

基于对称性指标预测拓扑材料*

唐峰^{1,2} 万贤纲^{1,2,†}

(1 南京大学物理学院 固体微结构物理国家重点实验室 南京 210093)

(2 南京大学 人工微结构科学与技术协同创新中心 南京 210093)

2019-05-25 收到

† email: xgwan@nju.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20190601

Efficient topological materials discovery using symmetry indicators

TANG Feng^{1,2} WAN Xian-Gang^{1,2,†}

(1 National Laboratory of Solid State Microstructures, School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

(2 Collaborative Innovation Center of Advanced Microstructures, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

摘要 拓扑材料是凝聚态物理和材料科学领域的前沿课题。随着理论方法的发展,最近人们在大规模筛选拓扑材料方向取得了多个进展。文章着重介绍作者基于对称性指标理论发展的根据在原子绝缘体基组展开系数高效判断材料拓扑性质的方法,以及相关的典型材料。人们预言的数千个新的拓扑体系为进一步深入研究拓扑材料提供了基础。

关键词 拓扑量子体系, 空间群及能带不可约表示, 对称性指标理论, 原子绝缘体基组, 拓扑材料判定新方法

Abstract Over the past decade, topological materials—in which the topology of electron bands in the bulk material leads to robust, unconventional surface states and electromagnetism—have attracted much attention. With the development of the theoretical methods, recently there have been many advancements on searching for topological materials in a large scale. Very recently, based on symmetry-indicator theory and using so-called atomic insulator basis, we develop a theoretical method for systematically discovering topological materials. In this paper, we introduce our algorithm, and we also discuss several typical topological materials. The predicted thousands of topological materials provide a platform for further study on topological materials next step.

Keywords topological systems, space group and irreducible representation of energy band, symmetry-indicator theory, atomic insulator basis, new topological materials diagnosing algorithm

* 国家重大研发计划(批准号: 2017YFA0303203; 2018YFA0305704)、国家自然科学基金(批准号: 11525417; 11834006; 51721001; 11790311)以及南京大学卓越研究计划资助项目

1 引言

拓扑原本是一个数学概念,表示一类由系统整体决定而随细节不敏感的性质。这个概念融入到凝聚态物理归因于量子霍尔效应的发现。1980年 Klitzing 等人发现了二维电子气在强磁场中霍尔电导展现出依赖于样品细节的量子化平台^[1]。人们发现其中的相变不涉及任何对称性的破缺,脱离了朗道相变理论的范畴。1982年 Thouless 等人推导了二维电子气中的霍尔电导公式,并且将它与拓扑不变量——第一类陈数($\in Z$)联系起来^[2],成功地解释了量子霍尔电导的鲁棒性。这一工作开创性地将数学中的拓扑概念应用到固体晶格动量空间中波函数性质的研究,是数学与物理相结合的一大典范^[2]。自此凝聚态中的拓扑性质受到广泛关注。6年后, Haldane 发现在六角晶格中加入交错磁通也可实现量子霍尔效应,表明在凝聚态晶格体系中存在无朗道能级的量子霍尔效应^[3]。但是实现量子霍尔效应需要施加巨大的外磁场^[1],这大大地限制了它在实际器件中的应用。这个方向近年来一个重大突破是“量子自旋霍尔绝缘体(即二维拓扑绝缘体)”的发现^[4, 5]。这一里程碑性的工作由美国宾夕法尼亚大学的 Kane 和 Mele^[6, 7]以及美国斯坦福大学的 Bernevig, Hughes 和 Zhang^[8]分别在石墨烯以及 HgTe/CdTe 量子阱中完成,推动了拓扑量子物理成为凝聚态物理的前沿和主流。与量子霍尔效应不同,量子自旋霍尔效应无需外磁场,受到时间反演对称的保护,对应的拓扑不变量是 Z_2 拓扑不变量(只能取 0 或 1)^[7]。此后人们进一步将二维拓扑绝缘体推广到三维,得到了三维拓扑绝缘体^[9-11]。三维拓扑绝缘体的拓扑不变量是 4 个 Z_2 数: $(\nu_0; \nu_1, \nu_2, \nu_3)$, 其中第一个不变量表征材料是否为强拓扑绝缘体,后面三个表征材料是否为弱拓扑绝缘体^[4, 5]。强拓扑绝缘体在任何面上均具有奇数个 Dirac 点,表面态不受无序影响,而弱拓扑绝缘体只有在特定表面才具有拓扑表面态^[4, 5]。

进一步的研究表明,对称性以及空间维度对物理体系的拓扑性质有重要的影响。通过分析是

否具有时间反演对称、粒子空穴对称以及手性对称性,人们对不同维度(1D, 2D, 3D)体系可能存在的拓扑相进行了系统的分类^[12-15]。值得提及的是,除了上述的内禀对称性外,凝聚态体系中还存在大量的晶格对称性。2011年,傅亮发现晶格对称对拓扑态有重要影响,从而开辟了拓扑晶体绝缘体这一新的研究方向^[16]。目前包括镜面陈绝缘体^[17]、Hourglass 拓扑晶体绝缘体^[18]、Wallpaper 拓扑晶体绝缘体^[19]、高阶拓扑绝缘体^[20-24]等大量拓扑晶体绝缘相相继被提出来^[25, 26]。在上述各类拓扑的绝缘体中,体相是绝缘体,但是在材料的表面或者边界会出现拓扑保护的无能隙电子态^[4, 5, 26]。

上述拓扑绝缘相的一个重要特性是,保持对称性的微扰对其拓扑性质不会有影响,具体地,只要这个微扰不关闭绝缘体的能隙,绝缘体的拓扑性质就不会发生改变。因此人们普遍认为拓扑物理只存在于绝缘体中。2011年,通过研究烧绿石结构 5d 过渡金属 Ir 氧化物,人们发现随着电子关联强度 U 在合理范围内的变化,材料占据和非占据电子态的宇称将发生翻转^[27],从而发现体系有 Weyl 点(即两个非简并线性色散能带的交点)。这时其低能电子行为可以用 Weyl 方程描述,因而这类材料可命名为 Weyl 半金属。Weyl 点是 Berry 曲率的源点,围绕一个 Weyl 点的闭合曲面上 Berry 曲率的积分绝对值为 2π , 该积分符号为 Weyl 点所对应的“手性”符号^[27]。由于 Berry 曲率沿整个布里渊区边界面的面积分为零,所以对应的总的“手性”必须为零,在 Weyl 半金属中, Weyl 点成对出现,外界微扰只能使 Weyl 点移动,只有当两个手性相反的 Weyl 点重合, Weyl 点才会消失。也就是说 Weyl 点受拓扑保护稳定,和体系的对称性无关^[27]。此外 Weyl 半金属有着奇特的表面态 Fermi 弧: Weyl 半金属表面态的费米面不是闭合的,而是一个开放的线段,这个开放的线段连接两个手性相反的 Weyl 点在这个表面上的投影点^[27]。Weyl 半金属只需要体系具有平移不变性,不一定需要其他的对称性。事实上它必须要求 PT 对称的破缺(P: 空间反演, T: 时间反演)。

除了Weyl半金属外,大量其他类型的拓扑半金属相也被发现。通过分析布里渊区(BZ)中高对称点^[28]或者高对称线上^[29, 30]的四度简并的能带交点,人们提出了低能激发满足Dirac方程的Dirac半金属。考虑到能带接触点的类型,人们也提出了nodal line半金属^[31, 32]。进一步考虑若干nodal line在BZ的位置以及它们之间的相对关系,人们又提出了nodal chain^[33]、nodal link和Hopf link半金属^[34-36]。在非简单群对称体系中,非简单操作要求能带形成Hourglass型连接,人们据此提出了体Hourglass半金属^[37]。考虑到晶格对称保护的多重(3, 6, 8重)简并点,人们也提出了多重简并费米子^[38]。值得提及的是,除了Weyl半金属外,上述这些拓扑(半)金属均形成需要晶格对称的保护才能稳定存在。

和普通材料相比,拓扑材料具有大量独特的物性。拓扑绝缘体特有的受拓扑保护的表面电子态具有自旋-动量绑定,背散射被禁闭^[4, 5, 39],因此拓扑绝缘体能够实现无能耗电子输运;拓扑绝缘体和超导的界面可以实现Majorana费米子,这有望应用到量子计算中^[40];拓扑绝缘体表面Dirac电子态也具有反常的磁电耦合^[41]等等,这一系列新奇的性质,具有广阔的应用前景。拓扑晶体绝缘体的无能隙表面态只在具有特定对称性的表面出现。由于晶体对称性更容易被外电场、应力所改变,拓扑晶体绝缘体很容易应用于场效应器件和压力感应器件^[26]。Weyl半金属也具有大量独有的性质:其具有和手性反常相关的高度各向异性磁电阻^[42];它也具有新颖的量子振荡现象^[43];通过上下两个表面Fermi弧在Weyl点投影处的隧穿行为,人们也理论设计^[44]并且实验实现了三维量子霍尔效应^[45];其霍尔电导只和Weyl点的符号和位置有关^[46];研究发现对Weyl半金属掺杂可能实现拓扑超导体^[47],另外其光学性质也是人们关注的目标^[48]。在拓扑半金属中实现Klein隧穿型的输运现象^[49]也引来了人们的广泛关注。Nodal line半金属的拓扑表面态在费米面上有很大的态密度,所以它可能表现较高临界温度的超导行为^[50]。这些新颖的物性可以预期在下一代电子、信息及至

能源领域有很大应用潜力。事实上,这些对材料的缺陷、杂质细节不敏感的拓扑量子材料越来越成为物理基础及工程应用领域的前沿课题与追求。过去十年拓扑量子领域在世界上已经取得了巨大的研究进展,理论预言了大量拓扑量子材料^[27-38, 51-68],很多预言以及一些关键性的拓扑量子效应已被实验证实^[69-80]。

与常规的材料体系不同,拓扑体系的拓扑行为和能带细节无关,可用不同的拓扑不变量来描述。因此确定物理体系的拓扑不变量是判定其拓扑性质的核心。但是,实验判定拓扑不变量在技术上面面临很大挑战,所以这一领域的一大特点就是通过对理论计算拓扑不变量来预言新型拓扑材料,然后角分辨光发射谱、输运等实验证实^[4, 5, 26, 66, 79, 80]。这昭示出拓扑不变量的计算在找寻新型拓扑材料中起着至关重要的作用。但是,通过直接计算拓扑不变量来判断一个体系拓扑性质的方法效率较低、有很大的局限性:(1)计算拓扑不变量通常需要进行基于波函数的积分,这一计算工作量极大^[81];(2)对于一个材料,需要对所有的拓扑不变量进行计算,才能确定拓扑性质。这一问题也带来了很大的工作量。所以和人们已经成功生长出来的材料数目相比较,已知的拓扑材料数量还较为有限。此外,虽然人们已经发现了许多拓扑材料^[4, 5, 26, 66, 79, 80],但是这些材料都不适合实际应用。比如拓扑绝缘体Bi₂Se₃体系中容易形成缺陷,导致费米能级处于体能带的价带或者导带内^[82],拓扑晶体绝缘体SnTe是p型半导体,呈现了较好的体的导电性^[83]。因此发展出新的理论方法,从而找到理想的、有实用价值的拓扑材料体系有着重要的科学价值和广阔的应用前景。

为了克服上述理论方法的困难,人们做了大量的工作。一个重要的进展是,傅亮等人发现在有中心反演对称的材料中,我们只需要计算空间反演不变点处价带的宇称,就可以得到Z₂拓扑不变量,从而快速地判定体系是否为拓扑绝缘体^[84]。除了中心反演对称性外,凝聚态体系还有很多其他空间对称性操作。基于材料电子能带在这些空间对称性操作的本征值,方辰等人发展了计算若

干拓扑不变量的方案^[85, 93]。这些理论方法不需要计算耗时的波函数积分，可大大加快体系拓扑性质的判定过程。

另外，2017年基于材料电子能带价带的实空间和倒空间图像的比较，人们发展了一套全面的拓扑分类方案：普林斯顿大学Benervig研究组基于图论方法研究了具有实空间图像的能带在其布里渊区高对称点小群不可约表示之间的连接方式，提供了10403个这样的基本连接方式，称之为“基本能带表示”^[86]。他们进一步提出可以通过比较材料的价带和10403个“基本能带表示”来判定拓扑性质。同时哈佛大学Vishwanath研究组提出了能带指标理论，该理论将绝缘体能带用一组整数表示，并且将其拓展成一个群。通过这个群和它具有实空间图像的子群求商，从而对所

有的空间群可能的拓扑行为进行了分类^[87]。该理论方法给出了描述能带结构的商群分类，但是不能直接应用到拓扑材料搜索中^[86]。Benervig等人的理论方案确实可以用于筛选拓扑材料，但是“基本能带表示”的过多数目一定程度上限制了大规模应用。下面我们先介绍对称性指标理论，然后给出基于这一理论，我们发展出来从原子绝缘体基组出发实现高效判断材料拓扑的新方法^[88]以及找到的典型拓扑材料。

2 对称性指标理论

凝聚态体系的电子特性可以用其电子的能带结构(能带色散和能带波函数)来描述，而电子的拓扑性质源于布洛赫本征态的特性。根据空间群对称，人们能够得到布洛赫本征态的变换性质，即本征态从属的不可约表示。在凝聚态体系布里渊区(BZ)里面有高对称点、高对称线、高对称面以及没有任何对称操作的普遍点。高对称点上能带可以用其对应小群的不可约表示来标记(简称为高对称点不可约表示)，高对称点上能带不可约表示确定后，根据相容性关系能带在高对称线以及高对称面的不可约表示也可确定。而当费米面上下两个能带的不可约表示发生变化时，其拓扑性质发生变化。所以非常自然，一个绝缘体材料可以用其价带在所有高对称点的不可约表示情况来标记。当这个标记发生变化时预示着拓扑性质的转变。

以硅的能带为例子，硅的晶格属于第227号空间群(记为SG227)。这个空间群的布里渊区有 Γ , X , L , W 这4个高对称点。第一性原理计算得到的能带如图1(a)所示，其中费米能级取为0，费米能级以下有8条能带。如表1所示， Γ 点具有6个不可约表示，它们的维度分别为2, 2, 4, 2, 2, 4，在图1(a)中我们标记了第一性原理计算得到的 Γ 点价带能级从属的不可约表示，其中 Γ_1 表示相应能级对应于 Γ 点第1个不可约表示(即表1中抽象群 G_6^8 的第4个不可约表示，参见表1)，类似地，对于其他高对称点我们也标记了不可约表

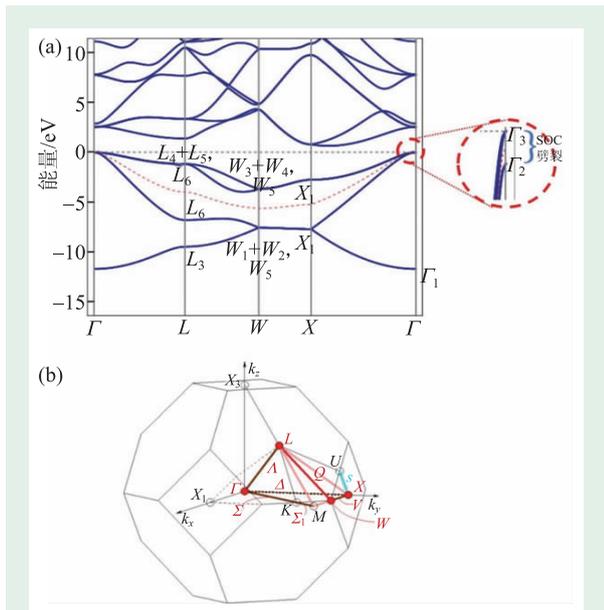


图1 (a)硅的能带(费米能级取为0)。图中列出了所有高对称点(即 Γ , X , L , W 点)处价带对应小群不可约表示的标记, 比如在 Γ 点, 8个价带具有 Γ 的第1, 2, 3个不可约表示(参见表1, 它们的维度分别为2, 2, 4), 图中记为 Γ_1 , Γ_2 和 Γ_3 。需要注意的是, 这里 L 点靠近费米面的能级(两个非常接近的二度简并能级)包含了两个1维表示(L_4 和 L_5 , 通过时间反演联系组成二维表示, 因此记为 L_4+L_5)和1个2维表示(L_6), W 点也有类似的情况出现。红色虚线框内展示了在 Γ 点处存在SOC劈裂。四条高对称线分别为 A , Q , V 和 A , 如(b)图所示, 连接 Γ , L , W , X , Γ 点; (b)硅所属的第227号空间群(SG227)对应的BZ

示的信息。根据前面的讨论，在分析材料拓扑性质时，可以不关心价带在高对称点的能级顺序以及高对称点间能带的具体色散这些细节，而只关心价带在高对称点每个不可约表示出现的次数或称为占据数 $n_{k_j}^i$ ：这里， k_j 标记第 j 个高对称点， i 标记该高对称点第 i 个不可约表示。当这个数字发生变化时预示着可能有拓扑性质的变化。对于硅，根据图 1(a)，在 Γ 点，8 个价带中，第 1, 2, 3 个不可约表示分别出现 1 次，其他不可约表示没有出现，因此 $n_{\Gamma}^1 = n_{\Gamma}^2 = n_{\Gamma}^3 = 1, n_{\Gamma}^4 = n_{\Gamma}^5 = n_{\Gamma}^6 = 0$ ，类似可以得到： $n_X^1 = 2, n_L^1 = n_L^2 = 0, n_L^3 = n_L^4 = n_L^5 = 1, n_W^1 = 2, n_W^2 = n_W^3 = n_W^4 = 1, n_W^5 = 2$ 。

可以将上述高对称点不可约表示占据数以及价电子数组成一个整数集 \mathbf{n}_{BS} ，来标记一组绝缘体价带：

$$\mathbf{n}_{BS} = (v, n_{k_1}^1, n_{k_1}^2, \dots, n_{k_1}^{r_1}, n_{k_2}^1, n_{k_2}^2, \dots, n_{k_2}^{r_2}, \dots, n_{k_N}^1, n_{k_N}^2, \dots, n_{k_N}^{r_N}). \quad (1)$$

在这一组数的集合中，其中第一个数是价电子数， k_j 小群不可约表示的数目记为 r_j 。值得指出的是，绝缘体价带中不同高对称点不可约表示占据数之间受到相容性关系的约束。对于硅的 8 个价带，可以写出其对应的高对称点不可约表示标记为

$$\mathbf{n}_{BS} = (8, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 1, 1, 1, 1, 2). \quad (2)$$

硅的 8 个价带可被图 1(a) 中红色虚线分割成上下两部分，每一部分的对称性标记分别为：

$$\mathbf{n}_{BS,1} = (4, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 1), \quad (3)$$

$$\mathbf{n}_{BS,2} = (4, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 1, 1, 0, 0, 1). \quad (4)$$

显而易见，

$$\mathbf{n}_{BS} = \mathbf{n}_{BS,1} + \mathbf{n}_{BS,2}, \quad (5)$$

即增加能带数目，只需对其对应的整数集做加法即可。

高对称点	坐标	Irreps
Γ	(0, 0, 0)	G_{96}^8 : 4(2), 5(2), 8(4), 12(2), 13(2), 16(4)
X	(0, 1, 0)	G_{64}^4 : 19(4)
L	(1/2, 1/2, 1/2)	G_{24}^3 : 3(1), 4(1), 6(2), 9(1), 10(1), 12(2)
W	(1/2, 1, 0)	G_{48}^3 : 13(1), 14(1), 15(1), 16(1), 20(2)

表 1 SG227 四个高对称点的坐标，以及它们小群不可约表示。这里高对称点坐标的基矢取为惯用元胞对应的倒空间基矢。根据文献 [89]，高对称点小群不可约表示 (Irrep) 可以从某一个抽象群 (记为 G_m^a) 的不可约表示得到，高对称点小群的不可约表示只能取该抽象群的若干不可约表示 [89]，我们也给出了这些不可约表示的维度 (第三列括号中的数字)，比如， Γ 点第 1 个不可约表示为抽象群 [89] G_{96}^8 的第 4 个不可约表示，其维度为 2， Γ 点第 2 个不可约表示为抽象群 [89] G_{96}^8 的第 5 个不可约表示，其维度为 2

需要提及的是， \mathbf{n}_{BS} 并不是严格意义上的矢量，因为对于实际材料，它的分量必须为非负整数，因此它不存在逆元的定义。Po 等人将 \mathbf{n}_{BS} 的取值范围推广到所有整数 [87]，因此得到了一个绝缘体线性空间，该空间包含了形如 (1) 式的矢量，这个线性空间可以看成是一个群 (群乘的定义即上面提及的 \mathbf{n}_{BS} 矢量的加法)。

显然，不是任何一个绝缘体均可以在不破坏对称性的情况下绝热变化到拓扑平庸的原子极限 (原子绝缘体)。通过对绝缘体不可约表示标记组成的群与原子绝缘体不可约表示标记组成的群做商群运算，Po 等人得到了对称性指标 (SI) 群，记为 X_{BS} [87]。在考虑自旋轨道耦合 (SOC) 情况下，Po 等人给出了具有时间反演对称的所有 230 个空间群的 SI 群 [87]。SI 群具有如下形式：

$$X_{BS} = Z_{C_1} \times Z_{C_2} \times \dots \times Z_{C_d}, \quad (6)$$

其中 $C_1 < C_2 < \dots < C_d$ ，且 C_i 可以被 C_j 整除 ($i > j$) [87]。然而这一分类方案并不适合用来找寻拓扑材料 [86]。

3 基于原子绝缘体基组的拓扑材料判断算法

若一个体系可以在满足对称性的情况下绝热地变化到原子极限，则这个体系等价于原子绝缘体，不表现出任何拓扑性质。设想有一个体系原

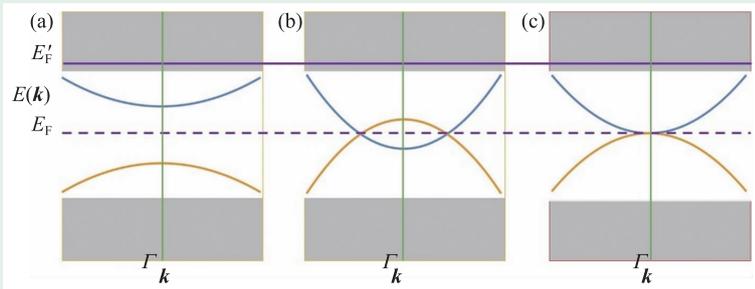


图2 某空间群 1a Wyckoff 位置上有一个 s 轨道的能带情况。考虑电子全部占据 (费米面在图中紫色实线位置), 那么图中 3 种情形都绝热等价于原子绝缘体。然而考虑半占据 (费米面在图中紫色虚线位置), 图中 3 种情况都无法退化到原子极限, 分别对应于: (a) 拓扑 (晶体) 绝缘体; (b) 高对称线/面上出现能带交点; (c) 高对称点上出现能带交点

胞里面只有一个原子, 而这个原子只有一个 s 轨道。这时其能带有如图 2 的几种情况: (a) 没有能带交点; (b) 在高对称线上有交点; (c) 在高对称点有能带交点。若费米面在图 2 的 E_F' 处, 即 2 个能带均被占据, 则上述的 3 种情况均可绝热变化到原子绝缘体, 但是如果费米面在 E_F 处, 体系不可能在不改变对称性的情况下变到原子绝缘体。

对于任何一个选定的空间群, 原子的实空间占位是固定的, 即原子只能占据这一空间群所属的 Wyckoff 位置。另外, 由于晶格空间群里面破坏了 SO(3) 对称, 在 Wyckoff 位置上放入的球谐函数形式的原子轨道, 将会劈裂为该 Wyckoff 位置位群不可约表示的函数。设某一空间群, 它有 N 个 Wyckoff 位置, 而第 i 个 Wyckoff 位置的位群具有 M_i 个不可约表示 (如果系统具有时间反演对称, 应当考虑时间反演对称对不可约表示的效应)。在任何一个 Wyckoff 上放入满足其任意一个不可约表示的函数, 然后组成能带, 若这些能带全部被占据, 所得能带都可以绝热变化到原子绝缘体^[88]。通过穷尽所有 Wyckoff 位置以及其对应的全部不可约表示, 组成能带, 我们一共可以得到 $L = \sum_i^N M_i$ 个原子绝缘体。显然这样得到的 L 个能带也可以用 (1) 式形式的整数集 \mathbf{n}_{BS} 来标记。任何一个实际材料的原子必须占据在其所属空间群的 Wyckoff 位置, 另外任意 Wyckoff 位置上的原

子轨道在晶体场作用下用该 Wyckoff 位置位群的不可约表示标记。如 (5) 式所示, 增加能带等于对 \mathbf{n}_{BS} 做加法, 所以该空间群的所有的原子绝缘体的标记 \mathbf{n}_{BS} 均可以用上面得到的 L 个原子绝缘体标记 \mathbf{n}_{BS}^i (其中 $i=1 \cdots L$) 线性组合得到 (组合系数为非负整数)。显然上述 L 个 \mathbf{n}_{BS}^i 并不线性无关, 不能张成一个线性空间。参考 Po 等人的做法^[87], 将组合系数推广到所有整数, 我们可以得到一个该空间群的原子绝缘体空间,

其基组记为 $\{\mathbf{a}_i, i=1, 2, \cdots, d_{AI}\}$ (即原子绝缘体基组, 它们线性无关而且完备, d_{AI} 是基矢的数目)。这时该空间群的任意原子绝缘体 \mathbf{n}_{AI} 均由原子绝缘体基组 (AI 基组) 线性组合得到:

$$\mathbf{n}_{AI} = \sum_{i=1}^{d_{AI}} q_i \mathbf{a}_i \quad (q_i \text{ 为整数})^{[88]}$$

若材料能带不可约表示标记 \mathbf{n} (见 (1) 式) 不可以用 AI 基组做线性组合得到, 则该体系一定表现出拓扑性质^[88]。

对应非磁性材料, 一共只有 230 个空间群。我们基于对称性指标理论, 高效判断拓扑材料算法的核心是构造出原子绝缘体基组^[88]。值得指出的是, AI 基组与具体材料无关, 对应 230 个空间群, 存在 230 套 AI 基组。相比基于图论的 10403 个基本能带表示 (这些基本能带表示都可以在 230 套 AI 基组上展开)^[86], 我们只需得到 230 个原子绝缘体基组, 然后通过实际材料不可约表示标记在 AI 基组上的展开系数, 来判定其是否为拓扑材料^[88], 具有可操作性。

4 构建原子绝缘体基组

原子绝缘体基组可以从下面 3 个步骤来构造:

第一步, 根据空间群的 Wyckoff 位置列表 (可参考网站 <http://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-table?from=getwp>) 得到对应位群的不可约表示。例如对于 SG227 Wyckoff 位置, 它可以取: 8a, 8b, 16c 到 192i 等 9 个值。每一个 Wyck-

off位置的位群必然同构于32个点群之一，其不可约表示也可以通过查阅群论书得到^[89]。

第二步，对每一个Wyckoff位置分别一一放入其位群不可约表示的函数，组成能带(如果存在时间反演对称T，需要考虑T的要求：同一个不可约表示出现两次或者两个不同不可约表示通过T联系^[89])。通过上述实空间基组构建布洛赫和，得到BZ中所有高对称k点小群不可约表示的占据数，从而得到 n_{BS} 分量，即得到该Wyckoff位置被占据某位群不可约表示时对应原子绝缘体的不可约表示标记。对应SG227，BZ具有4个高对称点，这些高对称点小群以及不可约表示信息可以查阅文献得到^[89]，表1中列出了这些高对称点的坐标和不可约表示。

第三步，根据第二步，我们穷举得到所有的Wyckoff位置以及其相应位群不可约表示，得到若干 n_{BS} 。对于SG227，可以得到20个这样的AI，见图3红色实线左侧部分，标记为 $n_i^1, n_h^1, n_g^1 \dots$ 其中下标表示Wyckoff位置，上标标记该位置位群的第几个不可约表示，由于a, b位置有3个不可约表示，c, d位置有4个不可约表示，e位置有2个不可约表示，其余位置只有1个不可约表示，因此穷举所有Wyckoff位置总共得到20个AI。显然这些AI之间并不是线性独立，通过这些AI的线性组合(组合系数为整数)可以得到AI的基矢。通过Smith正态分解，人们可得到一组AI基组， $\{a_i, i=1, 2, \dots, d_{AI}\}$ ，这里 a_i 是原子绝缘体基组中的基矢， d_{AI} 是基矢的个数。SG227的8个AI基矢见图3红色实线右侧部分，可见只有最后一个基矢具有公因子4，其余没有公因子。对于所有230个空间的AI基组，我们在文献^[90]中的网上补充材料部分罗列了出来，且构造AI基组的程序在文献^[91]中给了出来。这种AI基组满足以下

	n_i^1	n_h^1	n_j^1	n_k^1	n_l^1	n_m^1	n_n^1	n_o^1	n_p^1	n_q^1	n_r^1	n_s^1	n_t^1	n_u^1	n_v^1	n_w^1	n_x^1	n_y^1	n_z^1	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8	
ν	96	48	48	24	16	16	8	8	8	8	8	8	8	8	4	4	4	4	8	24	8	8	8	-24	8	4	-48	
n_i^1	4	2	2	1	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
n_h^1	4	2	2	1	0	1	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
n_j^1	8	4	4	2	2	1	2	1	0	0	2	1	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
n_k^1	4	2	2	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
n_l^1	4	2	2	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
n_m^1	8	4	4	2	2	1	2	1	0	0	2	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
n_n^1	4	2	2	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
n_o^1	4	2	2	1	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
n_p^1	8	4	4	2	2	1	2	1	0	0	2	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0
n_q^1	24	12	12	6	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	2	1	2	1	2	6	2	2	2	-6	2	1	-12	
n_r^1	8	4	4	2	2	1	1	1	0	1	0	1	1	0	0	1	0	0	1	2	1	1	1	-2	0	0	-4	
n_s^1	8	4	4	2	2	1	1	1	0	1	0	1	1	0	0	1	0	0	1	2	1	1	1	-2	0	0	-4	
n_t^1	16	8	8	4	2	3	2	2	0	1	0	2	2	1	1	1	1	1	1	4	1	2	2	-5	1	1	-8	
n_u^1	8	4	4	2	2	1	1	1	1	1	1	0	0	0	1	0	0	1	2	2	1	0	-2	1	0	-4		
n_v^1	8	4	4	2	2	1	1	0	1	1	1	1	0	0	0	1	0	0	1	2	1	1	0	-2	1	0	-4	
n_w^1	16	8	8	4	2	3	0	1	2	2	2	0	1	1	1	1	1	1	4	1	0	1	-3	2	1	-8		
n_x^1	12	6	6	3	2	2	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	0	1	3	1	1	1	-2	1	0	-4		
n_y^1	12	6	6	3	2	2	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	0	1	3	1	1	1	-2	1	0	-4		
n_z^1	12	6	6	3	2	2	1	1	1	1	1	1	0	1	0	1	1	1	3	1	1	1	-4	1	1	-8		
$n_{w'}^1$	12	6	6	3	2	2	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	1	1	3	1	1	1	-4	1	1	-8		
$n_{w''}^1$	24	12	12	6	4	4	2	2	2	2	2	2	2	2	1	2	1	2	6	2	2	2	-6	2	1	-12		

图3 根据上述构造原子绝缘体基组方式中第一、二步，可以求得SG227的20个AI(红色实现左侧， $n_i^1, n_h^1, n_g^1, \dots$ 其中下标表示Wyckoff位置(参见http://www.cryst.cheu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-wp-list)，上标1, 2, 3, ...标记Wyckoff位置对应位群的不可约表示，顺序根据文献^[89]，且考虑了时间反演对称的要求)。这些AI的分量按照式(1)以列向量形式给出，如图中所示，从上至下依次为 $\nu, n_i^1, n_h^1, n_g^1, \dots$ ，含义见式(1)的说明。我们根据文献^[89]中的顺序依次标记高对称点不可约表示，比如，根据表1， Γ 点第1个不可约表示为抽象群^[89] G_{96}^8 的第4个不可约表示， Γ 点第2个不可约表示为抽象群^[89] G_{96}^8 的第5个不可约表示，...对这20个AI通过Smith正态分解得到8个AI基矢： $\{a_i\}_{i=1}^{d_{AI}=8}$ ，展示于红色实线右侧

条件：

- (a)任何一个AI均可表示为这组AI基矢的线性组合，且组合系数为整数，在物理上它表示不同原子极限的叠加；
- (b)其基矢具有最大可能的公因子和最多的大于1的公因子数；
- (c)把基矢 a_i 的公因子记为 C_i ，AI基矢的顺序按照AI基矢公因子由小到大排列，即 $C_1 < C_2 < \dots < C_i < \dots < C_{d_{AI}}$ ，且后面一个公因子可以被前面所有公因子整除。

公因子 C_i 对应式(6)中Z的下标((6)式中的 $d=d_{AI}$)，这也是为什么AI基组需要满足上述条件(b)的原因，这样才能够得到完整的拓扑分类。同时，对于SI群，我们可以只考虑 $C_i > 1$ 的部分，因为 $C_i=1$ 对应 Z_i 平庸群(只含有元素0)^[87]。总之，从AI基组可以很快得到SI群，其中最大公因子对应的SI群，称为强SI群^[92]，在本文中对于某一空间群，如果称其SI群为 Z_m ，默认指它的强SI群为 Z_m ，即 m 为其AI基矢中最大的公因子。

我们判断拓扑性质的流程图如图4所示。相

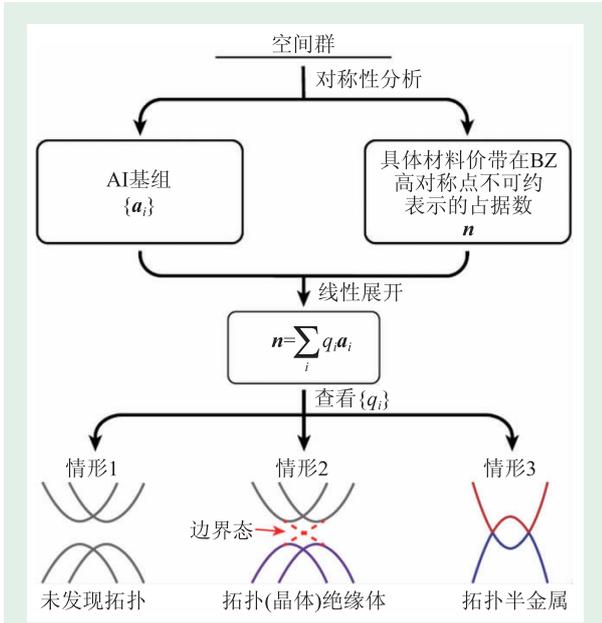


图4 算法流程图^[88]：对于任何一材料，使用能带方法可以求出其价带在BZ高对称点不可约表示出现的情况 n ，然后在该空间群的AI基组(与具体材料无关)上做线性展开，得到3种情形，其中第一种等价于一个原子绝缘体(即文中的情况(i))，第二种对应于拓扑(晶体)绝缘体(即文中的情况(ii))，第三种对应于拓扑半金属(即文中的情况(iii))

关的程序源代码参见文献[91]。主要步骤如下：

对于任何一个材料，基于第一性原理计算自洽的结果，可以求出价带在BZ中各个高对称点上不可约表示的占据数。值得提及的是，这里不需要事先分析这组价带是不是和导带分开，即是否具有直接带隙。使用常规计算不可约表示出现次数的方法^[91]，可以求得如(1)式形式的 n ，如果所有分量都是整数，说明所有高对称点上都具有有限的直接带隙，相反，如果不是整数说明这个非整数对应的高对称点具有能带交叉(比如图2(c))。需要注意的是，即使所有 n 的分量都是整数， n 也可能并不对应一个绝缘体(比如图2(b))。我们把第一性原理计算得到材料的 n 用该材料所属空间群对应的原子绝缘体基组(即 $\{a_i, i=1, 2, \dots, d_{AI}\}$)做展开：

$$n = \sum_i^{d_{AI}} q_i a_i, \quad (7)$$

展开系数 q_i 可以很容易求出。从展开系数 q_i 来判断拓扑材料。

展开系数必定属于以下3种情形之一：

(i)所有 q_i 都是整数，这时材料有机会绝热等价于符合空间群对称的原子绝缘体。由于只用到了高对称元素上面的信息，所以本方案不能判断出TaAs等拓扑材料^[52]；

(ii)存在非整数的 q_i ，同时所有 $q_i C_i$ 都是整数(C_i 为基矢 a_i 的公因子)。此时材料在BZ所有高对称点均有能隙，但无法退化到符合该空间群对称的原子极限。这种情形又可以细分为拓扑绝缘体和拓扑晶体绝缘体。根据 q_i 可以求出材料对应于SI因子群 Z_{C_i} 中的值： $SI_i = q_i C_i \bmod C_i$ ，可取 $0, 1, 2, \dots, C_i - 1$ 。这样，根据展开系数，容易求得整个SI群中的取值 $SI = (SI_p, SI_{p+1}, \dots, SI_{d_{AI}})$ ，其中 $C_p > 1, C_{p-1} = 1$ ；

(iii)存在 $q_i C_i$ 是非整数，这种情形可以分为下面两种子情形：

1) n 的某个分量为非整数，说明非整数分量对应的高对称点存在能带交叉；

2) 所有 n 的分量都是整数，说明BZ所有高对称点都存在直接带隙，但是在高对称线/面上存在能带交叉。

其中，情形(i)中仍可能具有非平庸拓扑，需要进一步的分析，但是情形(ii)和(iii)必然具有非平庸拓扑，因此我们主要关心情形(ii)和(iii)对应的拓扑材料。

5 大规模拓扑材料搜索

众所周知，一个有中心反演对称性的材料，其原子绝缘体在演化的过程中如果其价带和导带的宇称在奇数个时间反演不变点处发生了翻转，该材料变成强拓扑绝缘体^[84]，可对应于 Z_4 SI群中1和3的情况。当发生能带翻转的是2或者6个时间反演不变点时，根据Fu—Kane判据可知体系不是拓扑绝缘体，但是后续的研究表明，这时候该体系将会属于 Z_4 SI群中2的情况，不能绝热地变到原子绝缘体，可能是高阶拓扑晶体绝缘体或者是镜面陈绝缘体^[92, 93]。目前已知的高阶拓扑晶体

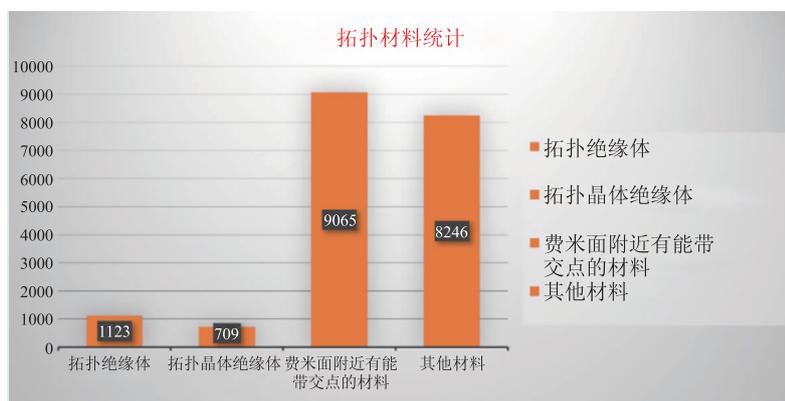


图5 ICSD 晶体库拓扑材料大规模搜索结果统计^[90]

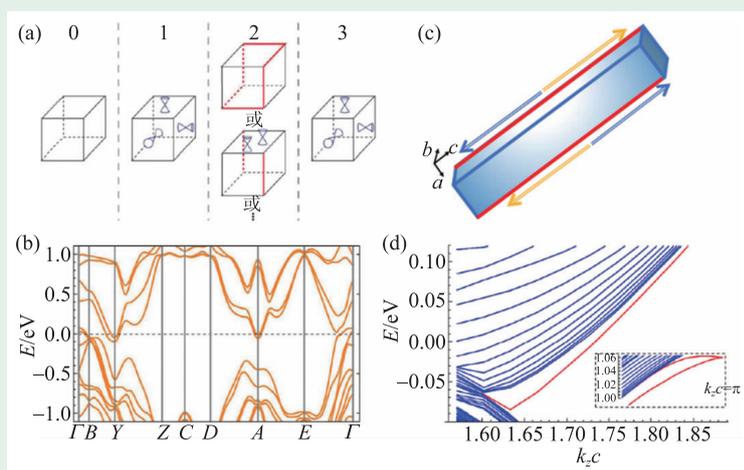


图6 (a) Z_4 强SI群中不同取值对应的拓扑相；(b)MoTe₂(SG11)的电子能带结构；(c)为了计算螺旋对称保护的铰链态，我们取了在a和b方向有界的棱柱，在c方向取周期性边界条件；(d)图(c)中棱柱的电子结构，其中红色表示铰链态，它们的实空间分布在(c)中示意地表示，其中箭头表示铰链态运动方向，不同颜色表示相反自旋

绝缘体数目还非常有限，所以基于上述拓扑材料搜索方案我们首先在无机材料数据库(ICSD)^[94]中搜索了第2, 11, 12, 61, 136, 166和227号空间群的所有材料。这7个空间群均具有 Z_4 SI群，我们找到了多个高阶拓扑绝缘体体系^[88]。也在ICSD数据库里搜索了具有高阶SI群(Z_8 和 Z_{12})的体系^[91]，这类体系具有丰富的晶格对称，我们发现了许多属于这类体系的拓扑材料，并对其中石墨(SG194)和Pt₃Ge(SG140)材料做了具体的拓扑性质分析^[91]。

这一方法非常高效，因此我们也用其对ICSD晶体库^[94]中所有的材料进行了拓扑性质的判断和筛选^[90, 91]。ICSD晶体库搜集了人们已经成功生长

出来的大约有18万个晶体材料，然而其中大量的材料原子占据不是整数，基于密度泛函理论的第一性原理计算方法处理这些体系有一定困难，所以在研究中排除掉了这些体系。LDA和GGA势函数在处理电子关联强的体系有很大的局限性，我们也排除掉了含有3d、4f以及部分4d/5d元素(Tc, Ru, Rh, Os, Ir)的材料体系。5f锕系核材料体系不利于实际应用，也被排除掉了。最终通过上述初筛，得到19143个晶体材料，然后基于我们的拓扑材料搜索算法，对这些材料进行快速的拓扑分类，最终得到10897个有趣的材料，其中包含1123个拓扑绝缘体，709个拓扑晶体绝缘体和9065个在费米面附近存在能带交点的体系(材料的结构和能带信息见ccmp.nju.edu.cn)。如图5所示，大规模搜索结果表明拓扑材料并非人们以前认为的那么罕见^[90]。

6 典型材料分析

下面将分析我们找到的几个典型的拓扑材料来进一步展示如何利用对称性指标来判断各种各样的拓扑材料，以及在得到拓扑归类以后所需的进一步分析。

6.1 拓扑晶体绝缘体

利用拓扑材料搜索方案，我们发现MoTe₂(SG11)和BiBr(SG12)可以分别实现图6(a)中“2”对应的两个拓扑晶体绝缘体相。有关这2个材料体系的具体讨论如下：

MoTe₂具有3个不同的晶体结构：六角 α 相^[95]，单斜 β 相^[96]以及正交 γ 相^[97]。在室温下的结构为 β -MoTe₂。其单层被预言可以实现量子自旋霍尔绝缘体^[59]。在240—260 K左右，结构相变使其变

除了上面两个材料,我们也发现了数百种拓扑晶体绝缘体材料^[90],其中SG164的Bi₂Se₂和Bi₂Pb₂Te₅具有较大的体能隙(≥ 25 meV)。尤其需要指出的是,其中除了上述Z₄ SI群的体系,高阶SI群(Z₈, Z₁₂)体系的拓扑材料也非常有意思^[91],相对于Z₄群的材料,这些材料的SI可以取更多的值,同时由于存在着丰富的晶格对称性,这些材料具有多种晶格对称保护的表面态/铰链态,这些具体的材料有助于将来研究这些边界态之间相互作用或者在外界微扰下,不同边界态的演化等带来的有意思的物理现象。石墨(SG194)可以看成是石墨烯的ABABABAB...Bernal型堆积,我们计算发现其SI=(4)(SG194的X_{BS}=Z₁₂)。根据第一性原理计算结果,SOC在K/K'打开了约为0.025 meV的体能隙。我们使用第一性原理方法计算了k_z=0和 $\frac{\pi}{c}$ 面的镜面陈数,发现后者为0,前者为-2。进一步计算($\bar{1}20$)平面的镜面陈数,发现为0。因此石墨可以呈现6重螺旋对称保护的铰链态^[92, 93],同时受到(010)滑移对称和2₁₁₀旋转对称的保护,石墨分别可以呈现沙漏型表面态和旋转反常。对于SG140(X_{BS}=Z₂×Z₈)的Pt₃Ge,计算发现其SI为(0, 4),同时(001)和(110)镜面对称对应的镜面陈数都为0,这说明这个材料在(100)滑移面上可以具有拓扑保护的沙漏型表面态,在c方向存在受4度螺旋对称保护的1维铰链态。

6.2 拓扑绝缘体

下面给出拓扑绝缘体(或叫强拓扑绝缘体)的一些例子。SG139的SI群为X_{BS}=Z₂×Z₈。根据第一性原理计算可得,Ag₂Zr(SG139)的SI=(0, 1)。这说明Ag₂Zr(SG139)

是一个(强)拓扑绝缘体。如图8(a)所示,Ag₂Zr(SG139)的费米面穿过一些能带,该材料具有一定的费米口袋,但是我们发现费米口袋的体积比较小,这说明在适当的动量-能量窗口下,人们可以观测到拓扑保护的Dirac型表面态的色散。我们也发现了一些具有能隙的拓扑绝缘体,比如Ba₁₁Cd₁₄Bi₈(SG12),其电子能带结构如图8(b)所示。第一性原理计算发现它具有大约34 meV左右的能隙,大于室温对应的热激发能(25 meV),从而这个拓扑绝缘体材料也是值得进一步研究的。

上面两个材料都是具有中心反演对称的,其Z₂拓扑不变量可以直接根据宇称进行计算。而具有Z₂ SI群的体系^[87],虽然没有中心反演对称,但

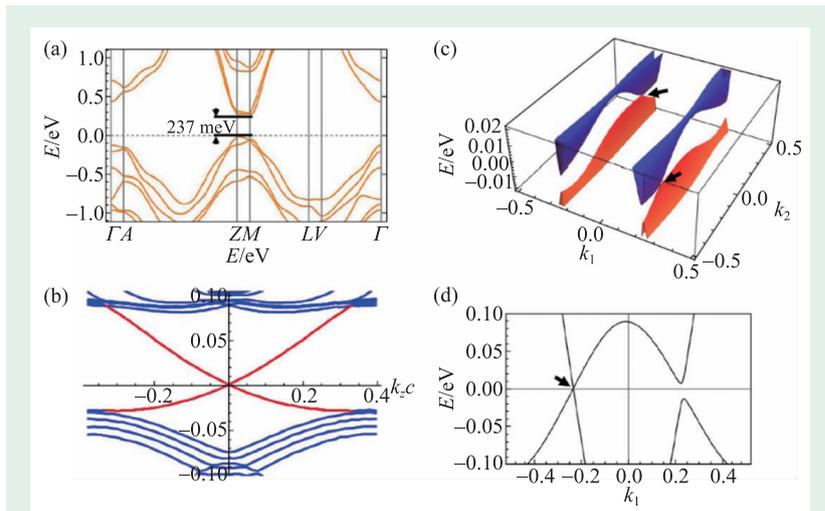


图7 (a)BiBr(SG12)的电子能带结构;(b)取中心反演对称的BiBr棱柱,计算得到沿着c方向的铰链态(红色)的色散,类似于 β -MoTe₂,这些铰链态局域在C₂联系起来的两个相对的铰链上;(c)在C₂对称的(001)面上出现的Dirac型表面态,其Dirac点在表面BZ中的一般位置(黑色箭头处);(d)图(c)中经过Dirac点的一维路径(k₂=0.333)上的能带色散,可以清楚地看到Dirac的位置(黑色箭头处,k₁=-0.237)

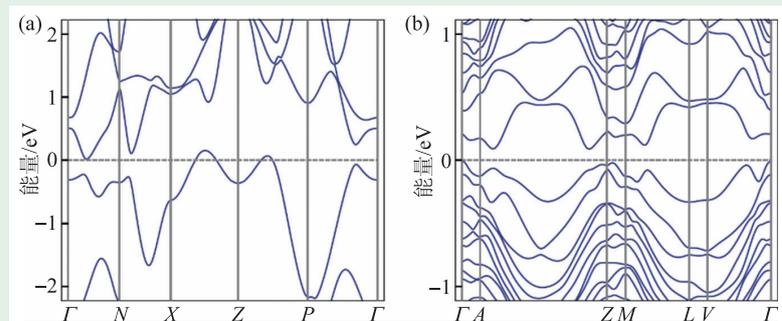


图8 (a)拓扑绝缘体Ag₂Zr(SG139)的电子能带结构;(b)拓扑绝缘体Ba₁₁Cd₁₄Bi₈(SG12)的电子能带结构

S_4 不变动量	Γ	Z	P'	P
$n_k^{\frac{1}{2}}$	5	4	4	4
$n_k^{-\frac{1}{2}}$	5	4	4	4
$n_k^{\frac{3}{2}}$	4	5	5	5
$n_k^{-\frac{3}{2}}$	4	5	5	5

表3 AgNaO 价带在 S_4 本征值中的占据数, 其中 $n_k^{j_z}$ 中 $j_z = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}$ 用来标记 S_4 本征值, $e^{-\frac{j_z \pi}{2}}$ 。 $\Gamma=(0, 0, 0)$, $Z=(0, 0, 1)$, $P'=(0, 1, -1/2)$, $P=(0, 1, 1/2)$, 为4个 S_4 不变动量的坐标(在惯用元胞对应的倒空间基矢下)

材料	完全带隙/meV
Sb ₂ Sr (SG11)	120
Al ₂ Ge ₂ Se ₃ (SG12)	34
O ₂ Pb (SG60)	40
AsCdNa (SG62)	87
Br ₂ Ca ₂ Si (SG71)	50
Ag ₂ CsSe ₃ (SG136)	40
Ag ₂ CsTe ₃ (SG136)	46
C ₄ K ₂ N ₄ PtS ₈ (SG164)	50
C ₆ N ₄ Rb ₂ PtS ₈ (SG164)	55
As ₂ Sn ₂ Sr (SG166)	30
GaGeTe (SG166)	25
HgS (SG216)	150

表4 我们预言的一些具有较大能隙(≥ 25 meV)的拓扑绝缘体材料, 在“材料”列中, 每一个化学式后面给出了所在的空间群

空间群	63	139	166	167	176
材料	K ₃ Pt ₂ O ₄	Al ₃ Nb	NaZn ₂ As ₃	Cs ₃ Ga ₁₁	AgHf ₂ Cd ₃ F ₂₀
Dirac 点	Z, T, R	$\Gamma-Z$	$\Gamma-Z$	L, Z	A, L
空间群	194	223	224	140	194
材料	Na ₂ MgSn	Pd ₂ SrO ₄	Ag ₂ O	AgXF ₃ (X=Rb, Cs)	AgAsX(X=Sr, Ba)
Dirac 点	$\Gamma-A$	$\Gamma-X$	$\Gamma-X$	N, P	$\Gamma-A$

表5 一些费米面比较干净且Dirac点离费米面较近的Dirac材料^[91, 104], 这里除了给出空间群(SG)信息、材料化学式, 还给出了Dirac点的位置(它们可以在高对称点上, 比如K₃Pt₂O₄的 Z, T, R 上, 或者高对称线上, 比如Al₃Nb的 $\Gamma-Z$ 线上)

是具有 $S_4(=C_4\sigma_h)$ 对称。通常人们需要计算波函数的内积来得到 Z_2 拓扑不变量^[81], 或者通过绝热连接得到中心反演对称的体系, 计算中心反演对称体系的宇称来得到原来体系的 Z_2 拓扑不变量。而这里, 直接计算 Z_2 SI群中的取值($=2q \bmod 2=0$ 或1, 其中 q 为价带 n 在公因子为2的AI基矢上展开系数), 就能够迅速得到这些空间群下材料是否为拓扑绝缘体的判断。我们在图9中展示了AgNaO(SG216)的电子结构, 作为这种拓扑绝缘体的例子。SG216没有中心反演对称操作, 但是它具有 S_4 对称, 拥有6个原子绝缘体基矢, 仅仅最后一个原子绝缘体基矢具有公因子为2, 其余公因子为1。我们发现该材料的SI=1, 因此该材料一定是拓扑绝缘体。而这个拓扑绝缘体相也可以从能带反转的图像理解: 如图9所示, s带主要出现在在费米面上面, 而d带主要出现在费米面下面。但是在 Γ 点, Γ_6 (具有s带成分)在 Γ_7 (具有d带成分)下方。实际上, 这里的拓扑绝缘体性质也可以通过计算 S_4 不变的动量上 S_4 本征态占据数来计算 S_4 拓扑不变量 κ_4 ^[92, 93]:

$$\kappa_4 = \left(\frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k \in \text{SIM}} s_4 n_k^{s_4} \right) \bmod 2,$$

其中SIM指 S_4 不变的动量(即具有 S_4 对称的高对称点)集合, 这里对于SG216, $\text{SIM}=\{\Gamma, Z, P', P\}$ (见表3), s_4 是 S_4 的本征值, 且 $s_4=e^{-\frac{j_z \pi}{2}}(j_z = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$ 。第一性计算得到 $\kappa_4 = 1 \bmod 2$ (参见表3), 表明材料是一个强拓扑绝缘体^[92, 93]。

在文献[90]中我们也列出一些潜在的适合应用的拓扑绝缘体材料, 它们的能隙大于室温对应的热激发能(~ 25 meV), 如表4所示。

6.3 Dirac半金属

我们也发现了大量半金属材料, 这里展示费米面几乎只穿过狄拉克点的两个材料: OPd(SG131)^[90]

和 MgBi_2O_6 (SG136)^[88]。第一性原理计算得到的 n 都是整数,表明这些材料所有高对称点上均具有有限的直接带隙。而根据(7)式做展开,发现展开系数满足情形(iii),进一步分析发现材料属于情形(iii)的第2个子情形。这样这两个材料均在高对称线/面上有对称性保护能带交叉点。进一步分析得知,这两个材料的能带交点为位于高对称线上的Dirac点,如图10和11所示,均受 C_{4v} 保护。除此之外,在文献[92]和[104]中,我们也得到了一些比较干净的Dirac半金属,将这些材料以及Dirac点的位置列于表5中。

7 总结和展望

本文详细地介绍了我们基于对称性指标理论,发展的使用原子绝缘体基组高效判断材料拓扑性质的方法,以及使用该算法对非磁性材料库进行拓扑筛选的结果(见ccmp.nju.edu.cn)。值得提及的是,中国科学院物理研究所方辰、翁红明、方忠团队^[105]和普林斯顿Benervig, Zhijun Wang团队^[106]分别利用对称性指标^[93, 107]和图论方法^[86]进行了晶体库的拓扑材料搜索,并且分别在http://materialae.iphy.ac.cn/^[105]和https://www.topologicalquantumchemistry.com/^[106]中列出了所有发现的拓扑材料。在这些材料中,找寻性能优越具有潜在应用前景的拓扑材料将是一件非常有意思的课题。

文中介绍的方案也可以应用到二维材料,也就是需要考虑80个layer群^[108]。此外,考虑磁性材料,该方案还可以被应用到1651个磁性空间群^[109]。除了稳定的拓扑,情形(i)中还可能不存在稳定的,所谓“易碎的”拓扑^[110],寻找具有这类拓扑的材料实现也非常有意思,而相关算法也可以很容易基于原子绝缘体基组来实现。此外,我们的方法对于构建具有期望拓扑性质的有效模型(全BZ)也非常有用。除了上述单电子图像下的拓扑性质,考虑多电子相互作用的拓扑材料的寻找也值得作为未来进一步的课题。

另外,除了电子拓扑材料,近年来,光子、声子、磁振子等玻色系统的拓扑性质也引

来了很多研究兴趣,而光子的空间群理论^[111, 112]也已经被提出来。基于对称性指标寻找实现拓扑超导的材料^[113],也是未来非常值得研究的课题。

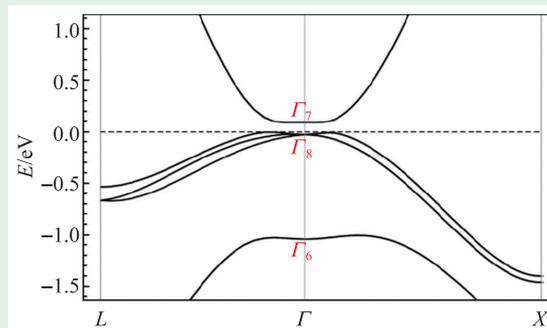


图9 AgNaO(SG216)的电子能带结构,其中 $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ 标记 Γ 点的不可约表示,昭示了能带反转的特征

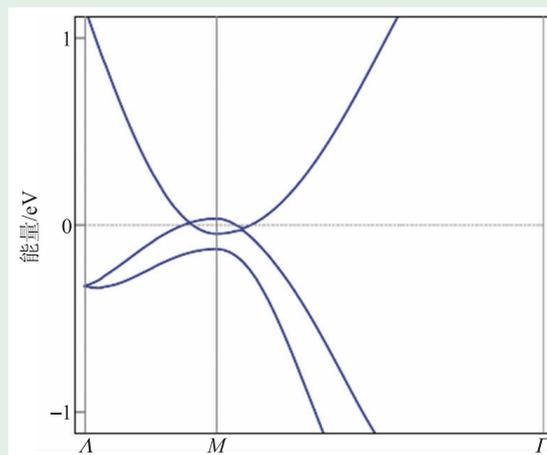


图10 Dirac半金属OPd(SG131)的电子能带图

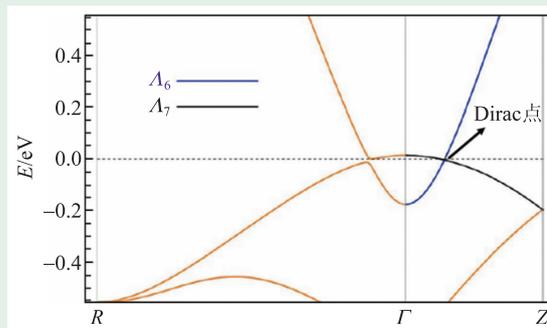


图11 Dirac半金属 MgBi_2O_6 (SG136)的电子结构,其中箭头标记Dirac点, A_6 和 A_7 标记高对称线 Γ -Z上两个不同不可约表示

计算方法说明

我们的第一性电子结构计算基于WIEN2k软件^[114], 并且考虑自旋轨道耦合, 使用了Perdew—Burke—Ernzerhof(PBE)采取广义梯度近似(GGA)的交换关联势^[115]。在文献[90]中对挑选的好的

拓扑(晶体)绝缘体进行了进一步 mBJ (modified Becke—Johnson)^[116]计算。

致谢 感谢 Ashvin Vishwanath 和 Hoi Chun Po 在系列工作^[88, 90, 91]中的合作。

参考文献

- [1] v Klitzing K, Dorda G, Pepper M. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45:494
- [2] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1982, 49:405
- [3] Haldane F D M. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 61:2015
- [4] Hasan M Z, Kane C L. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82:3045
- [5] Qi X L, Zhang S C. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, 83:1057
- [6] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95:226801
- [7] Kane C L, Mele E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 95:146802
- [8] Bernevig B A, Hughes T, Zhang S C. *Science*, 2006, 314: 1757
- [9] Fu L, Kane C L, Kane E J. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98:106803
- [10] Moore J E, Balents L. *Phys. Rev. B*, 2007, 75:121306 (R)
- [11] Roy R. *Phys. Rev. B*, 2009, 79:195322
- [12] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A *et al.* *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 195125
- [13] Ryu S, Schnyder A P, Furusaki A *et al.* *New Journal of Physics*, 2010, 12:065010
- [14] Kitaev A. *AIP Conference Proceedings*, 2009, 1134:22
- [15] Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P *et al.* *Rev. Mod. Phys.*, 2016, 88:035005
- [16] Fu L. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106: 106802
- [17] Hsieh T H, Lin H, Liu J *et al.* *Nature Commun.*, 2012, 3:982
- [18] Wang Z, Alexandradinata A, Cava R J *et al.* *Nature*, 2016, 532: 189
- [19] Wieder B J *et al.* *Science*, 2018, 361:246
- [20] Schindler F *et al.* *Science Advances*, 2018, 4:eaat0346
- [21] Benalcazar W A, Bernevig B A, Hughes T L. *Science*, 2017, 357:61
- [22] Benalcazar W A, Bernevig B A, Hughes T L. *Phys. Rev. B*, 2017, 96:245115
- [23] Song Z, Fang Z, Fang C. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119:246402
- [24] Langbehn J, Peng Y, Trifunovic L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119:246401
- [25] Slager R J, Mesarosm A, Jurić V *et al.* *Nature Physics*, 2013, 9:98
- [26] Ando Y, Fu L. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2015, 6:361
- [27] Wan X, Turner A M, Vishwanath A *et al.* *Phys. Rev. B*, 2011, 83: 205101; 万贤纲. *物理*, 2015, 44:427
- [28] Young S M, Zaheer S, Teo J C Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 108:140405
- [29] Wang Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2012, 85:195320
- [30] Wang Z, Weng H, Wu Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2013, 88:125427
- [31] Burkov A A, Hook M D, Balents L. *Phys. Rev. B*, 2011, 84: 235126
- [32] Weng H, Liang Y, Xu Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2015, 92:045108; Fang C, Chen Y, Kee H Y *et al.* *Phys. Rev. B*, 2015, 92:081201
- [33] Bzdusek T, Wu Q S, Ruegg A *et al.* *Nature*, 2016, 538:75
- [34] Chen W, Lu H Z, Hou J M. *Phys. Rev. B*, 2017, 96:041102(R); Sun X Q, Lian B, Zhang S C. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119: 147001; Yan Z, Bi R, Shen H *et al.* *Phys. Rev. B*, 2017, 96: 041103(R)
- [35] Chang P Y, Yee C H. *Phys. Rev. B*, 2017, 96:081114(R)
- [36] Ezawa M. *Phys. Rev. B*, 2017, 96:041202(R)
- [37] Wang L, Jian S K, Yao H. *Phys. Rev. B*, 2017, 96:075110
- [38] Bradlyn B *et al.* *Science*, 2016, 353:aaf5037; Weng H, Fang C, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2016, 93:241202(R); Weng H, Fang C, Fang Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2016, 94:165201
- [39] Zhang T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 103:266803
- [40] Fu L, Kane C L. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100:096407; Akhmerov A R, Nilsson J, Beenakker C W J. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102: 216404
- [41] Qi X L, Hughes T L, Zhang S C. *Phys. Rev. B*, 2008, 78: 195424; Essin A, Moore J E, Vanderbilt D. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, 102:146805
- [42] Son D T, Spivak B Z. *Phys. Rev. B*, 2013, 88:104412
- [43] Potter A C, Kimchi I, Vishwanath A. *Nature Commun.*, 2014, 5: 5161

- [44] Wang C M, Sun H P, Lu H Z *et al.* Phys. Rev. Lett., 2017, 119: 136806
- [45] Zhang C *et al.* Nature, 2019, 565:331
- [46] Yang K Y, Lu Y M, Ran Y. Phys. Rev. B, 2011, 84:075129
- [47] Hosur P, Dai X, Fang Z *et al.* Phys. Rev. B, 2014, 90:045130
- [48] Wu L *et al.* Nature Physics, 2017, 13:350
- [49] Katsnelson M I, Novoselov K S, Geim A K. Nature Physics, 2006, 2:620
- [50] Kopnin N B, Heikkila T T, Volovik G E. Phys. Rev. B, 2011, 83: 220503(R)
- [51] Zhang H, Liu C X, Qi X L *et al.* Nature Physics, 2009, 5:438
- [52] Weng H, Fang C, Fang Z *et al.* Phys. Rev. X, 2015, 5:011029; Huang S M *et al.* Nature Commun., 2015, 6:7373
- [53] Xu G, Weng H, Wang Z *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 107: 186806
- [54] Yu R, Weng H, Fang Z *et al.* Phys. Rev. Lett., 2015, 115:036807; Kim Y, Wieder B J, Kane C L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2015, 115: 036806
- [55] Yu R, Zhang W, Zhang H J *et al.* Science, 2010, 329:61
- [56] Du Y, Wan B, Wang D *et al.* Scientific Reports, 2015, 5: 14423; Du Y *et al.* npj Quantum Materials, 2017, 2:3
- [57] Liu C C, Feng W, Yao Y. Phys. Rev. Lett., 2011, 107:076802
- [58] Zhang H J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 106:156402
- [59] Qian X, Liu J, Fu L *et al.* Science, 2014, 346:1344
- [60] Zhang W *et al.* Phys. Rev. Lett., 2011, 106:156808
- [61] Neupane M *et al.* Phys. Rev. B, 2012, 85:235406
- [62] Kuroda K *et al.* Phys. Rev. Lett., 2012, 108:206803
- [63] Yan B *et al.* Europhys. Lett., 2010, 90:37002
- [64] Sato T *et al.* Phys. Rev. Lett., 2010, 105:136802
- [65] Xu Y *et al.* Phys. Rev. Lett., 2013, 111:136804
- [66] Bansil A, Lin H, Das T. Rev. Mod. Phys., 2016, 88:021004
- [67] Tang P, Zhou Q, Zhang S C. Phys. Rev. Lett., 2017, 119:206402
- [68] Schindler F *et al.* Nature Physics, 2018, 14:918
- [69] Hsieh D *et al.* Nature, 2009, 460:1101; Chen Y *et al.* Science, 2009, 325:178; Xia Y *et al.* Nature Physics, 2009, 5:398
- [70] Liu Z K *et al.* Science, 2014, 343:864; Liu Z K *et al.* Nature Materials, 2014, 13:677
- [71] Lv B Q *et al.* Phys. Rev. X, 2015, 5:031013; Xu S Y *et al.* Science, 2015, 349:613; Lv B Q *et al.* Nature, 2017, 546:627
- [72] Zhang C L *et al.* Nature Commun., 2016, 7:10735; Huang X *et al.* Phys. Rev. X, 2015, 5:031023
- [73] Fei Z *et al.* Nature Physics, 2017, 13:677; Tang S *et al.* Nature Physics, 2017, 13:683
- [74] Zhu F F *et al.* Nature Materials, 2015, 14:1020
- [75] Chang C Z *et al.* Science, 2013, 340:167
- [76] Takane D *et al.* Phys. Rev. Lett., 2019, 122:076402
- [77] Rao Z *et al.* Nature, 2019, 567:496
- [78] Sanchez D S *et al.* Nature, 2019, 567:500
- [79] Ando Y. J. Phys. Soc. Jpn., 2013, 82:102001
- [80] Armitage N P, Mele E J, Vishwanath A. Rev. Mod. Phys., 2018, 90:015001
- [81] Feng W, Wen J, Zhou J *et al.* Computer Physics Communications, 2012, 183:1849
- [82] Scanlon D O *et al.* Adv. Mater., 2012, 24:2154
- [83] Wang N *et al.* Phys. Rev. B, 2014, 89:045142
- [84] Fu L, Kane C L. Phys. Rev. B, 2007, 76:045302
- [85] Fang C, Gilbert M J, Bernevig B A. Phys. Rev. B, 2012, 86: 115112
- [86] Bradlyn B, Elcoro L, Cano J *et al.* Nature, 2017, 547:298
- [87] Po H C, Vishwanath A, Watanabe H. Nature Commun., 2017, 8: 50
- [88] Tang F, Po H C, Vishwanath A *et al.* Nature Physics, 2019, 15: 470
- [89] Bradley C J, Cracknell A P. The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point Groups and Space Groups. Oxford University Press, 1972
- [90] Tang F, Po H C, Vishwanath A *et al.* Nature, 2019, 566:486
- [91] Tang F, Po H C, Vishwanath A *et al.* Science Advances, 2019, 5: eaau8725
- [92] Khalaf E, Po H C, Vishwanath A *et al.* Phys. Rev. X, 2018, 8: 031070
- [93] Song Z, Zhang T, Fang Z *et al.* Nature Commun., 2018, 9:3530
- [94] Hellenbrandt M. Crystallogr. Rev., 2004, 10:17
- [95] Brixner L H. J. Inorg. Nucl. Chem., 1962, 24:257
- [96] Brown B E. Acta Crystallogr., 1966, 20:268
- [97] Clarke R, Marseglia E, Hughes H P. Philos. Mag. B, 1978, 38: 121
- [98] Deng K *et al.* Nature Physics, 2016, 12:1105
- [99] Tamai A *et al.* Phys. Rev. X, 2016, 6:031021
- [100] Huang L *et al.* Nat. Mater., 2016, 15:1155; Jiang J *et al.* Nat. Commun., 2017, 8:13973
- [101] Wang Z, Wieder B J, Li J *et al.* arXiv 1806.11116 (2018)
- [102] Fang C, Fu L. arXiv 1709.01929 (2017)
- [103] Hsu C H *et al.* 2D Mater., 2019, 6:031004

[104] Tang F, Wan X. *Frontiers of Physics*, 2019, 14:4

[105] Zhang T, Jiang Y, Song Z *et al.* *Nature*, 2019, 566:475

[106] Vergniory M G, Elcoro L, Felser C *et al.* *Nature*, 2019, 566:480

[107] Song Z, Zhang T, Fang C. *Phys. Rev. X*, 2018, 8:031069

[108] Wang D *et al.* arXiv 1906. 01283 (2019)

[109] Watanabe H, Po H C, Vishwanath A. *Science Advances*, 2018, 4:eaat8685

[110] Po H C, Watanabe H, Vishwanath A. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121:126402

[111] Watanabe H, Lu L. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121:263903

[112] de Paz M B, Vergniory M G, Bercioux D *et al.* arXiv 1903.02562 (2019)

[113] Ono S, Yanase Y, Watanabe H. arXiv 1811.08712 (2018)

[114] Blaha P, Schwarz K, Madsen G K H *et al.* WIEN2k: An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties. Karlheinz Schwarz, Technische Univ. Wien, Austria, 2001

[115] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77:3865

[116] Koller D, Tran F, Blaha P. *Phys. Rev. B*, 2001, 83:195134



Golden WAY SCIENTIFIC 专心/专注/专业

二十年的默默耕耘，风雨兼程，铸就了欧普特人“专心”，“专注”，“专业”的风格和品质，孜孜不倦地对创新和品质的追求，让欧普特具备了全线覆盖低、中、高，超高功率激光光学元件的加工生产和检测能力。伴随中国激光行业的蓬勃发展，欧普特愿与您共同进步，砥砺前行，为中国光电事业的发展 and 进步共同尽一份心力和责任。

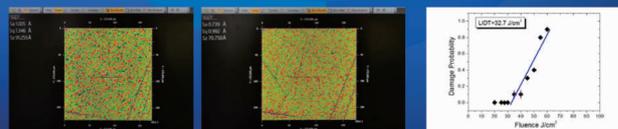
精密光学元件

1. 球面透镜
2. 柱面&非球面透镜
3. 光学棱镜
4. 反射镜(玻璃&金属)
5. 光学窗口
6. 偏振&消偏元件
7. 滤光片
8. 光栅



激光器件

1. 扫描场镜(紫外-红外)
2. 线扫镜头
3. 紫外远心镜头
4. 中继镜
5. 扩束镜



(熔石英基材，直径50.8mm光学窗口)

(单晶硅基材，1070nm高反膜)



北京市朝阳区酒仙桥东路1号M7栋东五层

www.goldway.com.cn
Email: optics@goldway.com.cn

Tel: +86-(0)10-8456 0667
Fax: +86-(0)10-8456 9901