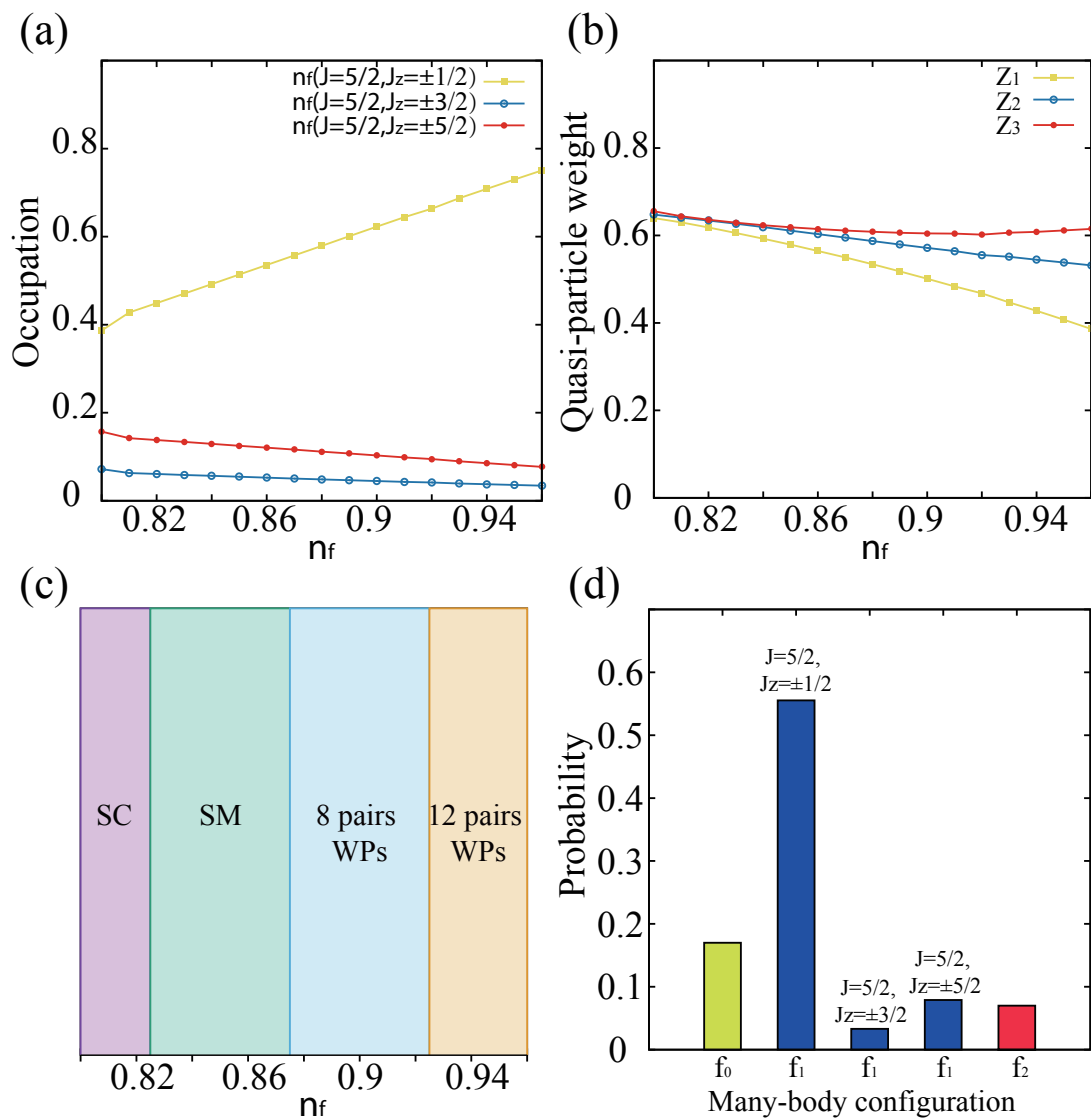


图 3.7: (a)不同成分的f电子占据数随着总的局域电子数的变化情况；(b)分波准粒子权重随着局域电子数变化；(c)不同局域轨道占据数对应的拓扑相图；(d)采用与实验值吻合的局域轨道占据数，得到的多体构型的几率。

第四章 总结与展望

在本论文中，我主要计算了一系列外尔半金属材料，包括多铁体系和重费米子体系。

首先，我们提出在不考虑SOC的情况下，我们通过第一性原理计算得到 YCoC_2 体系是一种特殊的Nodal-line半金属，布里渊区中两个镜面上存在着镜面保护的两个简并环线，它们在两个点处相切。在考虑自旋轨道耦合之后，两个Nodal-line劈裂成三类不等价的外尔点，包括Type-I和Type-II型外尔点。从表面态的计算结果我们可以看到连接外尔锥的费米弧，有望被ARPES实验验证。同时，该体系还被发现是 $T_c=4.2\text{K}$ 的超导体，因此它的拓扑超导性也有待研究。

在第二章，我们还研究了多铁与拓扑共存的两个材料。对于铁电材料，我们通过第一性原理计算提出了 HgPbO_3 的铁电相变，并发现随着铁电极化强度增强，体系将从平庸的半金属相变为外尔半金属。从表面态的计算结果，我们可以分辨出连接外尔点的费米弧。对于该体系的铁电相变，已经初步被中子散射实验和球差电镜实验所证实。对于其外尔半金属特征，还有待ARPES实验和相关的输运实验所证实。对于反常霍尔电导的来源一直以来备受争议，最开始理论上的主流观点认为反常霍尔效应来源于材料中的杂质散射（即外禀机制）。后来随着拓扑物质态理论的发展，人们逐渐接受另外一种内禀机制的解释，即反常霍尔电导来源于波函数的贝里曲率。我们与实验组合作发现铁磁半金属 $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ 具有很强的反常霍尔电导，为了对此作出解释，我们做了系统的理论计算。计算结果表明该体系是一类铁磁外尔半金属。同时，基于紧束缚模型计算得到外尔点附近的贝里曲率呈发散行为，其对反常霍尔电导的贡献与输运实验结果吻合，我们提出实验测得的巨大反常霍尔电导主要来源于体系的拓扑性质。另外，通过固定材料的磁矩大小，我们发现反常霍尔电导与外尔点的劈裂距离有关。这一工作为解释反常霍尔效应的来源提供了依据。铁电与铁磁体是两类具有很大潜在应用价值的体系，我们把这两个概念与拓扑结合起来，极大地丰富了对自旋电子学的研究。

在第三章，采用第一性原理与多体技术相结合的方法，我们第一次在重费米子体系 CeRu_4Sn_6 中预言了外尔半金属态。与弱关联拓扑体系不同，重费米子体系的电子有效质量非常大，相应的准粒子能带比较窄。这就导致了它与弱关联拓扑体系有很大不同，例如 CeRu_4Sn_6 中的费米弧比一般的外尔半金属的费米

弧都要长，其拓扑相对外界物理环境非常敏感等，这些特征都将引起独特的输运行为，也为拓扑材料的量子调控提供了可能。

时至今日，拓扑材料搜索已进行得如火如荼，研究人员已经通过高通量计算把几乎所有的弱关联材料计算了一遍，并为之打上“拓扑标签”，令人震撼。但是，在多铁材料和强关联领域的拓扑材料搜索依然进展缓慢。一方面是由于这些材料不具有规模和普遍性，只能进行逐个研究。另一方面是由于当前的计算方法只适用于弱关联体系，强关联计算方法还有待进一步完善。随着拓扑能带论的发展和完善，相信最近人们对于强关联和磁性体系的丰富拓扑性质研究会逐步展开。

参考文献

- Anisimov, V. I., Solovyev, I. V., Korotin, M. A., Czyżyk, M. T., and Sawatzky, G. A. (1993). Density-functional theory and nio photoemission spectra. *Phys. Rev. B*, 48:16929–16934.
- Anisimov, V. I., Zaanen, J., and Andersen, O. K. (1991). Band theory and mott insulators: Hubbard u instead of stoner i. *Phys. Rev. B*, 44:943–954.
- Armitage, N. P., Mele, E. J., and Vishwanath, A. (2018). Weyl and dirac semimetals in three-dimensional solids. *Rev. Mod. Phys.*, 90:015001.
- Benalcazar, W. A., Bernevig, B. A., and Hughes, T. L. (2017a). Electric multipole moments, topological multipole moment pumping, and chiral hinge states in crystalline insulators. *Phys. Rev. B*, 96:245115.
- Benalcazar, W. A., Bernevig, B. A., and Hughes, T. L. (2017b). Quantized electric multipole insulators. *Science*, 357(6346):61–66.
- Bernevig, B. A., Hughes, T. L., and Zhang, S.-C. (2006). Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells. *Science*, 314(5806):1757–1761.
- Brüning, E. M., Brando, M., Baenitz, M., Bentien, A., Strydom, A. M., Walstedt, R. E., and Steglich, F. (2010). Low-temperature properties of CeRu₄Sn₆ from NMR and specific heat measurements: Heavy fermions emerging from a Kondo-insulating state. *Phys. Rev. B*, 82:125115.
- Bünemann, J., Gebhard, F., and Weber, W. (1997). Gutzwiller-correlated wave functions for degenerate bands: exact results in infinite dimensions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(35):7343.
- Bünemann, J., Weber, W., and Gebhard, F. (1998). Multiband gutzwiller wave functions for general on-site interactions. *Physical Review B*, 57(12):6896.
- Burkov, A. A. and Balents, L. (2011). Weyl semimetal in a topological insulator multilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 107:127205.

- Ceperley, D. M. and Alder, B. J. (1980). Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett.*, 45:566–569.
- Chen, R. Y., Chen, Z. G., Song, X.-Y., Schneeloch, J. A., Gu, G. D., Wang, F., and Wang, N. L. (2015a). Magnetoinfrared spectroscopy of landau levels and zeeman splitting of three-dimensional massless dirac fermions in ZrTe_5 . *Phys. Rev. Lett.*, 115:176404.
- Chen, R. Y., Zhang, S. J., Schneeloch, J. A., Zhang, C., Li, Q., Gu, G. D., and Wang, N. L. (2015b). Optical spectroscopy study of the three-dimensional dirac semimetal ZrTe_5 . *Phys. Rev. B*, 92:075107.
- Chen, Y., Analytis, J. G., Chu, J.-H., Liu, Z., Mo, S.-K., Qi, X.-L., Zhang, H., Lu, D., Dai, X., Fang, Z., et al. (2009). Experimental realization of a three-dimensional topological insulator Bi_2Te_3 . *Science*, 325(5937):178–181.
- Cigarroa, O. V., Renosto, S. T., Grant, T., Fisk, Z., and Machado, A. J. S. (2014). Superconductivity in a new non-centrosymmetric compound of YCoC_2 composition. In *APS March Meeting Abstracts*, page C1.130.
- Das, I. and Sampathkumaran, E. V. (1992). Electrical-resistance anomalies in a ce-ru-sn phase. *Phys. Rev. B*, 46:4250–4252.
- Deng, X., Dai, X., and Fang, Z. (2008). Lda+gutzwiller method for correlated electron systems. *EPL (Europhysics Letters)*, 83(3):37008.
- Deng, X., Wang, L., Dai, X., and Fang, Z. (2009). Local density approximation combined with gutzwiller method for correlated electron systems: Formalism and applications. *Phys. Rev. B*, 79:075114.
- Dzero, M., Sun, K., Coleman, P., and Galitski, V. (2012). Theory of topological Kondo insulators. *Physical Review B*, 85(4):045130.
- Dzero, M., Sun, K., Galitski, V., and Coleman, P. (2010). Topological Kondo Insulators. *Physical Review Letters*, 104(10):106408.
- Dzero, M., Xia, J., Galitski, V., and Coleman, P. (2016). Topological Kondo Insulators. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 7:249.

- Fan, Z., Liang, Q.-F., Chen, Y. B., Yao, S.-H., and Zhou, J. (2017). Transition between strong and weak topological insulator in ZrTe_5 and HfTe_5 . *Sci Rep*, 7.
- Fang, Z., Nagaosa, N., Takahashi, K. S., Asamitsu, A., Mathieu, R., Ogasawara, T., Yamada, H., Kawasaki, M., Tokura, Y., and Terakura, K. (2003). The Anomalous Hall Effect and Magnetic Monopoles in Momentum Space. *Science*, 302(5642):92–95.
- Fu, L. (2011). Topological crystalline insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 106:106802.
- Fu, L. and Kane, C. L. (2007). Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76(4):045302.
- Fu, L., Kane, C. L., and Mele, E. J. (2007). Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 98:106803.
- Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W., and Rozenberg, M. J. (1996). Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 68:13–125.
- Guritanu, V., Wissgott, P., Weig, T., Winkler, H., Sichelschmidt, J., Scheffler, M., Prokofiev, A., Kimura, S., Iizuka, T., Strydom, A. M., Dressel, M., Steglich, F., Held, K., and Paschen, S. (2013). Anisotropic optical conductivity of the putative Kondo insulator CeRu_4Sn_6 . *Phys. Rev. B*, 87:115129.
- Haldane, F. D. M. (1988). Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly”. *Phys. Rev. Lett.*, 61(18):2015–2018.
- Hasan, M. Z. and Kane, C. L. (2010). Colloquium: Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82(4):3045–3067.
- Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B):B864.
- Hsieh, D., Xia, Y., Qian, D., Wray, L., Dil, J., Meier, F., Osterwalder, J., Patthey, L., Checkelsky, J., Ong, N., et al. (2009). A tunable topological insulator in the spin helical dirac transport regime. *Nature*, 460(7259):1101.

Hsieh, T. H., Lin, H., Liu, J., Duan, W., Bansil, A., and Fu, L. (2012). Topological crystalline insulators in the SnTe material class. *Nature communications*, 3:982.

Jeitschko, W. and Gerss, M. (1986). Ternary carbides of the rare earth and iron group metals with cecoc2-and cenic2-type structure. *Journal of the Less Common Metals*, 116(1):147–157.

Jiang, J., Li, S., Zhang, T., Sun, Z., Chen, F., Ye, Z. R., Xu, M., Ge, Q. Q., Tan, S. Y., Niu, X. H., Xia, M., Xie, B. P., Li, Y. F., Chen, X. H., Wen, H. H., and Feng, D. L. (2013). Observation of in-gap surface states in the Kondo insulator SmB6 by photoemission. *arXiv.org*.

Kane, C. L. and Mele, E. J. (2005a). $\mathbb{Z}_2$ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95(14):146802.

Kane, C. L. and Mele, E. J. (2005b). Quantum Spin Hall Effect in Graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95(22):226801.

Kim, D., Thomas, S., Grant, T., Botimer, J., Fisk, Z., and Xia, J. (2012). Robust Surface Hall Effect and Nonlocal Transport in SmB6: Indication for an Ideal Topological Insulator. *arXiv.org*.

Klitzing, K. v., Dorda, G., and Pepper, M. (1980). New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494–497.

Kohn, W. and Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A):A1133.

König, M., Wiedmann, S., Brüne, C., Roth, A., Buhmann, H., Molenkamp, L. W., Qi, X.-L., and Zhang, S.-C. (2007a). Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770.

König, M., Wiedmann, S., Brüne, C., Roth, A., Buhmann, H., Molenkamp, L. W., Qi, X.-L., and Zhang, S.-C. (2007b). Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770.

- Kotliar, G., Savrasov, S. Y., Haule, K., Oudovenko, V. S., Parcollet, O., and Marianetti, C. A. (2006). Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory. *Rev. Mod. Phys.*, 78:865–951.
- Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54(16):11169.
- Kresse, G. and Hafner, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B*, 47(1):558.
- Lanatà, N., Strand, H. U. R., Dai, X., and Hellsing, B. (2012). Efficient implementation of the gutzwiler variational method. *Phys. Rev. B*, 85:035133.
- Langbehn, J., Peng, Y., Trifunovic, L., von Oppen, F., and Brouwer, P. W. (2017). Reflection-symmetric second-order topological insulators and superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 119:246401.
- Laughlin, R. B. (1983). Anomalous quantum hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1395–1398.
- Li, Q., Kharzeev, D. E., Zhang, C., Huang, Y., Pletikosić, I., Fedorov, A., Zhong, R., Schneeloch, J., Gu, G., and Valla, T. (2016a). Chiral magnetic effect in zrte 5. *Nature Physics*, 12(6):550.
- Li, R., Xu, Y., He, J., Ullah, S., Li, J., Liu, J.-M., Li, D., Franchini, C., Weng, H., and Chen, X.-Q. (2016b). Weyl ferroelectric semimetal. *arXiv preprint arXiv:1610.07142*.
- Li, X.-B., Huang, W.-K., Lv, Y.-Y., Zhang, K.-W., Yang, C.-L., Zhang, B.-B., Chen, Y. B., Yao, S.-H., Zhou, J., Lu, M.-H., Sheng, L., Li, S.-C., Jia, J.-F., Xue, Q.-K., Chen, Y.-F., and Xing, D.-Y. (2016c). Experimental observation of topological edge states at the surface step edge of the topological insulator ZrTe₅. *Phys. Rev. Lett.*, 116:176803.

Liang, T., Lin, J., Gibson, Q., Kushwaha, S., Liu, M., Wang, W., Xiong, H., Sobota, J. A., Hashimoto, M., Kirchmann, P. S., et al. (2018). Anomalous hall effect in zrte 5. *Nature Physics*, page 1.

Liechtenstein, A. I., Anisimov, V. I., and Zaanen, J. (1995). Density-functional theory and strong interactions: Orbital ordering in mott-hubbard insulators. *Phys. Rev. B*, 52:R5467–R5470.

Liu, E., Sun, Y., Kumar, N., Muechler, L., Sun, A., Jiao, L., Yang, S.-Y., Liu, D., Liang, A., Xu, Q., et al. (2018). Giant anomalous hall effect in a ferromagnetic kagome-lattice semimetal. *Nature Physics*, page 1.

Liu, Z., Jiang, J., Zhou, B., Wang, Z., Zhang, Y., Weng, H., Prabhakaran, D., Mo, S. K., Peng, H., Dudin, P., et al. (2014a). A stable three-dimensional topological dirac semimetal Cd_3As_2 . *Nature materials*, 13(7):677.

Liu, Z., Zhou, B., Zhang, Y., Wang, Z., Weng, H., Prabhakaran, D., Mo, S.-K., Shen, Z., Fang, Z., Dai, X., et al. (2014b). Discovery of a three-dimensional topological dirac semimetal Na_3Bi . *Science*, 343(6173):864–867.

Lu, F., Zhao, J., Weng, H., Fang, Z., and Dai, X. (2013). Correlated Topological Insulators with Mixed Valence. *Physical Review Letters*, 110(9):096401.

Lu, L., Wang, Z., Ye, D., Ran, L., Fu, L., Joannopoulos, J. D., and Soljačić, M. (2015). Experimental observation of weyl points. *Science*, 349(6248):622–624.

Lv, B., Feng, Z.-L., Xu, Q.-N., Gao, X., Ma, J.-Z., Kong, L.-Y., Richard, P., Huang, Y.-B., Strocov, V., Fang, C., et al. (2017). Observation of three-component fermions in the topological semimetal molybdenum phosphide. *Nature*, 546(7660):627.

Lv, B. Q., Xu, N., Weng, H. M., Ma, J. Z., Richard, P., Huang, X. C., Zhao, L. X., Chen, G. F., Matt, C. E., Bisti, F., Strocov, V. N., Mesot, J., Fang, Z., Dai, X., Qian, T., Shi, M., and Ding, H. (2015). Observation of Weyl nodes in TaAs. *Nat Phys*, advance online publication.

Ma, J., Yi, C., Lv, B., Wang, Z., Nie, S., Wang, L., Kong, L., Huang, Y., Richard, P., Zhang, P., et al. (2017). Experimental evidence of hourglass fermion

- in the candidate nonsymmorphic topological insulator khgsb. *Science Advances*, 3(5):e1602415.
- Ma, J.-Z., He, J.-B., Xu, Y.-F., Lv, B., Chen, D., Zhu, W.-L., Zhang, S., Kong, L.-Y., Gao, X., Rong, L.-Y., et al. (2018). Three-component fermions with surface fermi arcs in tungsten carbide. *Nature Physics*, 14(4):349.
- Mostofi, A. A., Yates, J. R., Lee, Y.-S., Souza, I., Vanderbilt, D., and Marzari, N. (2008). wannier90: A tool for obtaining maximally-localised wannier functions. *Computer physics communications*, 178(9):685–699.
- Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M. (1996a). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3865–3868.
- Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M. (1996b). Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.*, 77(18):3865.
- Pöttgen, R., Hoffmann, R.-D., Sampathkumaran, E., Das, I., Mosel, B., and Müllmann, R. (1997). Crystal Structure, Specific Heat, and ^{119}Sn Mössbauer Spectroscopy of CeRu_4Sn_6 : A Ternary Stannide with Condensed, Distorted RuSn_6 Octahedra. *Journal of Solid State Chemistry*, 134(2):326 – 331.
- Qi, X.-L. and Zhang, S.-C. (2011). Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83(4):1057–1110.
- Schindler, F., Cook, A. M., Vergniory, M. G., Wang, Z., Parkin, S. S., Bernevig, B. A., and Neupert, T. (2018a). Higher-order topological insulators. *Science advances*, 4(6):eaat0346.
- Schindler, F., Wang, Z., Vergniory, M. G., Cook, A. M., Murani, A., Sengupta, S., Kasumov, A. Y., Deblock, R., Jeon, S., Drozdov, I., et al. (2018b). Higher-order topology in bismuth. *Nature Physics*, 14(9):918.
- Shi, Y., Guo, Y., Wang, X., Princep, A. J., Khalyavin, D., Manuel, P., Michiue, Y., Sato, A., Tsuda, K., Yu, S., et al. (2013). A ferroelectric-like structural transition in a metal. *Nature materials*, 12(11):1024.

- Sodemann, I. and Fu, L. (2015). Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal Invariant Materials. *Phys. Rev. Lett.*, 115(21):216806.
- Soluyanov, A. A., Gresch, D., Wang, Z., Wu, Q., Troyer, M., Dai, X., and Bernevig, B. A. (2015). Type-ii weyl semimetals. *Nature*, 527(7579):495.
- Song, Z., Fang, Z., and Fang, C. (2017). $(d - 2)$ -dimensional edge states of rotation symmetry protected topological states. *Phys. Rev. Lett.*, 119:246402.
- Sundermann, M., Strigari, F., Willers, T., Winkler, H., Prokofiev, A., Ablett, J. M., Rueff, J. P., Schmitz, D., Weschke, E., Moretti Sala, M., Al-Zein, A., Tanaka, A., Haverkort, M. W., Kasinathan, D., Tjeng, L. H., S., P., and Severing, A. (2015). CeRu₄Sn₆: a strongly correlated material with nontrivial topology. *Scientific Reports*, 5:17937.
- Tanaka, Y., Ren, Z., Sato, T., Nakayama, K., Souma, S., Takahashi, T., Segawa, K., and Ando, Y. (2012). Experimental realization of a topological crystalline insulator in snite. *Nature Physics*, 8(11):800.
- Tang, F., Po, H. C., Vishwanath, A., and Wan, X. (2018). Towards ideal topological materials: Comprehensive database searches using symmetry indicators. *arXiv preprint arXiv:1807.09744*.
- Thole, B. T., van der Laan, G., Fuggle, J. C., Sawatzky, G. A., Karnatak, R. C., and Esteve, J.-M. (1985). 3d x-ray-absorption lines and the $3d^9 4f^{n+1}$ multiplets of the lanthanides. *Phys. Rev. B*, 32:5107–5118.
- Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P., and den Nijs, M. (1982). Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49(6):405–408.
- Tsui, D. C., Stormer, H. L., and Gossard, A. C. (1982). Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48:1559–1562.
- Turner, A. M., Zhang, Y., Mong, R. S., and Vishwanath, A. (2012). Quantized response and topology of magnetic insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, 85(16):165120.

- Vergniory, M., Elcoro, L., Felser, C., Bernevig, B., and Wang, Z. (2018). The (high quality) topological materials in the world. *arXiv preprint arXiv:1807.10271*.
- Wan, X., Turner, A., Vishwanath, A., and Savrasov, S. (2011). Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 83(20):205101.
- Wang, Q., Xu, Y., Lou, R., Liu, Z., Li, M., Huang, Y., Shen, D., Weng, H., Wang, S., and Lei, H. (2018a). Large intrinsic anomalous hall effect in half-metallic ferromagnet $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ with magnetic weyl fermions. *Nature communications*, 9(1):3681.
- Wang, Q., Xu, Y., Lou, R., Liu, Z., Li, M., Huang, Y., Shen, D., Weng, H., Wang, S., and Lei, H. (2018b). Large intrinsic anomalous hall effect in half-metallic ferromagnet $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ with magnetic weyl fermions. *Nature communications*, 9(1):3681.
- Wang, Z., Alexandradinata, A., Cava, R. J., and Bernevig, B. A. (2016). Hour-glass fermions. *Nature*, 532(7598):189–194.
- Wang, Z., Sun, Y., Chen, X.-Q., Franchini, C., Xu, G., Weng, H., Dai, X., and Fang, Z. (2012). Dirac semimetal and topological phase transitions in A_3Bi ($\text{A}=\text{Na}, \text{K}, \text{Rb}$). *Phys. Rev. B*, 85(19):195320.
- Wang, Z., Weng, H., Wu, Q., Dai, X., and Fang, Z. (2013). Three-dimensional Dirac semimetal and quantum transport in Cd_3As_2 . *Phys. Rev. B*, 88(12):125427.
- Wang, Z., Zhang, P., Xu, G., Zeng, L., Miao, H., Xu, X., Qian, T., Weng, H., Richard, P., Fedorov, A. V., et al. (2015). Topological nature of the fese 0.5 te 0.5 superconductor. *Physical Review B*, 92(11):115119.
- Weng, H., Dai, X., and Fang, Z. (2014a). Transition-Metal Pentatelluride ZrTe_5 and HfTe_5 : A Paradigm for Large-Gap Quantum Spin Hall Insulators. *Phys. Rev. X*, 4(1):011002.

- Weng, H., Fang, C., Fang, Z., Bernevig, B. A., and Dai, X. (2015). Weyl Semimetal Phase in Noncentrosymmetric Transition-Metal Monophosphides. *Phys. Rev. X*, 5(1):011029.
- Weng, H., Zhao, J., Wang, Z., Fang, Z., and Dai, X. (2014b). Topological crystalline kondo insulator in mixed valence ytterbium borides. *Phys. Rev. Lett.*, 112:016403.
- Wissgott, P. and Held, K. (2016). Electronic structure of CeRu_4Sn_6 : a density functional plus dynamical mean field theory study. *The European Physical Journal B*, 89(1):5.
- Wu, Q., Zhang, S., Song, H.-F., Troyer, M., and Soluyanov, A. A. (2017). Wanniertools: An open-source software package for novel topological materials. *arXiv preprint arXiv:1703.07789*.
- Wu, R., Ma, J.-Z., Nie, S.-M., Zhao, L.-X., Huang, X., Yin, J.-X., Fu, B.-B., Richard, P., Chen, G.-F., Fang, Z., Dai, X., Weng, H.-M., Qian, T., Ding, H., and Pan, S. H. (2016). Evidence for topological edge states in a large energy gap near the step edges on the surface of ZrTe_5 . *Phys. Rev. X*, 6:021017.
- Xia, Y., Qian, D., Hsieh, D., Wray, L., Pal, A., Lin, H., Bansil, A., Grauer, D., Hor, Y. S., Cava, R. J., et al. (2009). Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature physics*, 5(6):398.
- Xu, G., Weng, H., Wang, Z., Dai, X., and Fang, Z. (2011). Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in HgCr_2Se_4 . *Phys. Rev. Lett.*, 107(18):186806.
- Xu, N., Shi, X., Biswas, P. K., Matt, C. E., Dhaka, R. S., Huang, Y., Plumb, N. C., Radovic, M., Dil, J. H., Pomjakushina, E., Amato, A., Salman, Z., Paul, D. M., Mesot, J., Ding, H., and Shi, M. (2013). Surface and Bulk Electronic Structure of the Strongly Correlated System SmB_6 and Implications for a Topological Kondo Insulator. *arXiv.org*.
- Xu, S.-Y., Alidoust, N., Belopolski, I., Yuan, Z., Bian, G., Chang, T.-R., Zheng, H., Strocov, V. N., Sanchez, D. S., Chang, G., Zhang, C., Mou, D., Wu, Y.,

- Huang, L., Lee, C.-C., Huang, S.-M., Wang, B., Bansil, A., Jeng, H.-T., Neupert, T., Kaminski, A., Lin, H., Jia, S., and Zahid Hasan, M. (2015a). Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide. *Nat Phys*, advance online publication.
- Xu, S.-Y., Belopolski, I., Alidoust, N., Neupane, M., Bian, G., Zhang, C., Sankar, R., Chang, G., Yuan, Z., Lee, C.-C., Huang, S.-M., Zheng, H., Ma, J., Sanchez, D. S., Wang, B., Bansil, A., Chou, F., Shibayev, P. P., Lin, H., Jia, S., and Hasan, M. Z. (2015b). Discovery of a Weyl Fermion semimetal and topological Fermi arcs. *Science*, page aaa9297.
- Xu, Y., Yue, C., Weng, H., and Dai, X. (2017). Heavy weyl fermion state in ceru_4sn_6 . *Phys. Rev. X*, 7:011027.
- Yang, B.-J. and Nagaosa, N. (2014). Classification of stable three-dimensional Dirac semimetals with nontrivial topology. *Nat Commun*, 5:4898.
- Yang, K.-Y., Lu, Y.-M., and Ran, Y. (2011). Quantum Hall effects in a Weyl semimetal: Possible application in pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 84(7):075129.
- Yao, Y., Kleinman, L., MacDonald, A., Sinova, J., Jungwirth, T., Wang, D.-s., Wang, E., and Niu, Q. (2004). First principles calculation of anomalous hall conductivity in ferromagnetic bcc fe. *Physical review letters*, 92(3):037204.
- Yu, R., Qi, X. L., Bernevig, A., Fang, Z., and Dai, X. (2011). Equivalent expression of $\mathbb{Z}_2$ topological invariant for band insulators using the non-Abelian Berry connection. *Phys. Rev. B*, 84(7):075119.
- Yu, R., Weng, H., Fang, Z., Dai, X., and Hu, X. (2015). Topological node-line semimetal and dirac semimetal state in antiperovskite Cu_3PdN . *Physical review letters*, 115(3):036807.
- Yu, R., Wu, Q., Fang, Z., and Weng, H. (2017). From nodal chain semimetal to weyl semimetal in hfc. *Phys. Rev. Lett.*, 119:036401.

- Yue, C., Xu, Y., Song, Z., Lu, Y.-M., Weng, H., Fang, C., and Dai, X. (2018). Symmetry enforced chiral hinge states and surface quantum anomalous hall effect in magnetic axion insulator $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Se}_3$. *arXiv preprint arXiv:1807.01414*.
- Zhang, H., Liu, C.-X., Qi, X.-L., Dai, X., Fang, Z., and Zhang, S.-C. (2009). Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nat Phys*, 5(6):438–442.
- Zhang, P., Yaji, K., Hashimoto, T., Ota, Y., Kondo, T., Okazaki, K., Wang, Z., Wen, J., Gu, G., Ding, H., et al. (2018a). Observation of topological superconductivity on the surface of an iron-based superconductor. *Science*, 360(6385):182–186.
- Zhang, T., Jiang, Y., Song, Z., Huang, H., He, Y., Fang, Z., Weng, H., and Fang, C. (2018b). Catalogue of topological electronic materials. *arXiv.org*.
- Zhang, T., Song, Z., Alexandradinata, A., Weng, H., Fang, C., Lu, L., and Fang, Z. (2018c). Double-weyl phonons in transition-metal monosilicides. *Phys. Rev. Lett.*, 120:016401.

个人简历

基本情况

徐远锋，男，河南省开封人，1990年7月出生，未婚，中国科学院物理研究所读博士研究生。

教育状况

2009-09-2013-06 重庆大学物理学学士；

2013-09-2018-11 中国科学院物理研究所理论物理硕博连读

获奖情况

2014年度中国科学院大学三好学生

2015年度所长奖学金表彰奖

2016年度所长奖学金优秀奖

2017年度博士生国家奖学金

发表文章目录

Yuanfeng Xu, Changming Yue, Hongming Weng, Xi Dai. Heavy Weyl Fermion State in CeRu_4Sn_6 .

Phys. Rev. X 7.011027(2017)

Yuanfeng Xu, Yueqiang Gu, Xianlei Sheng, Hongming Weng. Topological nodal line and hybrid Weyl semimetal states in YCoC_2 .

In preparation

Qi Wang, **Yuanfeng Xu**[†], Rui Lou, Zhonghao Liu, Man Li, Yaobo Huang, Dawei Shen, Hongming Weng, Shancai Wang, Hechang Lei . Large intrinsic anomalous Hall effect in half-metallic ferromagnet $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$ with magnetic Weyl fermions.

Nature Communications 9, 3681 (2018)

J.-Z. Ma, J.-B. He, **Y.-F. Xu**[†], B. Q. Lv, D. Chen, W.-L. Zhu, S. Zhang, L.-Y. Kong, X. Gao, L.-Y. Rong, Y.-B. Huang, P. Richard, C.-Y. Xi, E. S. Choi, Y. Shao, Y.-L. Wang, H.-J. Gao, X. Dai, C. Fang, H.-M. Weng, G.-F. Chen, T. Qian , H. Ding. Three-component fermions with surface fermi arcs in topological semimetal tungsten carbide.

Nature Physics 14(4)(2018)

Changming Yue, **Yuanfeng Xu**, Zhida Song, Yuan-Ming Lu, Hongming Weng, Chen Fang, Xi Dai Symmetry Enforced Chiral Hinge States and Surface Quantum Anomalous Hall Effect in Magnetic Axion Insulator $\text{Bi}_2\text{ESm}_x\text{Se}_3$

arXiv:1807.01414 (2018)

R. Lou, **Y. F. Xu**[†], L.-X. Zhao, Z.-Q. Han, P.-J. Guo, M. Li, J.-C. Wang, B.-B. Fu, Z.-H. Liu, Y.-B. Huang, P. Richard, T. Qian, K. Liu, G.-F. Chen, H. M. Weng, H. Ding, and S.-C. Wang. Observation of Open-Orbit Fermi Surface Topology in Extremely Large Magnetoresistance Semimetal MoAs_2 .

Phys. Rev. B 96, 241106(R)(2017)

Jian Zhang, Mingfeng Tian, Guangxi Jin, **Yuanfeng Xu**, Xi Dai. Implementation of LDA+Gutzwiller with Newtons method.

Chi. Phys. B 26(1);017103(2017)

Ronghan Li, **Yuanfeng Xu**[†], Jianggang He, Sami Ullah, Jiangxiu Li, Jun-Ming Liu, Dianzhong Li, Cesare Franchini, Hongming Weng, Xing-Qiu Chen .Weyl Ferroelectric Semimetal.

arXiv: 1610. 07142(2016)

Zhida Song, **Yuanfeng Xu**, Simin Nie, Hongming Weng, Zhong Fang, Xi Dai. First principle calculation of the effective Zeeman's couplings in topological materials.

arXiv:1512.05084(2015)

致谢

值此论文完成之际，衷心感谢我的两位指导老师，戴希研究员和翁红明研究员，以及和我有过合作的老师和同学。

感谢戴老师在科研学习上对我的耐心指导和细心培养。在我进实验室之前，没有任何科研经历，看拓扑绝缘体方面的文献也是一头雾水。戴老师因材施教，并没有直接分配给我具体的课题，而是指导我首先学习掌握相关的基本技能。通过学习Gutzwiller方法，我开始逐步接触到凝聚态物理的前沿课题，在之后学习拓扑能带理论时也相对轻松很多。戴老师对学生的科研工作要求严格，同时也特别注重锻炼学生的学术交流能力和扩展学术视野，时常给组里的同学参加国际会议和访问的机会。戴老师的人格魅力同样让人敬佩，在美国和香港访问期间，经常请同学们吃大餐，实属良师益友。

感谢我的另一位指导老师翁老师。翁老师在拓扑材料计算，特别是在外尔半金属材料的研究方面做出了很多著名的工作。在我做第一个研究课题的时候，翁老师很耐心地给我讲解拓扑半金属的基本理论，并教会了我很多材料计算方面的技巧和细节。之后，翁老师还指导我和实验组合作，做了很多拓扑半金属材料的计算。做计算的过程中很容易出现错误，翁老师总是一步步给予把关和纠正。生活中的翁老师阳光随和，是我学习的榜样。

感谢和我有过合作的几位老师，他们是物理所的丁洪研究员、方辰研究员、钱天研究员，人民大学的王善才教授、雷和畅教授，俄亥俄州立大学的Yuanming Lu教授，金属所的陈星秋研究员，和你们的合作让我受益匪浅。感谢合作过的几位实验组的同学，包括马均章和姜睿，与你们交流使我对实验物理充满兴趣。感谢访美期间，Tsung-han Lee和蓝汪伟在生活中提供的很多帮忙。

同时还要感谢组里的其他老师，他们是方忠研究员、徐力方研究员、孟子杨研究员、和王磊研究员，在组会上从你们的讨论中，我学到了很多知识。特别感谢齐建为老师在生活中给予的照顾和科研学习上给与的支持。

还要特别感谢组里的几位师兄在科研上给与的鼓励和帮助。感谢王义林师兄指导我学习强关联计算方法，感谢张健师兄指导我推导Gutzwiller方法中的很多公式细节，感谢聂思敏师兄在我学习拓扑材料计算时给与的帮助，感谢顾跃强、岳长明、许霄琰、秦彦齐、崔志海师兄和许秋楠师姐在学习生活中的诸多提点。感谢组里的其他师兄姐妹们，包括已经毕业离组的刘青梅、王广涛、

张海军、庄嘉宁、徐刚、余睿、吴泉生、赵建洲、胜献雷、王志俊、卢海燕、金光希、宋志达，以及还在组里的程秋波、毛林枫、张田田、任宏斌、张坦、孙光宇、刘子宏、彭士宇、钱玉婷、李哲、陈闯、廖远达、孙松、张帅、高嘉成、周丽琴、刘毓智、张锴、张越水等。感谢理论室篮球队，让我在科研之外找到了运动的乐趣。

感谢我的父母对我的养育、教导和鼓励，感谢他们在我的学术道路上给与的大力支持和信任。感谢我的两位姐姐和兄长，你们不仅带给了我愉快的童年，还引导我走进知识的殿堂。

感谢所有帮助过我的人！