

来源：中科院物理研究所 发布时间：2009-3-9 13:56:4

小字号

中字号

大字号

PRL：中美合作提出计算非周期系统的电极化公式

最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室的施均仁研究员与美国University of Texas at Austin的牛谦教授等人合作，提出了计算非周期系统电极化的普适贝里相位公式。文章发表在《物理评论快报》（*Physical Review Letters*, PRL, 102(2009)087602）上。

这一公式适用于计算那些具有大尺度空间结构（如多铁材料中的磁结构）的材料电极化强度。研究还发现，这一公式确定的电极化强度具有一个以第二类陈示性数表征的拓扑不确定度。这一不确定度与一个由含时非空间周期势驱动的绝热电荷泵浦效应有密切的联系。

电极化强度是表征铁电体、压电材料以及最近引起广泛兴趣的多铁材料的重要物性。如何在理论上计算各类材料的电极化性质是一个重要的研究课题。在这一领域的最重要工作是Resta和Vanderbilt等人发展的电极化的贝里相位理论。这一理论将材料电极化的电子贡献与周期系统中电子布洛赫波函数的贝里相位相联系，从而为从头计算固体材料的电极化性质提供了一个普适的方法。然而，这一理论在最近对多铁材料的研究中却无法应用：多铁材料往往存在与材料本身晶体周期结构非公度的磁结构，而且这些结构有很长的周期。如果为了利用前述的贝里相位理论而使用超元胞方法，计算效率将十分低下，而且不准确。

这一公式的确立为计算多铁材料的铁电效应提供了一个新方法。同时该研究也提供了一个由第二类陈示性数表征的拓扑物理过程，即非空间周期势驱动的量子化绝热电荷泵浦效应。

相关研究得到了国家自然科学基金委的资助。

更多阅读

[《物理评论快报》发表论文摘要（英文）](#)

发E-mail给:



打印 | 评论 | 论坛 | 博客

读后感言:

发表评论

相关新闻

《天体物理学杂志》：借助X射线找回部分宇宙丢失...

黄胜年：物理院士诗人情怀

第342次香山会议研讨“宇宙线物理学的若干前沿...

863计划海洋技术领域“地球物理探测”重点项目...

2008物理学：中国科学家光芒闪现

肖锋研究员受邀担任《计算物理杂志》副主编

物理学家王恩哥院士专访：我认为这是值得做的！

《物理评论D》：创建新模型解释宇宙起源

一周新闻排行

2008年最热门论文排名出炉

刘兴土院士就“抄袭剽窃”向举报人道歉

研究称：女人曲线不宜太凹凸

冯端院士：冯康是否既“顶天”又“立地”的讨论

2009年度基金项目申请开始集中受理

六名教授联名投诉刘兴土院士涉嫌抄袭剽窃

美刊盘点搞笑诺贝尔奖十大最受欢迎“科研成果”

《肥胖评论》：女人为何比男人更容易发胖

