

# 拓扑声子目录

张田田<sup>1</sup> 徐远锋<sup>2,\*</sup>

(1 中国科学院理论物理研究所 北京 100190)

(2 浙江大学物理学院 关联物质研究中心 杭州 310027)

2024-07-20收到

\* email: y.xu@zju.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20240808

## 1 背景介绍

太赫兹量级的声子直接影响固体材料的载流子迁移率、热导率等基本物性，并在结构相变、常规超导、光散射等物理现象中扮演着重要角色。然而，“零自旋”和电中性等特征使得声子难以直接被电磁场操控。在声子系统中定义新的物理自由度可以为复杂物理过程(如电—声子耦合、热输运等)的理解提供新的视角，也为实现物态调控、新型功能器件的设计提供新途径。近年来，受晶体对称性保护的拓扑电子材料受到了广泛关注和研究。拓扑电子材料中受拓扑保护的表面态对杂质、缺陷等不敏感，使其在低功耗电子器件的设计方面具有巨大的应用潜力。2017年，由普林斯顿大学 B. A. Bernevig 研究组和哈佛大学 A. Vishwanath 研究组分别提出的拓扑量子化学理论和对称性指标理论，对 230 个晶体空间群中所有可能的对称性保护拓扑态进行了系统分类<sup>[1, 2]</sup>。中国科学院物理研究所方辰研究组基于对称性指标理论，在 230 种空间群下建立了对称性质(即晶格布里渊区高对称点上能带的不可约表示)和拓扑性质之间的映射，该映射关系又被称为“拓扑词典”<sup>[3, 4]</sup>。结合材料的第一性原理计算和拓扑词典，便可获得该材料可能的拓扑信息。在此之后，针对所有磁空间群的分类理论也被进一步提出和完善<sup>[5, 6]</sup>。这一系列理论进展极大地促进了拓扑凝聚态物理的发展，催生了拓扑电子材料数据库的建立<sup>[7-10]</sup>。2018 年前后，人们将“拓扑”进一步引入到声子中，实现了拓扑能带理论在晶体声子谱中的推广(图 1)<sup>[11-13]</sup>。与电子体系不同，晶格振动模式缺乏内禀的自旋自由度，描述声子谱的动力学矩阵无

法自发破缺时间反演对称性。同时，声子体系中的时间反演算符满足  $T^2 = 1$  的特征，属于 Altland—Zirnbauer 拓扑分类中的 AI 类，与无自旋轨道耦合效应的电子体系类似，无法定义完全打开能隙的强拓扑相。目前，与拓扑声子晶体相关的研究主要是关于对称性强制的无能隙拓扑节点或节点线。例如，在 FeSi 等系列材料中发现的二重简并“双外尔声子”以及三重简并“spin-1 外尔声子”<sup>[11, 12]</sup>，以及在 MoB<sub>2</sub> 中发现的受时间—空间反演对称保护的拓扑节点线声子等<sup>[13]</sup>。2021 年，中

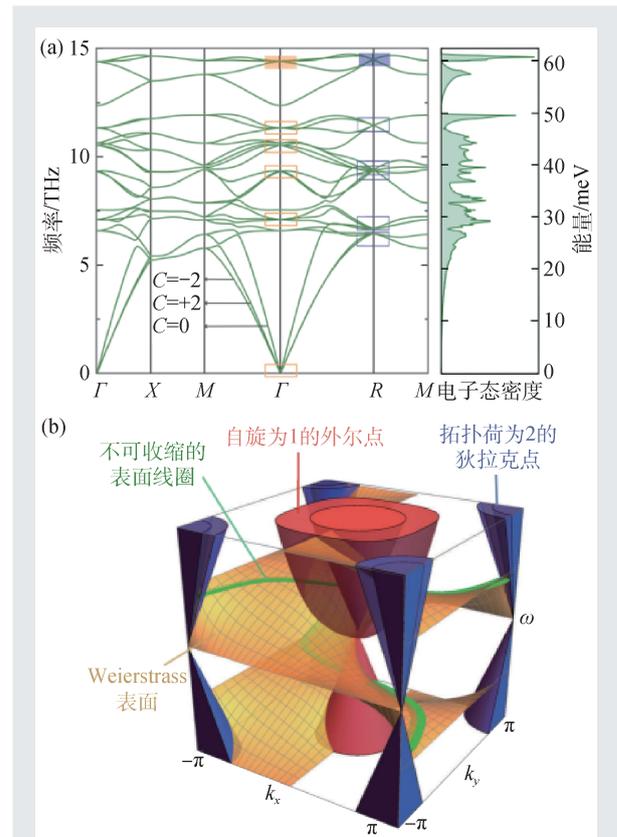


图1 (a) 由第一性原理计算得到的 FeSi 声子谱；(b) FeSi 声子谱中的两种“双外尔点”激发及其对应的拓扑表面态(黄色曲面)<sup>[11]</sup>

中国科学院金属研究所陈星秋研究组采用数值分析声子谱能隙的方法在五千多种晶体材料的声子谱中发现了由对称性强制的拓扑节点(线)<sup>[14]</sup>。近期,浙江大学徐远锋与普林斯顿大学B. A. Bernevig团队合作,将拓扑量子化学理论和实空间不变量理论拓展至声子系统中,进一步丰富了拓扑声子的类型,并通过高通量计算建立了拓扑声子目录<sup>[15]</sup>。

## 2 拓扑量子化学

在拓扑量子化学和对称性指标理论中<sup>[1, 2]</sup>, 一组能带的对称性特征由布洛赫波函数在所有高对称动量点处的群表示描述。如果该能带的群表示不满足对应空间群的相容性关系, 这组能带与其他能带间必然存在受对称性保护的简并点或简并线; 否则, 可以认为这组能带为一组孤立能带。对于局域在晶格高对称位置的不可约原子轨道, 其布洛赫群表示又被称为元表示基组(elementary band representation, EBR)。拓扑量子化学理论表明, 任意一组孤立能带的布洛赫群表示都可以由对应空间群的EBR线性展开, 而能带的拓扑性质由展开系数的类型决定: (a) 对于强拓扑相, 展开系数中必然存在分数; (b) 对于脆拓扑相, 其展开系数均为整数, 但必然存在负整数; (c) 对于拓扑平庸相, 其展开系数均为正整数。拓扑平庸相的

布洛赫群表示与原子轨道等价, 即在实空间存在局域的瓦尼尔函数, 而强/脆拓扑相不然。近年来, 拓扑平庸相又被进一步分为平庸原子型和阻塞原子型<sup>[1, 16-18]</sup>。前者对应的瓦尼尔函数局域在原子上, 而后者对应的瓦尼尔函数中心与原子位置不匹配。目前, 实空间不变量理论<sup>[16, 19]</sup>是分类和判别阻塞原子型能带的有效方法。

## 3 拓扑声子材料数据库

晶格动力学矩阵是晶体材料中声子的哈密顿量, 一般可通过第一性原理计算得到。相比电子结构计算, 声子的计算复杂度较高, 使得声子材料数据库的规模有限。目前, 从第一性原理计算出发所建立的三维声子材料数据库主要有Materials Project (<https://next-gen.materialsproject.org>, 包含1500多种材料)和日本京都大学A. Togo等人建立的phonondb@kyoto-u (<https://github.com/atztogo/phonondb>, 包含一万多种材料)。

最近, 浙江大学徐远锋等人通过拓展拓扑量子化学理论, 对以上一万多种材料的声子动力学矩阵进行高通量计算, 完成了声子谱的群表示和拓扑性质的判断<sup>[15]</sup>。如图2所示, 该高通量计算的具体流程为: (1)分析材料的晶体对称性, 计算高对称动量点处所有声子模式的对称性本征值,

并将数据存储至文件(trace.txt)中; (2)将文件导入拓扑声子判断工具Check Topo. Phonons (<https://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/magnetictopo.pl?tipog=phonon>), 采用拓扑量子化学理论判断声子模式的群表示和相容性关系。最终将所有声子能带分为多组孤立能带, 且每组孤立能带内的任意两条相邻能带间存在

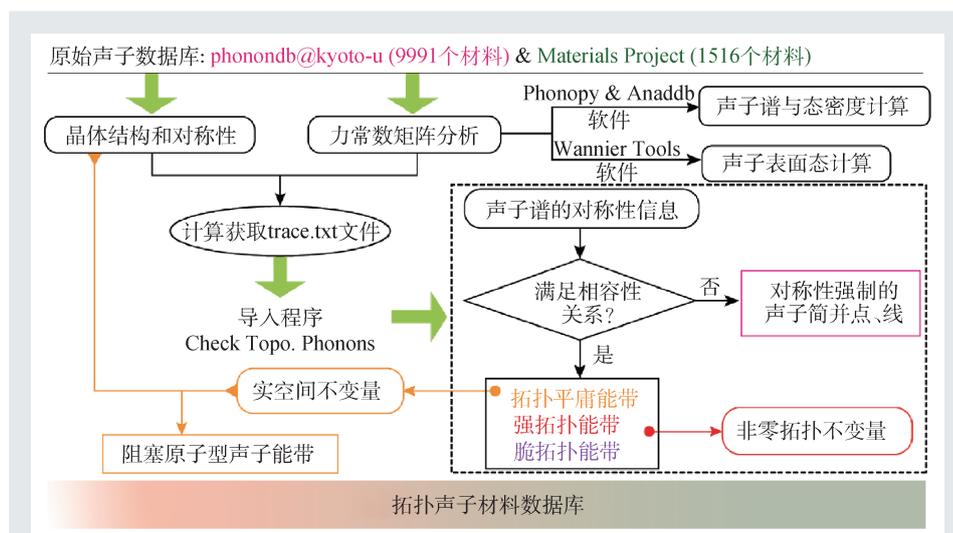
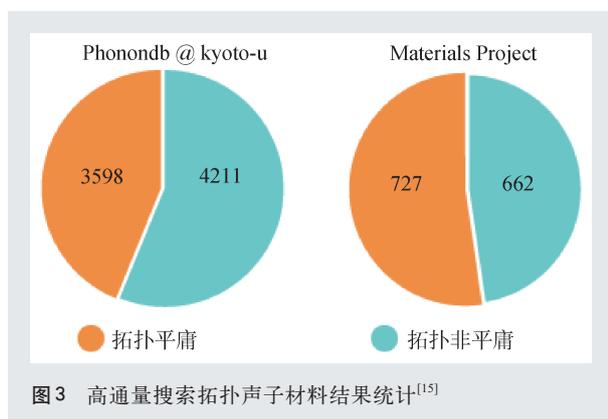


图2 高通量计算拓扑声子材料流程图<sup>[15]</sup>



对称性强制的简并点或线；(3)判断每组孤立能带的拓扑性质，并将其拓扑类型分为强拓扑、脆拓扑和平庸拓扑。同时，该工作还计算了强拓扑能带的拓扑指标，拓扑平庸能带的实空间不变量 (real space invariant, RSI)，以及所有材料的声子表面态。考虑到声子自旋为0，其强拓扑指标必然指示非高对称动量位置处存在拓扑简并点或节点线<sup>[3-4]</sup>。而对于拓扑平庸能带，可根据RSI的计算和原子占据信息进一步将其分为原子型能带、阻塞原子型能带(OABR)和轨道选择的阻塞原子能

## 参考文献

[1] Bradlyn B, Elcoro L, Cano J *et al.* Nature, 2017, 547(7663):298  
 [2] Po H, Vishwanath A, Watanabe H. Nature Communications, 2017, 8(1):50  
 [3] Song Z, Zhang T, Fang Z *et al.* Nature Communications, 2018, 9 (1):3530  
 [4] Song Z, Zhang T, Fang C. Physical Review X, 2018, 8(3):031069  
 [5] Elcoro L, Wieder B, Song Z *et al.* Nature Communications, 2021, 12(1):5965  
 [6] Watanabe H, Po H, Vishwanath A. Science Advances, 2018, 4(8): eaat8685  
 [7] Zhang T, Jiang Y, Song Z *et al.* Nature, 2019, 566(7745):475  
 [8] Tang F, Po H, Vishwanath A *et al.* Nature, 2019, 566(7745):486  
 [9] Vergniory M, Elcoro L, Felser C *et al.* Nature, 2019, 566(7745): 480  
 [10] Xu Y, Elcoro L, Song Z *et al.* Nature, 2020, 586(7831): 702  
 [11] Zhang T, Song Z, Alexandradinata A *et al.* Phys. Rev. Lett., 2018, 120(1):016401  
 [12] Miao H, Zhang T, Wang L *et al.* Phys. Rev. Lett., 2018, 121(3): 035302

带(OOABR)。目前，以上所有结果已被收录进拓扑声子材料数据库 (<https://www.topologicalquantumchemistry.fr/topophonons>)。

如图3所示，经统计被研究的一万多种材料中约52.98%的材料具有非原子型的拓扑声子能带，并与拓扑电子材料在晶体材料中的占比(约52.65%<sup>[20]</sup>)相近，该结果进一步向人们展示了拓扑物态在晶体世界的普遍存在性。

## 4 展望

拓扑电子和声子的完整分类和材料数据库的建立不仅为拓扑物态的研究提供了大量候选材料，也将有助于人们重新审视与电-声子耦合直接相关的多种量子效应(如热电效应、超导等)的几何本质。同时，探索声子体系中的新型量子效应(如声子霍尔效应<sup>[21]</sup>、声子的手性与角动量<sup>[22-24]</sup>)及其与电子自由度之间的耦合效应将有助于丰富对声子的调控手段，并进一步推动拓扑物态在功能器件研发方面的应用。

[13] Zhang T, Miao H, Wang Q *et al.* Phys. Rev. Lett., 2019, 123 (24):245302  
 [14] Li J, Liu J, Baronett S *et al.* Nature Communications, 2021, 12 (1):1204  
 [15] Xu Y, Vergniory M, Ma D *et al.* Science, 2024, 384(6696): eadf8458  
 [16] Xu Y, Elcoro L, Li G *et al.* 2021, arXiv:2111.02433  
 [17] Xu Y, Elcoro L, Song Z *et al.* Phys. Rev. B, 2024, 109(16): 165139  
 [18] Gao J, Qian Y, Jia H *et al.* Science Bulletin, 2022, 67(6):598  
 [19] Song Z, Elcoro L, Bernevig B A. Science, 2020, 367(6479):794  
 [20] Vergniory M, Wieder B, Elcoro L *et al.* Science, 2022, 376 (6595):abg9094  
 [21] Zhang L, Ren J, Wang J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2010, 105(22): 225901  
 [22] Zhang L, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2014, 112(8):085503  
 [23] Zhang L, Niu Q. Phys. Rev. Lett., 2015, 115(11):115502  
 [24] Long Y, Ren J, Chen H. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2018, 115(40):9951