

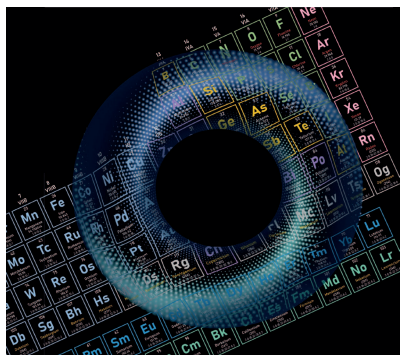
拓扑材料周期表

(中国科学院理论物理研究所 张田田, 中国科学院物理研究所 翁红明、方辰 编译自 Margaret Harris. *Physics World*, 2023, (4): 39)

人们曾经认为, 外部导电但内部绝缘的材料是不常见的。然而, 德国德累斯顿马克斯·普朗克固体化学物理研究所的计算化学家 Maia Vergniory 及其同事最近证明了事实并非如此。他们发现了数以万计的此类拓扑绝缘体以及其他具有值得关注的拓扑特性的材料, 并将这些结果创建成拓扑材料数据库 (www.topologicalquantumchemistry.com)。Vergniory 对 Margaret Harris 讲述了她所在的团队如何进行这种搜索以及数据库对其领域的意义。

什么是拓扑材料?

拓扑材料中最有趣的是拓扑绝缘体, 它们的内部绝缘但表面导电。这类材料中的电子导电通道非常稳定, 对实验中可能遇到的一些外部干扰不敏感, 例如弱无序或温度波动, 也不依赖于材料的尺寸。以上特性很有趣, 因为这意味着这类材料具有恒定的电阻和电导率。



拓扑材料目录。由 Maia Vergniory 及其同事创建的拓扑材料数据库是一种可搜索的网站工具, 包含9万多种已知拓扑材料(译者注: 判别的已知拓扑材料为9千多种)

可对电流进行如此严格的控制对于许多应用都很有用。

能否举些拓扑绝缘体的例子?

最著名的例子可能是砷化镓, 它是一种二维半导体, 常用于整数量子霍尔效应的实验中。在新一代拓扑绝缘体中, 最著名的是硒化铋, 但并未引起像砷化镓那样的广泛关注。(译者注: 整数量子霍尔效应中用到的是 GaAs 和 AlGaAs 生长成的异质结, 用该量子阱去限制电子成为二维电子气。)

为什么您和同事决定寻找新的拓扑材料?

当时人们所知的拓扑材料很少, 于是我们想到, “如果能开发一种可以快速计算或判别拓扑的方法, 我们就可以得知是否存在具有更优性质的拓扑材料”。

例如电子能带的带隙便是一种优化属性。由于拓扑绝缘体的体内是绝缘的, 因此其体内有一个“禁止”的能量范围, 在这个区域内的电子无法传输; 然而该能量范围的电子可以存在于材料的表面, 在表面形成导电通道。材料的电子带隙越大, 它就越是一个好的拓扑绝缘体。

您是如何着手寻找新的拓扑材料的?

我们开发了一种基于材料晶体对称性的算法, 这是以前没有考虑到的。在计算拓扑性质时, 晶体的对称性非常重要, 因为某些拓扑材料和某些拓扑相需要特定的对称性(或缺乏对称性)才能存在。

例如, 整数量子霍尔效应不需要任何晶体对称性的保护, 但它确实需要打破一种对称性, 即时间反演对称性。这意味着材料需要具有磁性, 或者对材料施加非常大的外部磁场。

但其他拓扑相确实需要对称性的保护, 我们也设法确定了它们所需要的对称性。然后, 一旦我们确定了所有的拓扑相和它们对应的对称性, 就可以对它们进行拓扑分类——因为这就是物理学家所做的事情, 即对物态进行分类。

我们从2017年开始研究理论表述, 并在两年后发表了第一篇与该理论表述相关的论文。但直到现在, 我们才最终完成了所有的工作并将结果发表出来。

这项工作中的合作者有谁, 每个人的贡献如何?

我设计(并部分执行)了第一性原理计算, 其中考虑了如何计算真实材料并“判别”它们是否具有拓扑特性。为此, 我们使用了最先进的代码和自主开发的代码来判别材料中电子性质以及对材料的拓扑性质进行分类。

对拓扑材料的理论分析和数据分析是由 Benjamin Wieder 和 Luis Elcoro 完成的, 因为他们是更硬核的理论物理学家, 对拓扑态进行了分析和分类。另一个非常重要的贡献者和该项目的领导者是 Nicolas Regnault, 我们一起建立和设计了拓扑材料数据库网站。

另外, 我们还得到了 Stuart Par-

kin 和 Claudia Felser 的帮助。他们是材料专家，因此他们可以就材料是否合适向我们提供建议。然后是这个工作的协调者 Andrei Bernevig，此前我们已经合作多年了。

你们发现了什么？

我们发现有很多材料具有拓扑性质——多到数以万计。我们对这个数字感到惊讶。

考虑到拓扑材料存在的普遍性，您为何会对这个结果感到惊讶呢？为什么以前没有人注意到有如此多的拓扑材料呢？

我不知道为什么研究者们之前错过了如此多的拓扑材料和拓扑性质，这里不仅仅是我们材料科学和凝聚态物理领域的研究者们。量子力学已经存在了一个世纪，这些拓扑性质很微妙，但并不复杂。然而，所有聪明的量子力学“前辈”都完全错过了这个理论表述。

有没有人试过合成这些材料并检查它们是否确实表现为拓扑绝缘体？

有一些，但并不是所有的都被验证过，因为数量太多了。在这项工作之后，实验上又合成了一些新型拓扑材料，例如高阶拓扑绝缘体 Bi_4Br_4 。

您和同事构建的拓扑材料数据库被描述为“拓扑材料周期表”。是什么性质决定了它的结构？

拓扑性质与电子电流有关，是材料的全局性质。此前物理学家没有考虑电子拓扑性质的原因之一，可能是因为他们非常关注局部属性，而不是全局属性。所以从这个意义上说，拓扑重要的属性与电荷在实空间的位置以及其定义方式有关。(译者注：电子电流指拓扑材料的边界/表面态，在实空间对应导电通道。)

我们发现，如果知道材料的晶体对称性，就可以预测电荷的行为或流动方式。这也是我们如何对拓扑相进行分类的。

拓扑材料数据库如何工作？研究人员在使用它时会做什么？

首先，他们输入材料的化学式。例如，如果您对食盐感兴趣，它的化学式为 NaCl 。因此，您将 Na 和 Cl 输入搜索栏，之后便可得知该材料所有的性质。使用起来非常简单。

您是说普通食盐是一种拓扑材料吗？这太神奇了。除了熟悉材料的拓扑特性让人们感到惊讶之外，您希望此数据库对这个领域产生什么影响？

我希望它能帮助实验学家弄清楚他们应该生长哪些材料。现在我们已经分析了材料的全部特性，实验学家可以说，“好吧，这个材料所处的电子输运态不好，但是如果我对它进行电子掺杂，那么我们将可以获得一个非常有趣的输运态”。因此，从某种意义上说，我们希望它能帮助实验者找到好的材料。

由于可能与量子计算有关，最近拓扑材料引起了很多关注。这是你工作的一大动力吗？

这是相关的，但每个领域都有不同的分支，我想说我们的工作处在一个不同的分支中。当然，你需要一个拓扑材料作为平台，随后才能使用任何可能的比特(量子比特)来开发拓扑量子计算机，所以我们所做的对此很重要。但是开发拓扑量子计算机将需要在材料设计方面做更多的工作，因为材料的尺寸起着重要作用。我们目前研究的是三维材料，对于量子计算的平台来说，可能需要关注二维系统。

不过，我们的工作还有其他应用。例如，您可以使用该数据库查

找太阳能电池的材料，或用于催化、探测器或低耗散电子设备的材料。除了异常奇特的应用之外，日常应用方面的可能性也非常重要。但我们做这项工作的真正动机是理解能带拓扑中的物理。

您和合作者的下一步研究计划是什么？

我想研究有机材料。当前数据库的重点是无机材料，因为我们以无机晶体结构数据库为起点，但有机材料也很有趣。我还想研究更多的磁性材料，因为数据库中报告的磁性材料比非磁性材料少。最后，我还想看看具有手性对称性的材料——也就是说，它们的结构有“左手手性”和“右手手性”两种。

您认为在有机材料或磁性材料中还会有数千种拓扑材料吗？

我不知道。这取决于电子能带中带隙的大小。让我们拭目以待！

(译者注：Maia Vergniory 在采访中介绍了近年来参与的与拓扑材料的计算和预言有关的重要工作，即拓扑材料的计算数据库，相关论文分别于 2019 年和 2022 年发表于 *Nature* 和 *Science*。事实上，在 2017 年，业内人士就已经意识到，能带中拓扑性质的全自动、快速判别是可能的。中科院物理所团队与美国哈佛大学团队在 2017 年底独立发布了“拓扑词典”，即非磁性晶体材料中对称性质到拓扑性质的完整映射。根据“拓扑词典”，中科院物理所团队于 2018 年 7 月上线了国际首个拓扑材料计算数据库 *Materiae* (与被采访者的 *Topological Materials Database* 同日上线)。之后，我国南京大学团队也上线了自己的拓扑材料计算数据库 *Topological Materials Arsenal*。中科院物理所团队、南京大学团队与受访者团队，于 2019 年 2 月在 *Nature* 上同期独立发表了相关论文。)