

节线半金属中的Imbert-Fedorov位移

潘荣华*, 罗 威

江西理工大学理学院, 江西 赣州

收稿日期: 2025年12月26日; 录用日期: 2026年1月26日; 发布日期: 2026年2月3日

摘 要

我们研究结线半金属(nodal-line semimetal, NLSM)电子在阶跃势垒界面上的散射所产生的Imbert-Fedorov (IF)横向位移。考虑含质量项 Δ 的两带有效模型, 其法向动量由界面势垒决定。由于其特殊的轮胎形费米面, 从而在反射端出现两束反射波。我们分别采用(1) 波包中心方法与(2) 基于Berry曲率的半经典方法计算各反射束的IF位移, 并给出两种方法在绝热散射条件下的等价性。

关键词

节线半金属, Imbert-Fedorov位移, 贝利曲率

Imbert-Fedorov Shift in Nodal-Line Semimetals

Ronghua Pan*, Wei Luo

School of Science, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou Jiangxi

Received: December 26, 2025; accepted: January 26, 2026; published: February 3, 2026

Abstract

We investigate the Imbert-Fedorov (IF) transverse shift arising from the scattering of electrons in a nodal-line semimetal (NLSM) at a step-like potential barrier interface. We consider an effective two-band model with a mass term Δ , where the in-plane momentum is conserved while the normal momentum is determined by the interfacial barrier. Owing to the characteristic torus-like Fermi surface of NLSMs, two reflected beams can emerge on the reflection side. We calculate the IF shift for each reflected beam using (1) the wave-packet center (stationary-phase) approach and (2) a semiclassical approach based on Berry curvature, and demonstrate the equivalence of the two methods in the adiabatic scattering regime. This framework provides a unified starting point for systematically exploring how the mass term and incident energy control the IF shift through numerical pa-

*第一作者。

parameter scans.

Keywords

Nodal-Line Semimetal, Imbert-Fedorov Shift, Berry Curvature

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

Imbert-Fedorov (IF)效应最早在光学系统中被发现, 该效应表现为: 在介质界面处, 反射光束会产生手性相关的横向位移(即垂直于入射平面) [1] [2]。该效应最早由 Fedorov 于 1955 年在玻璃全内反射案例中完成理论推导。Imbert 于 1972 年通过实验验证了这一现象, 因此该效应也被称为 Imbert-Fedorov (IF) 效应。IF 位移最初是基于麦克斯韦方程组推导的, 该方程组是电磁波的经典理论描述。因此, 这种效应可以被视为广义的波动现象[3] [4]。由于所有粒子都具有波粒二象性, 因此其他粒子也应存在空间位移现象。在最近发现的外尔半金属(WSMs)中 IF 位移效应得到证实, 从半经典理论的角度分析, IF 位移源自系统的拓扑效应也就是系统的贝利曲率[5]-[8]。在本研究中, 我们将 IF 位移的研究推广到节点线型半金属(NLSMs)。

节线半金属的能带在布里渊区沿直线或者环形区域呈现交叉现象, 或者其他更复杂的一维构型[9]。这一特性已在多种候选材料中得到验证[10]-[19], 并可能展现出独特的输运特性[20]-[23]。节线的存在依赖一定的对称性: 如反演对称、时间反演对称或镜面对称。一旦这些对称性被打破, 节线可能演化为点节点(Weyl/Dirac)或打开能隙[9] [10]。在节线半金属中, 沿动量空间中任意环绕节线的闭合回路, 布洛赫波函数的 Berry 相位量子化为 π , 这拓扑不变量确保了能带交叉线的稳定性, 而布里渊区其他区域的贝里曲率则为零。因此, 在没有自旋轨道耦合的情况下, IF 位移将不存在。然而, 在大量节点线型半金属候选体系中, 自旋轨道耦合通常不可忽略, 其效应可能在能谱中引入约 10~100 meV 量级的有限能隙[24] [25]。在这些材料中, π 贝里通量会在动量空间中形成有限区域的贝里曲率分布, 异常速度会产生 IF 位移。

目前, 无论是在光学系统还是在外尔半金属中观测到的 IF 位移现象, 均主要依赖半经典理论加以阐释[3] [7]。在该框架下, 波包的轨迹由半经典运动方程决定, 其外场诱导的位移源于反常速度, 而反常速度本质上对应于贝里曲率在动量空间的积分[26]。

在晶界材料中, 量子力学方法已被应用于 IF 位移的计算[6]。当两种晶界材料之间存在明显界面时, 无论系统的对称性如何, 该方法都能取得最佳效果。

在本研究中, 系统地探讨了掺杂大质量节点线半金属中具有轮胎面型费米面的拓扑 IF 位移现象。在考虑自旋轨道耦合效应的条件下, 我们引入质量项并分析了节线半金属体系中可能产生的 IF 位移机制。

2. 基本原理(实验仿真)

2.1. 波包驻相法求解 IF 位移

首先从一个最小模型出发, 该模型描述了两个能带沿单一节点环交叉的节点线半金属体系, 如文献 [10]所述。

$$H_0 = \hbar\lambda(k_x^2 + k_y^2 - k_0^2)\tau_x + \hbar vk_z\tau_y \quad (1)$$

此处 $\tau_{x,y}$ 为作用于轨道自由度的泡利矩阵, λ 为模型参数。该哈密顿量的特征值 $E_k = \pm\sqrt{\hbar^2\lambda^2(k_x^2 + k_y^2 - k_0^2)^2 + \hbar^2v^2k_z^2}$ 定义了一条能带简并线 $k_x^2 + k_y^2 = k_0^2$, 即在倒易空间中半径为 k_0 的节点环。假设在 $x=0$ 存在一个界面和势垒该势垒源于外部电场或者与其他材料表面的束缚势, 其中势垒 V 为:

$$V = \begin{cases} 0, (x < 0) \\ V(x), (x > 0) \end{cases} \quad (2)$$

在存在自旋轨道耦合的情况下, 应添加质量项[24]:

$$H = H_0 + \Delta\tau_z\sigma_z \quad (3)$$

我们重点研究外场与自旋之间塞曼耦合效应可忽略不计的情况。可以证明, 主要结论并不依赖于自旋(或者说质量的符号), 因此下文设定 $\sigma_z = 1$ 。

该哈密顿量表明在节线半金属中存在一个位于 $x=0$ 处的界面。我们考虑一束从 $x < 0$ 区域入射的电子束, 其波包采用高斯波包模型进行描述。带有轮胎面的非线性模型(NLSM)具有高度各向异性特性, 其费米面如图 1(a)所示。由于其特殊的费米面, 导致在界面散射中存在两束反射波, 其示意图如图 1(b)所示。对于全反射情形, 我们预期不同方向反射面的界面(IF)位移会呈现显著差异。

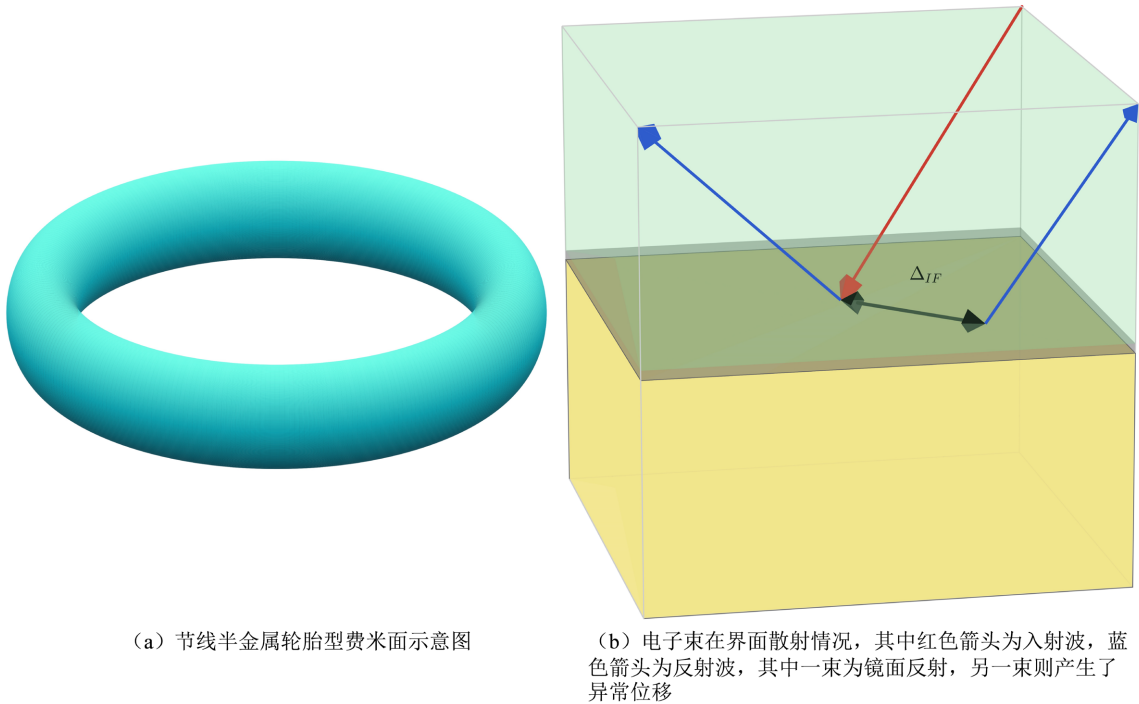


Figure 1. Schematic diagram of the Fermi surface and wave packet scattering
图 1. 费米面示意图及波包散射图

我们假设波包在存在势能台阶的界面处发生反射, 反射界面位于 $x=0$, 并且入射波包被限制 x - y 面, 其反射示意如图 2(a)所示, 在 $x < 0$ 的区域用高斯波包进行建模:

$$\psi_g^{in}(k, r) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z f(k_y - \bar{k}_y) f(k_z - \bar{k}_z) \psi^{in}(k, r) \quad (4)$$

在高斯波包的模型中 $f(k_s - \bar{k}_s) = (\sqrt{2\pi}\Delta_{k_s})^{-1} e^{-(k_s - \bar{k}_s)^2 / 2\Delta_{k_s}^2}$, 是宽度为 Δ_{k_s} 的高斯分布函数, 其峰值位于平均波矢量 $(\bar{k}_x, \bar{k}_y, \bar{k}_z)$ 处, 其中 $s = y, z$ 。

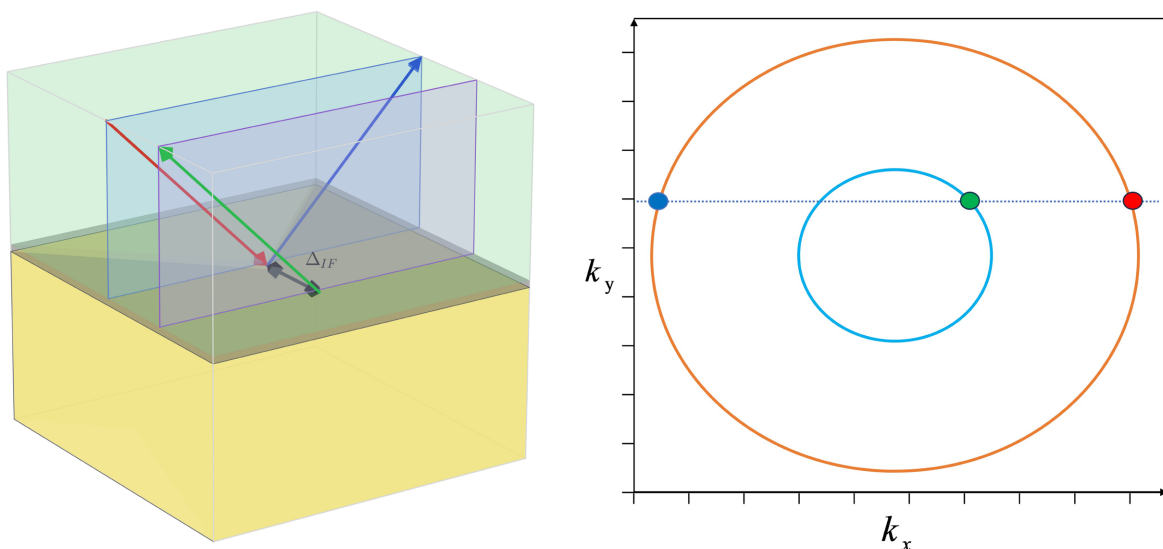
所有结果均不依赖于波包的具体形状。此处 $\psi^{in}(k, r)$ 是入射波函数, 作为节线半金属方程的解, 即对于 $x < 0$ 区域满足薛定谔方程 $H\psi^{in} = E\psi^{in}$:

可以得到波函数的具体表达式, 然后给出一个简洁的入射波函数形式:

$$\psi^{in}(k, r) = \frac{1}{\sqrt{1+\eta^2}} \left(\frac{e^{-i\alpha}}{\eta} \right) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \quad (5)$$

其中, $\eta = \sqrt{(E - \Delta)/E + \Delta}$, $\alpha = \tan^{-1}(\hbar v k_z / \hbar \lambda (k_x^2 + k_y^2 - k_0^2))$, 类似地, 反射波包可表示为

$\psi_g^{re}(k, r) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y dk_z f(k_y - \bar{k}_y) f(k_z - \bar{k}_z) \psi^{in}(k, r)$, 其中 ψ^{re} 为反射波函数, 根据能量守恒定律, 固定入射的切向动量 k_y 时, 水平截线与等能线可出现两组交点, 从而在法向动量上产生两支传播分支, 散射后对应两束反射通道。当内圈分支在给定 k_y 下变为虚根时, 第二束反射消失, 这一点与“存在区筛选”完全一致。反射波的 x 动量要么为 $-k_x$, 要么为 $k_x' = \pm \sqrt{2(k_0^2 - k_y^2) - k_x^2}$, 其示意图如图 2(b) 所示。



(a) 节线半金属的界面散射示意图, 其中红色箭头为入射波, 蓝色箭头为镜面反射波, 绿色箭头为异常反射波

(b) 红色点为入射波, 蓝色点为镜面反射波1, 绿色点为异常反射波

Figure 2. Schematic diagram of wave packet reflection

图 2. 波包反射示意图

同样的方法我们可以求得反射波函数 ψ^{re} , 该函数可通过以下方式从入射波等式中获得: 首先将波函数形式替换为 $k_x \mapsto -k_x$ 、 $\alpha \mapsto \alpha$; $k_x \mapsto k_x'$ 、 $\alpha \mapsto (\pi - \alpha)$ 然后在分别乘以反射振幅 r_1 和 r_2 , 因此我们得到了反射波函数的具体表达式:

$$\psi^{re}(k, r) = \frac{r_1}{\sqrt{1+\eta^2}} \left(\frac{e^{-i\alpha}}{\eta} \right) e^{i(-k_x x + k_y y + k_z z)} + \frac{r_2}{\sqrt{1+\eta^2}} \left(\frac{e^{-i(\pi-\alpha)}}{\eta} \right) e^{i(k_x' x + k_y y + k_z z)} \quad (6)$$

其中, $\eta = \sqrt{(E - \Delta)/E + \Delta}$, $\alpha = \tan^{-1}(\hbar v k_z / \hbar \lambda (k_x^2 + k_y^2 - k_0^2))$, 反射系数 $r_{1,2} = e^{i\phi_{1,2}}$ 与上文一致。

对于透射波函数, 我们采取同样的办法求得, 此时透射波波矢为 $\kappa = i\kappa_{x1,2}$, 并且存在有一个势垒 V 。写出其哈密顿量的表达式:

$$H = \begin{pmatrix} \Delta + V & \hbar\lambda(k_j x^2 + ky^2 - k_0^2) - i\hbar vk_z \\ \hbar\lambda(k_j x^2 + ky^2 - k_0^2) + i\hbar vk_z & -\Delta + V \end{pmatrix}, j = 1, 2; \quad (7)$$

用相同的办法可以得到透射波函数的解析表达式:

$$\psi^{\text{tr}}(k, r) = \frac{1}{\sqrt{1+\xi^2}} \begin{pmatrix} e^{-i\beta_1} \\ \xi \end{pmatrix} e^{i(k_1 x + k_y y + k_z z)} + \frac{1}{\sqrt{1+\xi^2}} \begin{pmatrix} e^{-i\beta_2} \\ \xi \end{pmatrix} e^{i(k_2 x + k_y y + k_z z)} \quad (8)$$

其中, $\xi = \sqrt{(E-V-\Delta)/(E-V+\Delta)}$, $\beta_{1,2} = \tan^{-1}(\hbar vk_z / \hbar\lambda(k_{1,2}^2 + k_y^2 - k_0^2))$ 。如果 $(E-V)^2 < \Delta^2 + \hbar^2 v^2 k_z^2$; 为了满足 $E = \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 \lambda^2 (k_{1,2}^2 + k_y^2 - k_0^2)^2 + \hbar^2 v^2 k_z^2} + V$ 。

令 $k_{1,2} + k_y^2 - k_0^2 = \pm i\kappa$, 其中 $\kappa = \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v^2 K Z^2 - (E-V)^2} / \hbar\lambda > 0$ 。我们要保证 k_1 和 k_2 的虚部为正的, 这样波函数才会在 $x > 0$ 的一侧衰减, 否则波函数会发散。当 $E-V$ 落入带隙导致 k_j 为复数时, 传输态对应倏逝波, 应选取满足 $\text{Im} k_j > 0$ 的分支以保证 $x > 0$ 区域波函数随 x 衰减并保持物理可归一性。

为验证界面匹配条件的物理一致性, 我们从连续性方程出发推导概率流密度。时间依赖方程 $i\hbar\partial_t \Psi = H\Psi$ 给出 $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$, 其中 $\rho = \Psi^\dagger \Psi$ 。对本文两带模型:

$$H = \hbar\lambda \left[(-i\partial_x)^2 + k_y^2 - k_0^2 \right] \tau_x + \hbar vk_z \tau_y + \Delta \tau_z + V(x) \quad (9)$$

可得沿界面法向的流密度:

$$j_x = 2\lambda \Im(\Psi^\dagger \tau_x \partial_x \Psi) \quad (10)$$

其来源是二次导数项的分部积分与厄米性要求。若界面仅包含有限阶跃势 $V(x)$ 而 λ 等材料本征参数在两侧相同, 则对薛定谔方程在 $x=0$ 邻域积分可得 Ψ 与 $\partial_x \Psi$ 在 $x=0$ 连续; 该条件同时保证 Ψ 与 $\tau_x \partial_x \Psi$ 的一致性, 从而 $j_x(0+) = j_x(0-)$, 概率流守恒成立。本文聚焦同一 NLSM 体系上施加静电阶跃势的散射, 因此采用波函数及其导数连续的标准匹配条件。

我们根据波函数连续性条件和导函数连续性条件可以求出反射系数, 根据波函数在 $(x=0)$ 时的连续性条件以及波函数导数的连续性条件即:

$$\begin{aligned} \Psi(0+) &= \Psi(0-) \\ \partial_x \Psi(0+) &= \partial_x \Psi(0-) \end{aligned} \quad (11)$$

根据连续性条件可以列出 4×4 的线性矩阵 $Ax = b$, 取未知向量 x :

$$x = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} \quad (12)$$

把常数项(入射项)移到右边, 可得:

$$A = \begin{pmatrix} N_\eta e^{-i\alpha} & N_\eta e^{-i(\pi-\alpha)} & -N_\xi e^{-i\beta_1} & -N_\xi e^{-i\beta_2} \\ N_\eta \eta & N_\eta \eta & -N_\xi \xi & -N_\xi \xi \\ -k_x N_\eta e^{-i\alpha} & k'_x N_\eta e^{-i(\pi-\alpha)} & -k_1 N_\xi e^{-i\beta_1} & -k_2 N_\xi e^{-i\beta_2} \\ -k_x N_\eta \eta & k'_x N_\eta \eta & -k_1 N_\xi \xi & -k_2 N_\xi \xi \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} -N_\eta e^{-i\alpha} \\ -N_\eta \eta \\ -k_x N_\eta e^{-i\alpha} \\ -k_x N_\eta \eta \end{pmatrix} \quad (13)$$

其中 $N_\eta = 1/\sqrt{1+\eta^2}$, $N_\xi = 1/\sqrt{1+\xi^2}$, 根据克拉默法则求解反射系数, 设 $D = \det(A)$, 用克拉默法则(第 j

个未知量 = 用 b 替换 A 的第 j 列后的行列式比值):

$$r_j = \frac{D_j}{D}, (j=1,2) \quad (14)$$

通过求解这个方程组就可以出求得反射系数 $r_{1,2} = e^{i\phi_{1,2}}$, 反射波包分为两束, 要计算波包在 z 方向的空间位移, 需要确定入射波包和反射波包在界面($x=0$)处的中心位置, 通过将相位 $\alpha(k_z)$ 和 $\phi(k_z)$ 在 $\bar{k}_z$ 附近展开至一阶, 积分得到 ψ_g^{in} 和 $\psi_g^{re_{1,2}}$ 的各分量的表达式分别为:

$$\begin{aligned} \psi_+^{in} &\propto e^{-\left(z - \frac{\partial \alpha}{\partial k_z}\right)^2 \Delta_{k_z}^2 / 2} \\ \psi_+^{re_1} &\propto e^{-\left(z + \frac{\partial \phi_1}{\partial k_z} - \frac{\partial \alpha}{\partial k_z}\right)^2 \Delta_{k_z}^2 / 2} \\ \psi_-^{re_1} &\propto e^{-\left(z + \frac{\partial \phi_1}{\partial k_z}\right)^2 \Delta_{k_z}^2 / 2} \\ \psi_+^{re_2} &\propto e^{-\left(z + \frac{\partial \phi_1}{\partial k_z} + \frac{\partial \alpha}{\partial k_z}\right)^2 \Delta_{k_z}^2 / 2} \\ \psi_-^{re_2} &\propto e^{-\left(z + \frac{\partial \phi_2}{\partial k_z}\right)^2 \Delta_{k_z}^2 / 2} \end{aligned} \quad (15)$$

随后可识别入射波包与反射波包在实空间中的中心(最大值点)。对于入射波包而言, 旋量分量的中心位置分别位于 $\bar{z}^{in}$, 其中下标 $\pm$ 分别对应旋量的第一和第二分量。因此我们得到入射波包的中心为:

$$\bar{z}_+^{in} = \left[\frac{\partial \alpha}{\partial k_z} \right]_{k_z = \bar{k}_z} \quad (16)$$

对于反射波而言, 旋量分量的中心位置位于

$$\begin{aligned} \bar{z}_+^{re_1} &= \left[-\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} + \frac{\partial \alpha}{\partial k_z} \right]_{k_z = \bar{k}_z} \\ \bar{z}_-^{re_1} &= \left[-\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} \right]_{k_z = \bar{k}_z} \\ \bar{z}_+^{re_2} &= \left[-\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} - \frac{\partial \alpha}{\partial k_z} \right]_{k_z = \bar{k}_z} \\ \bar{z}_-^{re_2} &= \left[-\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} \right]_{k_z = \bar{k}_z} \end{aligned} \quad (17)$$

考虑到上述结果, 我们可以获得自旋量分量在 z 方向上的空间位移:

$$\begin{aligned} \Delta_+^{z_1} &= \bar{z}_+^{re_1} - \bar{z}_+^{in} = -\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} \\ \Delta_-^{z_1} &= \bar{z}_-^{re_1} - \bar{z}_-^{in} = -\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} \\ \Delta_+^{z_2} &= \bar{z}_+^{re_2} - \bar{z}_+^{in} = -\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} - 2\frac{\partial \alpha}{\partial k_z} \end{aligned}$$

$$\Delta_{-z_1} = \bar{z}_{-}^{re_1} - \bar{z}_{-}^{in} = -\frac{\partial \phi_r}{\partial k_z} \quad (18)$$

空间位移被定义为两个旋量分量的平均位移:

$$\Delta^z = \frac{\Delta_{+}^{z_{1,2}} + \eta^2 \Delta_{-}^{z_{1,2}}}{1 + \eta^2} \quad (19)$$

因此我们可以得到两个 IF 位移

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= -\partial_{k_z} \phi_{r_1} \Big|_{k_z=0} \\ \Delta_2 &= -\partial_{k_z} \phi_{r_2} \Big|_{k_z=0} - \frac{2}{1 + \eta^2} \partial_{k_z} \alpha \Big|_{k_z=0} \end{aligned} \quad (20)$$

如式所示, 为计算界面处($x=0$)的空间位移, 需获知反射相位 ϕ_r , 在已知通过将 $x=0$ 处的入射波函数 $\psi^{in}(k, r)$ 与反射波函数 $\psi^{re}(k, r)$ 同衰减波进行匹配, 可计算得到反射系数。根据波函数的连续性条件可以求得反射系数 $r = e^{i\phi_r}$, 得到反射系数后, 我们采取数值模拟计算的方法将相位 α 与 ϕ_r 代入式 $\Delta_{1,2}$, 即可求得 z 方向的 IF 位移量。

我们用数值模拟的方法去求解 IF 位移, 参数设定为 $0 < V_0 < 2E$ 且 $|E - V_0| < k_x < E$, 以确保发生全反射。其中, $|r_1|^2$ 表示粒子从 k_x 被反射到 $-k_x$ 的概率, 而 $|r_2|^2 |v_2|/v_1$ 则表示粒子从 k_x 反射到 k'_x 的概率。这里 $v_1 > 0$ 是入射速度的 x 分量, $-v_1$ 和 v_2 分别代表被反射到不同位置粒子速度的 x 分量。后者之所以乘以 $|v_2|/v_1$ 这个系数, 因为概率流 $v_1 = |r_1|^2 v_1 + |r_2|^2 |v_2|$ 成立。可以得到 IF 位移与能量 E 以及质量项之间的关系。为便于向实验与器件方向评估可观测性, 本节给出典型参数下的 IF 位移数据图与机制图, 其中数值模拟结果反射波包 1 的 IF 位移为 0, 因此我们重点讨论反射波包 2 的 IF 位移。所有曲线均在满足双通道反射存在条件的参数区域内绘制; 当第二束反射通道不再存在时, 相应数据将被屏蔽。

本文质量项写为 $\Delta \tau_z \sigma_z$ 。在不考虑自旋翻转散射时 $[\sigma_z, H] = 0$, 因此可在固定 $s = \sigma_z = \pm 1$ 的子空间内分别求解。选取 $s = +1$ 等价于讨论自旋极化入射; 另一分支 $s = -1$ 的结果可由 $\Delta \rightarrow -\Delta$ 得到, 其 Berry 曲率与 Δ_{IF} 整体变号。若入射电子不具备自旋极化且两分支权重相同, 则总的横向位移信号将出现抵消趋势。几何上, 节线环位于 XY 平面($k_z = 0$)。取界面法向为 x 时, k_z, k_y 守恒; 本文主算例取 $k_{z0} = 0$, 使反射过程在 k_x 方向被势垒驱动, 从半经典方程产生沿 z 的异常漂移。改变切向动量方向将改变 Berry 曲率参与的分量以及散射路径在动量空间的端点, 从而导致 Δ_{IF} 的各向异性;

双通道反射的存在区筛选判据: 在 $x < 0$ 区域, 给定 (E, Δ, k_y, k_z) 后, 色散关系给出 k_x 的两支解

$$k_{x,\pm}^2 = k_0^2 - k_y^2 \pm \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{E^2 - \Delta^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2}{\hbar^2}} \quad (21)$$

双通道反射要求两支解同时为实数, 即满足

$$\begin{aligned} E^2 - \Delta^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2 &\geq 0, \\ k_0^2 - k_y^2 &\geq \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{E^2 - \Delta^2 - \hbar^2 v^2 k_z^2}{\hbar^2}}, \\ |k_y| &\leq k_0 \Delta_{IF}^{(1,2)}. \end{aligned} \quad (22)$$

数值计算中我们先按上述不等式筛选动量点, 仅在“双通道存在区”内计算并绘制两束反射对应的 $\Delta_{IF}^{(1/2)}$ 。当参数跨越存在区边界时, 内圈(或外圈)解消失, 反射束数目发生变化, 对应图中临界点的消失。

为便于与实验材料建立一一对应关系, 本文在数值模拟中采用凝聚态物理中常用的 eV-Å 单位制。在

该单位制下, 动量以 $\text{\AA}^{-1}$ 计, 能量以 eV 计, 位移以 $\text{\AA}$ 计。为将最小模型与具体候选材料建立量纲对应, 我们以 ZrSiS 的实验量级作为示例标度, 通过采用傅里叶变换扫描隧道谱(FT-STs)技术, 在 4.5 K 温度下解析了线节点半金属锆硅硫化物(ZrSiS)表面单个缺陷中心的准粒子干涉(QPI)图案。QPI 测量显示, 在接近线节点的能量处赝自旋守恒。此外, 测得线性色散斜率 $\hbar v_F = 2.65 \pm 0.10 \text{ eV\AA}$, 而线节点则位于 E_F 上方约 140 meV 处[27]。磁光研究给出“平均”费米速度 $3 \times 10^5 \text{ m/s}$, 同时给出能隙约 26 meV, 也就是线性色散斜率 $\hbar v_F = 1.97 \text{ eV\AA}$ [28]。结线在倒空间的长度约 $4.3 \text{ \AA}$, 我们用等效环半径 k_0 近似。

固定入射切向动量 $k_y = 0.20 \text{ \AA}$, 分别取 $\Delta = 12, 13, 14 \text{ meV}$ 绘制 IF 位移 $\Delta \text{IF}(E)$ 。在满足传播条件 $E^2 > \Delta^2$ 与双通道存在条件时, 位移随 E 增大整体增强; 同时, 较小 Δ 显著放大位移幅值。其原因在于质量项会削弱节线邻域的贝里曲率峰, 其结果如图 3(a)所示。

通过固定 $k_y = 0.20 \text{ \AA}$, 分别取 $E = 0.04, 0.08, 0.12 \text{ meV}$ 绘制 IF 位移 $\Delta \text{IF}(\Delta)$ 。可以看到随 $|\Delta|$ 增大位移迅速减小, 而在小 $|\Delta|$ 区域闭式表达式给出强增强趋势, 其结果如图 3(b)所示。

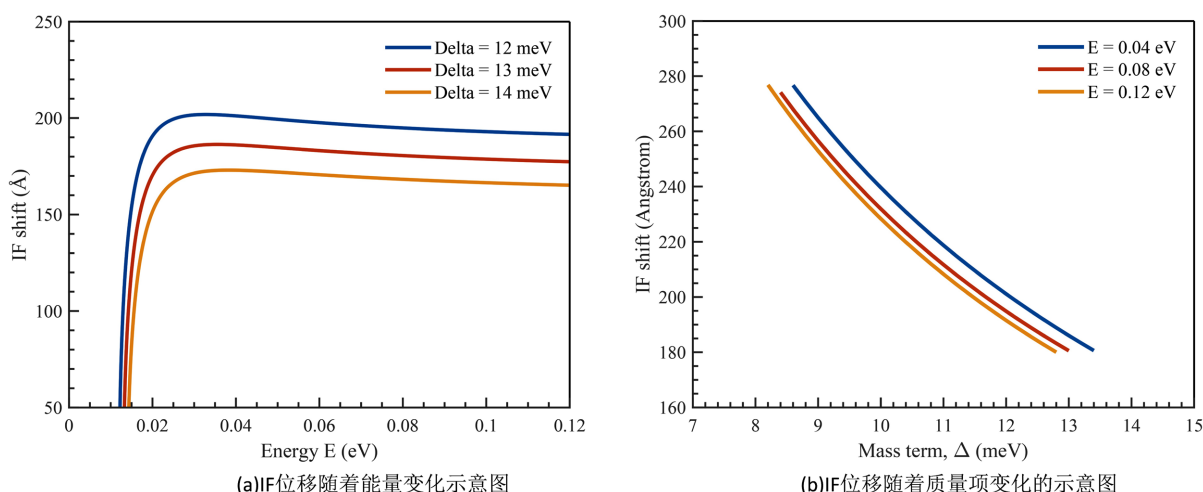


Figure 3. Schematic of IF displacement variation

图 3. IF 位移变化图

2.2. 半经典法求解 IF 位移

从半经典视角来看, 波包的运动受方程组支配, 而当波包受到有效力作用时, 贝里曲率会引发反常速度, 从而导致横向位移[26], 描述波包实空间坐标 r 和动量空间坐标 k 轨迹的方程组为:

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\partial E(k)}{\hbar \partial k} - \frac{dk}{dt} \times \Omega \quad (23)$$

其中 Ω 为能带的贝里曲率, 我们假设波包在存在势垒台阶的界面处发生反射。从原理上说, 势垒台阶必须比波包更平滑才能满足方程组的约束条件; 但正如先前研究所示, 势垒台阶是尖锐还是平滑并不会影响横向位移的量级。波包的入射动量为 $(k_x, k_y, 0)$, 反射动量为 $(-k_x, k_y, 0)$ 和 $(k'_x, k_y, 0)$ 。IF 偏移量 ΔIF 是总反射发生期间反常速度对时间间隔的积分(是贝里曲率在布里渊区线段上的积分):

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\partial E(k)}{\hbar \partial k} - \frac{dk}{dt} \times \Omega \quad (24)$$

哈密顿量等式(1)可表示为 $H_0(k) = h(k) \cdot \sigma$, 其中 σ 的分量是泡利矩阵, h 的分量则是每个泡利矩阵的系数:

$$\vec{h}(k) = (\hbar\lambda(k_x^2 + k_y^2 - k_0^2), \hbar vk_z, \Delta) \quad (25)$$

为了获得 Ω , 我们首先将 $h(k)$ 展开到一阶, 得到:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{h}(k)}{\partial k_x} &= (2\hbar\lambda k_x, 0, 0) \\ \frac{\partial \vec{h}(k)}{\partial k_y} &= (2\hbar\lambda k_y, 0, 0) \\ \frac{\partial \vec{h}(k)}{\partial k_z} &= (0, \hbar v, 0) \end{aligned} \quad (26)$$

对两带哈密顿量 $H = h(k) \cdot \tau$ (能带 $\varepsilon_{\pm} = \pm|h|$), Berry 曲率可写为[26]:

$$\Omega_{\pm,i}(k) = \frac{1}{2} \frac{h}{|h|^3} (\partial_{k_j} h \times \partial_{k_k} h) \quad (27)$$

进而推导出各分量贝利曲率 Ω :

$$\begin{aligned} \Omega_x &= \frac{\hbar^2 \lambda v \Delta k_y}{E^3} \\ \Omega_y &= -\frac{\hbar^2 \lambda v \Delta k_x}{E^3} \\ \Omega_z &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

我们将求解得到的贝利曲率代入公式可以得到 IF 位移(在 x - y 面入射, y 方向的速度不变因此 $dk_y/dt = 0$)

$$\Delta_{IF}^1 = -\int_{k_x}^{-k_x} dt \left[\frac{dk}{dt} \times \Omega(k) \right] = -\int_{k_x}^{-k_x} dk_x \Omega_y \quad (29)$$

$$\Delta_{IF}^2 = -\int_{k_x}^{k'_x} dt \left[\frac{dk}{dt} \times \Omega(k) \right] = -\int_{k_x}^{k'_x} dk_x \Omega_y \quad (30)$$

其中 Ω_y 是关于 k_x 的奇函数, 所以在对称积分区间的积分为零, 也就是 $\Delta_{IF}^1 = 0$ 。对于另一个积分区间, IF 位移为:

$$\Delta_{IF}^2 = \frac{\hbar^2 \lambda v \sqrt{E^2 - \Delta^2}}{\Delta E} \quad (31)$$

从公式可以看出, IF 位移和能量以及质量项相关, 可以证明节线半金属的节线能隙打开时, 能够产生一个横向位移, 也就是 IF 位移存在。两种方法实质上计算的是同一几何相位 k_y 对的响应, 因此在绝热散射下给出相同的 IF 位移。

3. 总结

本文研究了节线半金属电子波包在阶跃势垒界面散射过程中产生的 Imbert-Fedorov (IF) 横向位移。在含质量项 Δ 的两带有效模型下, 由于轮胎形费米面带来的多分支等能结构, 反射侧在一定参数范围内出现两支反射通道。

我们首先采用波包驻相法, 通过界面处波函数及其导数连续性确定散射系数, 并由反射振幅相位对切向动量 k_y 的响应提取波包中心在 z 方向的偏移。数值结果表明, 在全反射且双通道存在的区域内, 镜面反射通道的 IF 位移近似为零, 而异常反射通道产生显著横向位移; 位移随入射能量 E 增大整体增强,

同时随 $|\Delta|$ 增大快速衰减。

进一步地, 我们从半经典波包动力学出发, 利用 Berry 曲率诱导的反常速度将 IF 位移表示为动量空间路径上的曲率积分, 并得到与 E 与 Δ 相关的闭式表达。该表达揭示: 质量项打开节线能隙后在节线邻域形成有限 Berry 曲率分布, 从而允许在界面反射过程中积累横向位移。

两种方法分别从“散射总相位的动量响应”与“几何反常速度的累积”出发, 等价刻画同一几何相位效应。该框架为后续围绕质量项与入射能量调控 IF 位移以及与其他界面效应耦合的研究提供了统一起点。

资助项目

本研究获得中国国家自然科学基金委员会资助(项目编号: 12464063, 资助对象: W. L.)。

参考文献

- [1] Fedorov, F.I. (1955) Kteorii polnogo otrazheniya. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, **105**, 465-468.
- [2] Imbert, C. (1972) Calculation and Experimental Proof of the Transverse Shift Induced by Total Internal Reflection of a Circularly Polarized Light Beam. *Physical Review D*, **5**, 787-796. <https://doi.org/10.1103/physrevd.5.787>
- [3] Onoda, M., Murakami, S. and Nagaosa, N. (2004) Hall Effect of Light. *Physical Review Letters*, **93**, Article ID: 083901. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.93.083901>
- [4] Bliokh, K.Y., Niv, A., Kleiner, V. and Hasman, E. (2008) Geometrodynamics of Spinning Light. *Nature Photonics*, **2**, 748-753. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2008.229>
- [5] Armitage, N.P., Mele, E.J. and Vishwanath, A. (2018) Weyl and Dirac Semimetals in Three-Dimensional Solids. *Reviews of Modern Physics*, **90**, Article ID: 015001. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.90.015001>
- [6] Jiang, Q., Jiang, H., Liu, H., Sun, Q. and Xie, X.C. (2015) Topological Imbert-Fedorov Shift in Weyl Semimetals. *Physical Review Letters*, **115**, Article ID: 156602. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.115.156602>
- [7] Yang, S.A., Pan, H. and Zhang, F. (2015) Chirality-dependent Hall Effect in Weyl Semimetals. *Physical Review Letters*, **115**, Article ID: 56603. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.115.56603>
- [8] Wang, L. and Jian, S. (2017) Imbert-Fedorov Shift in Weyl Semimetals: Dependence on Monopole Charge and Intervalley Scattering. *Physical Review B*, **96**, Article ID: 115448. <https://doi.org/10.1103/physrevb.96.115448>
- [9] Fang, C., Weng, H., Dai, X. and Fang, Z. (2016) Topological Nodal Line Semimetals. *Chinese Physics B*, **25**, Article ID: 117106. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/25/11/117106>
- [10] Burkov, A.A., Hook, M.D. and Balents, L. (2011) Topological Nodal Semimetals. *Physical Review B*, **84**, Article ID: 235126. <https://doi.org/10.1103/physrevb.84.235126>
- [11] 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**, Article ID: 036807. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.115.036807>
- [12] Weng, H., Liang, Y., Xu, Q., Yu, R., Fang, Z., Dai, X., et al. (2015) Topological Node-Line Semimetal in Three-Dimensional Graphene Networks. *Physical Review B*, **92**, Article ID: 045108. <https://doi.org/10.1103/physrevb.92.045108>
- [13] Li, C., Wang, C.M., Wan, B., Wan, X., Lu, H. and Xie, X.C. (2018) Rules for Phase Shifts of Quantum Oscillations in Topological Nodal-Line Semimetals. *Physical Review Letters*, **120**, Article ID: 146602. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.120.146602>
- [14] Chan, Y., Chiu, C., Chou, M.Y. and Schnyder, A.P. (2016) Ca_3P_2 and Other Topological Semimetals with Line Nodes and Drumhead Surface States. *Physical Review B*, **93**, Article ID: 205132. <https://doi.org/10.1103/physrevb.93.205132>
- [15] Bzdušek, T., Wu, Q., Rüegg, A., Sigrist, M. and Soluyanov, A.A. (2016) Nodal-Chain Metals. *Nature*, **538**, 75-78. <https://doi.org/10.1038/nature19099>
- [16] Schoop, L.M., Ali, M.N., Straßer, C., Topp, A., Varykhalov, A., Marchenko, D., et al. (2016) Dirac Cone Protected by Non-Symmorphic Symmetry and Three-Dimensional Dirac Line Node in ZrSiS . *Nature Communications*, **7**, Article No. 11696. <https://doi.org/10.1038/ncomms11696>
- [17] Hu, J., Zhu, Y.L., Graf, D., Tang, Z.J., Liu, J.Y. and Mao, Z.Q. (2017) Quantum Oscillation Studies of the Topological Semimetal Candidate ZrGeM ($M = \text{S, Se, Te}$). *Physical Review B*, **95**, Article ID: 205134. <https://doi.org/10.1103/physrevb.95.205134>

-
- [18] An, L., Zhu, X., Gao, W., Wu, M., Ning, W. and Tian, M. (2019) Chiral Anomaly and Nontrivial Berry Phase in the Topological Nodal-Line Semimetal SrAs₃. *Physical Review B*, **99**, Article ID: 045143. <https://doi.org/10.1103/physrevb.99.045143>
- [19] Zhou, T., Tong, M., Xie, X., Yu, Y., Zhu, X., Wang, Z., *et al.* (2020) Quantum Transport Signatures of a Close Candidate for a Type II Nodal-Line Semimetal. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **11**, 6475-6481. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c01726>
- [20] Chen, W., Luo, K., Li, L. and Zilberberg, O. (2018) Proposal for Detecting Nodal-Line Semimetal Surface States with Resonant Spin-Flipped Reflection. *Physical Review Letters*, **121**, Article ID: 166802. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.121.166802>
- [21] Chen, W., Lu, H. and Zilberberg, O. (2019) Weak Localization and Antilocalization in Nodal-Line Semimetals: Dimensionality and Topological Effects. *Physical Review Letters*, **122**, Article ID: 196603. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.122.196603>
- [22] Luo, W., Chen, W. and Xing, D. (2021) Anomalous Andreev Reflection on a Torus-Shaped Fermi Surface. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, **64**, Article ID: 267262. <https://doi.org/10.1007/s11433-020-1656-0>
- [23] Chen, W. and Lado, J.L. (2019) Interaction-Driven Surface Chern Insulator in Nodal Line Semimetals. *Physical Review Letters*, **122**, Article ID: 016803. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.122.016803>
- [24] Zhang, X., Fu, B., Jin, L., Dai, X., Liu, G. and Yao, Y. (2019) Topological Nodal Line Electrides: Realization of an Ideal Nodal Line State Nearly Immune from Spin-Orbit Coupling. *The Journal of Physical Chemistry C*, **123**, 25871-25876. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b08446>
- [25] Xu, Q., Yu, R., Fang, Z., Dai, X. and Weng, H. (2017) Topological Nodal Line Semimetals in the CaP₃ Family of Materials. *Physical Review B*, **95**, Article ID: 045136. <https://doi.org/10.1103/physrevb.95.045136>
- [26] Xiao, D., Chang, M. and Niu, Q. (2010) Berry Phase Effects on Electronic Properties. *Reviews of Modern Physics*, **82**, 1959-2007. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.82.1959>
- [27] Lodge, M.S., Chang, G., Huang, C., Singh, B., Hellerstedt, J., Edmonds, M.T., *et al.* (2017) Observation of Effective Pseudospin Scattering in ZrSiS. *Nano Letters*, **17**, 7213-7217. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b02307>
- [28] Uykur, E., Maulana, L.Z., Schoop, L.M., Lotsch, B.V., Dressel, M. and Pronin, A.V. (2019) Magneto-Optical Probe of the Fully Gapped Dirac Band in ZrSiS. *Physical Review Research*, **1**, Article ID: 032015. <https://doi.org/10.1103/physrevresearch.1.032015>