

---

# 物理所在对称性与拓扑之间的定量映射研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/2075.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

固体中晶体对称性的研究已经在上个世纪完成;当今，几乎任何晶体的对称性数据都可以从第一性原理计算获得。然而，在拓扑绝缘体的研究中，计算拓扑不变量却一直是一件困难的事。这个困难使得拓扑材料的寻找十分缓慢，以至于每次找到一种新拓扑态都能引起很大的关注。最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心理论室副研究员方辰、方忠和博士研究生宋志达、张田田的研究提供了一部“拓扑词典”，该“词典”给出了230种空间群中对称性数据与拓扑不变量之间的完整映射关系。有了这部“词典”，物理学家只要在其中查找材料的对称性数据就可以获得该材料的拓扑不变量。该工作已经发表在《自然-通讯》上【Nature Communications9, 3530 (2018)】。

这个工作基于最近提出的拓扑量子化学(文献【1】)、对称性指标(文献【2】)等理论。这些工作系统地研究了绝缘体的能带连接关系。这些连接满足一组称为“相容性关系”的线性方程，文献【1】具体地给出了所有的相容性关系，并且指出：如果一个能带的对称性数据不能分解为原子绝缘体的对称性数据，这个能带必然是拓扑非平庸的。文献【2】则指出，任何有能隙的能带对称性数据可以压缩为几个对称性指标，这些对称性指标的取值为一些有限的整数。对于拓扑性质来说，这种压缩是“无损”的，也就是说所有原则上可以从对称性数据判断出来的拓扑不变量都可以由对称性指标推导出来。然而，文献【2】并没有给出对称性指标与拓扑不变量之间的具体关系。非零的对称性指标预示着材料是拓扑的，然而不能告诉我们是怎样的拓扑。文献【2】也没有给出计算对称性指标的具体公式。

本工作致力于完成在有时间反演对称性、自旋轨道耦合的系统中，对称性指标与拓扑不变量之间的映射关系。首先，作者推导出了所有空间群中对称性指标的显示表达式(附表1-3);其次，对于每一种对称性指标列举了所有可能的拓扑不变量组合(附表4-8)。这些不变量包括：弱拓扑指标、镜面陈数、滑移(沙漏费米子)不变量、旋转不变量、反演不变量、螺旋不变量、以及S4不变量。其中，螺旋不变量和S4不变量是首次提出和讨论。在列举不变量时，作者假设任何晶体对称性保护的拓扑态都可以由2维拓扑态构造出来。由于这种构造的简易性，无论拓扑不变量还是对称性指标都很容易计算出来。他们先是穷尽所有拓扑不等价的2维构造，然后对每一种构造分别计算其对称性指标和拓扑不变量，进而得到两者之间的对应关系。通过这种方法，一共发现3133种拓扑态。

这里以具有第225号空间群对称的碲化锡为例演示如何使用“拓扑字典”。第一步，计算碲化锡的对称性数据，也就是统计在每一个高对称点( $\Gamma$ , X, L, W)上每一种不可约表示在占据态中出现的次数。这一步可以由标准的第一性计算软件完成，结果如图1上部所示。第二步，把对称性数

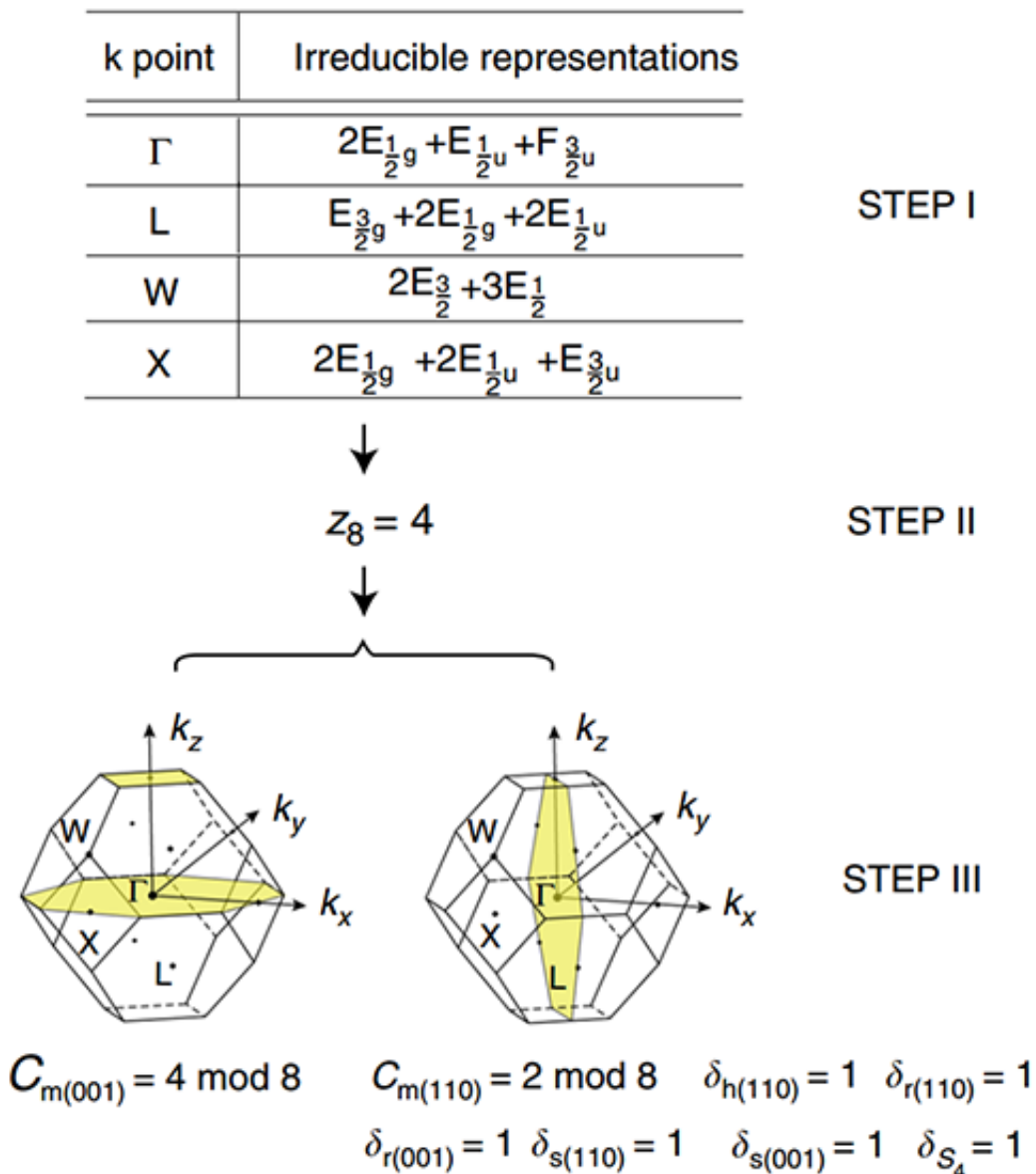
据带入附表1和2中的公式计算对称性指标。225号空间的对称性指标是一个Z8数，经计算可以发现这个Z8数等于4。最后，查找附表7，发现225号空间中对称性指标为4的态只有两种：第一种， $k_z=0$ 面上的镜面陈数为4(模8)，如图1下部左所示;第二种， $k_x+k_y=0$ 面上的镜面陈数为2(模4)，如图1下部右所示。进一步区分这两种态需要使用“威尔逊圈”这种更复杂的数值方法。进一步的计算表明，实际的碲化锡材料属于第二种情况(文献【3】)。

相关文献：

【1】Bradlyn, B. et al. Topological quantum chemistry. Nature 547, 298 – 305 (2017).

【2】Po, H. C., Vishwanath, A. & Watanabe, H. Complete theory of symmetry-based indicators of band topology. Nature Communications 8, 50 (2017).

【3】Hsieh, T. H. et al. Topological crystalline insulators in the SnTe material class. Nature communications 3, 982 (2012).



---

图1：“拓扑字典”的使用方法——以225号空间群的碲化锡为例。顶部的表格是第一性原理计算得到的对称性数据，其中每一行代表一个高对称点上的对称性数据，每行中的每个不可约表示符号之前的数字代表这种不可约表示在占据态中出现的次数。利用附表1和2，可以计算出这组对称性数据的对称性指标为 $z_8=4$ 。查找附表7，可以发现 $z_8=4$ 对应两种可能的拓扑态，如下部左、下部右所示。其中黄色的平面代表定义镜面陈数 $C_m(001)$ 和 $C_m(110)$ 的面。实际碲化锡材料属于第二种情况【3】。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发