拓扑物理学领域可能即将迎来爆发

作者：陆琦 来源：中国科学报

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/4173.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！

拓扑物理学领域可能即将迎来爆发。拓扑物理学领域可能即将迎来它的爆发。2月28日凌晨，来自中科院物理所、南京大学和美国普林斯顿大学的3个研究组分别在《自然》杂志发布了最新相关研究成果。

他们的研究表明，数千种已知材料都可能具有拓扑性质，即自然界中大约24%的材料可能具有拓扑结构。

这个数字让人震惊。因为在这之前，科学家知道的拓扑材料只有几百种，其中被详细研究过的只有十几种。

当物理遇见拓扑：打开一扇窗

拓扑，描述的是几何图形或空间在连续改变形状后还能保持不变的性质。对于普通人来说，这可能是让人云里雾里的科学名词。但当拓扑这一数学概念被引入物理学领域后，一方面推动了基础物理学研究的发展，另一方面也促使大量新颖拓扑材料出现。

上世纪80年代初，物理学家第一次把宏观的观测量——霍尔电导和数学上的拓扑不变量联系起来，给出了量子霍尔效应的拓扑诠释。

在南京大学物理学院教授万贤纲看来，这为物理学打开了一扇全新的窗户。2016年诺贝尔物理学奖，就授予了在拓扑物理学方面有开创性贡献的3位理论物理学家。

20多年间，科学家进一步发现在不同的维度和对称性下，还存在着各种各样的描述电子波函数结构的宏观量子数，即拓扑不变量。而具有非零的拓扑不变量的材料，就被称为拓扑材料。

拓扑材料都有着新奇的表面态。中科院物理所研究员方辰介绍说。

比如，二维拓扑绝缘体的表面态被称为螺旋表面态，当电子处在这样的状态时，它在前进过程中不会被杂质散射，因此原则上利用这一特点可以实现无能耗的传输。这让拓扑材料成为实现超低功耗电子元件的候选者。

又如具有拓扑性质的超导材料(简称拓扑超导体)，这类材料的边界态被称为马约拉纳零模。它们在量子统计上具有特殊性质，被认为是实现量子计算机的可能的物理基础。

越来越多的科学家开始意识到，拓扑材料可能比预期的更加普遍和新奇。它们近在眼前，只是没想到好的方法去寻找它们。

从几百种到几千种：算法的突破

拓扑材料的核心属性是具有非零的拓扑不变量。方辰表示，大多数新发现的拓扑不变量并不对应着量子化的一个可观测量，直接的观测相当困难，而实验的观测基本上都是间接的。

鉴于在实验上观测拓扑性质是一项比较耗时耗力的工作，一般认为比较有效率的方法是先用计算物理的方法去计算材料的拓扑不变量。当在理论上发现该不变量确实不为零之后，再去生长材料、做实验。

于是，发现拓扑材料的第一步成了在计算上确认该材料的拓扑不变量。然而，由于很多拓扑不变量的表达式非常繁难，使得这样的计算需要在此方面有所专攻的计算物理专家耗费相当长的时间才能完成。

我们采取了‘曲线救国’的思路，大大化简了不变量的计算。方辰研究组放弃不变量原本的复杂表达式，转而去计算材料能带的对称性数据，然后根据之前建立的从对称性信息到拓扑不变量的映射关系，推导出材料的拓扑不变量的信息。

计算是全自动完成的，没有任何人为调节的参数，有着百分之百的可重复性。用这种方法，他们找到了8000个以上的拓扑材料。

万贤纲等则放弃了计算拓扑不变量这一传统方案，通过分析占据能带对称性在原子绝缘体基组下展开系数是否为整数，判断材料的拓扑性质。在笔记本电脑上，半小时可构造230个空间群的原子绝缘体基组，不仅速度快了很多，可操作性也非常大。

工作是在我们课题组以及实验室的计算机上完成的，并不需要超级计算机，大概花了一个多月的时间系统搜索了整个材料数据库，找到了几千种拓扑材料。万贤纲说。

这令实验物理学家兴奋不已，这给接下来的实验工作提供了大量的线索和机会。

从数据库到新材料：交叉研究的产生

科学家将他们的算法集成到了可检索的数据库中。只需输入材料的组分名称，点击一下，就可以知道这种材料是否存在拓扑结构。

方辰研究组的数据库提供的拓扑材料数超过8000个，包括材料的晶体结构三维图、拓扑不变量列表等几乎所有重要的基本信息，同时考虑了自旋轨道耦合可忽略/不可忽略两种情况。

万贤纲研究组的数据库则是经过了一定的人工拣选，虽然目录中的材料数目略少，但是从某些角度看来，如作为拓扑材料的特异性等物理性质是相对更好的。

普林斯顿数据库的优势，是其考虑了晶体材料合成的难易程度，排除了一些无法在实验中完成单晶合成的材料，因此被称为高质量拓扑材料库。

不过，万贤纲坦言，目前的研究仍然是有限的。现在找的都是非磁材料，他想把已有的方法进一步发展，用来找磁性材料，因为这些材料也可能具有拓扑性质。

方辰也表示，从更长远的角度来看，应该以一种合适的方式引入带磁性的拓扑材料。这需要在理论上更好地理解磁性材料中的拓扑不变量，并确定在磁性材料中处理电子强关联效应的计算方法。这两件事情都有着相当的难度，尤其是后者。

我们只是做了第一步，提供了一些拓扑材料‘候选人’，‘好不好用’还要靠实验物理学家去探索。万贤纲说。

方辰最希望看到的，则是交叉研究的产生。比方说，本来知道某个材料是超导体，通过他们的数据库发现它又有拓扑性质。这对于科学家来说，可能一下就开辟了新的研究角度，能提出新的问题。

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转发