

外尔半金属薄膜的介电张量及色散性质研究

王佐宏¹ 钱黎明¹ 郑改革^{1,2}

(南京信息工程大学¹物理与光电工程学院, 江苏 南京 210044;

²江苏省大气环境与装备技术协同创新中心, 江苏 南京 210044)

摘要 外尔半金属(WSM)是一种以外尔费米子为准粒子的新型拓扑材料,具有优异的物理和光学特性。在光与 WSM 相互作用的过程中,材料的介电函数起到十分关键的作用。从修正的电位移矢量和电场强度关系出发,通过介电函数张量比较了不同费米能级情况下 WSM 介电常数的变化。在此基础上,引入 4×4 的磁光矩阵来求解麦克斯韦方程组,得到菲涅尔反射系数,研究波矢的色散方程。研究表明,WSM 的色散在短波矢处具有线性色散,而在长波矢极限近似具有恒定频率。当 WSM 厚度的持续增大时,能够支持更多的模式分支。

关键词 外尔半金属;介电函数;色散;光学性质

DIELECTRIC TENSOR AND DISPERSION PROPERTIES OF WEYL SEMIMETAL THIN FILMS

WANG Zuohong¹ QIAN Liming¹ ZHENG Gaige^{1,2}

(¹ School of Physics and Optoelectronic Engineering;

² Jiangsu Collaborative Innovation Center of Atmospheric Environment and Equipment Technology (CICAET),

Nanjing University of Information Science & Technology, Nanjing, Jiangsu 210044)

Abstract Weyl semimetals (WSMs) are novel topological materials with Weyl fermions as quasiparticles, which have excellent physical and optical properties. The dielectric function of the material plays a crucial role in the interaction between light and WSM. Based on the relation between the modified electric displacement vector and the electric field intensity, the change of the dielectric constant of WSM under different Fermi energy levels is compared through the dielectric function tensor. On this basis, a 4×4 magneto-optical matrix is introduced to solve Maxwell's equations, to obtain the Fresnel reflection coefficients and to study the dispersion equations of the wave vector. The research results show that the dispersion of WSM has a linear dispersion at the short wavevector and an approximate constant frequency at the longer wavevector limit. As the thickness of the WSM continues to increase, more mode branches can be supported.

Key words Weyl semimetal; dielectric function; dispersion; optical property

收稿日期: 2022-12-12

通讯作者: 郑改革,男,教授,主要从事微纳光学方面的研究,002382@nuist.edu.cn。

引文格式: 王佐宏,钱黎明,郑改革,等. 外尔半金属薄膜的介电张量及色散性质研究[J]. 物理与工程, 2023, 33(3): 52-56.

Cite this article: WANG Z H, QIAN L M, ZHENG G G, et al. Dielectric tensor and dispersion properties of Weyl semimetal thin films [J]. Physics and Engineering, 2023, 33(3): 52-56. (in Chinese)

最近以外尔半金属(Weyl semimetal, WSM)为代表的新型拓扑材料引起了极大的关注^[1-3]。其表现出许多新奇的物理现象,比如特异的表面态、低耗散的输运行为、无色散的朗道能级、手征磁效应以及极大磁阻等。揭示并理解 WSM 材料所呈现的新颖光学效应是目前极具吸引力的研究方向之一^[4]。WSM 以无质量的外尔费米子为准粒子,具有拓扑非平庸的能带结构,其中外尔费米子附近能带的线性色散关系又使得 WSM 成为一种相对论性的电子系统。因此,WSM 也被称为“三维的石墨烯”^[5,6]。WSM 能够在较宽能量范围内保持较强的光学各向异性,有望应用在基于各向异性的光学元件和光电器件中,在图像信息处理、交换以及传感等方面发挥重要的作用,尤其是为开发下一代高度集成化、响应时间短以及光敏感强的光电器件提供一个理想的材料平台。2016 年,山东大学张怀金教授研究团队与中科院物理所王刚研究员团队合作,研究了 Weyl 费米子与拓扑费米弧的线性和非线性光学响应,揭示了光场下 Weyl 费米子与光子相互作用的物理过程,通过分析 WSM 的电子传输和光吸收性质(反射率,折射率,光电导),证实了 TaAs 具有各向异性的超高的电子迁移率^[7]。最近,中山大学杨国伟教授团队报道了一种基于 WSM 的太赫兹探测器,其光响应率为 5.7×10^4 V/W,探测率为 2.9×10^9 Jones,在室温下具有 1 年的空气稳定性。同时该器件还显示出巨大的本征各向异性电导和太赫兹响应,为实现非制冷和高灵敏度的太赫兹探测器开辟了一条新途径^[8]。

WSM 的光学各项异性意味着其对光场的响应在不同方向和偏振下是不同的。此时的介电函数不再是一个常数,而是一个二阶张量。电位移矢量和电场强度之间的关系发生了变化,以往在推导涉及各向同性介质的亥姆霍兹方程也不再适用。首先研究 WSM 的介电张量,分析介电函数与频率以及费米能级之间的关系,在此基础上求解电磁场在各向异性介质中传播时的方程,得到菲涅尔反射系数并研究其色散性质。

1 WSM 的介电张量

WSM 的能带结构包含偶数个非退化能带接触点(Weyl 节点)。此处考虑一种最简单的情况,

其中 WSM 包含两个具有相反手性的 Weyl 节点,且在动量空间的间隔为由波矢 $2\mathbf{b}$ 表示,实验已经证实了这种 WSM 的存在。相应的电位移矢量和电场强度之间的关系服从修正后的本构关系^[9]

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_d \mathbf{E} + i \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar \omega} \mathbf{b} \times \mathbf{E} \quad (1)$$

其中, ϵ_0 是真空的介电常数, ϵ_d 是当 $\mathbf{b} = 0$ 时对应的狄拉克半金属的相对介电常数。 i 是虚数单位, e 代表电子电荷, $\hbar, \omega$ 分别是约化普朗克常数和角频率。

在这种情况下,基于 $\mathbf{D} = \epsilon_0 \bar{\epsilon} \mathbf{E}$ 定义的 WSM 的介电函数张量写为^[10]

$$\bar{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_d & i\epsilon_a & 0 \\ -i\epsilon_a & \epsilon_d & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_d \end{bmatrix} \quad (2)$$

其中,非对角线项是符号相反的纯虚数, ϵ_a 由下式给出

$$\epsilon_a = \frac{be^2}{2\pi^2 \hbar \omega \epsilon_0} \quad (3)$$

介电函数中非对角线不对称项的存在打破了洛伦兹互易,因此可能突破传统的基尔霍夫定律。对角线项是相同的,可以通过使用双波段的 Kubo-Greenwood 公式获得

$$\epsilon_d = \epsilon_b + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0} \quad (4)$$

其中, ϵ_b 是背景介电函数, σ 是由下式给出的体电导率^[10]

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\epsilon_0 r_s g E_F}{6 \hbar} \Omega G(E_F \Omega / 2) + i \frac{\epsilon_0 r_s g E_F}{6 \pi \hbar} (\Gamma + \Delta) \\ \Gamma &= \frac{4}{\Omega} \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right] \\ \Delta &= 8 \Omega \int_0^{\xi_c} \frac{G(\xi E_F) - G(E_F \Omega / 2)}{\Omega^2 - 4 \xi^2} \xi d\xi \end{aligned} \quad (5)$$

在式(5)中, $r_s = e^2 / 4\pi \epsilon_0 \hbar v_F$ 是由费米速度 v_F 定义的有效精细结构常数, g 为外尔节点数目, E_F 是费米能级, $\Omega = \hbar(\omega + i\tau^{-1}) / E_F$ 是个复数归一化频率, τ^{-1} 代表散射速率。而 $G(E) = n(-E) - n(E)$, 其中 $n(E) = \{\exp[(E - E_F) / k_B T] + 1\}^{-1}$ 是费米-狄拉克分布函数, k_B 为玻尔兹曼常数。 $\xi_c = E_c / E_F$ 是归一化截止能量,在这个能量之外,频率色散关系就不再是线性的。

本工作中使用的参数取自 Zhao 等人的工作。 $\epsilon_b = 6.2$, $\xi_c = 3$, $\tau = 1000 \text{ fs}$, $g = 2$, $b = 2 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$,

$\nu_F = 8.3 \times 10^4 \text{ m/s}^{[10]}$ 。相对磁导率 μ 取为 1, 这一假设已被用于处理磁光效应。 E_F 是温度的函数, 可以根据 Ashby 和 Carbotte 给出的公式计算, 在我们的研究中使用 $E_F = 0.15 \text{ eV}$ 为室温下的默认值。

在图 1 中, 我们比较了不同费米能级情况下 WSM 介电常数的变化。 ϵ_d 的实部随着波长变大而逐渐减小, 直至为负值。图 1(a)、图 1(b) 和图 1(c) 分别为 $E_F = 0.05 \text{ eV}$ 、 $E_F = 0.15 \text{ eV}$ 和 $E_F = 0.3 \text{ eV}$ 对应的介电常数曲线。它们对应的临界波长分别为 $17.558 \mu\text{m}$ 、 $8.541 \mu\text{m}$ 和 $4.183 \mu\text{m}$ 。

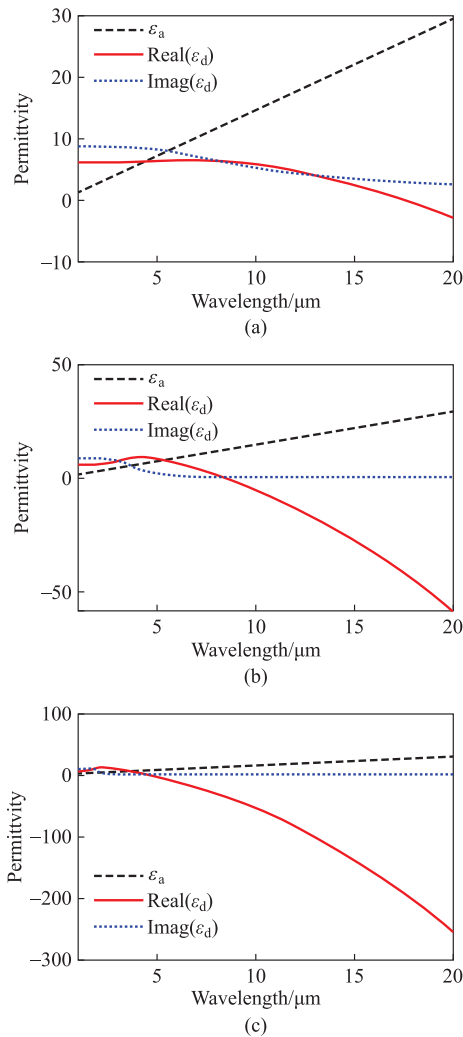


图 1 WSM 在不同费米能级下的介电常数曲线
(a) $E_F = 0.05 \text{ eV}$ 对应的介电常数曲线; (b) $E_F = 0.15 \text{ eV}$ 对应的介电常数曲线; (c) $E_F = 0.3 \text{ eV}$ 对应的介电常数曲线

2 WSM 薄膜的色散性质

考虑如图 2 所示的结构, 由 WSM 薄膜和一个

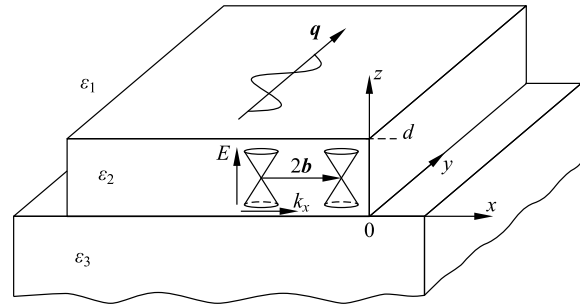


图 2 WSM 和衬底组成的结构示意图

介电常数为 ϵ_3 的衬底组成, 外界为空气, 即 $\epsilon_1 = 1$ 。当一束光入射时, 在界面处发生反射。由于 WSM 中的电磁极化分离, 传统的传输矩阵方法不适用于求解反射系数。我们引入一个 4×4 的磁光矩阵来解决这个问题^[11]。首先, 我们从麦克斯韦方程组出发研究波矢的色散方程。在区域 2 和区域 3, 麦克斯韦方程组可以写成

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}_i &= i\omega\mu_0 \mathbf{H}_i \\ \nabla \times \mathbf{H}_i &= -i\omega \mathbf{D}_i \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $i = 2, 3$, 通过使用波向量 $\mathbf{k}_2$ 来代替空间导数, 方程(6)可以简化为 $\mathbf{k}_2 \times \mathbf{E}_2 = \omega\mu_0 \mathbf{H}_2$ 和 $\mathbf{k}_2 \times \mathbf{H}_2 = -\omega\mu_0 \mathbf{E}_2$ 。利用同样的处理方法可以得到 $\mathbf{k}_2$ 和 $\mathbf{E}_2$ 之间的关系

$$\mathbf{k}_2 \times (\mathbf{k}_2 \times \mathbf{E}_2) = -k_0^2 \mathbf{E}_2 \quad (7)$$

根据 $\mathbf{k}_2 = k_{2x}\mathbf{x} + k_{2z}\mathbf{z}$, 方程(7)可以写成如下矩阵的形式

$$\begin{pmatrix} k_0^2 \epsilon_d - k_{2z}^2 & -ik_0^2 \epsilon_a & k_{2z}k_{0x} \\ -ik_0^2 \epsilon_a & k_{\perp}^2 - k_0^2 \epsilon_d & 0 \\ k_{2z}k_{0x} & 0 & k_0^2 \epsilon_d - k_{0x}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{x2} \\ E_{y2} \\ E_{z2} \end{pmatrix} = 0 \quad (8)$$

其中, $k_{\perp} = \sqrt{k_{2z}^2 + k_{2x}^2}$, $k_0 = \omega/c$ 。该方程存在非零解的条件是式(8)的系数矩阵的模为零, 可以得到如下表达式

$$\begin{aligned} (\epsilon_d k_0^2 - k_{\perp}^2) (\epsilon_d k_0^2 - \epsilon_d k_{0x}^2 - \epsilon_d k_{2z}^2) + \\ k_0^2 (k_{0x}^2 - \epsilon_d k_0^2) \epsilon_a^2 = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

求解方程(9), 我们即可以研究 WSM 的色散性质。

为了研究结构的反射系数, 我们引入了 4×4 琼斯反射矩阵

$$\mathbf{M} = (\mathbf{D}^{(1)})^{-1} \mathbf{D}^{(2)} \mathbf{P}^{(2)} (\mathbf{D}^{(2)})^{-1} \mathbf{D}^{(3)} \quad (10)$$

上标(1)、(2)和(3)分别代表空气、WSM 和衬底区域。在区域 1 不同的模式相互独立, 所以

$$(D^{(1)})^{-1} = (2N^{(1)} \cos \theta)^{-1} \begin{bmatrix} N^{(1)} \cos \theta & 1 & 0 & 0 \\ N^{(1)} \cos \theta & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & N^{(1)} & -\cos \theta \\ 0 & 0 & N^{(1)} & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$D^{(2)} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{11} & D_{11} & D_{11} \\ D_{21} & -D_{21} & D_{23} & -D_{23} \\ D_{31} & D_{31} & D_{33} & D_{33} \\ D_{41} & -D_{41} & D_{43} & -D_{43} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$P^{(2)} = \begin{bmatrix} \exp\left(i \frac{\omega}{c} N_{z+} d\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-i \frac{\omega}{c} N_{z+} d\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp\left(i \frac{\omega}{c} N_{z-} d\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(-i \frac{\omega}{c} N_{z-} d\right) \end{bmatrix} \quad (13)$$

最终我们可以得到光学结构对应的传输矩阵 M 的表达式和反射系数,在此基础上研究 WSM 的色散性质。反射系数可由下式获得^[12]

$$r_{sp} = \frac{E_{0s}^r}{E_{0p}^i} = \frac{M_{11}M_{23} - M_{21}M_{13}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (14)$$

$$r_{pp} = \frac{E_{0p}^r}{E_{0p}^i} = \frac{M_{11}M_{43} - M_{41}M_{13}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (15)$$

$$r_{ss} = \frac{E_{0s}^r}{E_{0s}^i} = \frac{M_{21}M_{33} - M_{23}M_{31}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (16)$$

$$r_{ps} = \frac{E_{0p}^r}{E_{0s}^i} = \frac{M_{41}M_{33} - M_{43}M_{31}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \quad (17)$$

图 3 绘制了不同厚度的 WSM 薄膜在空气界面处的色散关系。当厚度为 500nm 时,色散曲线是退化的,形式上只有一条曲线,如图 3(a)所示。但是当 WSM 薄膜厚度增大到 1000nm 时,薄膜的上下表面对应的色散是不同的,表现为分散的曲线,如图 3(b)所示,当厚度持续增大时,能够支持更多的模式色散,正式图 3(c)所表现出的情形。总的来说,WSM 的色散在短波矢处具有线性色散,而在长波矢极限近似具有恒定频率。另外,必须指出的是,WSM 中的表面等离激元并不能直接激发,必须提供额外的波矢补偿。

3 结语

WSM 奇异的电学、热学、光学等性质无论在

其中矩阵中的相应元素是:

$$D_{11} = i\epsilon_d (\epsilon_d - N_x^2),$$

$$D_{21} = i\epsilon_d N_{z+} (\epsilon_d - N_x^2),$$

$$D_{23} = i\epsilon_d N_{z-} (\epsilon_d - N_x^2),$$

$$D_{31} = (\epsilon_d - N_x^2) (\epsilon_d - N_x^2 - N_{z+}^2),$$

$$D_{33} = (\epsilon_d - N_x^2) (\epsilon_d - N_x^2 - N_{z-}^2),$$

$$D_{41} = -N_{z+} \epsilon_d (\epsilon_d - N_x^2 - N_{z+}^2),$$

$$D_{43} = -N_{z-} \epsilon_d (\epsilon_d - N_x^2 - N_{z-}^2),$$

$N_x = \sin \theta$, $N_{z\pm} = k_{\pm}/k_0$ 。此外,WSM 薄膜中的光束传播矩阵表示为:

$$P^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \exp\left(i \frac{\omega}{c} N_{z-} d\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-i \frac{\omega}{c} N_{z-} d\right) & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

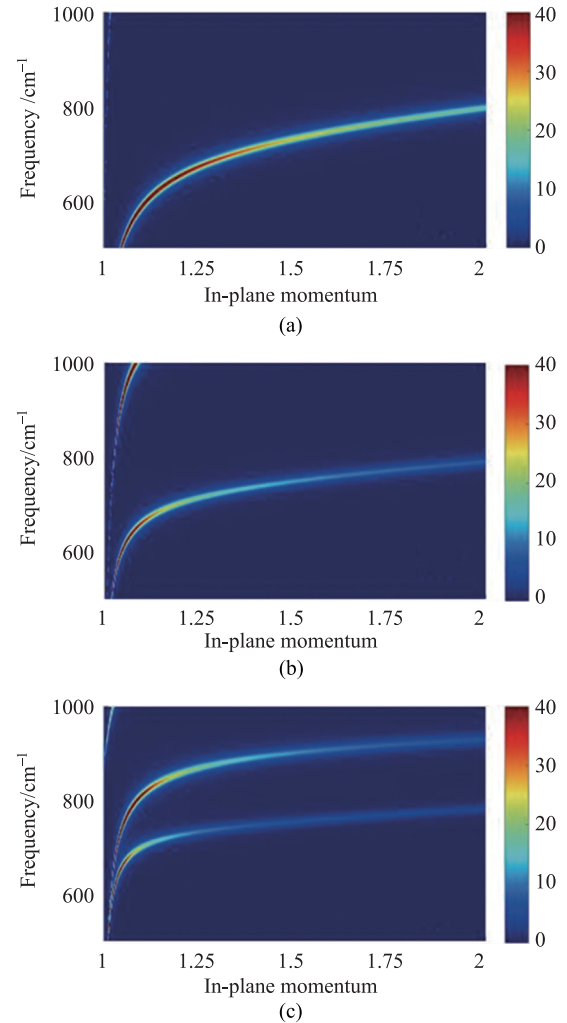


图 3 二氧化硅衬底上不同厚度的 WSM 薄膜的色散性质
(a) 500nm; (b) 1000nm; (c) 2000nm

理论上还是实验上都已经得到初步证实。相关研究极大地丰富了拓扑物态,不仅扩展了人们对凝聚态物理领域中拓扑系统的认识,也拓展了WSM在光电子器件中的应用。通过各向异性的介电函数张量,比较了不同费米能级情况下WSM介电常数的变化。同时基于四阶传输矩阵求解麦克斯韦方程组,得到菲涅尔反射系数,描述电磁波的传输,研究波矢的色散曲线。研究结果表明,WSM的色散在短波矢处具有线性色散,而在长波矢极限近似具有恒定频率。当WSM厚度的持续增大时,能够支持更多的模式分支。

参 考 文 献

- [1] 周丽琴,徐远锋,翁红明,等. 磁性外尔半金属材料研究现状与展望[J]. 物理, 2020, 49(12): 807-816.
ZHOU L Q, XU Y F, WENG H M, et al. Magnetic Weyl semimetal materials[J]. PHYSICS, 2020, 49(12): 807-816. (in Chinese)
- [2] 刘娜,王译,李文波,等. 外尔半金属 WTe₂/Ti 异质结的热稳定性拉曼散射研究[J]. 物理学报, 2022, 71(19): 197501.
LIU N, WANG Y, LI W B, et al. Thermal stability study of Weyl semimetal WTe₂/Ti heterostructures by Raman scattering[J]. Acta Physica Sinica, 2022, 71(19): 197501. (in Chinese)
- [3] 张智强,蒋庆东,陈垂针,等. 外尔半金属及其输运特性[J]. 物理学进展, 2018, 38(3): 101-131.
ZHANG Z Q, JIANG Q D, CHEN C Z, et al. Weyl semimetals and their related transport properties[J]. Progress in Physics, 2018, 38(3): 101-131. (in Chinese)
- [4] 刘昕. 第一类与第二类外尔半金属界面上的菲涅尔反射系数[J]. 光学技术, 2020, 46(3): 342.
LIU X. Fresnel reflection coefficients on the surfaces of type-I and type-II Weyl semimetals[J]. Optical Technology, 2020, 46(3): 342. (in Chinese)
- [5] SU Y X, ILYA B NASSER A, et al. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs[J]. Science, 2015, 349: 613-617.
- [6] GOOTH J, NIEMANN A C, MENG T, et al. Experimental signatures of the mixed axial-gravitational anomaly in the Weyl semimetal NbP[J]. Nature 547, 324-327 (2017).
- [7] CHI S M, LI Z L, YU H H, et al. Symmetrical broken and nonlinear response of Weyl semimetal TaAs influenced by the topological surface states and Weyl nodes[J]. Annalen der Physik, 2017, 529: 1600359.
- [8] ZHANG J T, ZHANG T N, YAN L, et al. Colossal Room-Temperature Terahertz Topological Response in Type-II Weyl Semimetal NbIrTe₄[J]. Advanced Materials, 2022, 34: 2204621.
- [9] ASADCHY V S, GUO C, ZHAO B, et al. Sub-wavelength passive optical isolators using photonic structures based on Weyl semimetals[J]. Advanced Optical Materials, 2020, 8(16): 2000100.
- [10] ZHAO B, GUO C, GARCIA C A C, et al. Axion-field-enabled nonreciprocal thermal radiation in Weyl semimetals[J]. Nano Letters, 2020, 20(3): 1923-1927.
- [11] PASSLER N C, PAARMANN A. Generalized 4×4 matrix formalism for light propagation in anisotropic stratified media: study of surface phonon polaritons in polar dielectric heterostructures[J]. Journal of the Optical Society of America B, 2017, 34: 2128-2139.
- [12] HALE N, SIMONSEN I, BRUNE C, et al. Use of 4×4 transfer matrix method in the study of surface magnon polaritons via simulated attenuated total reflection measurements on the antiferromagnetic semiconductor MnF₂ [J]. Physical Review B, 2022, 105, 104421.

(上接第 51 页)

有近似性。最后引用弗伦奇教授的一句话来结束本文是适宜的,那就是:“重要的事情是,用相当简单的方法,我们证实了二分点的进动(岁差)确能用牛顿的动力学原理去理解。”^[1]

参 考 文 献

- [1] 弗伦奇著. A P. 郭敦仁,何成钧译. 牛顿力学(第三册)[M]. 北京:人民教育出版社,1982:217-223.
- [2] MARION J B 编著. 李筌译,杨润殷校. 质点与系统的经典动力学[M]. 北京:高等教育出版社,1985:382.
- [3] 周衍柏编. 理论力学教程[M]. 1 版. 北京:人民教育出版社,1979:212.
- [4] 张三慧主编. 大学物理学(第一册)——力学[M]. 北京:清华大学出版社,1990:vii-viii,216.

[1] 弗伦奇著. A P. 郭敦仁,何成钧译. 牛顿力学(第三册)