

自旋空间群的枚举和表示理论

陈晓冰 刘奇航[†]

(南方科技大学物理系 深圳 518055)

2024-10-02收到

[†] email: liuqh@sustech.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20241007

CSTR: 32040.14.wl20241007

1 背景介绍

对称性是物理学中历史最悠久的概念之一，从经典物理学，到量子力学、粒子物理、凝聚态物理等分支，对称性分析都是其中的有力工具。系统存在某个对称性，在数学特别是几何学上表示为系统在经历某种变换后仍与变换前的系统重合，而在物理学中则表现为系统的状态量(包括拉格朗日量、哈密顿量等)及其运动方程在经历某种变换前后不发生改变，因此对称性也被称为不变性。诺贝尔奖获得者杨振宁先生将对称性与量子化和相位因子并列为20世纪以来物理学发展的主旋律；著名物理学家安德森教授也曾提出“稍微夸张地说，研究物理就是研究对称性”的观点^[1]。

描述对称性的数学语言是群论，是一种在19世纪初由伽罗瓦和阿贝尔等人首先提出的一种代数结构。而早在19世纪末，科学家们就已经开始探索晶体的对称性，并发展出一套描述晶体固体性质和行为的基本框架，即晶体群理论，包括32个晶体点群和230个晶体空间群^[2]。晶体群理论的核心是描述三维非磁或顺磁性固体所有的对称元素，包括旋转、反演、反射、平移以及它们的组合。在20世纪上半叶，科学家们开始意识到除了几何对称性外，磁性材料还表现出了额外的对称性。这些对称性与材料内部的原子或离子内禀的自旋自由度有关。20世纪中叶，晶体学家 Alexei V. Shubnikov 等人将使自旋翻转的反对称操作引入空间群，用于磁性材料的对称性分析，并提出了磁性点群和磁性空间群^[2, 3]。晶体群和磁群理论的建立不仅帮助研究人员理解了晶体中的诸多特性，还推动了固体物理学、半导体科学乃至材料工程等领域的飞速发展。

尽管磁群理论被认为是描述所有磁有序材料几何特征及其物理性质的普适理论，但随着对磁性材料更深入的研究，人们逐渐意识到需要一个更加全面的群来完全表征磁有序材料的几何形状和物理性质^[4-7]。这源于自旋磁矩作为材料的内禀自由度，具有可旋转的轴矢量属性。因此，自旋空间的对称操作在不考虑与晶格耦合的情况下，可以独立于晶格对称操作而存在。一个典型的例子是晶体中的顺磁—铁磁相变对应的是自旋 $SU(2)$ 旋转对称性的破缺。而在磁群中，自旋和晶格的转动是严格锁定在一起的。如果要完整描述磁有序材料的构型，需要将晶格和自旋空间的对称操作分开考虑(图1)，从而构成一个更庞大的群——自旋群，包括自旋点群和自旋空间群。

晶体群和磁群理论已完整建立了数十年，并早已被写入了教科书。相比之下，对自旋群，尤其是自旋空间群基本理论的研究，国内外仍处于刚起步的阶段。目前，与自旋群相关的研究主要是基于自旋点群。1977年，宾夕法尼亚大学的 Daniel B. Litvin 团队穷举了598种自旋点群^[7]。2022年，南方科技大学刘奇航研究组完成了共线、共面和非共面磁结构的自旋点群分类^[8]，并预言和观测到了自旋空间群保护的 Z_2 拓扑相和新

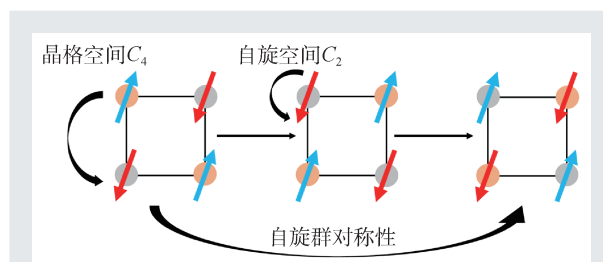


图1 一种磁群并不存在的自旋群对称性：实空间中晶格的四度旋转联合自旋空间中自旋的二度旋转

型准粒子^[8-10]。2022年,德国美因茨大学的Libor Šmejkal研究组利用自旋点群定义了一类具有动量空间自旋劈裂的共线反铁磁——交错磁体^[11]。2024年,南方科技大学刘奇航与刘畅研究组合作首次观测到反铁磁体中的自旋劈裂现象^[12]。近期,南方科技大学刘奇航研究组完成了自旋空间群的枚举并发展了自旋空间群的表示理论^[13],为更深入地理解和进一步探索磁性材料中出现的演生现象开辟了道路。

2 自旋空间群的枚举

由于包含晶体平移和自旋旋转的耦合,自旋空间群的枚举和分类研究更加具有挑战性。相比于自旋点群,自旋空间群由于允许任意的平移扩胞,导致自旋空间不再只允许2、3、4和6重转动,因此理论上也存在无穷多个自旋空间群。我们从230个晶体空间群和最大阶数为8的有限平移群出发(即允许磁结构导致的8倍扩胞),遍历了所有晶体空间群的不等价的正规子群,并通过不等价的同构关系建立它们与自旋空间中描述自旋分布的点群的映射。

表1展示了最终枚举得到的非平庸自旋空间群的晶系和磁结构分类,包括1421个共线自旋群和100612个可以描述共线、共面和非共面磁结构的自旋空间群。与磁空间群相比,自旋空间群具有更多的对称性,可以得到更多磁结构的几何信息。例如我们发现立方晶系的自旋空间群可以允许共线磁结构,同时在三方和六方晶系中允许非共面磁结构。为了更便于应用自旋空间群理论,我们为所有自旋空间群开发了国际符号,可以从

表1 不同晶系和磁结构支持的非平庸自旋空间群^[13]

晶系	共线	非共线	总数
三斜(2)	5	55	60
单斜(13)	78	3540	3618
正交(59)	503	53734	54237
四方(68)	502	31185	31687
三方(25)	83	2393	2476
六方(27)	137	7260	7397
立方(36)	113	1024	1137
总数(230)	1421	99191	100612

中获得具体的对称操作信息^[13]。此外,开发了在线程序FINDSPINGROUP (findspingroup.com)^[14],它能够识别任何磁有序晶体的自旋群和磁群对称性以及相关物理效应,例如自旋劈裂、反常霍尔效应、量子几何^[15]等。我们也识别了MAGNDATA磁性材料数据库^[16]中2001个公度磁结构的磁性材料的自旋空间群,并提供了一些典型的非常规磁性材料,如199个交错磁体和268个非共线自旋劈裂反铁磁体的完整列表^[13]。

3 自旋空间群的表示理论

自旋空间群的完整枚举不仅可以更全面地描述磁结构,还可以用于描述自旋轨道耦合效应较小的电子能带结构。我们在自旋空间群框架内推导出高对称波矢小群的不可约共表示。利用基于对易算符完全集方法的投影表示理论^[17]和修改的特征标求和规则^[13, 18],构造了支持非共线(共面和非共面)磁构型的自旋空间群的能带表示。另一方面,由于自旋群中存在连续任意转动操作,因此共线自旋空间群的能带表示被单独考虑。共线自旋空间群中 $SO(2)$ 自旋旋转对称性的存在为自旋简并和能带表示提供了一个更简单的视角,即可以从II型磁空间群的单值共表示出发,通过自旋空间中的一些额外简并规则获得。

为了验证表示理论,我们还提供了几种代表性材料来展示它们的自旋空间群对称性和超出磁空间群框架的物理特性。例如在具有自旋翻转(U)联合分数平移(τ)对称性的共面反铁磁体 $CeAuAl_3$ 中发现了螺旋序诱导的反铁磁自旋劈裂,如图2(a), (b)所示。此外,在不具有时间反演(T)联合空间反演(P)对称性的非共面反铁磁体 $CoNb_3S_6$ 中(图2(c))观察到了全动量空间自旋简并的电子能带结构。这种自旋简并来源于任意波矢的自旋空间中的 D_2 双群,提供二维共表示并禁止任何自旋极化分量。之后还给出了反铁磁自旋劈裂的一般性对称性判据,即任意 k 点小群同时破缺 PT 对称性和自旋空间的 D_n 操作。

我们还从自旋空间群角度阐明了共线和共面

磁体中的反常霍尔效应均是自旋轨道耦合效应引起的。这是因为共线和共面磁体中存在等效时间反演操作 TU ，它对于电导张量的约束和时间反演对称性 T 相同，从而禁止了不依赖于自旋轨道耦合的反常霍尔效应。另一方面，虽然非共面反铁磁体 CoNb_3S_6 具有全空间自旋简并，但其自旋空间群的实空间部分的点群 $62'2'$ 允许 z 方向轨道磁矩和几何霍尔电导（即不需要自旋轨道耦合的反常霍尔效应） σ_{xy} 的出现，如图 2(d) 所示。这些结果进一步展示了自旋空间群在理解磁性材料的电子结构和物理性质方面的优势。

4 展望

值得注意的是，与该工作同期发表在 *Physics Review X* 上的还有北京大学宋志达课题组^[19]和中国科学院物理研究所方辰、杨健、中国人民大学刘正鑫课题组^[20]的工作，他们采用不同方法对自旋空间

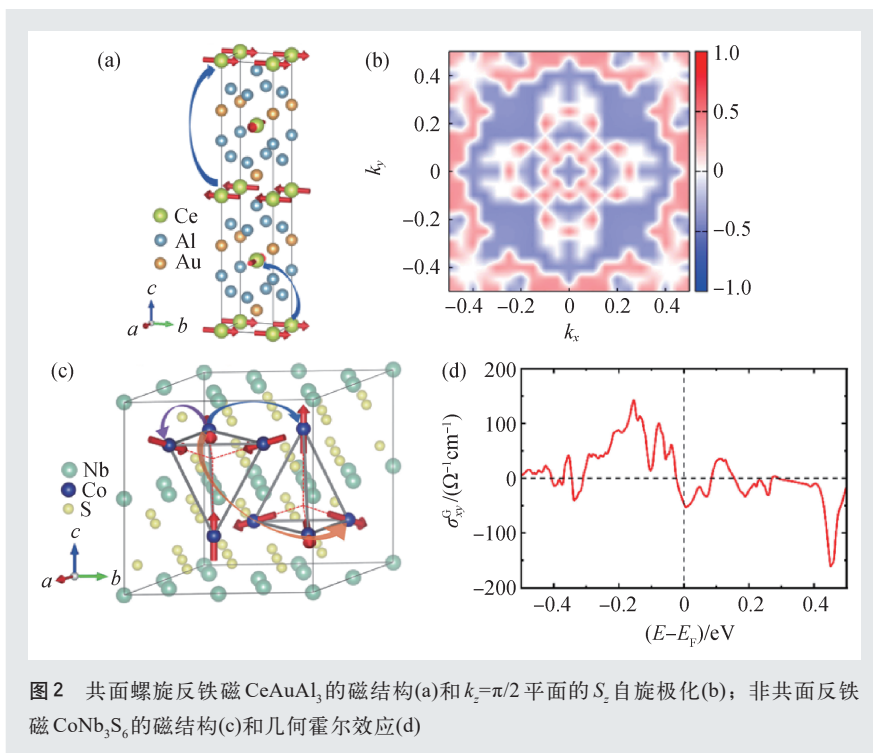


图 2 共面螺旋反铁磁 CeAuAl_3 的磁结构(a)和 $k_z=\pi/2$ 平面的 S_z 自旋极化(b); 非共面反铁磁 CoNb_3S_6 的磁结构(c)和几何霍尔效应(d)

群也进行了系统列举，得到了相似的结果。自旋空间群的完整枚举、分类和能带表示理论的建立，不仅可以更全面地描述磁结构，还提供了依赖于磁交换场的材料设计的新范式。此外，自旋空间群理论的完整建立有望在传统磁性分类上建立依赖于对称性的更严谨和完善的磁性分类，开启异于传统铁磁体和反铁磁体的“非常规磁体”的新方向，并进一步推动未来新型磁性材料的研发和应用。

参考文献

- [1] Anderson P W. *Science*, 1972, 177: 393
- [2] Bradley C J, Cracknell A P. *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids: Representation Theory for Point Groups and Space Groups*. Oxford University Press, New York, 1972
- [3] Belov N V, Neronova N N, Smirnova T S. *Sov. Phys. Crystallogr.*, 1957, 2: 311
- [4] Naish V E. *Proc. USSR Acad. Sci.*, 1963, 27: 1496
- [5] Brinkman W F, Elliott R J. *Proc. R. Soc. A*, 1966, 294: 343
- [6] Litvin D B, Opechowski W. *Physica (Utrecht)*, 1974, 76: 538
- [7] Litvin D B. *Acta Crystallogr. Sect. A*, 1977, 33: 279
- [8] Liu P, Li J, Han J *et al.* *Phys. Rev. X*, 2022, 12: 021016
- [9] Liu P, Zhang A, Han J *et al.* *Innovation*, 2022, 3: 100343
- [10] Zhang A, Deng K, Sheng J *et al.* *Chin. Phys. Lett.*, 2023, 40: 126101
- [11] Šmejkal L, Sinova J, Jungwirth T. *Phys. Rev. X*, 2022, 12: 031042
- [12] Zhu Y P, Chen X, Liu X R *et al.* *Nature*, 2024, 626: 523
- [13] Chen X, Ren J, Zhu Y *et al.* *Phys. Rev. X*, 2024, 14: 031038
- [14] <https://findspingroup.com>.
- [15] Zhu H, Li J, Chen X *et al.* 2024, arXiv: 2406:03738
- [16] Gallego S V, Perez-Mato J M, Elcoro L *et al.* *J. Appl. Crystallogr.*, 2016, 49: 1750
- [17] Chen J Q, Gao M J, Ma G Q. *Rev. Mod. Phys.*, 1985, 57: 211
- [18] Dimmock J O. *Phys. Rev.*, 1963, 130: 1337
- [19] Xiao Z, Zhao J, Li Y *et al.* *Phys. Rev. X*, 2024, 14: 031037
- [20] Jiang Y, Song Z, Zhu T *et al.* *Phys. Rev. X*, 2024, 14: 031039