

2023 WORK SUMMARY

# 拓扑绝缘体系统和一 种新的 $Z_2$ 拓扑数的计 算方法

汇报人：

2024-01-14

# 目录

CATALOGUE

- 引言
- 拓扑绝缘体系统基本理论
- $Z_2$ 拓扑数的计算方法及优化
- 拓扑绝缘体系统中 $Z_2$ 拓扑数的应用
- 实验验证与数据分析
- 总结与展望

# PART 01



# 引言



# 研究背景和意义

## 拓扑绝缘体

拓扑绝缘体是一种具有特殊能带结构的量子物态，其内部是绝缘的，但边缘或表面却允许电荷无耗散地传输。这种独特的性质使得拓扑绝缘体在自旋电子学、量子计算等领域具有潜在的应用价值。

## Z2拓扑数

Z2拓扑数是描述拓扑绝缘体性质的重要物理量，它可以用来区分普通绝缘体和拓扑绝缘体。然而，传统的Z2拓扑数计算方法通常较为复杂，且难以应用于实际材料体系。因此，发展一种简单有效的Z2拓扑数计算方法具有重要的理论意义和实际应用价值。



# 国内外研究现状及发展趋势

## 国内外研究现状

目前，国内外学者已经对拓扑绝缘体进行了广泛而深入的研究，包括理论模型、实验观测、材料制备等方面。在Z2拓扑数的计算方面，虽然已经发展了一些方法，如基于格林函数的方法、基于散射矩阵的方法等，但这些方法通常较为复杂，且难以应用于实际材料体系。

VS

## 发展趋势

随着拓扑绝缘体研究的不断深入，未来将会出现更多具有优异性能的拓扑绝缘体材料。同时，随着计算机技术的不断发展，基于第一性原理计算的方法将会在拓扑绝缘体的研究中发挥越来越重要的作用。因此，发展一种简单有效的Z2拓扑数计算方法具有重要的现实意义和长远的发展前景。

# 论文研究目的和主要内容



## 研究目的

本文旨在发展一种简单有效的Z2拓扑数计算方法，并将其应用于实际材料体系的拓扑绝缘体性质研究中。通过该方法的应用，我们希望能够更深入地理解拓扑绝缘体的物理性质，并为拓扑绝缘体的应用提供理论支持。

## 主要内容

本文首先介绍了拓扑绝缘体的基本概念和性质，以及Z2拓扑数的定义和计算方法。然后，我们提出了一种新的基于第一性原理计算的Z2拓扑数计算方法，并详细阐述了该方法的原理和步骤。接着，我们将该方法应用于实际材料体系的拓扑绝缘体性质研究中，包括计算材料的能带结构、态密度、自旋极化等物理性质，并分析其与Z2拓扑数的关系。最后，我们总结了本文的主要研究成果和创新点，并展望了未来的研究方向和应用前景。



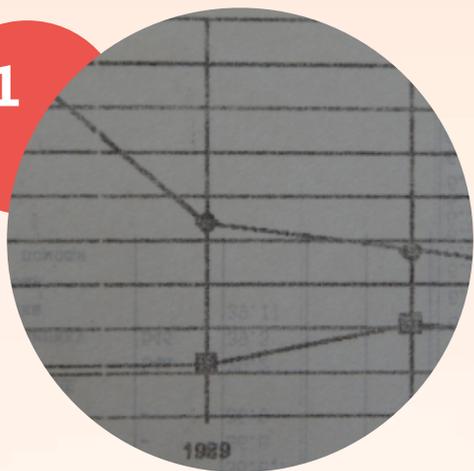
## PART 02



# 拓扑绝缘体系统基本理论

# 拓扑绝缘体的定义和性质

01

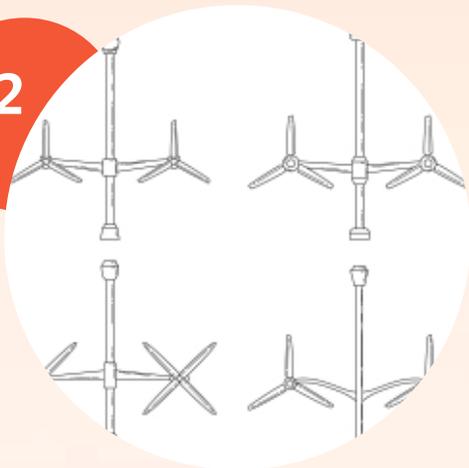


## 拓扑绝缘体



一种具有特殊能带结构的量子态物质，其内部是绝缘的，但边缘或表面却允许电荷无耗散地传输。

02

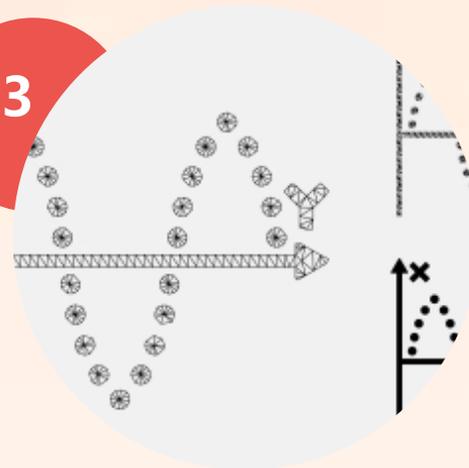


## 拓扑性质



拓扑绝缘体的性质不依赖于材料的细节，而是由其能带结构的全局拓扑性质决定。

03

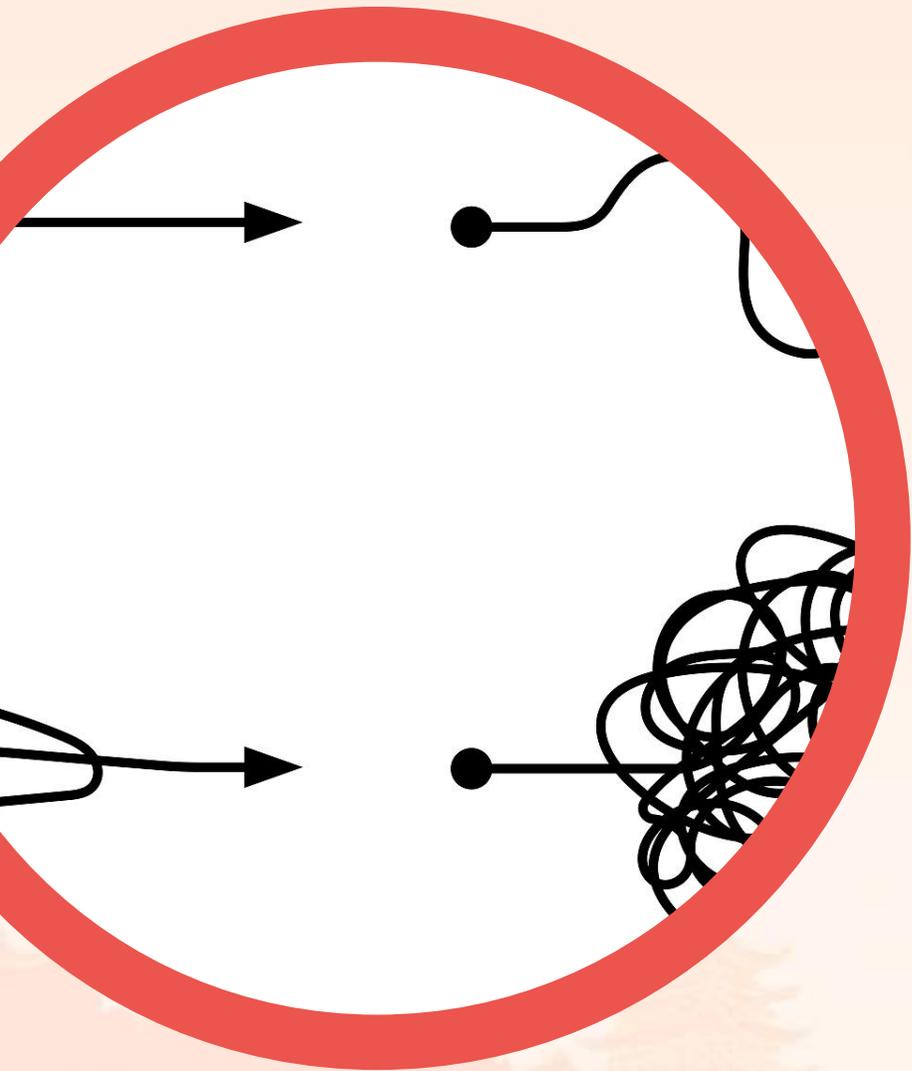


## 时间反演对称性



拓扑绝缘体通常具有时间反演对称性，即其电子态在时间反演下保持不变。

# 拓扑绝缘体的分类和特点



01

## 二维拓扑绝缘体

具有量子自旋霍尔效应，其边缘态为无质量狄拉克费米子。

02

## 三维拓扑绝缘体

表面态为无能隙的二维狄拉克费米子，具有自旋纹理和自旋动量锁定等特点。

03

## 强拓扑绝缘体和弱拓扑绝缘体

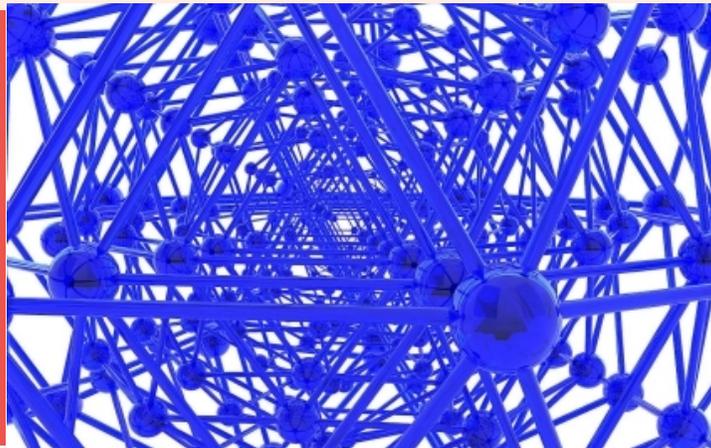
根据体能带结构的拓扑稳定性，可分为强拓扑绝缘体和弱拓扑绝缘体。



# 拓扑绝缘体在凝聚态物理中的地位和作用

## 新物态的发现

拓扑绝缘体的发现揭示了凝聚态物质中一类全新的量子态，丰富了我们物质世界的认识。



## 未来技术应用

拓扑绝缘体的特殊性质使其在自旋电子学、量子计算等领域具有潜在的应用价值，对未来的科技发展具有重要意义。



## 拓扑物态的研究

拓扑绝缘体的研究推动了凝聚态物理中拓扑物态领域的发展，为探索新的物理现象和规律提供了重要平台。



## PART 03



# Z2拓扑数的计算方法及 优化

# 传统Z2拓扑数计算方法的回顾与总结

## 回顾传统方法

传统的Z2拓扑数计算方法主要基于Pfaffian函数和Berry曲率，通过复杂的数值计算得到结果。

## 总结传统方法

传统方法虽然可以计算出Z2拓扑数，但计算过程复杂，计算量大，且对于某些复杂系统难以应用。





# 新的Z2拓扑数计算方法的提出与实现



## 提出新方法

我们提出了一种基于机器学习的Z2拓扑数计算方法，通过训练神经网络模型来预测Z2拓扑数。



## 实现过程

首先，我们构建了一个包含大量拓扑绝缘体样本的数据集，并计算了它们的Z2拓扑数作为标签。然后，我们设计了一个深度学习模型，并使用该数据集进行训练。训练完成后，我们可以使用该模型来预测新样本的Z2拓扑数。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：  
<https://d.book118.com/107004133061006130>