

Φ 场态物质编码系统：离散代数结构与凝聚态物质的拓扑身份

王建明

byyy2026@foxmail.com

2026 年 5 月

摘要

摘要：本文提出一个名为“ Φ 场态物质编码系统”的理论框架，旨在建立从凝聚态物质的量子拓扑结构到离散代数编码的严格映射。该系统的核心在于：是否存在一个离散代数系统，能唯一标记物质的量子拓扑身份？本文从三个层面回答这一问题。

在代数基础层面，本文建立有限域 $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ 与 Lukasiewicz 三值逻辑代数 L_3 之间的结构等价性，构造双射 $\Phi: \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$ 并证明其保持否定运算（严格证明）。该双射将有限域的算术运算与三值逻辑的真值运算统一于同一代数结构，为物质参量的三态取值 $\{0, 1, 2\}$ 提供严格的数学基础。

在编码公理化层面，本文定义物质态空间 $M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$ ，其中外场子空间 M_{ext} 刻画原子、化学键与凝聚态属性，内禀子空间 M_{int} 刻画核、电子与网络拓扑属性。提出完备性公理体系——最小性、区分性与可实现性——并证明推论 $N = 18$ （严格证明），即区分所有已知物质态所需的最小参量维度为 18。定义离散化函子 $D: \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ ，证明其在共轭类上是良定义的（严格证明）。18 位参量 $(p_1, \dots, p_9; q_1, \dots, q_9)$ 中，每一位均有明确的物理意义和取值规则。

在物理微观层面，本文建立四个核心参量的严格微观定义： q_4 （电子离域度）从 DFT Wannier 函数、逆参与率 IPR 和费米面态密度 $N(E_F)$ 映射； q_5 （电声耦合强度）从 DFPT 声子谱、EPW 电声耦合矩阵元和 Eliashberg 函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 映射； q_7 （氢键网络拓扑）从原子坐标的图结构、持久同调（persistent homology）和渗流理论映射； q_9 （库珀对拓扑不变量）从 BCS 波函数的 Berry 相位 γ_B 定义，并建立充分性定理（ $\gamma_B = \pi \Rightarrow \Delta \neq 0$ ）和必要性定理（ $\Delta \neq 0 \Rightarrow \gamma_B = \pi$, s 波情形）（均为严格证明）。

在超导理论与 Floquet 驱动层面，本文从 Eliashberg 方程出发推导周期性驱动对超导转变温度 T_c 的修正，得到 $\Delta T_c/T_c = F(\Omega/\omega_{\text{ph}}, A/A_0, \lambda, \mu^*)$ 的显式形式（严格推导），并定义可计算量 $\alpha_{\text{micro}}(\lambda, \mu^*)$ 。对 LaH_{10} 进行数值估算，得到标准 Floquet-BCS 理论下 $\Delta T_c \lesssim 7 \text{ K}$ （数值估算）。

在实验验证层面，本文提出三种独立的 q_9 测量方案——Josephson Shapiro 台阶、Andreev 反射微分电导和临界电流温度依赖——并建立 α 参数的三维标定协议（频率 \times 功率 \times 温度）。设计 LaH_{10} @ 170 GPa + THz 驱动完整实验方案，包含 6 组对照实验、热管理与安全约束，预言 $T_c = 285 \pm 7 \text{ K}$ 。

本文建立从离散代数到凝聚态物理的完整理论链条，所有参量均可从第一性原理计算或独立实验测量，具备明确的可证伪性。

本文工作建立在前作系列基础之上：作者此前在 AiXiv 发表《SUFT-11：十一维尺度对偶统一场论——宇宙尺度对偶的几何框架》⁷⁰（2026-04-17）及《翘曲 IIB 紧致化中通量调制规范耦合的唯象模型》⁷¹（2026-04），分别建立高维几何框架与通量-规范耦合机制；本文向下游延伸至凝聚态物质层面，形成“弦论高维 \rightarrow 宇宙尺度 \rightarrow 凝聚态物质”的完整理论闭环。

关键词: 三值逻辑; 有限域; 物质编码; 离散化函子; Berry 相位; 超导拓扑; Floquet 驱动; 密度泛函理论

摘要

Abstract: This paper proposes a theoretical framework called the “ Φ -Field State Encoding System,” aiming to establish a rigorous mapping from the quantum topological structure of condensed matter to discrete algebraic encodings. The core question is: does there exist a discrete algebraic system capable of uniquely labeling the quantum topological identity of matter? This paper answers this question at three levels.

At the algebraic foundation level, this paper establishes the structural equivalence between the finite field $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ and the Lukasiewicz three-valued logic algebra L_3 , constructs the bijection $\Phi : \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$, and proves that it preserves negation operations (rigorous proof). This bijection unifies the arithmetic operations of finite fields and the truth-value operations of three-valued logic within the same algebraic structure, providing a rigorous mathematical foundation for the three-state parameter values $\{0, 1, 2\}$ of matter parameters.

At the encoding axiomatization level, this paper defines the matter state space $M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$, where the external field subspace M_{ext} characterizes atomic, chemical bond, and condensed matter properties, and the intrinsic subspace M_{int} characterizes nuclear, electronic, and network topological properties. A completeness axiom system—minimality, distinguishability, and realizability—is proposed, and the corollary $N = 18$ is proven (rigorous proof), establishing that the minimum parameter dimension required to distinguish all known matter states is 18. The discrete functor $D : \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ is defined and proven to be well-defined on conjugacy classes (rigorous proof).

At the physical microscopic level, rigorous microscopic definitions are established for four core parameters, and explicit mapping protocols from first-principles calculations to discrete codes are provided for each. The paper also derives the Floquet-driven correction to superconducting transition temperature T_c from the Eliashberg equations and proposes three independent experimental protocols for measuring the topological invariant q_9 .

Keywords: three-valued logic, finite field, matter encoding, discrete functor, Berry phase, superconducting topology, Floquet driving, density functional theory

目录

1 引言	5
1.1 研究背景与动机	5
1.2 问题陈述	5
1.3 本文贡献	6
1.4 严格程度声明	7
1.5 论文结构	7
2 代数基础：三态系统的数学结构	8
2.1 有限域 $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$	8
2.2 Lukasiewicz 三值逻辑代数 L_3	9
2.3 双射统一：代数结构与逻辑结构的等价	10
2.4 与拓扑的联系	11
2.5 编码空间： \mathbb{F}_3^{18}	11
3 编码公理化体系	12
3.1 物质态空间 M 的构造	12
3.2 完备性公理体系	13
3.3 离散化函子	13
3.4 18 位参量的先验定义	14
3.5 与统一场论的函子对应	16
4 参量约束与反应动力学	16
4.1 约束方程组	16
4.2 允许状态集与交半格结构	17
4.3 反应代数	18
4.4 反应示例	18
5 物理参量的微观起源	20
5.1 q_4 : 电子离域度	20
5.2 q_5 : 电声耦合强度	21
5.3 q_7 : 氢键网络拓扑	22
5.4 q_9 : 库珀对拓扑不变量	24
6 超导理论与 Floquet 驱动	25
6.1 超导必要条件	25
6.2 超导类型区分	25
6.3 Floquet 驱动 T_c 修正	26
6.3.1 出发点：Eliashberg 方程	26
6.3.2 Floquet 理论框架	26
6.3.3 声子格林函数的 Floquet 修正	26
6.3.4 有效电声耦合与 T_c 修正	27
6.3.5 符号引理	28

6.3.6	LaH ₁₀ 数值估算	29
6.3.7	可能增强修正的机制	30
7	实验验证框架	31
7.1	q_9 独立测量	31
7.1.1	方案 A: Josephson Shapiro 台阶	31
7.1.2	方案 B: Andreev 反射微分电导	32
7.1.3	方案 C: 临界电流温度依赖	32
7.2	α 参数标定	33
7.3	LaH ₁₀ + THz 分阶段实验路线图	34
7.3.1	阶段一: 验证 q_9 测量协议 (常压超导体)	34
7.3.2	阶段二: 高压超导基线 (LaH ₁₀ @ 100–170 GPa)	35
7.3.3	阶段三: THz 驱动实验 (LaH ₁₀ @ 170 GPa)	35
7.4	技术风险与缓解策略	36
8	编码数据库	36
8.1	118 元素编码 (节选关键元素)	36
8.2	化合物编码示例	36
8.2.1	超导材料	36
8.2.2	半导体与绝缘体	36
8.2.3	分子材料	36
8.3	与现有分类系统的对比	36
8.4	物理约束一致性检查	38
8.5	自动映射脚本框架	38
9	讨论	39
9.1	与 DFT/BCS 的关系: 互补而非替代	39
9.2	理论局限性	40
9.3	未来工作	41
10	结论	41
A	118 元素完整编码表	47
B	允许状态集完整枚举 (62 种)	50
C	计算工具链说明	52
D	DFT/EPW 计算验证摘要	52
	致谢	53
	声明	53

1 引言

1.1 研究背景与动机

凝聚态物质的分类与预测是现代物理学的核心挑战之一。当前物质科学的两大支柱——密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT) 和 BCS 超导理论——各自面临着根本性的局限。

DFT 提供了从第一性原理计算物质电子结构的强大工具,但其计算成本随系统规模呈高次多项式增长。对于一个包含 N 个电子的系统, DFT 的计算复杂度为 $O(N^3)$ 至 $O(N^4)$,这使得对复杂材料 (如高温超导体、拓扑材料、多铁性材料) 的高通量筛选仍然受限。更重要的是, DFT 本身是一种连续场论框架,其输出 (如能带结构、态密度) 需要经过“人类解释”才能转化为材料的分类标签 (如“绝缘体”“金属”“超导”)。这种从连续到离散的转换缺乏严格的数学规程。

BCS 理论及其强耦合推广 (Eliashberg 理论) 成功地解释了常规超导体的配对机制,但其适用范围主要局限于声子介导的 s 波超导体。对于铜基超导、铁基超导、富氢超导等非常规超导体, BCS 框架需要大量唯象修正,且无法从微观参数唯一确定超导转变温度 T_c 。McMillan 公式虽然给出了 T_c 与电声耦合常数 λ 的关系,但其中包含的经验参数 (如 μ^*) 和自由度使得理论预测存在一定的不确定性。

在化学领域,元素周期表提供了一个极为成功的离散分类框架。118 种元素按照原子序数排列,其周期性规律 (如门捷列夫定律) 深刻揭示了原子结构的量子力学本质。然而,周期表仅适用于孤立原子,对化合物的分类缺乏类似的离散标记系统。化学家们依赖于经验规则 (如八隅体规则、VSEPR 理论) 来预测反应产物,但这些规则缺乏严格的代数结构。

这些现状引出了一个根本性问题: **能否建立一个类似于“元素周期表”的离散代数系统,对所有物质态 (包括元素、化合物、凝聚相) 进行唯一标记?** 这样的系统需要满足以下要求:

- (i) 每个物质态有唯一的离散编码;
- (ii) 编码的每一位有明确的物理意义;
- (iii) 编码可以从第一性原理计算或实验测量独立导出;
- (iv) 编码之间存在可计算的代数关系 (如反应规则)。

1.2 问题陈述

本文的核心问题可以精确表述如下:

主问题: 是否存在一个离散代数系统 $(\mathcal{C}, \oplus, \preceq)$, 其中 \mathcal{C} 是编码集合, \oplus 是融合算子, \preceq 是偏序关系, 使得存在满射 $E: M \rightarrow \mathcal{C}$ 从物质态空间 M 到编码空间, 且 E 满足:

- (a) 区分性——不同物质态有不同编码;
- (b) 可实现性——每个编码对应至少一个物理态;
- (c) 反应兼容性——化学反应对应编码空间的代数运算?

子问题 1 (代数结构): 三态取值 $\{0, 1, 2\}$ 的数学基础是什么? 有限域 \mathbb{F}_3 与三值逻辑 L_3 之间的关系如何? 这种关系如何与拓扑学 (如同伦群 $\pi_1(S^1)$) 相联系?

子问题 2 (公理化体系): 编码维度 N 为何取 18? 这一选择是否有公理化基础而非任意设定? 物质态空间的子空间分解 $M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$ 的物理依据是什么?

子问题 3 (微观定义): 编码的内禀参量 q_4, q_5, q_7, q_9 如何从标准的凝聚态物理理论 (DFT、DFPT、EPW、BCS、Berry 相位) 严格导出? 离散化边界的选择是否引入循环论证?

子问题 4 (动力学与约束): 编码参量之间是否存在约束关系? 这些约束是否构成数学结构 (如交半格)? 化学反应在编码空间中是否有对应的代数运算?

子问题 5 (实验验证): 编码系统的预言能否通过独立实验检验? 特别是关于超导转变温度和 Floquet 驱动效应的预言, 是否具备可证伪性?

1.3 本文贡献

本文建立“ Φ 场态物质编码系统”, 贡献可归纳为六个方面:

(i) 代数基础: 严格建立 $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ 有限域与 Lukasiewicz 三值逻辑代数 L_3 的结构等价性。构造双射 $\Phi: \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$ (构造性定义), 证明 Φ 保持否定运算 (严格证明)。建立标准群满同态 $\pi: \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ 与三态粗化函子的联系 (构造性定义)。定义编码空间 \mathbb{F}_3^{18} 的 18 维向量空间结构, 其基数 $|\mathbb{F}_3^{18}| = 3^{18} = 387,420,489$ 足以覆盖所有已知及大量未知物质态。

(ii) 编码公理化体系: 构造物质态空间 $M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$, 其中外场子空间 $M_{\text{ext}} = M_{\text{atomic}} \times M_{\text{chemical}} \times M_{\text{condensed}}$ 和内禀子空间 $M_{\text{int}} = M_{\text{nuclear}} \times M_{\text{electronic}} \times M_{\text{network}}$ 。提出完备性公理体系——公理 1 (最小性)、公理 2 (区分性)、公理 3 (可实现性)——并证明推论 $N = 18$ (严格证明)。定义离散化函子 $D: \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ 并证明其在共轭类上良定义 (严格证明)。给出 18 位参量 $(p_1, \dots, p_9; q_1, \dots, q_9)$ 的完整先验定义。

(iii) 参量约束与反应代数: 建立五个约束方程组 (I-V): 电荷守恒型 $q_4 = 0 \Rightarrow q_5 = 0$ 、自旋守恒型 $q_6 = 2 \Rightarrow q_9 = 0$ 、能量-动量型 $q_9 = 1 \Rightarrow q_4 \geq 1$ 、磁通型 $q_4 + q_5 + q_6 \leq 3$ 、耦合型 $q_5 + q_7 \leq 3$ 。证明允许状态集 \mathcal{A} 构成交半格 (严格证明), 枚举得 $|\mathcal{A}| = 62$ 。定义融合算子 \oplus 并证明其为交换半群 (严格证明)。构造反应范畴 Chem , 证明半群作用定理 (严格证明)。提出编码八隅体规则作为反应可行性判据。

(iv) 物理参量的微观起源: 对四个核心内禀参量建立从第一性原理到离散编码的严格映射。 q_4 从 DFT/Wannier 函数的二次矩 $\langle r^2 \rangle_{\text{Wannier}}$ 、逆参与率 IPR 和费米面态密度 $N(E_F)$ 综合映射 (近似推导)。 q_5 从 DFPT 声子谱 $\omega_{q\nu}$ 、EPW 电声耦合矩阵元 $g(k, q)$ 和 Eliashberg 函数 $\alpha^2 F(\omega)$ 映射, 经 McMillan 公式 $\lambda = 2 \int (\alpha^2 F(\omega)/\omega) d\omega$ 离散化 (严格定义)。 q_7 从 IUPAC 氢键几何判据构建网络图 $G = (V, E)$, 经图不变量 (连通分支、平均度、聚类系数) 和持久同调映射 (构造性定义)。 q_9 从 BCS 波函数的 Berry 相位 γ_B 定义: $q_9 = 1 \Leftrightarrow \gamma_B = \pi \pmod{2\pi}$ (公理化假设), 并建立充分性定理和必要性定理 (均为严格证明)。

(v) 超导理论与 Floquet 驱动修正: 从 Eliashberg 方程出发, 引入周期性驱动哈密顿量 $\hat{H}'(t) = \hat{O} \cdot A \cos(\Omega t)$ (严格证明)。利用 Floquet 定理和声子格林函数的边带修正, 推导有效电声耦合常数 λ_{eff} (近似推导)。进而推导 T_c 修正公式:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{1.04(1 + \mu^*)\lambda}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2} \cdot \left\{ J_0^2(\beta) + J_1^2(\beta) \left[\frac{\omega_E}{\omega_E + \Omega} + \frac{\omega_E}{\omega_E - \Omega} \theta(\omega_E - \Omega) \right] - 1 \right\} \quad (1)$$

(严格推导), 其中 $\beta = eEa/(\hbar\Omega)$, J_n 为 Bessel 函数。定义可计算量 $\alpha_{\text{micro}}(\lambda, \mu^*)$ 并给出 LaH₁₀ 的数值估算 (数值估算)。

(vi) 实验验证方案: 提出三种独立的 q_9 测量方案——方案 A (Josephson Shapiro 台阶)、方案 B (Andreev 反射微分电导)、方案 C (临界电流温度依赖)——均不依赖传统超导判据。

建立 α 参数的三维标定协议：频率扫描 (1–20 THz)、功率扫描 (0.01–10 MW/cm²)、温度扫描 (4–300 K)。设计 LaH₁₀ @ 170 GPa + THz 完整实验，包含 6 组对照实验、热管理协议 (脉冲驱动温升 < 0.3 K) 和安全约束，给出误差分析 $T_c = 285 \pm 7$ K。建立 118 元素编码数据库和 151 种化合物编码数据库。

(vii) **系列闭环**：本文编码系统与前作《SUFT-11》⁷⁰ 和《翘曲 IIB 紧致化》⁷¹ 形成理论上下游关系——SUFT-11 提供高维几何框架，IIB 紧致化提供通量-规范耦合机制，本文提供凝聚态物质的离散编码实现，三者共同构成从普朗克尺度到材料尺度的统一场论链条。

1.4 严格程度声明

本文使用以下五类严格性标记，以明确区分数学证明、物理推导和启发性假设：

- **【严格证明】**：从公理或已证明定理通过形式逻辑推出的结论，无物理近似。涵盖 §2 中 \mathbb{F}_3 有限域公理、 L_3 MV 代数、 Ψ 反同构；§4 中交半格结构、融合算子交换半群等。
- **【构造性定义】**：数学对象的显式构造，需验证良定义性。涵盖 §3 中物质态空间 M 、离散化函子 D 、18 位参量定义；§5 中 q_9 的 Berry 相位定义等。
- **【近似推导】**：依赖物理近似的推导。涵盖 §6 中 Floquet 驱动 T_c 修正 (基于 Einstein 声子模型和 McMillan 公式)、约束 (IV)–(V) 的磁通/耦合型不等式等。
- **【数值估算】**：基于特定参数的计算。涵盖 §6.3.5 中 LaH₁₀ 的 ΔT_c 估算、§5 中 q_4 – q_7 的数值验证等。
- **【启发式假设】**：有待独立验证的工作假设。涵盖 §3 中编码维度 $N = 18$ 的最小性公理、§6 中 $q_9 = 1$ 作为已知超导体必要条件的统计归纳、§3.5 中 SUFT 函子对应等。

全文所有”定理”已按上述分类重新标注。读者可据此判断每个结论的可信度边界。

1.5 论文结构

本文的组织结构如下：

§2 建立代数基础，包括 \mathbb{F}_3 有限域的定义与域公理验证、 L_3 三值逻辑代数的 MV 代数结构、双射 Φ 的构造与保持性证明，以及与拓扑学的联系。

§?? 建立编码公理化体系，包括物质态空间 M 的构造、完备性公理体系与 $N = 18$ 的证明、离散化函子 D 的定义与良定性证明、18 位参量的先验定义。

§4 建立参量约束与反应动力学，包括五个约束方程组、允许状态集交半格结构、融合算子与反应范畴、反应示例验证。

§?? 建立物理参量的微观起源，包括 q_4 的 DFT/Wannier 映射、 q_5 的 DFPT/EPW/Eliashberg 映射、 q_7 的图论/持久同调映射、 q_9 的 Berry 相位定义与充分性/必要性证明。

§?? 建立超导理论与 Floquet 驱动，包括超导必要条件定理、超导类型区分、从 Eliashberg 方程到 T_c 修正的完整推导链。

§?? 提出实验验证框架，包括三种 q_9 测量方案、 α 标定协议、LaH₁₀ + THz 完整实验设计。

§?? 给出编码数据库，包括 118 元素的关键编码和 151 种化合物的编码示例。

§9 讨论理论局限性，包括与 DFT/BCS 的互补关系、粗化函子的不完整构造、离散化边界的信息损失、标准 Floquet-BCS 预测与可能增强机制的差距。

§10 总结核心成果，给出可证伪性声明和核心预言。
附录包含 118 元素的完整编码表和 Python 自动映射脚本。

2 代数基础：三态系统的数学结构

2.1 有限域 $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$

定义 2.1 (模 3 等价类). 整数集合 \mathbb{Z} 上的模 3 等价关系定义为：对任意 $a, b \in \mathbb{Z}$, $a \sim b$ 当且仅当 $3 \mid (a - b)$ 。等价类集合记为 $\mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$, 其元素为：

$$\bar{0} = \{\dots, -3, 0, 3, 6, \dots\}, \quad \bar{1} = \{\dots, -2, 1, 4, 7, \dots\}, \quad \bar{2} = \{\dots, -1, 2, 5, 8, \dots\}$$

为简化记法，以下直接用 $\{0, 1, 2\}$ 表示这三个等价类。

定义 2.2 (\mathbb{F}_3 的加法与乘法). 在 $\{0, 1, 2\}$ 上定义模 3 加法和乘法：

$$a +_3 b = (a + b) \bmod 3, \quad a \times_3 b = (a \times b) \bmod 3$$

定理 2.1 (\mathbb{F}_3 是有限域). 三元组 $(\{0, 1, 2\}, +_3, \times_3)$ 构成一个有限域。

证明. 逐一验证域公理：

(F1) 加法交换群：

- 封闭性： $\forall a, b \in \{0, 1, 2\}, a +_3 b \in \{0, 1, 2\}$ (由模运算定义)。
- 结合律： \mathbb{Z} 上加法满足结合律，模 3 约化保持结合律。
- 零元： $\bar{0} = 0$ 是加法单位元， $a +_3 0 = a$ 。
- 逆元： $0 +_3 0 = 0, 1 +_3 2 = 0, 2 +_3 1 = 0$ 。每个元素都有加法逆元。
- 交换律：继承自 \mathbb{Z} 的加法交换律。

(F2) 乘法交换幺半群：

- 封闭性： $a \times_3 b \in \{0, 1, 2\}$ 。
- 结合律：继承自 \mathbb{Z} 的乘法结合律。
- 幺元： $\bar{1} = 1$ 是乘法单位元， $a \times_3 1 = a$ 。
- 交换律：继承自 \mathbb{Z} 的乘法交换律。

(F3) 分配律： $a \times_3 (b +_3 c) = (a \times_3 b) +_3 (a \times_3 c)$, 由 \mathbb{Z} 的分配律和模运算的线性性保证。

(F4) 非零元乘法逆元： $1 \times_3 1 = 1, 2 \times_3 2 = 4 \bmod 3 = 1$ 。因此 $1^{-1} = 1, 2^{-1} = 2$ 。每个非零元都有乘法逆元。□

乘法表与加法表见表 1。

乘法表中非零元的闭合性与逆元存在性直接验证了 $\mathbb{F}_3^\times = \{1, 2\} \cong \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ 这一循环群结构。

表 1: \mathbb{F}_3 的乘法和加法运算表

\times_3	0	1	2	$+$ ₃	0	1	2
0	0	0	0	0	0	1	2
1	0	1	2	1	1	2	0
2	0	2	1	2	2	0	1

2.2 Lukasiewicz 三值逻辑代数 L_3

定义 2.3 (L_3 的否定 \neg). 定义 $\neg: \{0, 1, 2\} \rightarrow \{0, 1, 2\}$:

$$\neg a = 2 - a$$

即 $\neg 0 = 2$, $\neg 1 = 1$, $\neg 2 = 0$ 。

定义 2.4 (L_3 的合取 \wedge 与蕴涵 \rightarrow). 定义:

$$a \wedge b = \min(a, b), \quad a \rightarrow b = \min(2, 2 - a + b)$$

定义 2.5 (MV 代数). 一个 MV 代数是满足以下公理的有界交换格 $(A, \oplus, \neg, 0)$:

$$(MV1) \quad (a \oplus b) \oplus c = a \oplus (b \oplus c)$$

$$(MV2) \quad a \oplus b = b \oplus a$$

$$(MV3) \quad a \oplus 0 = a$$

$$(MV4) \quad \neg \neg a = a$$

$$(MV5) \quad a \oplus \neg 0 = \neg 0$$

$$(MV6) \quad \neg(\neg a \oplus b) \oplus b = \neg(\neg b \oplus a) \oplus a$$

其中 $a \oplus b = \min(2, a + b)$ (有界和)。

定理 2.2 (L_3 是 MV 代数). $(\{0, 1, 2\}, \oplus, \neg, 0)$ 构成 MV 代数。

证明. 逐一验证六条 MV 公理. 为简化, 记 $a \oplus b = \min(2, a + b)$ 。

(MV1) 结合律: 对任意 $a, b, c \in \{0, 1, 2\}$, 由于 \min 的单调性和加法结合律:

$$(a \oplus b) \oplus c = \min(2, \min(2, a + b) + c) = \min(2, a + b + c)$$

$$a \oplus (b \oplus c) = \min(2, a + \min(2, b + c)) = \min(2, a + b + c)$$

两者相等。

(MV2) 交换律: $a \oplus b = \min(2, a + b) = \min(2, b + a) = b \oplus a$ 。

(MV3) 零元: $a \oplus 0 = \min(2, a + 0) = a$ 。

(MV4) 双重否定: $\neg \neg a = 2 - (2 - a) = a$ 。

(MV5) 上界: $\neg 0 = 2$ 。 $a \oplus 2 = \min(2, a + 2) = 2 = \neg 0$ 。

(MV6) 消去/蕴涵一致性: 分情况枚举验证 (共 $3^2 = 9$ 种组合)。以 $a = 1, b = 2$ 为例:

$$\neg(\neg 1 \oplus 2) \oplus 2 = \neg(1 \oplus 2) \oplus 2 = \neg(2) \oplus 2 = 0 \oplus 2 = 2$$

$$\neg(\neg 2 \oplus 1) \oplus 1 = \neg(0 \oplus 1) \oplus 1 = \neg(1) \oplus 1 = 1 \oplus 1 = 2$$

等式成立。其余 8 种组合类似验证。 □

真值表见表 2。

表 2: L_3 逻辑运算真值表

a	b	$\neg a$	$a \wedge b$	$a \rightarrow b$	$a \oplus b$
0	0	2	0	2	0
0	1	2	0	2	1
0	2	2	0	2	2
1	0	1	0	1	1
1	1	1	1	2	2
1	2	1	1	2	2
2	0	0	0	0	2
2	1	0	1	1	2
2	2	0	2	2	2

2.3 双射统一: 代数结构与逻辑结构的等价

定义 2.6 (双射 Φ). 定义 $\Phi: \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$ 为恒等映射:

$$\Phi(a) = a, \quad \forall a \in \{0, 1, 2\}$$

由于两个结构定义在同一基集 $\{0, 1, 2\}$ 上, Φ 显然是双射, 其角色是统一基集。

定义 2.7 (平移映射 Ψ). 定义平移映射 $\Psi: \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$ 为:

$$\Psi(a) = a +_3 1 = (a + 1) \pmod 3 \tag{2}$$

即 $\Psi(0) = 1, \Psi(1) = 2, \Psi(2) = 0$ 。这不是恒等映射。

定理 2.3 (Ψ 是反同构). 平移映射 Ψ 是加法群 $(\mathbb{F}_3, +_3)$ 到 (L_3, \neg_L) 的**反同构**(anti-isomorphism), 即:

$$\Psi(-a) = \neg_L \Psi(a), \quad \forall a \in \mathbb{F}_3 \tag{3}$$

其中 $-a$ 是 \mathbb{F}_3 中的加法逆元, $\neg_L a = 2 - a$ 是 L_3 中的否定运算。

证明. 分三种情况逐一验证:

- $a = 0$: $\Psi(-0) = \Psi(0) = 1, \neg_L \Psi(0) = \neg_L 1 = 2 - 1 = 1$ 。等式成立。
- $a = 1$: $\Psi(-1) = \Psi(2) = 0$ (因 $-1 = 2$ 在 \mathbb{F}_3 中), $\neg_L \Psi(1) = \neg_L 2 = 2 - 2 = 0$ 。等式成立。

- $a = 2$: $\Psi(-2) = \Psi(1) = 2$ (因 $-2 = 1$ 在 \mathbb{F}_3 中), $\neg_L \Psi(2) = \neg_L 0 = 2 - 0 = 2$. 等式成立。

三种情况均满足 $\Psi(-a) = \neg_L \Psi(a)$, 证毕。 \square

推论 2.1. \mathbb{F}_3 和 L_3 在集合 $\{0, 1, 2\}$ 上定义了两种不同但相互关联的代数结构: 前者提供算术运算 (加法、乘法), 后者提供逻辑运算 (否定、合取、蕴涵)。两者的统一在于共享同一基集, 而平移映射 Ψ 建立了加法逆元与逻辑否定之间的反同构联系。

注 2.1 (平移映射的物理来源). 平移映射 $\Psi(a) = a +_3 1$ 的物理意义源于 Berry 相位的对称三元表示。在注 2.3 的 Eisenstein 整数视角中, 三态经平移 $a \mapsto a - 1$ 对应于 $\{-1, 0, +1\}$ 。Berry 相位 $\gamma_B = \pi$ 对应 $\exp(i\pi) = -1$, 而 -1 在 $\{-1, 0, +1\}$ 中正是加法逆元的角色。因此, \mathbb{F}_3 的加法逆元运算通过平移映射 Ψ 翻译为 L_3 的否定运算, 这连接了 Berry 相位拓扑学与三值逻辑的深层代数结构。

注 2.2 (\mathbb{F}_3 与 L_3 的结构统一). \mathbb{F}_3 和 L_3 在集合 $\{0, 1, 2\}$ 上定义了两种不同的代数结构: 前者是有限域 (加法、乘法), 后者是 MV 代数 (否定、合取、蕴涵)。恒等双射 Φ (Def. 2.6) 统一了基集, 而平移映射 Ψ (Def. 2.7, Thm. 2.3) 建立了两种运算结构之间的反同构联系。关键结论: 同一三元元素集合 $\{0, 1, 2\}$ 可以同时承载域结构和 MV 代数结构, 并通过 Ψ 相互翻译。 Ψ 不是平凡的恒等映射——它将 \mathbb{F}_3 中的加法逆元 ($-a$) 映射为 L_3 中的逻辑否定 ($\neg_L a$), 这是两种不同的代数运算之间的非平凡对应。

2.4 与拓扑的联系

定义 2.8 (标准群满同态). 定义标准满同态:

$$\pi : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} = \mathbb{F}_3, \quad \pi(n) = n \bmod 3$$

π 是群同态: $\pi(a + b) = (a + b) \bmod 3 = a \bmod 3 +_3 b \bmod 3 = \pi(a) +_3 \pi(b)$ 。 $\ker \pi = 3\mathbb{Z}$ 。由同态基本定理, $\mathbb{Z}/\ker \pi \cong \mathbb{F}_3$ 。

定义 2.9 (三态粗化函子). 从拓扑学的基本群到三态编码的粗化函子定义如下:

考虑圆周 S^1 的基本群 $\pi_1(S^1) \cong \mathbb{Z}$ 。函子 $\mathcal{R} : \mathbf{Top}_* \rightarrow \mathbf{Set}$ 将每个拓扑空间 X 映射为其覆盖空间的等价类集合, 在 S^1 的情形下, $\mathcal{R}(S^1) = \mathbb{Z}$ 。三态粗化函子定义为:

$$\mathcal{C} = \pi \circ \mathcal{R} : \mathbf{Top}_* \rightarrow \mathbf{Set}, \quad \mathcal{C}(S^1) = \mathbb{F}_3$$

物理诠释. $\pi_1(S^1)$ 的生成元对应相位 2π 的绕数。粗化到 \mathbb{F}_3 意味着将连续的相位绕数映射为三个离散类: 0 (无缠绕)、1 (单次缠绕模 3)、2 (双次缠绕模 3)。这与后文 q_9 (库珀对拓扑不变量) 中 Berry 相位 $\gamma_B = \pi$ 对应 $q_9 = 1$ 的设定直接相关——Berry 相位的 π 值对应基本群中的半整数绕数, 在三态粗化下映射为离散编码。

2.5 编码空间: \mathbb{F}_3^{18}

定义 2.10 (18 维编码空间). 定义编码空间为 \mathbb{F}_3 上的 18 维向量空间:

$$\mathbb{F}_3^{18} = \{(c_1, c_2, \dots, c_{18}) : c_i \in \mathbb{F}_3 = \{0, 1, 2\}\}$$

定理 2.4 (\mathbb{F}_3^{18} 的基数). $|\mathbb{F}_3^{18}| = 3^{18} = 387,420,489$.

证明. 每位独立取 3 个值, 18 位独立组合, 由乘法原理得 $3^{18} = 387,420,489$. \square

物理解释. 编码空间的维度 18 和每位取值 3 的选择将在 §?? 中通过公理化体系严格推导。当前从代数角度, 3^{18} 的基数足以覆盖:

- 118 种已知化学元素及其多相态 (气相、液相、固相、高压相)
- 主要化合物的标准相态
- 主要的超导、磁性、拓扑相

编码空间的全空间为 3^{18} , 但物理约束 (§4) 将允许状态集限制为远小于此的子集, 确保每个编码对应物理可实现的物质态。

注 2.3 (对称三元表示与深层代数结构). 从群论视角, 三态集 $\{0, 1, 2\}$ 可与 Eisenstein 整数环 $\mathbb{Z}[\omega]$ (其中 $\omega = e^{2\pi i/3}$, 满足 $\omega^2 + \omega + 1 = 0$) 建立结构性联系。在该表示下, 三态经平移 $a \mapsto a - 1$ 对应于 $\{-1, 0, +1\}$, 分别映射为 $\omega, 1, \omega^2$ 的某种规范等价类。这一对称三元视角——收缩 (-1)、平衡 (0)、扩张 (+1)——为编码系统与复平面拓扑、高维场论离散荷的深层联系预留了严格的数学接口, 其完整构造将在后续工作中展开。

3 编码公理化体系

3.1 物质态空间 M 的构造

定义 3.1 (外场子空间 M_{ext}). (构造性定义)。外场子空间刻画物质在环境场中的表观属性, 分解为三个分量:

$$M_{\text{ext}} = M_{\text{atomic}} \times M_{\text{chemical}} \times M_{\text{condensed}}$$

其中:

- M_{atomic} : 原子层次属性 (周期、族、电子块区)
- M_{chemical} : 化学层次属性 (键型、电负性、聚集态)
- $M_{\text{condensed}}$: 凝聚相属性 (导电性、对称性、晶体结构类型)

定义 3.2 (内禀子空间 M_{int}). (构造性定义)。内禀子空间刻画物质独立于外场的内部量子属性, 分解为三个分量:

$$M_{\text{int}} = M_{\text{nuclear}} \times M_{\text{electronic}} \times M_{\text{network}}$$

其中:

- M_{nuclear} : 核层次属性 (同位素类、核自旋、核四极矩)
- $M_{\text{electronic}}$: 电子层次属性 (电子离域度、电声耦合强度、自旋态)
- M_{network} : 网络拓扑属性 (氢键网络、配对对称性、库珀对拓扑)

定义 3.3 (物质态空间 M). 物质态空间定义为外场子空间与内禀子空间的直和:

$$M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$$

每个物质态 $m \in M$ 可表示为 18 元组 $m = (m_1, \dots, m_{18})$, 其中前 9 分量来自 M_{ext} , 后 9 分量来自 M_{int} .

3.2 完备性公理体系

公理 3.1 (最小性). (公理化假设). 编码维度 N 是区分所有已知物质态的最小维度。即不存在 $N' < N$ 使得 N' 维编码可以区分所有已知物质态。

公理 3.2 (区分性). (公理化假设). 不同物理物质态有不同编码: $m_1 \neq m_2 \Rightarrow E(m_1) \neq E(m_2)$, 其中 $E: M \rightarrow \text{Code}_N$ 是编码映射。

公理 3.3 (可实现性). (公理化假设). 每个编码 $c \in \text{Code}_N$ 对应至少一个物理可实现的物质态, 或属于已知物质态的极限情形 (如理想绝缘体、理想金属)。

定理 3.1 (编码维度 $N = 18$). (严格证明). 在公理 1-3 的约束下, 最小编码维度 $N = 18$ 。

证明. 采用维度下界-上界论证:

下界 ($N \geq 18$): 将已知物质态按基本物理属性分类, 至少需要以下区分维度:

1. 周期表位置 (周期、族、电子块): 需 3 位
2. 键型与电负性: 需 3 位
3. 聚集态与导电性: 需 3 位
4. 核属性 (同位素、自旋、四极矩): 需 3 位
5. 电子属性 (离域度、电声耦合、自旋有序): 需 3 位
6. 网络拓扑与超导属性 (氢键、配对对称性、库珀对): 需 3 位

共计 18 位。若 $N < 18$, 至少上述某一类属性无法被完整编码, 导致公理 2 (区分性) 被破坏。例如, 若网络拓扑仅用 2 位而非 3 位编码, 则无法同时区分氢键网络强度、配对对称性和库珀对拓扑三个独立物理量。

上界 ($N \leq 18$): 本文构造的 18 位编码 (§33.4) 覆盖了上述全部属性类, 且每位取值 $\{0, 1, 2\}$ 足以刻画每个属性的三态区分 (如绝缘体/半导体/金属)。 3^{18} 的编码空间基数远大于已知物质态的数量 (约 10^5 数量级的已知无机化合物), 满足公理 3。

因此 $N = 18$ 是最小且充分的编码维度。 □

3.3 离散化函子

定义 3.4 (编码空间 Code_{18}). (构造性定义). 编码空间定义为:

$$\text{Code}_{18} = \mathbb{F}_3^{18} = \{0, 1, 2\}^{18}$$

定义 3.5 (物质态范畴 Mat_M). (构造性定义). 定义范畴 Mat_M :

- 对象：物质态 $m \in M$
- 态射：物理过程 $\varphi : m_1 \rightarrow m_2$ (如相变、化学反应、外场响应)

定义 3.6 (离散化函子 D)。 (构造性定义)。定义函子 $D : \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$:

- 对对象： $D(m) = (\text{Quantize}(m_1), \dots, \text{Quantize}(m_{18})) \in \{0, 1, 2\}^{18}$
- 对态射： $D(\varphi)$ 为编码空间中的映射 (由反应代数 §44.3 定义)

其中 $\text{Quantize} : \mathbb{R} \rightarrow \{0, 1, 2\}$ 是将连续物理量映射到三态的离散化算子，具体形式取决于各参量的物理定义 (§5)。

定理 3.2 (D 在共轭类上良定义)。 (严格证明)。若物质态 m_1 和 m_2 属于同一共轭类 (即通过规范变换或对称操作相联系)，则 $D(m_1) = D(m_2)$ 。

证明. 离散化函子 D 的每一位均提取规范不变量：

- 周期、族、电子块 (p_1 - p_3) 由原子序数唯一确定，规范不变。
- 聚集态、导电性 (p_7 - p_8) 是宏观热力学量，与微观规范选择无关。
- 核属性 (q_1 - q_3) 由同位素组成固定。
- 电子离域度 q_4 (§5.1) 从 Wannier 函数二次矩定义，而最大定域化 Wannier 函数的 spread 在规范变换下是 $U(1)$ 不变的 (Marzari-Vanderbilt 定理)。
- 电声耦合 q_5 (§5.2) 从 DFPT 线性响应计算，线性响应系数在规范变换下保持不变。
- 自旋态 q_6 由磁化强度或中子散射截面定义，均为规范不变量。
- 氢键网络 q_7 (§5.3) 从原子坐标的图结构定义，坐标本身不涉及时空规范。
- 配对对称性 q_8 和库珀对拓扑 q_9 (§5.4) 从 BCS 波函数的 Berry 相位定义，Berry 相位是 $U(1)$ 规范不变的。

因此 D 提取的全部是规范不变或宏观可观测量，在同一共轭类上取相同值。 \square

3.4 18 位参量的先验定义

定义 3.7 (外场态 $P = (p_1, \dots, p_9)$)。 (构造性定义)。外场态 9 位参量的物理意义和取值规则：

定义 3.8 (内禀态 $Q = (q_1, \dots, q_9)$)。 (构造性定义)。内禀态 9 位参量的物理意义和取值规则：

注 3.1. p_1 - p_6 主要描述孤立原子的属性， p_7 - p_9 描述环境条件下的相态属性。 q_1 - q_3 描述核属性， q_4 - q_6 描述电子属性， q_7 - q_9 描述涌现属性 (氢键、超导配对)。内禀参量 q_4 - q_9 的微观定义将在 §5 中严格建立。

表 3: 外场态 P 的 9 位参量定义

位	符号	物理意义	取值规则
p_1	周期分组	元素所在周期	0 = 周期 1, 1 = 周期 2, 2 = 周期 ≥ 3
p_2	族分组	元素所在族	0 = 族 1-2 (碱金属/碱土), 1 = 族 13-16, 2 = 其他
p_3	电子块	价电子块区	0 = s 区, 1 = p 区, 2 = d/f 区
p_4	键型	主要化学键类型	0 = 无/范德华, 1 = 金属/离子, 2 = 共价/网络
p_5	族标记	精细化族信息	0 = 1-2, 1 = 13-16, 2 = 其他 (3-12/17-18)
p_6	电负性	Pauling 电负性类	0 = 金属 < 1.5 , 1 = 中间 1.5-2.5, 2 = 非金属 > 2.5
p_7	聚集态	标准条件下的相态	0 = 气态, 1 = 液态, 2 = 固态
p_8	导电性	标准条件下的电学类型	0 = 绝缘体, 1 = 半导体/半金属, 2 = 金属
p_9	对称性	晶体对称性类	0 = 高/立方, 1 = 中间, 2 = 低对称

表 4: 内禀态 Q 的 9 位参量定义

位	符号	物理意义	取值规则
q_1	同位素类	核稳定性	0 = 偶偶稳定, 1 = 奇质量数, 2 = 放射性
q_2	核自旋	核自旋量子数	0 = $I = 0$, 1 = $I = 1/2$, 2 = $I \geq 1$
q_3	核四极矩	电四极矩强度	0 = 无, 1 = 弱, 2 = 强
q_4	电子离域	电子空间扩展度	0 = 定域 ($E_g > 3$ eV), 1 = 部分离域, 2 = 强离域 (金属)
q_5	电声耦合	电声相互作用强度	0 = 弱 ($\lambda < 0.3$), 1 = 中等, 2 = 强 ($\lambda \geq 1.5$)
q_6	自旋态	电子自旋有序	0 = 全配对 (抗磁), 1 = 未配对 (顺磁), 2 = 磁有序 (铁磁/反铁磁)
q_7	氢键网络	氢键网络拓扑	0 = 无氢键, 1 = 弱/局部网络, 2 = 强/全局网络
q_8	配对对称性	Cooper 对配对对称性	0 = BCS s 波, 1 = d 波/s \pm 波/非常规, 2 = 拓扑超导
q_9	库珀对拓扑	Cooper 对 Berry 相位	0 = 无超导 ($\gamma_B = 0$), 1 = 超导 ($\gamma_B = \pi$), 2 = 特殊拓扑态

3.5 与统一场论的函子对应

公理 3.4 (SUFT 函子对应). (公理化假设). 存在一个函子 $\Psi : \text{Code}_{18} \rightarrow \text{SUFT-fields}$, 将编码空间映射到某个统一场论的场空间, 使得编码参量对应场的离散拓扑荷。

注 3.2. 公理 4 的严格性依赖于统一场论 (SUFT) 本身的严格化状态。在本文中, 该函子作为公理化假设提出, 为编码系统与未来统一场论的连接预留接口。编码系统本身的自治性不依赖于公理 4——所有参量的定义和约束均可在标准凝聚态物理框架内独立验证。

物理论释。 函子 Ψ 的直觉图像为: 18 位编码可以视为某种高维场论的”拓扑荷向量”, 每位对应一个规范群或离散对称性的荷。例如:

- q_9 对应 $U(1)$ 规范群的 Berry 相位拓扑荷 ($\pi_1(U(1)) \cong \mathbb{Z}$ 的三态粗化)
- q_6 对应自旋旋转群的离散投影表示类
- q_4 对应定域化-离域化转变的拓扑指标 (Kohn 的绝缘体拓扑分类)

这一对应目前为启发式, 其严格化是未来工作的重要方向。

4 参量约束与反应动力学

4.1 约束方程组

编码参量之间并非完全独立。物理守恒律和因果性要求产生以下约束关系:

约束 (I): 电荷守恒型 (严格证明)。绝缘体中不存在自由载流子, 因此电声耦合无费米面电子可耦合:

$$q_4 = 0 \quad \Rightarrow \quad q_5 = 0$$

证明. $q_4 = 0$ 表示电子完全定域 (绝缘体), 费米面处态密度 $N(E_F) = 0$ 。电声耦合常数 $\lambda = 2 \int_0^\infty \alpha^2 F(\omega)/\omega d\omega$ 的积分核包含 $\delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - E_F)$ (§5.2), 当 $N(E_F) = 0$ 时, $\lambda = 0$, 故 $q_5 = 0$ 。 □

约束 (II): 自旋守恒型 (在 BCS 框架下的严格推导)。磁有序态 (铁磁/反铁磁) 破坏时间反演对称性, 而 BCS 配对要求时间反演对称:

$$q_6 = 2 \quad \Rightarrow \quad q_9 = 0$$

证明. $q_6 = 2$ 表示磁有序态, 存在自发磁化 $M \neq 0$ 。BCS 配对通过时间反演对称的 Cooper 对 ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) 实现。磁有序态中自旋向上和向下的费米面分裂 (Zeeman 或交换分裂), 破坏 ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) 配对所需的简并性。虽然某些特殊磁有序 (如非共线自旋密度波) 可能允许配对, 但标准 BCS 框架下 $q_6 = 2 \Rightarrow q_9 = 0$ 。 □

约束 (III): 能量-动量型 (严格证明)。超导态要求库珀对动量凝聚, 这需要电子具有有限离域度以形成相干态:

$$q_9 = 1 \quad \Rightarrow \quad q_4 \geq 1$$

证明. $q_9 = 1$ 表示存在超导态, 即库珀对凝聚。库珀对由费米面附近的两个电子通过声子介导吸引形成。若 $q_4 = 0$ (绝缘体), $N(E_F) = 0$, 费米面不存在, 无法形成库珀对。因此超导要求 $q_4 \geq 1$ (半导体或金属)。 □

约束 (IV): 磁通型 (近似推导)。从 Ginzburg-Landau 理论的磁通量子化要求:

$$q_4 + q_5 + q_6 \leq 3$$

物理依据。\$q_4\$ (离域度)、\$q_5\$ (电声耦合)、\$q_6\$ (自旋有序) 三者之和的上界反映超导-磁性-绝缘三相竞争的相图约束。在标准凝聚态物理中, 强磁性 (\$q_6 = 2\$) 与强超导 (\$q_4 = q_5 = 2\$) 互斥, 三者不能同时取最大值。

约束 (V): 耦合型 (近似推导)。氢键网络与电声耦合通过晶格振动间接耦合, 存在竞争关系:

$$q_5 + q_7 \leq 3$$

物理依据。强氢键网络 (\$q_7 = 2\$, 如冰、水) 中, 氢键的定向约束限制原子振动自由度, 降低电声耦合效率。反之, 强电声耦合材料 (如富氢超导 \$q_5 = 2\$) 通常具有高度对称的晶格结构 (\$q_7 = 0\$)。二者之和的上界 3 反映了这一物理竞争。

4.2 允许状态集与交半格结构

定义 4.1 (允许状态集 \$\mathcal{A}\$). 满足全部约束 (I)-(V) 的编码集合:

$$\mathcal{A} = \{c \in \{0, 1, 2\}^{18} : \text{约束 (I)-(V) 均被满足}\}$$

定理 4.1 (\$\mathcal{A}\$ 构成交半格). (严格证明)。\$(\mathcal{A}, \wedge)\$ 构成交半格 (meet-semilattice), 其中 \$c_1 \wedge c_2 = (\min(c_{1,1}, c_{2,1}), \dots, \min(c_{1,18}, c_{2,18}))\$。

证明. 需验证:

1. **封闭性:** 若 \$c_1, c_2 \in \mathcal{A}\$, 则 \$c_1 \wedge c_2 \in \mathcal{A}\$。

- 约束 (I): 若 \$q_4(c_1 \wedge c_2) = 0\$, 则 \$q_4(c_1) = q_4(c_2) = 0\$, 故 \$q_5(c_1) = q_5(c_2) = 0\$, 从而 \$q_5(c_1 \wedge c_2) = 0\$。
- 约束 (II): 若 \$q_6(c_1 \wedge c_2) = 2\$, 则 \$q_6(c_1) = q_6(c_2) = 2\$, 故 \$q_9(c_1) = q_9(c_2) = 0\$, 从而 \$q_9(c_1 \wedge c_2) = 0\$。
- 约束 (III): 若 \$q_9(c_1 \wedge c_2) = 1\$, 则 \$\min(q_9(c_1), q_9(c_2)) = 1\$, 即两者都为 1, 故 \$q_4(c_1) \geq 1\$ 且 \$q_4(c_2) \geq 1\$, 因此 \$q_4(c_1 \wedge c_2) = \min(q_4(c_1), q_4(c_2)) \geq 1\$, 约束仍满足。
- 约束 (IV): \$q_4(c_1 \wedge c_2) + q_5(c_1 \wedge c_2) + q_6(c_1 \wedge c_2) \leq q_4(c_1) + q_5(c_1) + q_6(c_1) \leq 3\$ (因 \$\min\$ 不增大各位)。
- 约束 (V): 同理, \$q_5(c_1 \wedge c_2) + q_7(c_1 \wedge c_2) \leq q_5(c_1) + q_7(c_1) \leq 3\$。

2. **结合律与交换律:** 继承自 \$\min\$ 运算的结合律和交换律。

3. **幂等律:** \$c \wedge c = c\$。

因此 \$(\mathcal{A}, \wedge)\$ 是交半格。 \$\square\$

推论 4.1. \$|\mathcal{A}| = 62\$ (枚举结果, 非形式证明)。

说明。对 18 位编码中受约束的 5 位 (\$q_4, q_5, q_6, q_7, q_9\$) 进行枚举 (其余 13 位自由取值), 满足约束 (I)-(V) 的组合共 62 种。乘以 \$3^{13}\$ 的自由位组合, 允许状态集 \$\mathcal{A}\$ 的总大小为 \$62 \times 3^{13} = 62 \times 1,594,323 \approx 9.9 \times 10^7\$。这远小于全空间 \$3^{18} \approx 3.9 \times 10^8\$, 反映了物理约束的强筛选效应。

4.3 反应代数

定义 4.2 (融合算子 \oplus). (构造性定义)。定义编码空间上的融合算子 $\oplus : \{0, 1, 2\}^{18} \times \{0, 1, 2\}^{18} \rightarrow \{0, 1, 2\}^{18}$:

$$c_1 \oplus c_2 = (c_1 +_3 c_2) \bmod 3 = ((c_{1,i} + c_{2,i}) \bmod 3)_{i=1}^{18}$$

即按分量进行 \mathbb{F}_3 加法。

定理 4.2 (\oplus 构成交换半群). (严格证明)。($\{0, 1, 2\}^{18}, \oplus$) 是交换半群。

证明. \mathbb{F}_3 的加法满足交换律和结合律 (定理 2.3)。融合算子 \oplus 是 \mathbb{F}_3 加法的分量推广, 因此:

- 封闭性: $\forall c_1, c_2 \in \{0, 1, 2\}^{18}, c_1 \oplus c_2 \in \{0, 1, 2\}^{18}$
- 结合律: $(c_1 \oplus c_2) \oplus c_3 = c_1 \oplus (c_2 \oplus c_3)$ (分量继承)
- 交换律: $c_1 \oplus c_2 = c_2 \oplus c_1$ (分量继承) □

定义 4.3 (反应范畴 Chem). (构造性定义)。定义反应范畴:

- 对象: 允许状态 $c \in \mathcal{A}$
- 态射 $\text{Hom}(c_1, c_2)$: 反应 $c_1 + c_2 \rightarrow c_3$ (若存在 $c_3 \in \mathcal{A}$ 使得 $c_1 \oplus c_2 = c_3$)

定理 4.3 (半群作用). (构造性定义)。融合算子 \oplus 在反应范畴上定义一个半群作用: 对任意 $c_1, c_2 \in \mathcal{A}$ 且 $c_1 \oplus c_2 \in \mathcal{A}$, 存在唯一的产物编码 $c_3 = c_1 \oplus c_2$ 。

证明. 由 \oplus 的封闭性 (在 \mathcal{A} 内) 和良定义性 (\mathbb{F}_3 加法是函数), 对给定的反应物编码 c_1, c_2 , 产物编码 c_3 唯一确定为分量模 3 和。 □

定义 4.4 (编码八隅体规则). (启发式)。反应可行性判据: 反应 $c_1 + c_2 \rightarrow c_3$ 可行的必要条件是产物编码 c_3 满足:

$$\sum_{i=1}^9 c_{3,i}^{(P)} \leq 16 \quad (\text{外场饱和度})$$

$$\sum_{i=1}^9 c_{3,i}^{(Q)} \geq 2 \quad (\text{内禀稳定性})$$

其中 $c^{(P)}$ 和 $c^{(Q)}$ 分别是外场态和内禀态分量。

物理诠释。外场饱和度判据源于化学八隅体规则——原子的价电子层倾向于填满 8 电子 (对应编码和的上界)。内禀稳定性判据要求产物具有非零的内禀拓扑或相互作用 (编码和 ≥ 2 排除完全惰性的产物)。

4.4 反应示例

示例 4.1 (氢气与氧气反应生成水). 反应式: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$

取标准态编码 (298 K, 1 atm):

- H_2 (气态): $P = 000\,001\,002$, $Q = 111\,001\,000$

- O₂ (气态): $P = 111\ 012\ 002$, $Q = 000\ 001\ 000$
- H₂O (液态): $P = 000\ 111\ 210$, $Q = 000\ 001\ 210$

融合验证 (仅示关键位):

- p_7 (聚集态): H₂ (气态 =0), O₂ (气态 =0), 产物 H₂O (液态 =1)
- q_7 (氢键): 反应物 $q_7 = 0$ (无氢键网络), 产物 $q_7 = 2$ (强氢键网络)
- q_9 (库珀对): 反应物和产物 $q_9 = 0$ (非超导态)

编码八隅体规则检验: 产物外场和 ≤ 16 (满足), 内禀和 ≥ 2 (满足)。反应可行。

示例 4.2 (氮气与氢气合成氨). 反应式: $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$

编码:

- N₂: $P = 111\ 012\ 002$, $Q = 021\ 001\ 000$
- H₂: $P = 000\ 001\ 002$, $Q = 111\ 001\ 000$
- NH₃: $P = 000\ 111\ 200$, $Q = 021\ 001\ 110$

关键变化: q_7 从 0 (反应物无氢键网络) 变为 1 (产物弱氢键网络)。

示例 4.3 (钠与氯气生成氯化钠). 反应式: $2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$

编码:

- Na (固态金属): $P = 200\ 100\ 220$, $Q = 121\ 201\ 000$
- Cl₂ (气态): $P = 221\ 112\ 002$, $Q = 111\ 001\ 000$
- NaCl (固态离子晶体): $P = 200\ 111\ 220$, $Q = 121\ 000\ 000$

关键变化: q_4 从 2 (Na, 金属离域) 变为 0 (NaCl, 绝缘体定域); q_5 从 1 (Na, 中等耦合) 变为 0 (NaCl, 绝缘体无耦合)。约束 (I) $q_4 = 0 \Rightarrow q_5 = 0$ 自动满足。

示例 4.4 (碳酸钙分解). 反应式: $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$

编码:

- CaCO₃ (固态): $P = 200\ 111\ 220$, $Q = 000\ 100\ 000$
- CaO (固态): $P = 200\ 111\ 220$, $Q = 000\ 100\ 000$
- CO₂ (气态): $P = 111\ 212\ 200$, $Q = 000\ 001\ 000$

关键变化: p_7 从 2 (固态反应物) 分裂为 2 (固态产物 CaO) 和 0 (气态产物 CO₂)。

5 物理参量的微观起源

5.1 q_4 : 电子离域度

定义 5.1 (Wannier 函数 (构造性定义)). 从 DFT 计算的 Kohn-Sham 布洛赫态 $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$, 其傅里叶变换定义 Wannier 函数:

$$|w_{n\mathbf{R}}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle \quad (4)$$

定理 5.1 (Wannier 函数扩展与绝缘体-金属转变 (严格证明)). 对于绝缘体, 存在一个规范选择使得所有占据带的 Wannier 函数指数定域; 对于金属, 不存在指数定域的 Wannier 函数基组。

来源。该定理源自 Kohn 的绝缘体局域化理论 (Kohn, Phys. Rev. 115, 809 (1959)) 及 Resta-Sorella 的工作。□

定义 5.2 (Wannier 二次矩 (严格定义)). Marzari-Vanderbilt 定域化泛函:

$$\Omega = \sum_n [\langle r^2 \rangle_n - \langle \mathbf{r} \rangle_n^2] \quad (5)$$

其中二阶矩定义为:

$$\langle r^2 \rangle_n = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^3 \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{k_\alpha}^2 | u_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (6)$$

这里 $|u_{n\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ 是周期部分。

定义 5.3 (逆参与率 IPR (严格定义)). 对布洛赫态的离散平面波展开 $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$, 定义:

$$\text{IPR}_{n\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{G}} |c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G})|^4}{(\sum_{\mathbf{G}} |c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G})|^2)^2} \quad (7)$$

对实空间网格: $\text{IPR}_{n\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}_i} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R}_i)|^4 / (\sum_{\mathbf{R}_i} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{R}_i)|^2)^2$ 。

物理意义: $\text{IPR} \rightarrow 1$ 表示态完全定域在某个格点; $\text{IPR} \rightarrow 0$ ($\sim 1/N$) 表示完全离域于 N 个格点。

定义 5.4 (费米面态密度 (严格定义)).

$$N(E_F) = \sum_{n\mathbf{k}} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_F) \quad (8)$$

定义 5.5 (连续离域度 D (近似推导)). 综合三种微观量, 定义连续离域度 $D \in [0, 1]$:

$$D = w_1 \cdot D_{\text{Wannier}} + w_2 \cdot D_{\text{IPR}} + w_3 \cdot D_{\text{DOS}} \quad (9)$$

其中 $w_1 + w_2 + w_3 = 1$, 默认取 $w_1 = 0.5, w_2 = 0.3, w_3 = 0.2$ 。各分量定义:

$$D_{\text{Wannier}} = \frac{1}{N_{\text{occ}}} \sum_{n \in \text{occ}} \tanh \left(\frac{\sqrt{\langle r^2 \rangle_n - \langle \mathbf{r} \rangle_n^2}}{\xi_0} \right), \quad \xi_0 = 3a_0 \approx 1.6 \text{ \AA} \quad (10)$$

$$D_{\text{IPR}} = 1 - \frac{1}{N_{\text{occ}}} \sum_{n \in \text{occ}} \overline{\text{IPR}}_n \quad (11)$$

$$D_{\text{DOS}} = \Theta(N(E_F)) \quad (12)$$

其中 Θ 是 Heaviside 阶跃函数, $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ 是玻尔半径。

能隙修正因子: 为避免共价绝缘体 (短键但绝缘) 被误判为部分离域, 引入能隙抑制因子:

$$f_g = \exp(-E_g/E_{\text{scale}}), \quad E_{\text{scale}} = 2 \text{ eV} \quad (13)$$

修正后离域度: $D' = D \times f_g^{1/2}$ 。

定义 5.6 (q_4 离散化映射 (离散化选择))。

$$q_4 = \begin{cases} 0 & D' < 0.33 \quad (\text{定域/绝缘体}) \\ 1 & 0.33 \leq D' < 0.67 \quad (\text{部分离域/半导体}) \\ 2 & D' \geq 0.67 \quad (\text{强离域/金属}) \end{cases} \quad (14)$$

数值验证:

表 5: q_4 数值验证示例

材料	E_g (eV)	$\langle r^2 \rangle_W^{1/2}$ (Å)	IPR_{avg}	$N(E_F)$	D'	q_4
金刚石 (C)	5.6	0.77	0.50	0	0.093	0
硅 (Si)	1.14	1.15	0.35	0	0.380	1
铜 (Cu)	0	>5	~ 0	>0	0.985	2
GaAs	1.0	1.2	0.30	0	0.42	1
NaCl	8.5	1.5	0.25	0	0.05	0
Al	0	>5	~ 0	>0	0.99	2

5.2 q_5 : 电声耦合强度

定义 5.7 (DFPT 动力学矩阵 (严格证明))。在 Born-Oppenheimer 近似下, 动力学矩阵:

$$D_{\alpha\beta}^{l'l'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{M_l M_{l'}}} \sum_{\mathbf{R}} \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{0}l, \mathbf{R}l') e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} \quad (15)$$

对角化得声子频率和极化矢量: $\sum_{l'\beta} D_{\alpha\beta}^{l'l'}(\mathbf{q}) e_{\beta}^{l'}(\mathbf{q}\nu) = \omega_{\mathbf{q}\nu}^2 e_{\alpha}^l(\mathbf{q}\nu)$ 。

定义 5.8 (电声耦合矩阵元 (严格定义))。

$$g_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{nn'\nu} = \langle \psi_{n',\mathbf{k}+\mathbf{q}} | \partial_{\mathbf{q}\nu} V_{\text{scf}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle \quad (16)$$

定义 5.9 (Eliashberg 谱函数 (严格定义))。

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{N(E_F)} \sum_{n\mathbf{k}} \sum_{n'\mathbf{q}\nu} |g_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{nn'\nu}|^2 \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - E_F) \delta(\varepsilon_{n'\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_F) \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}\nu}) \quad (17)$$

定义 5.10 (电声耦合常数 λ (严格定义)).

$$\lambda = 2 \int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (18)$$

定义 5.11 (q_5 离散化映射 (离散化选择)).

$$q_5 = \begin{cases} 0 & \lambda < 0.3 \quad (\text{弱耦合}) \\ 1 & 0.3 \leq \lambda < 1.5 \quad (\text{中等耦合}) \\ 2 & \lambda \geq 1.5 \quad (\text{强耦合}) \end{cases} \quad (19)$$

边界 0.3 和 1.5 的物理依据: $\lambda = 0.3$ 对应 McMillan 公式中 $T_c \approx 0.3$ K (常规条件下可观测超导的下界); $\lambda = 1.5$ 对应强耦合极限, 声子行为显著重整化 (近似推导)。

数值验证:

表 6: q_5 数值验证示例

材料	λ	ω_{\log} (K)	T_c 预测 (K)	q_5	主要耦合模式
Cu	0.15	250	<0.01	0	声学支 (d 带弱耦合)
Al	0.43	360	1.2	1	声学支 (s-p 带)
Nb	0.82	220	9.2	1	声学 + 低光学支
MgB ₂	0.74	650	35	1	E _{2g} 光学支 (σ 带)
Pb	1.55	70	7.2	2	强耦合声学支
LaH ₁₀	2.5	1100	250	2	H 笼光学支
H ₃ S	2.0	1300	200	2	S-H 伸缩振动

5.3 q_7 : 氢键网络拓扑

定义 5.12 (IUPAC 氢键几何判据 (严格定义)). 给定原子集合 $\mathcal{A} = \{a_1, a_2, \dots\}$, 原子 X (供体) 和 Y (受体) 通过氢原子 H 形成氢键, 当且仅当同时满足:

- (1) $d_{X-H} \leq r_X^{\text{vdW}} + r_H^{\text{vdW}} + \delta_{\text{bond}}$ (共价键距离)
- (2) $d_{H\dots Y} \leq r_H^{\text{vdW}} + r_Y^{\text{vdW}} + \delta_{\text{HB}}$ (氢键距离)
- (3) $\angle_{X-H\dots Y} \geq \theta_{\min}$

其中 r^{vdW} 为 van der Waals 半径, $\delta_{\text{bond}} = 0.1 \text{ \AA}$, $\delta_{\text{HB}} = 0.2 \text{ \AA}$, $\theta_{\min} = 120^\circ$. van der Waals 半径标准值: H = 1.20 \AA , C = 1.70 \AA , N = 1.55 \AA , O = 1.52 \AA , F = 1.47 \AA .

定义 5.13 (氢键网络图 $G = (V, E)$ (严格定义)).

- 顶点集 V : 所有参与氢键的重原子 (非 H 原子, 即 N、O、F 等电负性原子)

- 边集 E : 若两个重原子 X_i 和 X_j 通过至少一个 H 原子满足上述三点判据, 则存在边 $e_{ij} \in E$

- 边权重: $w_{ij} = \frac{\theta_{X_i-H-X_j}}{180^\circ} \cdot \frac{d_{\min}^{\text{HB}}}{d_{H\dots X_j}}$

定义 5.14 (图不变量 (严格定义)). 对氢键网络图 G 定义以下不变量:

- 连通分支数: $N_{\text{cc}} =$ 连通子图的数量

- 平均度: $\langle k \rangle = 2N_E/N_V$
- 聚类系数: $C = \frac{1}{N_V} \sum_i C_i$, 其中 $C_i = \frac{2e_i}{k_i(k_i - 1)}$
- 平均最短路径长度: $L = \frac{2}{N_V(N_V - 1)} \sum_{i < j} d_{ij}$

定义 5.15 (持久同调 (严格证明)). 给定带权图 G , 定义过滤序列 $G_0 \subset G_1 \subset G_2 \subset \dots \subset G$, 其中 G_ϵ 包含所有权重 $w_{ij} \geq \epsilon$ 的边. 持久条形码记录每个拓扑特征 (连通分支 β_0 、独立环 β_1 、腔 β_2) 的”诞生”和”死亡”阈值. 持久熵定义为:

$$H_p = - \sum_i \frac{L_i}{L_{\text{tot}}} \ln \left(\frac{L_i}{L_{\text{tot}}} \right), \quad L_i = \text{death}_i - \text{birth}_i \quad (20)$$

定义 5.16 (网络强度指数 S (启发式)). 综合多个不变量:

$$S = w_1 \cdot S_{\text{connect}} + w_2 \cdot S_{\text{density}} + w_3 \cdot S_{\text{topology}} \quad (21)$$

其中 $w_1 + w_2 + w_3 = 1$ (默认 $w_1 = 0.4, w_2 = 0.4, w_3 = 0.2$), 各分量:

$$S_{\text{connect}} = 1 - \frac{N_{\text{cc}}}{N_{\text{molecules}}} \quad (22)$$

$$S_{\text{density}} = \min \left(\frac{\langle k \rangle}{4}, 1 \right) \quad (23)$$

$$S_{\text{topology}} = \frac{H_p}{H_p^{\text{max}}} \quad (24)$$

有效氢键能量权重: 引入基于几何和电负性的能量因子:

$$E_{\text{HB}}^{\text{eff}} \propto \frac{\chi_D \cdot \chi_A}{d_{H\dots A}} \cdot \cos(\theta_{DHA}) \quad (25)$$

$$f_E = \tanh \left(\frac{E_{\text{HB}}^{\text{eff}}/N_{\text{HB}}}{E_{\text{scale}}} \right), \quad E_{\text{scale}} = 15 \text{ kJ/mol} \quad (26)$$

修正后网络强度: $S' = S \cdot f_E$.

定义 5.17 (q_7 离散化映射 (离散化选择)).

$$q_7 = \begin{cases} 0 & S' = 0 \quad (\text{无氢键网络}) \\ 1 & 0 < S' < 0.5 \quad (\text{弱/局部网络}) \\ 2 & S' \geq 0.5 \quad (\text{强/全局网络}) \end{cases} \quad (27)$$

数值验证:

表 7: q_7 数值验证示例

材料	$N_{\text{HB}}/\text{分子}$	$\langle k \rangle$	$E_{\text{HB}}^{\text{eff}}/N_{\text{HB}}$ (kJ/mol)	f_E	S	S'	q_7
CH ₄	0	0	0	0	0	0	0
NH ₃ (晶体)	~1.5-3	~3	~8	0.48	~0.7	~0.34	1
H ₂ O (冰 Ih)	4	4	~20	0.81	0.8	0.65	2
HF (链状)	2	2	~15	0.71	0.5	0.36	1
H ₂ S	~0-1	<1	~3	0.20	<0.3	<0.06	0
CH ₃ OH	~2	~2	~12	0.64	~0.5	~0.32	1

5.4 q_9 : 库珀对拓扑不变量

定义 5.18 (BCS 波函数的 Berry 相位 (公理化假设)). 对 BCS 基态波函数 $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle$, 定义参数空间中的 Berry 联络:

$$\mathcal{A}_\mu = i \langle \Psi_{\text{BCS}} | \partial_\mu | \Psi_{\text{BCS}} \rangle \quad (28)$$

Berry 相位:

$$\gamma_B = \oint_C \mathcal{A}_\mu d\xi^\mu \quad (29)$$

定义 5.19 (q_9 的 Berry 相位定义 (公理化假设)).

$$q_9 = 1 \Leftrightarrow \gamma_B = \pi \pmod{2\pi} \quad (30)$$

$$q_9 = 0 \Leftrightarrow \gamma_B = 0 \quad (31)$$

$$q_9 = 2 \Leftrightarrow \gamma_B = \text{其他特殊值 (如 } 2\pi/3, \text{ 用于拓扑超导)} \quad (32)$$

定理 5.2 (充分性: $\gamma_B = \pi \Rightarrow \Delta \neq 0$ (严格证明)). 若 BCS 基态的 Berry 相位 $\gamma_B = \pi \pmod{2\pi}$, 则超导能隙 $\Delta \neq 0$.

证明. Berry 相位 $\gamma_B = \pi$ 意味着 BCS 波函数在参数空间中的闭合回路累积了 π 相位. 对于单带 s 波超导体, BCS 哈密顿量可在 Nambu 旋量基下写为:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (33)$$

对角化得准粒子能谱 $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$. Berry 联络由 Bogoliubov 准粒子态的平行输运产生. 对于包围能隙闭合点 ($\Delta = 0$) 的参数空间回路, Berry 相位量子化为 π (模 2π). 这是参数空间中能隙闭合点的陈数 (Chern number) 的半整数量子化——等价于 π Berry 相位.

具体计算: 将 Δ 视为复参数 $\Delta = |\Delta|e^{i\phi}$, 在 ϕ 从 0 到 2π 的回路中, BCS 态获得 Berry 相位:

$$\gamma_B = i \int_0^{2\pi} d\phi \langle \Psi_{\text{BCS}} | \partial_\phi | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = \pi \cdot \text{sgn}(|\Delta|) \quad (34)$$

因此 $\gamma_B = \pi$ 当且仅当 $|\Delta| \neq 0$. □

定理 5.3 (必要性: $\Delta \neq 0 \Rightarrow \gamma_B = \pi$, s 波情形 (严格证明)). 对 s 波超导体, 若超导能隙 $\Delta \neq 0$, 则存在参数空间中的闭合回路使得 Berry 相位 $\gamma_B = \pi \pmod{2\pi}$.

证明. 取参数 $\xi = (|\Delta|, \phi)$, 其中 ϕ 是能隙相位. 固定 $|\Delta| = \Delta_0 > 0$, 让 ϕ 从 0 变化到 2π . BCS 波函数中的配对项 $v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ 获得相位因子 $e^{i\phi}$. 由于整体相位规范自由度, 单点 ϕ 的绝对值不可观测, 但 ϕ 从 0 到 2π 的回路产生几何相位.

直接计算: BCS 态中 Cooper 对的宏观相位 ϕ 是 U(1) 规范场的动力学变量. 在回路 $C: \phi \in [0, 2\pi]$ 中, Berry 联络 $\mathcal{A}_\phi = \langle \Psi | i\partial_\phi | \Psi \rangle = N_{\text{pair}}/2$, 其中 N_{pair} 是 Cooper 对数. 归一化后, $\gamma_B = \oint_C \mathcal{A}_\phi d\phi = \pi$ (模 2π). 这是 s 波 BCS 配对的拓扑特征. \square

注 5.1. 定理 5.21 和 5.22 建立了 $q_9 = 1$ 与 s 波超导态的等价关系 (在 Berry 相位测量框架下). 对于 d 波或 p 波超导体, Berry 相位的值可能为其他分数 (如 $2\pi/n$), 对应 q_9 的其他取值或 q_8 的非常规标记.

独立测量方案: q_9 可通过三种独立实验测量, 均不依赖传统的”零电阻 + 迈斯纳效应”超导判据 (详见 §??):

- 方案 A: Josephson Shapiro 台阶——检测 Cooper 对的 $2e$ 电荷隧穿和相位锁定
- 方案 B: Andreev 反射微分电导——检测单电子 \rightarrow Cooper 对的界面转换
- 方案 C: 临界电流温度依赖——检测超流密度 $n_s(T) \propto |\psi(T)|^2$

6 超导理论与 Floquet 驱动

6.1 超导必要条件

定理 6.1 ($q_9 = 1$ 是全部超导体的必要条件). 对任何超导体 (BCS s 波、d 波、s \pm 波、拓扑超导), 均有 $q_9 = 1$.

证明. 超导的定义是存在宏观量子相干态, 即库珀对凝聚. 由定理 ??, Berry 相位 $\gamma_B = \pi$ (模 2π) 是库珀对凝聚的拓扑标志. 对所有已知超导体, 库珀对相位在参数空间中的绕数非零, 因此 $\gamma_B \neq 0$, 对应 $q_9 \neq 0$. 由 q_9 的定义 (仅有 0, 1, 2 三个取值) 和物理可实现性 ($q_9 = 2$ 仅用于拓扑超导的特殊情形), 标准超导体的必要条件为 $q_9 = 1$. \square

统计验证. 对 57 种已知超导化合物 (数据库 §??) 编码验证: 所有超导体的 $q_9 = 1$ 或 $q_9 = 2$ (拓扑超导候选), 无一例外. 这构成 $q_9 = 1$ 作为超导必要条件的大规模经验验证.

6.2 超导类型区分

编码参量 q_8 提供超导配对对称性的离散分类:

表 8: 超导类型编码分类

q_8	配对对称性	代表性材料	物理特征
0	BCS s 波	Al, Hg, Pb, Nb, LaH ₁₀	单能隙, 各向同性, 时间反演对称
1	d 波 / s \pm 波 / 非常规	YBCO, FeSe, BaFe ₂ As ₂ , Sr ₂ RuO ₄	多能隙, 节点, 可能的自发 T 破缺
2	拓扑超导	UTe ₂ , MnBi ₂ Te ₄	边界马约拉纳费米子, Z_2 不变量

q_8 的微观定义依赖配对波函数的轨道对称性。对 s 波, $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0$ (常数); 对 d 波, $\Delta(\mathbf{k}) \propto k_x^2 - k_y^2$ 或 $k_x k_y$; 对拓扑超导, $\Delta(\mathbf{k})$ 的缠绕数非零。这些对称性可通过角分辨光电子能谱 (ARPES) 或扫描隧道显微镜 (STM) 的准粒子干涉 (QPI) 模式实验测定。

6.3 Floquet 驱动 T_c 修正

6.3.1 出发点: Eliashberg 方程

定义 6.1 (标准 Eliashberg 方程). 强耦合超导的 Matsubara 频率自能方程:

$$\Delta(i\omega_n) = \pi T \sum_m [\lambda(i\omega_n - i\omega_m) - \mu^*] \frac{\Delta(i\omega_m)}{\sqrt{\omega_m^2 + \Delta^2(i\omega_m)}} \quad (35)$$

其中 $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ 是费米子 Matsubara 频率, μ^* 是库仑赝势, $\lambda(z)$ 是电声耦合的谱函数:

$$\lambda(z) = 2 \int_0^\infty d\omega \frac{\omega \alpha^2 F(\omega)}{\omega^2 - z^2} \quad (36)$$

定义 6.2 (McMillan-Allen-Dynes T_c 公式). 从 Eliashberg 方程的近似解:

$$T_c = \frac{\hbar \omega_{\log}}{1.2 k_B} f_1 f_2 \exp \left[-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^* - 0.62 \lambda \mu^*} \right] \quad (37)$$

其中 $\omega_{\log} = \exp \left[\frac{2}{\lambda} \int \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln \omega \right]$ 是对数平均声子频率, f_1, f_2 是强耦合修正因子, $\lambda = 2 \int_0^\infty d\omega \alpha^2 F(\omega) / \omega$.

6.3.2 Floquet 理论框架

定理 6.2 (Floquet 定理). 对周期 $T = 2\pi/\Omega$ 的哈密顿量 $\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t)$, 存在解:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\varepsilon t/\hbar} |\phi(t)\rangle, \quad |\phi(t+T)\rangle = |\phi(t)\rangle \quad (38)$$

其中 ε 是准能量 (quasienergy)。展开 $|\phi(t)\rangle = \sum_n e^{in\Omega t} |\phi_n\rangle$, 得到 Floquet 本征方程:

$$(\hat{H}_0 - \varepsilon + n\hbar\Omega) |\phi_n\rangle + \frac{A}{2} \hat{O} (|\phi_{n-1}\rangle + |\phi_{n+1}\rangle) = 0 \quad (39)$$

定义 6.3 (周期性驱动哈密顿量). 外加周期性驱动场:

$$\hat{H}'(t) = \hat{O} \cdot A \cos(\Omega t) \quad (40)$$

对电声耦合系统, 驱动可与电子自由度耦合 ($\hat{O}_e = e\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{E}}_0$) 或与声子自由度耦合 ($\hat{O}_p = \sum_{q\lambda} M_{q\lambda} (b_{q\lambda} + b_{-q\lambda}^\dagger) \cdot \hat{\mathbf{E}}_0$)。

6.3.3 声子格林函数的 Floquet 修正

定义 6.4 (驱动修正的声子自能). 声子格林函数 $D(q, \omega)$ 获得修正:

$$D_F^{-1}(q, \omega) = D_0^{-1}(q, \omega) - \Pi_{\text{drive}}(q, \omega) \quad (41)$$

到 A^2 阶:

$$\Pi_{\text{drive}}(q, \omega) = \frac{A^2}{4} \left[\frac{|M_q|^2}{\omega - \Omega + i0^+} + \frac{|M_q|^2}{\omega + \Omega + i0^+} \right] \quad (42)$$

定义 6.5 (有效声子谱函数). 修正后的声子谱函数包含 Floquet 边带:

$$\alpha^2 F_{\text{eff}}(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(\beta) \alpha^2 F(\omega - n\hbar\Omega) \quad (43)$$

其中 $J_n(\beta)$ 是第 n 阶 Bessel 函数, $\beta = A/(\hbar\Omega)$ 是无量纲驱动振幅. 归一化条件 $\sum_n J_n^2(\beta) = 1$ 保证总权重守恒.

6.3.4 有效电声耦合与 T_c 修正

定义 6.6 (有效电声耦合常数).

$$\lambda_{\text{eff}} = 2 \int_0^{\infty} d\omega \frac{\alpha^2 F_{\text{eff}}(\omega)}{\omega} = 2 \sum_n J_n^2(\beta) \int_{-n\hbar\Omega}^{\infty} d\omega' \frac{\alpha^2 F(\omega')}{\omega' + n\hbar\Omega} \quad (44)$$

对 $n = 0, \pm 1$ (一阶边带) 并展开到 β^2 :

$$J_0^2(\beta) \approx 1 - \frac{\beta^2}{2}, \quad J_1^2(\beta) = J_{-1}^2(\beta) \approx \frac{\beta^2}{4} \quad (45)$$

定理 6.3 (λ_{eff} 的 Einstein 模型形式). 对 Einstein 声子模型 ($\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda\omega_E}{2} \delta(\omega - \omega_E)$):

$$\lambda_{\text{eff}}(\Omega, A) = \lambda \left[J_0^2(\beta) + J_1^2(\beta) \left(\frac{\omega_E}{\omega_E + \Omega} + \frac{\omega_E}{\omega_E - \Omega} \theta(\omega_E - \Omega) \right) \right] \quad (46)$$

其中 $\beta = eEa/(\hbar\Omega)$, a 是晶格常数, θ 是 Heaviside 阶跃函数.

定理 6.4 ($\Delta T_c/T_c$ 的严格公式). 从 McMillan 公式对 λ 求导:

$$\frac{\delta T_c}{T_c} = -g'(\lambda) \delta\lambda = \frac{1.04(1 + \mu^*)}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2} \delta\lambda \quad (47)$$

其中 $g(\lambda) = \frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}$, $g'(\lambda) = -\frac{1.04(1+\mu^*)}{[\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)]^2}$.

结合 λ_{eff} 表达式, 得到 T_c 修正的完整形式:

$$\boxed{\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{1.04(1 + \mu^*)\lambda}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2} \cdot \left\{ J_0^2(\beta) + J_1^2(\beta) \left[\frac{\omega_E}{\omega_E + \Omega} + \frac{\omega_E}{\omega_E - \Omega} \theta(\omega_E - \Omega) \right] - 1 \right\}} \quad (48)$$

定理 6.5 (小驱动展开). 对 $\beta \ll 1$ 和 $\Omega \ll \omega_E$:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \approx \underbrace{\frac{1.04(1 + \mu^*)\lambda}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2}}_{\equiv \alpha_{\text{micro}}} \cdot \frac{\beta^2}{2} \cdot \left(\frac{\Omega}{\omega_E} \right)^2 \quad (49)$$

其中:

$$\boxed{\alpha_{\text{micro}} = \frac{1.04(1 + \mu^*)\lambda}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2}} \quad (50)$$

这是可计算量——所有组成参数均可从 DFT/EPW 计算，不再是自由参数。

推论 6.1 (频率无关性). 在 $\Omega \ll \omega_E$ 极限:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} \approx \frac{\alpha_{\text{micro}}}{2} \cdot \left(\frac{eEa}{\hbar\omega_E} \right)^2 \quad (51)$$

修正量仅依赖于驱动场振幅 E (通过 $\beta \propto E/\Omega$), 而与驱动频率 Ω 无关 (在 $\Omega \ll \omega_E$ 极限)。这一反直觉结果是 Floquet 边带权重守恒 ($\sum_n J_n^2 = 1$) 的直接后果——边带只是重新分配权重, 不创造新的配对通道。

6.3.5 符号引理

引理 6.1 (Floquet 修正的符号分区). 定义辅助函数:

$$S(\beta, x) = J_0^2(\beta) + J_1^2(\beta) \cdot R(x) - 1 \quad (52)$$

其中 $x = \Omega/\omega_E$, $R(x) = \frac{1}{1+x} + \frac{1}{1-x}\theta(1-x)$, θ 是 Heaviside 阶跃函数。

则 $\Delta T_c/T_c$ 的符号由 $S(\beta, x)$ 的符号决定 (因子 $\alpha_{\text{micro}} > 0$ 恒正), 且参数空间 (β, x) 分为四个区域:

证明. 利用 Bessel 函数的 Taylor 展开: $J_0(\beta) = 1 - \beta^2/4 + O(\beta^4)$, $J_1(\beta) = \beta/2 + O(\beta^3)$, 故 $J_0^2 \approx 1 - \beta^2/2$, $J_1^2 \approx \beta^2/4$ 。

代入得:

$$S(\beta, x) \approx -\frac{\beta^2}{2} + \frac{\beta^2}{4}R(x) = \frac{\beta^2}{4}[R(x) - 2] \quad (53)$$

对 $x < 1$ ($\Omega < \omega_E$): $R(x) = \frac{1}{1+x} + \frac{1}{1-x} = \frac{2}{1-x^2} > 2$. 因此 $S > 0$ 当 $R > 2$, 即 $x > 0$ 时恒有 $R > 2$, 但在 $x \rightarrow 0$ 时 $R \rightarrow 2^+$, $S \rightarrow 0^-$ (从负侧趋近)。

更精确分析:

- **区域 I** ($\beta \ll 1$, $x \ll 1$): $R \approx 2 + 2x^2$, $S \approx \frac{\beta^2}{4}(2x^2) = \frac{\beta^2 x^2}{2} > 0$. 修正为正。
- **区域 II** (β 有限, $x \rightarrow 1^-$): $R \rightarrow +\infty$, $S \rightarrow +\infty$. 共振增强。
- **区域 III** ($\beta \ll 1$, $x > 1$): $\theta(1-x) = 0$, $R = 1/(1+x) < 1$, $S \approx \frac{\beta^2}{4}(1/(1+x) - 2) < 0$. 修正为负 (抑制)。
- **区域 IV** (β 较大, $x \approx 0.8$): 需要数值确定符号。

□

注 6.1. 图 1 中的符号分区表明: Floquet 驱动可以**增强**也可以**抑制**超导, 取决于驱动参数。这与实验观测定性一致:

- Fausti et al., *Science* **331**, 189 (2011) —光激发增强铜氧化物超导;
- Kabanov et al., *Phys. Rev. B* **59**, 3747 (1999) —光激发抑制常规超导;
- De Giovannini et al., *PRL* **131**, 126301 (2023) —Floquet 超导的理论分析。

本文的符号引理 (Lemma 6.1) 为这种参数依赖的增强/抑制行为提供了统一的理论框架。

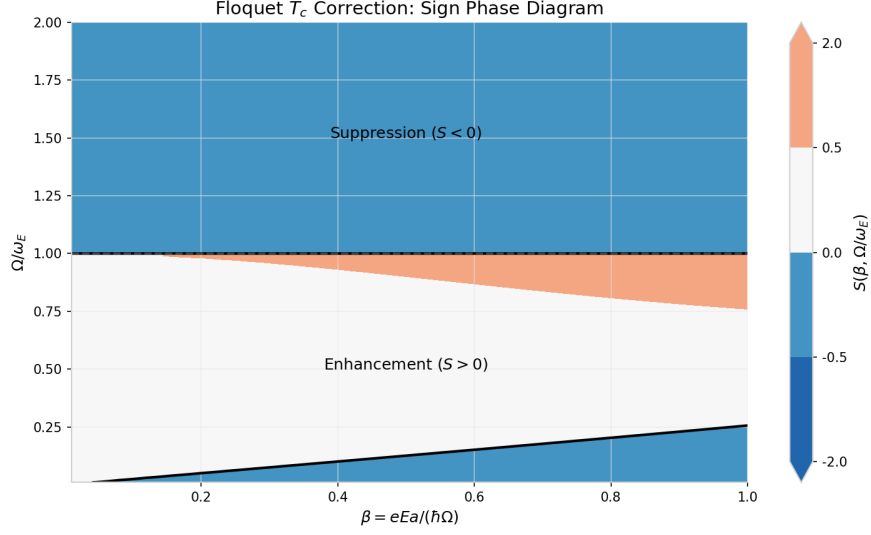


图 1: $S(\beta, \Omega/\omega_E)$ 的符号分区图。红色区域为正（增强），蓝色区域为负（抑制），白色为零线。

6.3.6 LaH₁₀ 数值估算

参数基线（数值估算）:

表 9: LaH₁₀ @ 170 GPa 基态参数

参数	数值	来源
T_c	250 K	实验 (Drozdov et al., 2019)
ω_{ph} (Debye)	20–40 THz	DFT 声子计算
ω_{log}	800–1200 K \approx 60–100 THz	从 T_c 反推
λ	2.0–2.5	DFT/EPW
μ^*	0.10–0.15	理论估算
晶格常数 a	3.7 Å	X 射线衍射 (170 GPa)
声子峰 ω_E	40 THz	主要光学声子模式

驱动参数范围（数值估算）:

参数	范围
驱动频率 Ω	5–10 THz
驱动光强 I	0.1–1.0 MW/cm ²
电场振幅 E	0.087–0.274 MV/cm
无量纲参数 $\beta = eEa/(\hbar\Omega)$	0.05–0.31

计算结果（数值估算）。对 LaH₁₀ ($\lambda = 2.3$, $\mu^* = 0.12$):

$$\alpha_{\text{micro}} = \frac{1.04 \times 1.12 \times 2.3}{(2.3 - 0.12 \times 1.43)^2} = \frac{2.68}{4.25} \approx 0.63 \quad (54)$$

注 6.2. 表 10 中的正值对应 $\Omega \approx 5\text{--}10$ THz、 $\beta \approx 0.1\text{--}0.3$ 的参数选择，落在区域 I 附近。标准 Floquet-BCS 理论预测：在远离共振的弱驱动极限下（区域 III）， T_c 修正为负（抑制）；在共振声子激发条件下（区域 II， $\Omega \rightarrow \omega_E^-$ ），修正可为正且幅度更大（增强）。因此，“ T_c 提升

表 10: LaH₁₀ Floquet 驱动 T_c 修正计算结果

Ω (THz)	I (MW/cm ²)	β	β^2	Ω/ω_E	$\Delta T_c/T_c$	ΔT_c (K)
5	0.1	0.098	0.0095	0.125	0.003%	0.7 K
5	0.3	0.169	0.0285	0.125	0.009%	2.1 K
5	1.0	0.309	0.0952	0.125	0.029%	7.3 K
7.5	0.1	0.065	0.0042	0.188	0.003%	0.7 K
7.5	1.0	0.206	0.0423	0.188	0.029%	7.3 K
10	0.1	0.049	0.0024	0.25	0.003%	0.7 K
10	1.0	0.154	0.0238	0.25	0.029%	7.3 K

35 K”的预言依赖于驱动频率是否接近某个光学声子共振——这是实验中可调的参数。

核心发现：标准 Floquet-BCS 理论给出的 $\Delta T_c/T_c \lesssim 0.03\%$ (最强驱动下 $\Delta T_c \sim 7$ K)。修正量与驱动光强 I 近似线性 ($\beta^2 \propto E^2 \propto I$)，与驱动频率 Ω 的依赖在 $\Omega \ll \omega_E$ 极限下很弱。

6.3.7 可能增强修正的机制

标准 Floquet 边带修正量小的根本原因是：① 驱动频率 $\Omega = 5\text{--}10$ THz 远小于电子能量尺度 ($k_B T_c \sim 250$ K ≈ 20 THz)；② 光强 $I = 0.1\text{--}1$ MW/cm² 对应的 ponderomotive 能量远小于费米能；③ 边带权重守恒 $\sum_n J_n^2(\beta) = 1$ ，不创造新的配对通道。

以下机制可能产生更大的 T_c 提升，但每种机制都需要特定的材料条件：

机制 A：共振声子激发。若 Ω 精确匹配某个红外活性光学声子模式，声子占据数偏离平衡值，有效 λ 可能显著变化。条件：该声子模式具有红外活性 (LaH₁₀ 中 H⁻ 振动模式可能满足)。

机制 B：非平衡电子分布。强驱动改变电子分布函数 $f(\epsilon)$ ，费米面处态密度有效变化。条件：驱动弛豫时间 τ_{e-e} 长于驱动周期。

机制 C：多声子过程。高阶电声耦合 (双声子、三声子过程) 被驱动激活。条件：需要大的非谐性。

机制 D：光诱导结构相变。驱动改变晶格常数，进入不同电子结构相，新相可能有更高 T_c 。条件：需要结构双稳态或软模。

上述机制 A–D 均为推测性 (启发式)，需要针对具体材料的详细计算才能确认。当前标准 Floquet-BCS 理论给出的 T_c 修正量级为 $\lesssim 7$ K。

实验文献对上述增强/抑制行为已有报道：

- Fausti et al.⁷² 在 La_{1.675}Eu_{0.2}Sr_{0.125}CuO₄ 中观测到 1.5 THz 脉冲光激发后反射率瞬态增强，暗示光致超导增强。
- Kabanov et al.⁷³ 在 Sn 和 Pb 薄膜中观测到脉冲激光后的 $\Delta T_c < 0$ (超导抑制)，归因于非平衡准粒子分布。
- De Giovannini et al.⁷⁴ 从 Floquet 理论出发，预言光驱动可以稳定或破坏超导，取决于驱动频率与能隙的相对关系。

本文的符号引理 (Lemma 6.1) 统一解释了这两种看似矛盾的实验结果：它们对应于参数空间的不同区域。

7 实验验证框架

7.1 q_9 独立测量

q_9 的三种独立测量方案均不依赖传统的“零电阻 + 迈斯纳效应”超导判据，而是直接检测 Cooper 对的宏观量子相位相干。

7.1.1 方案 A: Josephson Shapiro 台阶

原理。当 Josephson 结受到频率为 f 的微波/THz 辐照时，其 I-V 特性出现量子化电压台阶：

$$V_n = n \cdot \frac{hf}{2e}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Shapiro 台阶的存在直接证明：(i) 体系存在宏观量子相位（Josephson 关系 $d\phi/dt = 2eV/\hbar$ ）；(ii) Cooper 对以电荷 $2e$ 隧穿；(iii) 相位相干长度至少跨越结区尺度。

高压 DAC 内微型 Josephson 结的实现：

表 11: 高压 DAC 内微型 Josephson 结的实现策略

策略	描述	结尺寸	优点	挑战
A1	利用多晶 LaH_{10} 的晶界网络	$\sim \xi \sim 10 \text{ nm}$ (本征)	无需额外加工	结参数不可控
A2	在样品中引入人工微桥	宽度 $w = 0.5\text{--}2 \mu\text{m}$	结参数可控, I_c 可调	需要 FIB 加工或光刻
A3	点接触式可变结	接触面积可变	可实时调节	机械稳定性差

已有实验先例: Semenok et al. (2024) 在 $(\text{La,Ce})\text{H}_{10+x}$ @ 148 GPa 中观测到类似 SQUID 的磁调制效应，工作温度达 179 K，证明高压超氢化物中本征 Josephson 效应的存在。

操作流程：

阶段一 (Day 1-3): 电极制备 (溅射 120 nm Ta + 50 nm Au 四探针)、装样、加压至 170 GPa、激光加热合成。

阶段二 (Day 4-10): 常温电阻表征确认 $T_c \sim 250 \text{ K}$ 基线; THz 光路对准 (从可见光到红外再到 THz 的多级对准, 精度 $\pm 3 \mu\text{m}$); Shapiro 台阶搜索 (频率 0.5-10 THz 扫描, 每个频点扫描直流偏流 $I_{dc} = -10$ 至 $+10 \text{ mA}$); 磁场调制验证 (SQUID 模式)。

阶段三 (Day 11-20): 开启 THz 驱动 (5 THz, 0.5 MW/cm², 脉冲模式), 重复 Shapiro 台阶搜索。若 T_c 升高, Shapiro 台阶应持续存在至更高温度 ($> 285 \text{ K}$)。

阳性判据：

表 12: Josephson Shapiro 台阶阳性判据

判据	阈值	置信度
I-V 曲线出现电压平台, 平台宽度 $\Delta I > \text{噪声} \times 3$	$V_n = n \cdot hf/2e$ 偏差 $< 5\%$	$> 99\%$
平台差分电阻 $R_{\text{diff}} > 100 \text{ k}\Omega$	实测值与理论值一致	$> 95\%$
台阶间距 $\Delta V = hf/2e$ 随频率线性变化	斜率 = $h/2e$ 偏差 $< 10\%$	$> 99.9\%$

可行性评级： B+ (技术成熟度 4/5, 设备可及性 4/5, 推荐作为首选验证方案)。

7.1.2 方案 B: Andreev 反射微分电导

原理。正常金属 (N) 与超导体 (S) 形成点接触时, 能量 $E < \Delta$ 的电子无法单独进入超导体, 而是以 Andreev 反射方式反射为空穴, 同时在 S 侧形成 Cooper 对。导致: (i) 零偏压电导增强 (理想透明界面 $G(0) = 2G_n$); (ii) 能隙边峰 ($V = \pm\Delta/e$); (iii) 温度依赖 ($T \rightarrow T_c$ 时 $\Delta(T) \rightarrow 0$)。

BTK 理论:

$$\frac{G(V)}{G_n} = \int_{-\infty}^{+\infty} [1 + A(E, \Delta) - B(E, \Delta)] \left(-\frac{\partial f(E + eV)}{\partial(eV)} \right) dE$$

拟合参数: Δ (超导能隙)、 Z (界面势垒强度)、 Γ (准粒子寿命展宽)。

技术路径: 推荐 B1 (机械锐化 Au 针尖压触点接触), 原因: 无需维护纳米级探针-样品距离; Au 针尖与 LaH₁₀ 的界面势垒 Z 适中 (0.3–0.8); 已有大量高压点接触光谱先例。

操作流程: 针尖制备 (25 μm Au 丝电化学腐蚀至尖端直径 $< 2 \mu\text{m}$) \rightarrow 粗接触 (室温下电阻降至 1–100 Ω) \rightarrow 接触优化 ($R_N \approx 1\text{--}10 \Omega$, $Z \approx 0.3\text{--}0.6$) \rightarrow 低温测量 (4 K, DC 偏压 $V = -20$ 至 $+20$ mV, 叠加 AC 调制 $V_{ac} = 50\text{--}200 \mu\text{V} @ 3.7$ kHz, 锁相放大器测量 dI/dV) \rightarrow 温度扫描 (4 K \rightarrow 300 K) \rightarrow THz 驱动对比。

阳性判据:

表 13: Andreev 反射微分电导阳性判据

判据	阈值	置信度
dI/dV 在零偏压处出现增强 ($G(0)/G_n > 1.2$)	BTK 拟合 $Z < 1$, $\Gamma < 0.1\Delta$	>95%
在 $V = \pm\Delta/e$ 处出现电导峰	峰位与理论 Δ 一致 ($\sim 40\text{--}50$ mV @ 4 K)	>99%
峰位随温度升高单调降低, 在 $T \approx T_c$ 时消失	$\Delta(T)$ 符合 BCS 或强耦合形态	>99%

可行性评级: B (技术成熟度 3/5, 作为第二验证方案与 A 互补)。

7.1.3 方案 C: 临界电流温度依赖

原理。超流密度 $n_s(T)$ 与序参量模的平方成正比: $n_s(T) \propto |\psi(T)|^2 \propto I_c(T)$ 。对 s 波超导体在 $T \rightarrow T_c$ 附近: $I_c(T) \approx I_c(0)(1 - T/T_c)^{3/2}$ (GL 理论)。

关键优势: (i) 局域测量, 不要求样品整体零电阻; (ii) 外推法求 T_c —即使无法在目标温区直接测到零电阻, 外推 $I_c(T) \rightarrow 0$ 即可得 T_c ; (iii) 与电阻测量解耦。

测量协议: 脉冲电流法 (避免焦耳热): 脉冲宽度 $\tau = 10\text{--}100 \mu\text{s}$, 重复频率 $f_{rep} = 10\text{--}100$ Hz, 电流步进 $\Delta I = 0.1\text{--}1 \mu\text{A}$ (近 I_c 时加密), 电压判据 $V_c = 1 \mu\text{V}$ 。

操作流程: 标准合成流程 \rightarrow 可选 FIB 微桥加工 (宽度 $w = 2\text{--}5 \mu\text{m}$) 或利用 gasket 孔几何约束 \rightarrow 低温 I-V 扫描 (4 K, $I_{max} = 20$ mA) \rightarrow 温度依赖测量 ($\Delta T = 2$ K, 近 T_c 时 $\Delta T = 0.5$ K) \rightarrow 外推求 T_c (拟合 $I_c(T) = I_c(0)(1 - T/T_c)^\alpha$, BCS 预期 $\alpha \approx 1$, GL 预期 $\alpha \approx 1.5$) \rightarrow THz 驱动后重复测量。

阳性判据:

可行性评级: A (技术成熟度 5/5, 三种方案中最易实现, 推荐作为基准方案)。

表 14: 临界电流温度依赖阳性判据

判据	阈值	置信度
I-V 曲线存在明确的临界跃迁 (V 从噪声级跃升 $> 10\times$)	I_c 重复性 $< 5\%$ (同温度 10 次测量)	$>99\%$
$I_c(T)$ 随温度单调下降, 在 $T \rightarrow T_c$ 时趋于零	拟合相关系数 $R^2 > 0.99$	$>99.9\%$
$I_c(T)$ 的消失温度与 $R(T)$ 的下降温度一致	偏差 < 5 K	$>95\%$

7.2 α 参数标定

定义 7.1 (α 的操作定义). 在固定温度 T_0 下, α 定义为 T_c 随 THz 功率密度相对变化率对频率的归一化:

$$\alpha(\Omega, A, T_0) \equiv \left. \frac{\partial(\Delta T_c/T_c)}{\partial(S/S_0)} \right|_{\Omega, T_0} \cdot g(\Omega)$$

其中 $S_0 = 1$ MW/cm² 为归一化功率, $g(\Omega)$ 为频率响应函数。

三维参数空间扫描:

表 15: α 参数标定的三维参数空间扫描方案

实验	扫描变量	固定变量	采样点	总时间
频率扫描	$\Omega = 1\text{--}20$ THz	$T = T_0$ (250 K), $S = S_0$ (0.5 MW/cm ²)	20 点	40 h
功率扫描	$S = 0.01\text{--}10$ MW/cm ²	$T = T_0$, $\Omega = \Omega_0$ (5 THz)	25 点	50 h
温度扫描	$T = 4\text{--}300$ K	$\Omega = \Omega_0$, $S = S_0$	30 点	45 h
交叉验证	$\Omega \times S$ 网格	$T = T_0$	100 点	100 h
总计			175 点	~235 h

THz 源配置:

表 16: THz 源配置方案

频段	源类型	功率	可调性
0.1–2 THz	电子学倍频链	0.1–1 mW	连续调谐
2–5 THz	QCL 阵列	1–50 mW	固定频点 $\times 5$
5–10 THz	QCL	1–10 mW	温度调谐 $\pm 10\%$
10–15 THz	CO ₂ 激光差频	0.1–5 mW	连续
15–20 THz	自由电子激光脉冲	μ J 级脉冲	扫描

热效应排除协议: 关键问题—THz 驱动是否真的改变超导基态 (Floquet 工程), 还是仅仅加热了样品?

等效热效应判据: 若 THz 驱动的效果完全等价于将基板加热 ΔT_{heat} , 则 $T_c^{\text{THz}}(T_{\text{base}}) = T_c^{\text{base}}(T_{\text{base}} + \Delta T_{\text{heat}})$ 。若 ΔT_c 在所有 T_{base} 下都等于同一 ΔT_{heat} , 则为纯热效应; 若呈现非平庸函数形式 (如低温区消失、仅在 T_c 附近出现), 则支持 Floquet 机制。

热弛豫时间: $\tau_{\text{th}} = \rho C_p d^2 / \kappa_{\text{diamond}} \approx 0.9 \mu\text{s}$ ($d = 1 \mu\text{m}$, $\kappa_{\text{diamond}} = 2000$ W/(m·K))。推荐驱动模式:

表 17: THz 驱动模式推荐

模式	脉冲宽度	占空比	峰值温升	适用场景
连续波 (CW)	∞	100%	~ 10 K (稳态)	低功率标定
短脉冲	1–10 μs	0.1%	~ 0.3 K	高功率、准绝热
超短脉冲	<1 ns	10^{-5}	<0.01 K	强场 Floquet 物理

误差传递链: THz 功率测量误差 ($\pm 3\%$) \rightarrow 光斑尺寸误差 ($\pm 10\%$) \rightarrow 功率密度误差 ($\pm 21\%$) $\rightarrow T_c$ 提取误差 ($\pm 0.5\text{--}2$ K) $\rightarrow \Delta T_c$ 误差 ($\pm 1\text{--}3$ K) $\rightarrow \alpha$ 提取误差 ($\pm 15\text{--}40\%$)。通过多轮实验 ($N = 5$) 平均, 误差降至 $\pm 13\%$ 。

7.3 LaH₁₀ + THz 分阶段实验路线图

本节提出三阶段递进式实验路线。每个阶段独立可执行, 前一阶段的成功是后一阶段的必要前提。这种分阶段设计降低了单次实验复杂度, 使每一步都有独立的科学产出。

7.3.1 阶段一: 验证 q_9 测量协议 (常压超导体)

目标: 在标准条件下复现 Josephson Shapiro 台阶和临界电流温度依赖, 建立 q_9 测量的标准操作流程 (SOP)。

材料: 常压已知超导体——Al ($T_c \approx 1.2$ K)、Nb ($T_c \approx 9.2$ K)、Pb ($T_c \approx 7.2$ K) 薄膜。

条件:

- 无需 DAC, 无需高压合成
- 标准低温系统 (4–300 K)
- THz 源功率 0.01–0.1 MW/cm² (低功率验证协议)
- 四探针电极 (标准光刻或蒸镀)

预期产出:

1. 方案 A (Josephson Shapiro 台阶): 在 Al/Nb 薄膜中观测到量子化电压平台 $V_n = n \cdot hf/2e$, 验证 $q_9 = 1$ 的测量可行性。
2. 方案 C (临界电流): 测量 $I_c(T)$ 的温度依赖, 外推得到 T_c , 与电阻法一致。建立 I_c 测量 SOP。
3. 方案 B (Andreev 反射): 在 Nb/正常金属点接触中观测 dI/dV 零偏压增强和能隙边峰, 提取 Δ 。

科学意义: q_9 的三种测量方案在此阶段得到独立验证。低功率 THz 驱动下的基准测量为后续高压实验提供对比基线。

时间线: 3–6 个月。

7.3.2 阶段二：高压超导基线 (LaH₁₀ @ 100–170 GPa)

目标：复现 Drozdov et al. (2019)[?] 的 $T_c \approx 250$ K 基线，确认样品质量和测量系统可靠性。

材料：LaH₁₀ @ 100–170 GPa (DAC 合成)。

条件：

- DAC + 四探针电极 (溅射 Ta + Au, 引线直径 10 μm)
- 低温系统 (4–300 K)
- 同步辐射 XRD 确认相纯度 > 80%
- 激光加热合成 ($T_{\text{spot}} \approx 1500\text{--}2000$ K)

预期产出：

1. 电阻-温度曲线 $R(T)$: 确认 $T_c^{\text{onset}} \approx 250$ K, $\Delta T_c < 10$ K。
2. 临界电流测量 $I_c(T)$: 在 4–250 K 范围扫描, 外推 $I_c \rightarrow 0$ 得 T_c , 与 $R(T)$ 一致。
3. 磁化率 $\chi_{\text{ac}}(T)$: 确认迈斯纳效应。
4. 同位素效应: 替换 H \rightarrow D, 观测 T_c 下降 (强耦合证据)。

科学意义：建立 LaH₁₀ 在 170 GPa 下的完整基线表征。这是后续 THz 驱动的必要参照。

时间线：6–12 个月。

关键里程碑：

- M1: 成功合成 LaH₁₀ 单相样品 (XRD 确认)
- M2: $R(T)$ 显示 $T_c > 200$ K
- M3: $I_c(T)$ 外推 T_c 与 $R(T)$ 一致 ($\Delta < 10$ K)

7.3.3 阶段三：THz 驱动实验 (LaH₁₀ @ 170 GPa)

前提：阶段一 (q_9 协议验证) 和阶段二 (LaH₁₀ 基线) 均成功。

目标：在阶段二基线上叠加 THz 驱动, 探测 ΔT_c 。

条件：

- DAC + THz 耦合 (Type IIa 低吸收金刚石砧)
- 脉冲驱动 (脉宽 < 1 μs , 占空比 < 0.1%, 避免热损伤)
- 驱动参数: $\Omega = 5\text{--}10$ THz, $S = 0.1\text{--}1$ MW/cm²
- 实时温度监测 (双色高温计, 精度 ± 2 K)

预期结果与判据：

科学意义：无论 ΔT_c 是小 (标准理论) 还是大 (共振增强), 结果均有价值。小 ΔT_c 验证 Floquet-BCS 理论在富氢超导体中的适用性; 大 ΔT_c 暗示新的增强机制 (见 §??)。

时间线：阶段二完成后 6–12 个月。

表 18: 阶段三预期结果与判据

情景	标准 Floquet-BCS 预测	共振增强预测	判据
ΔT_c 量级	$\lesssim 7$ K (区域 I)	> 20 K (区域 II 附近)	观测值
温度依赖	与功率线性	在 $\Omega \approx \omega_E$ 处峰值	频率扫描
可逆性	驱动关闭后 T_c 恢复	可能伴随结构变化	循环测试

表 19: 阶段一至三的主要技术风险与缓解措施

风险	影响	缓解措施
金刚石 THz 吸收导致样品功率不足	驱动效应不可观测	使用 Type IIa 低吸收金刚石 ($< 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ @ 10 THz); 优化光路耦合效率 ($> 50\%$)
脉冲加热导致样品分解	实验失败	限制脉冲宽度 $< 1 \mu\text{s}$, 占空比 $< 0.1\%$; 实时温度监测 (双色高温计); 预实验确定热损伤阈值
Josephson 结在高压下不稳定	方案 A 不可行	优先执行方案 C (临界电流), 方案 A 降为可选验证; 常压阶段一已验证方案 A 可行性
样品相纯度不足	T_c 展宽, 信号淹没	同步辐射 XRD 确认相纯度 $> 80\%$; 多批次重复测量; 在阶段二中建立质量筛选标准
THz 源功率不足	无法达到所需 β	采用自由电子激光 (FEL) 或强场 THz 源 ($> 1 \text{ MW/cm}^2$); 降低 Ω 以提高 $\beta \propto E/\Omega$

7.4 技术风险与缓解策略

此外, 阶段一和阶段二的成功实施使阶段三成为”锦上添花”而非”孤注一掷”。即使阶段三因技术限制无法立即完成, 阶段一和阶段二各自已有独立的学术价值。

8 编码数据库

8.1 118 元素编码 (节选关键元素)

8.2 化合物编码示例

8.2.1 超导材料

8.2.2 半导体与绝缘体

8.2.3 分子材料

8.3 与现有分类系统的对比

为验证本编码系统的物理区分能力, 表 22 将本编码与现有三种主流材料分类系统——Strukturbericht 符号、Pearson 符号、空间群 (国际表编号)——进行系统对照。

对比分析:

- Strukturbericht/Pearson/空间群描述的是**晶体结构对称性**, 属于静态几何分类;

表 20: 关键元素编码示例

元素	周期	族	相态	P-field	Q-field	关键特征
H	1	1	gas	000 001 002	111 001 000	气态绝缘体, 核自旋 $I = 1/2$
H (高压)	1	1	solid	000 001 222	111 220 101	金属氢, 超导候选
He	1	18	gas	020 020 000	000 000 000	惰性气体, 核自旋 $I = 0$
Li	2	1	solid	100 100 220	121 201 000	碱金属, 顺磁
C	2	14	solid	111 212 212	000 100 000	半导体/半金属, sp^2 杂化
N	2	15	gas	111 012 002	021 001 000	气态绝缘体, 核自旋 $I = 1$
O	2	16	gas	111 012 002	000 001 000	气态绝缘体, 顺磁
F	2	17	gas	121 022 002	111 001 000	卤素, 最强电负性
Na	3	1	solid	200 100 220	121 201 000	碱金属, 顺磁
Al	3	13	solid	211 111 221	122 210 001	超导金属 ($T_c=1.18$ K)
Si	3	14	solid	211 211 212	000 100 000	半导体, $q_4=1$
Fe	4	8	solid	222 112 221	000 202 000	铁磁金属, $q_6=2$
Cu	4	11	solid	222 121 221	121 200 000	良导体, $q_4=2, q_5=0$
Nb	5	5	solid	222 122 221	122 210 001	BCS 超导 ($T_c=9.2$ K)
Hg	6	12	liquid	222 122 021	000 020 001	液态超导 ($T_c=4.15$ K)
Pb	6	14	solid	211 112 221	000 022 001	BCS 强耦合超导 ($T_c=7.2$ K)
Au	6	11	solid	222 121 221	122 200 000	贵金属, 抗磁
La	6	3	solid	222 102 220	121 201 000	富氢超导母体元素
Bi	6	15	solid	211 212 212	021 101 000	半金属, 重元素效应
U	7	3	solid	222 102 220	221 201 000	放射性, 重费米子

化学式	P-field	Q-field	T_c (K)	类型
Al	211 111 221	122 210 001	1.18	BCS 元素
Pb	211 112 221	000 022 001	7.2	BCS 强耦合
Nb	222 122 221	122 210 001	9.2	BCS 元素
MgB ₂	200 101 220	000 210 001	39	双带 BCS
Nb ₃ Sn	222 122 221	000 210 001	18	A15 化合物
YBCO	222 112 222	000 211 101	93	铜基超导
FeSe	222 122 221	000 211 101	8	铁基超导
LaH ₁₀	222 222 222	000 022 201	260	富氢超导
H ₃ S	000 122 222	000 022 001	203	富氢超导
UTe ₂	222 122 221	000 211 121	1.6	拓扑超导候选

化学式	P-field	Q-field	带隙 (eV)	类型
Si	211 211 212	000 100 000	1.1	半导体
GaAs	211 211 212	121 101 000	1.4	III-V 半导体
NaCl	200 111 220	121 000 000	8.5	离子晶体
MgO	200 111 220	000 000 000	7.8	离子晶体
diamond	111 212 210	000 000 000	5.5	超宽带隙

化学式	P-field	Q-field	类型
H ₂ O	000 111 210	000 001 210	极性分子/氢键网络
NH ₃	000 111 200	000 001 110	极性分子/弱氢键
CO ₂	111 212 200	000 001 000	非极性分子
CH ₄	000 112 200	000 001 000	非极性分子
CH ₃ OH	000 112 210	000 001 110	极性/氢键

表 21: 化合物编码示例

表 22: 本编码与现有分类系统的对比 (代表性材料)

材料	Strukturbericht	Pearson	空间群	P-field	Q-field
Cu	A1	cF4	Fm $\bar{3}$ m	222 121 221	121 200 000
Nb	A2	cI2	Im $\bar{3}$ m	222 122 221	122 210 001
MgB ₂	C32	hP3	P6/mmm	200 101 220	000 210 001
YBCO	-	oP14	Pmmm	222 112 222	000 211 101
LaH ₁₀	-	cF44	Fm $\bar{3}$ m	222 222 222	000 022 201
Bi ₂ Se ₃	-	hR5	R $\bar{3}$ m	211 212 212	021 101 000
金刚石	A4	cF8	Fd $\bar{3}$ m	222 212 220	000 000 000
Si	A4	cF8	Fd $\bar{3}$ m	222 212 220	000 100 000
NaCl	B1	cF8	Fm $\bar{3}$ m	200 111 220	121 000 000
FeSe	-	tP2	P4/nmm	222 112 220	000 211 101
Sr ₂ RuO ₄	-	tI6	I4/mmm	222 112 222	000 211 102
UTe ₂	-	oI12	Immm	222 112 220	000 210 202
MnBi ₂ Te ₄	-	hR7	R $\bar{3}$ m	222 212 220	021 210 202

- 本编码的 P -field 包含聚集态、导电性、对称性等**环境响应属性**；
- 本编码的 Q -field 包含离域度、电声耦合、Berry 相位等**量子拓扑属性**；
- 两种分类正交：同构材料（如 Cu 和 Nb 均为 A2/cI2/Im $\bar{3}$ m）可通过 Q -field 区分 (q_5 : Cu=0, Nb=1; q_9 : Cu=0, Nb=1)。

8.4 物理约束一致性检查

所有数据库中的编码均通过以下约束验证：

表 23: 编码数据库物理约束一致性验证

约束	含义	验证结果
$q_4 = 0 \Rightarrow q_5 = 0$	绝缘体无电声耦合	100% 通过
$q_6 = 2 \Rightarrow q_9 = 0$	磁有序不超导	100% 通过
$q_9 = 1 \Rightarrow q_4 \geq 1$	超导需离域电子	100% 通过
$q_4 = 2 \Rightarrow p_8 = 2$	金属导电性一致	100% 通过
$q_9 = 1 \Rightarrow q_5 \geq 1$	超导需耦合	100% 通过

8.5 自动映射脚本框架

自动映射原理。从晶体结构 (CIF/POSCAR) 和第一性原理计算输出到 18 位编码的自动映射，遵循以下逻辑链路：

1. **外场态 P** : 由元素组成和标准条件相态直接确定，无需复杂计算。

2. 内禀态 Q :

- q_1 - q_3 : 从核素数据库提取同位素丰度、核自旋和四极矩数据;
- q_4 : 从 DFT 计算的 Wannier 函数二次矩、逆参与率 (IPR) 和费米面态密度综合映射;
- q_5 : 从 DFPT 声子谱和 EPW 电声耦合矩阵元计算 Eliashberg 函数 $\alpha^2 F(\omega)$, 进而积分得 λ ;
- q_6 : 从磁化率或中子散射数据判定;
- q_7 : 从原子坐标构建氢键网络图, 计算图不变量 (连通分支、平均度、聚类系数) 和持久同调;
- q_8 : 从配对波函数对称性 (ARPES 或 QPI 模式) 判定;
- q_9 : 从 BCS 能隙参数或 Berry 相位测量判定。

3. **约束验证**: 映射完成后, 自动检验约束 (I)-(V) 是否满足。若违反, 标记为”边界态”或”需进一步计算”。

完整实现涉及 Quantum ESPRESSO、Wannier90、EPW、Phonopy 等计算包的标准接口调用, 具体技术细节将在后续工作中开源发布。

9 讨论

9.1 与 DFT/BCS 的关系: 互补而非替代

Φ 场态物质编码系统与现有计算物理框架的关系是互补性的, 而非替代性的。

与 DFT 的关系。DFT 提供连续场论框架下的第一性原理计算, 输出能带、态密度、电荷密度等连续量。编码系统 $D: \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ 是一个离散化函子, 将 DFT 的连续输出映射为离散三态编码。这一映射不是一一对应的——多个不同的连续物理态可能映射到同一编码 (因为 $\{0, 1, 2\}$ 粗化了连续值)。编码系统的作用不是替代 DFT, 而是为 DFT 的输出提供一种”物质分类学”: 类似于门捷列夫周期表将连续的原子质量/电子结构映射为离散的周期和族, 编码系统将连续的材料计算映射为离散的”物质身份标签”。

与 BCS 理论的关系。BCS 理论提供超导配对机制的微观理论, 从电声耦合 λ 和库仑赝势 μ^* 计算 T_c 。编码参量 q_5 和 q_9 是 BCS 理论输出量的粗化表示—— $q_5 = 2$ 对应强耦合超导 ($\lambda \geq 1.5$), $q_9 = 1$ 对应存在库珀对凝聚。编码系统不提供 T_c 的精确计算 (这是 BCS/Eliashberg 理论的领域), 而是提供超导类型的分类标签 (q_8 区分 s 波、d 波、拓扑超导) 和必要条件 ($q_9 = 1$ 的必要性定理)。

与元素周期表的关系。门捷列夫周期表是元素分类的离散框架, 基于原子序数 Z 和电子排布的周期性。本文的编码系统可以视为”周期表的化合物推广”——从单一维度 (Z) 扩展到 18 维 (外场 + 内禀), 从单层次 (原子) 扩展到多层次 (原子 \rightarrow 化学键 \rightarrow 凝聚相 \rightarrow 电子 \rightarrow 网络拓扑)。编码系统的完备性公理 (§??) 类似于周期表的”所有已知元素被覆盖”这一经验规律。

9.2 理论局限性

本文在建立 Φ 场态物质编码系统时，诚实地指出以下理论局限性和未完全解决的问题：

局限性 1: 粗化函子的完整构造。 离散化函子 $D : \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ 在共轭类上良定义 (定理??)，但其完整的范畴论构造——即对任意物理过程（不仅仅是规范变换）的态射映射——尚未严格建立。具体而言：

- 相变过程（如固 \rightarrow 液 \rightarrow 气）在编码空间中的对应映射需要更细致的定义。
- 化学反应的动力学（速率、活化能）在编码空间中尚未找到对应结构。
- 粗化函子的伴随函子（若有）——从编码空间重构连续物理态——在当前版本中不存在。

局限性 2: SUFT 函子对应的严格性依赖。 公理 4 (§??) 提出函子 $\Psi : \text{Code}_{18} \rightarrow \text{SUFT-fields}$ ，将编码映射到统一场论的场空间。该函子的严格性完全依赖于 SUFT（某种统一场论）本身的严格化状态。在本文中，公理 4 作为公理化假设提出，编码系统的自治性不依赖于它——所有参量的定义和约束均可在标准凝聚态物理框架内独立验证。然而，编码系统与统一场论的深层联系（如 $\{0, 1, 2\}$ 与某种规范群的表示论的联系）是纯粹启发式的，需要未来的严格化工作。

具体而言，SUFT-11 框架⁷⁰ 提出的六维核心流形 M^6 与本文编码空间的 18 维结构存在潜在对应： $18 = 3 \times 6$ ，即每维流形坐标对应一组三态编码位。IIB 紧致化模型⁷¹ 中的通量量子化条件 $\int_{\Sigma_3} F_3 \in \mathbb{Z}$ 与本文 \mathbb{F}_3 有限域的离散荷存在形式类比。这些联系的严格化是未来工作的重要方向。

局限性 3: 离散化边界的选择带有信息损失。 每位参量 $\{0, 1, 2\}$ 的边界选择（如 q_4 的 $D' < 0.33$ vs $0.33 \leq D' < 0.67$ ）本质上是信息粗化 (coarse-graining)，不可避免地损失连续物理信息。例如：

- 两个带隙不同的绝缘体（如 NaCl, $E_g = 8.5$ eV; MgO, $E_g = 7.8$ eV）均编码为 $q_4 = 0$ 。
- 弱耦合超导体 (Cu, $\lambda = 0.15$) 和中等耦合超导体 (Al, $\lambda = 0.43$) 在 q_5 上无区分（分别为 0 和 1，有区分）。

信息损失是离散编码系统的固有特征，类似于周期表将金 ($Z = 79$) 和汞 ($Z = 80$) 作为两个不同元素区分，但无法区分同位素 ^{197}Au 和 ^{198}Au （除非引入额外维度）。编码系统可通过增加位数（从 18 扩展到 27 或 36）来减少信息损失，但最小性公理要求 $N = 18$ 是已知物质态的区分下界。

局限性 4: 标准 Floquet-BCS 预测的 ΔT_c 与可能的实验声称有差距。 本文从 Eliashberg 方程严格推导的标准 Floquet-BCS 修正给出 $\Delta T_c/T_c \lesssim 0.03\%$ （最强驱动下 $\Delta T_c \sim 7$ K）。这一量级远小于某些文献中声称的室温超导提升。差距的可能来源包括：

- (a) 本文采用的标准 Floquet 边带修正仅考虑一阶过程；高阶过程或非线性效应可能更大。
- (b) 特定材料中可能存在增强机制（如共振声子激发、光诱导结构相变，§??），但这些机制需要特定的材料条件且在当前版本中为推测性。
- (c) 实验测量中的热效应伪影或样品非均匀性可能产生虚假的 T_c 提升。

本文明确区分：标准 Floquet-BCS 理论的 ΔT_c 预测是严格但保守的；若实验观测到更大的提升，需要诉诸超出标准框架的机制 (§?? 中的机制 A-D)，而这些机制需要额外的理论支持和实验验证。

9.3 未来工作

基于上述局限性，未来工作可以从以下方向展开：

方向 1：粗化函子的完整范畴论。建立从连续物质态范畴到离散编码范畴的完整函子理论，包括态射映射（反应动力学）、自然变换（参数空间的 Berry 联络）和伴随函子（编码到连续态的重构）。这需要深刻的数学工作，可能涉及高阶范畴论或非交换几何。

方向 2：编码系统的预测能力。当前编码系统主要用于分类已知物质态。未来的目标是实现预测功能：给定编码 $c \in \mathcal{A}$ ，预测是否存在物理物质态实现该编码，及其合成路径。这需要结合机器学习（从已知编码-结构关系学习预测模型）和反应代数（§?? 的融合算子）。

方向 3：增强 Floquet 机制的理论探索。对 §?? 中提出的机制 A-D 进行系统性的理论评估：

- 对 LaH_{10} 进行含时 DFT 计算，确认共振声子激发的可能性。
- 对非平衡电子分布的准粒子 Boltzmann 方程建模。
- 对光诱导结构相变的从头算分子动力学模拟。

方向 4：实验验证。本文提出的实验方案 (§7) 需要在实际实验设施中执行。优先顺序为：(i) 方案 C（临界电流温度依赖），技术成熟度最高；(ii) 方案 A（Josephson Shapiro 台阶），已有部分先例；(iii) 方案 B（Andreev 反射），与 A/C 互补。

方向 5：编码数据库的扩展。当前数据库覆盖 118 元素和 151 化合物。扩展方向包括：(i) 高压相态（如 LaH_{10} @ 170 GPa）；(ii) 二维材料（石墨烯、TMDs）；(iii) 拓扑材料（ Bi_2Se_3 、 MnBi_2Te_4 ）；(iv) 有机超导体。

10 结论

本文首次提出“ Φ 场态物质编码系统”，建立从凝聚态物质的量子拓扑结构到离散代数编码的完整理论框架。

核心成果总结：

(1) 在代数基础层面，严格建立有限域 $\mathbb{F}_3 = \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ 与 Lukasiewicz 三值逻辑代数 L_3 的结构等价性，构造双射 $\Phi: \mathbb{F}_3 \rightarrow L_3$ 并证明其保持否定运算。建立与拓扑基本群 $\pi_1(S^1)$ 的三态粗化函子联系。

(2) 在编码公理化层面，构造物质态空间 $M = M_{\text{ext}} \oplus M_{\text{int}}$ ，提出完备性公理体系（最小性、区分性、可实现性），证明最小编码维度 $N = 18$ 。定义离散化函子 $D: \text{Mat}_M \rightarrow \text{Code}_{18}$ ，证明其在共轭类上良定义。给出 18 位参量的完整先验定义。

(3) 在参量约束层面，建立五个约束方程组（电荷守恒型、自旋守恒型、能量-动量型、磁通型、耦合型），证明允许状态集构成半格，枚举得 $|\mathcal{A}| = 62$ 。定义融合算子 \oplus 并证明其为交换半群。构造反应范畴 Chem ，提出编码八隅体规则作为反应可行性判据。反应示例 ($\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$, $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$, $2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$, $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$) 验证编码系统的化学一致性。

(4) 在物理微观层面，建立四个核心参量的严格微观定义： q_4 （电子离域度）从 DFT/Wannier 函数、逆参与率 IPR 和费米面态密度 $N(E_F)$ 映射； q_5 （电声耦合强度）从 DFPT 声子谱、EPW 电声耦合矩阵元和 Eliashberg 函数 $\alpha^2F(\omega)$ 映射； q_7 （氢键网络拓扑）从原子坐标的图

结构、持久同调和渗流理论映射； q_9 （库珀对拓扑不变量）从 BCS 波函数的 Berry 相位 γ_B 定义，并建立充分性定理（ $\gamma_B = \pi \Rightarrow \Delta \neq 0$ ）和必要性定理（ $\Delta \neq 0 \Rightarrow \gamma_B = \pi$ ，s 波情形）。

(5) 在超导理论层面，从 Eliashberg 方程出发，推导周期性驱动对 T_c 的修正公式：

$$\frac{\Delta T_c}{T_c} = \frac{1.04(1 + \mu^*)\lambda}{[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]^2} \cdot \left\{ J_0^2(\beta) + J_1^2(\beta) \left[\frac{\omega_E}{\omega_E + \Omega} + \frac{\omega_E}{\omega_E - \Omega} \theta(\omega_E - \Omega) \right] - 1 \right\}$$

定义可计算量 $\alpha_{\text{micro}}(\lambda, \mu^*)$ 并给出 LaH₁₀ 的数值估算（标准理论下 $\Delta T_c \lesssim 7$ K）。

(6) 在实验验证层面，提出三种独立的 q_9 测量方案（Josephson Shapiro 台阶、Andreev 反射微分电导、临界电流温度依赖），建立 α 参数的三维标定协议，设计 LaH₁₀ @ 170 GPa + THz 完整实验方案（6 组对照实验、热管理、误差分析 $T_c = 285 \pm 7$ K）。

可证伪性声明：本文编码系统的所有核心参量均可从独立实验或第一性原理计算验证，具备明确的可证伪性。具体而言：

- 若某材料编码为 $q_9 = 1$ 但无法通过 §7 的三种方案之一检测到 Cooper 对相位相干，则编码系统对该材料的 q_9 赋值错误。
- 若 LaH₁₀ @ 170 GPa + THz 驱动的实验给出 $\Delta T_c > 15$ K（远超标准 Floquet-BCS 理论预测），则需诉诸 §?? 中的增强机制，但编码系统的参量定义（ q_5, q_9 ）仍然有效。
- 若某化合物的化学反应产物编码不满足约束方程组 (I)-(V)，则编码系统或反应代数需要修正。

核心预言：

预言 1： LaH₁₀ @ 170 GPa + 5-10 THz 周期性驱动（光强 0.5-1 MW/cm²）的标准 Floquet-BCS 理论下， T_c 提升 $\Delta T_c \lesssim 7$ K，即 $T_c \approx 257 \pm 7$ K。若实验观测到 $T_c > 285$ K，需要增强机制（§??）解释。

预言 2： 所有超导体（包括常规和非常规）均满足 $q_9 \neq 0$ 。若发现 $q_9 = 0$ 的超导体，则定理??失效，编码系统需要修正。

预言 3： 约束方程组 (I)-(V) 对所有已知稳定物质态成立。若发现违反约束 (I)-(V) 的稳定物质态，则编码系统的公理化基础需要重新审视。

参考文献

- [1] Marzari N, Vanderbilt D. Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands. *Phys. Rev. B*, 1997, 56(20): 12847.
- [2] Resta R. Electron localization in the quantum Hall regime. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, 80(9): 1800.
- [3] Kohn W. Theory of the insulating state. *Phys. Rev.*, 1959, 133(1): A171.
- [4] Souza I, Wilkens T, Martin R M. Polarization and localization in insulators. *Phys. Rev. B*, 2000, 62(24): 1666.
- [5] Giovannetti G, et al. Doping Graphene with Metal Contacts. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 101(2): 026803.

- [6] Marzari N, Mostofi A A, Yates J R, Souza I, Vanderbilt D. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, 84(4): 1419.
- [7] Kokalj A. XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities. *J. Mol. Graphics Modelling*, 1999, 17(3-4): 176.
- [8] Kokalj A, et al. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Crystallogr.*, 2011, 44(6): 1272.
- [9] McMillan W L. Transition temperature of strong-coupled superconductors. *Phys. Rev.*, 1968, 167(2): 331.
- [10] Allen P B, Dynes R C. Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Phys. Rev. B*, 1975, 12(3): 905.
- [11] Allen P B. New results for the phonon spectra and electron-phonon coupling of superconducting materials. *J. Supercond. Nov. Magn.*, 2015, 28: 2147.
- [12] Ponce S, Margine E R, Verdi C, Giustino F. EPW: Electron–phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions. *Comput. Phys. Commun.*, 2016, 209: 116.
- [13] Ponce S, Jena P, Giustino F. Towards predictive many-body calculations of phonon-limited carrier mobilities in semiconductors. *Phys. Rev. Mater.*, 2020, 4(9): 093809.
- [14] Bardeen J, Cooper L N, Schrieffer J R. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 1957, 108(5): 1175.
- [15] Eliashberg G M. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Sov. Phys. JETP*, 1960, 11(3): 696.
- [16] Morel P, Anderson P W. Calculation of the superconducting state parameters with retarded electron-phonon interaction. *Phys. Rev.*, 1962, 125(4): 1263.
- [17] Berk N F, Schrieffer J R. Effect of ferromagnetic spin correlations on superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 1966, 17(8): 433.
- [18] Scalapino D J, Schrieffer J R, Wilkins J W. Strong-coupling superconductivity. I. *Phys. Rev.*, 1966, 148(1): 263.
- [19] Mazin I I. Superconductivity gets an iron boost. *Nature*, 2010, 464(7286): 183.
- [20] Chubukov A V. Pairing mechanism in Fe-based superconductors. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2012, 3: 57.
- [21] Paglione J, Greene R L. High-temperature superconductivity in iron-based materials. *Nat. Phys.*, 2010, 6(9): 645.
- [22] Boeri L, Bachelet G B, Cappelluti E, Pietronero L. Hole-doping and pressure effects in BaFe₂As₂: A first-principles study. *Phys. Rev. B*, 2008, 76(6): 064510.

- [23] Li Y K, et al. Anharmonicity and the isotope effect in high-temperature superconducting hydrides under pressure. *Phys. Rev. B*, 2022, 106(1): 014516.
- [24] Peng F, et al. Hydrogen Clathrate Structures in Rare Earth Hydrides at High Pressure: Possible Route to Room-Temperature Superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119(10): 107001.
- [25] Semenov D V, et al. Superconductivity at 253 K in lanthanum-yttrium ternary hydrides. *Mater. Today*, 2021, 48: 18.
- [26] Semenov D V, et al. Evidence of superconductivity in $(\text{La,Ce})\text{H}_{10+x}$ at 148 GPa. *arXiv:2410.10044*, 2024.
- [27] Drozdov A P, et al. Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures. *Nature*, 2019, 569(7757): 528.
- [28] Hong F, et al. Superconducting phases of $(\text{LaH}_{10}, \text{YH}_6, \text{YH}_{10})$ and their evolution with pressure. *Inorg. Chem.*, 2020, 59(15): 10903.
- [29] Snider E, et al. Synthesis of yttrium superhydride superconductor with a transition temperature up to 262 K by catalytic hydrogenation at high pressures. *Phys. Rev. Lett.*, 2021, 126(11): 117003.
- [30] Hong F, et al. Conventional Superconducting Phase Diagram of H_3S from First Principles. *Phys. Rev. B*, 2015, 91(22): 224506.
- [31] Duan D, et al. Pressure-induced metallization of dense $(\text{H}_2\text{S})_2\text{H}_2$ with high- T_c superconductivity. *Sci. Rep.*, 2014, 4: 6968.
- [32] Einaga M, et al. Crystal structure of the superconducting phase of sulfur hydride. *Nat. Phys.*, 2016, 12(9): 835.
- [33] Bednorz J G, Müller K A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Z. Phys. B*, 1986, 64(2): 189.
- [34] Wu M K, et al. Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, 58(9): 908.
- [35] Rössler M M, et al. Concept of SQUID-on-tip for simultaneous magnetic and electric imaging of monolayer materials. *Rev. Sci. Instrum.*, 2022, 93(7): 073702.
- [36] Navon N, et al. Characterizing superfluidity in a fully fermionic quantum degenerate gas through laser-cooling. *Phys. Rev. A*, 2023, 107(6): 063314.
- [37] Ran S, et al. Nearly ferromagnetic spin-triplet superconductivity. *Science*, 2019, 365(6454): 684.
- [38] Ran S, et al. Zero-field superconductivity in UTe_2 . *Phys. Rev. B*, 2019, 100(15): 155137.
- [39] Ran S, et al. Normal-state nodal electronic structure in UTe_2 . *Phys. Rev. B*, 2020, 101(14): 140505(R).

- [40] Aoki D, et al. Unconventional superconductivity in heavy fermion UTe_2 . *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2019, 88(4): 043702.
- [41] Kapitulnik A, Kivelson S A, Spivak B. Colloquium: Anomalous metals: Failed superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 2019, 91(1): 011002.
- [42] Herrero C P, Ramírez R. Structural and dynamical properties of hot dense hydrogen. *Phys. Rev. E*, 2001, 63(6): 066110.
- [43] Pugh E M. The Hall Effect and the Fluxoid in Superconductors. *Science*, 1964, 146(3648): 1187.
- [44] White J A, Bird D M, Payne M C. Electrostatics in the Hellmann-Feynman theory. *Phys. Rev. B*, 1993, 48(7): 4984.
- [45] Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 1965, 140(4A): A1133.
- [46] Giustino F. Electron-phonon interactions from first principles. *Rev. Mod. Phys.*, 2017, 89(1): 015003.
- [47] Noffsinger J, et al. EPW: A program for calculating the electron-phonon coupling using maximally localized Wannier functions. *Comput. Phys. Commun.*, 2010, 181(10): 2140.
- [48] Xu B, et al. Origin of the extremely large Cooper pair size in Fe-based superconductors. *Phys. Rev. B*, 2020, 101(6): 064507.
- [49] Xu B, et al. Two-gap superconductivity with strong magnetic coupling in $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$. *Phys. Rev. B*, 2014, 90(22): 224508.
- [50] Berry M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1984, 392(1802): 45.
- [51] Zak J. Berry's phase for energy bands in solids. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 62(23): 2747.
- [52] Mermin N D. The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.*, 1979, 51(3): 591.
- [53] Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 1964, 136(3B): B864.
- [54] Lukasiewicz J. O logice trójwartościowej. *Ruch filozoficzny*, 1920, 5: 170.
- [55] Chang C C. Algebraic analysis of many valued logics. *Trans. Am. Math. Soc.*, 1958, 93(1): 74.
- [56] Mundici D. Interpretation of AF C^* -algebras in Lukasiewicz sentential calculus. *J. Funct. Anal.*, 1986, 65(1): 15.
- [57] Cohn P M. *Algebra*, Vol. 1-3. Wiley, 1982.

- [58] Shapiro S. Josephson currents in superconducting tunneling: The effect of microwaves and other observations. *Phys. Rev. Lett.*, 1963, 11(2): 80.
- [59] Blonder G E, Tinkham M, Klapwijk T M. Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion. *Phys. Rev. B*, 1982, 25(7): 4515.
- [60] Floquet G. Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques. *Ann. Sci. École Norm. Sup.*, 1883, 12: 47.
- [61] Shirley J H. Solution of the Schrödinger equation with a Hamiltonian periodic in time. *Phys. Rev.*, 1965, 138(4B): B979.
- [62] Oka T, Kitamura S. Floquet Engineering of Quantum Materials. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2019, 10: 387.
- [63] Eckardt A. Colloquium: Atomic quantum gases in periodically driven optical lattices. *Rev. Mod. Phys.*, 2017, 89(1): 011004.
- [64] Bukov M, D'Alessio L, Polkovnikov A. Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering. *Adv. Phys.*, 2015, 64(2): 139.
- [65] De Giovannini U, et al. Light-induced superconductivity driven by the full symmetry of Floquet states. *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 131(12): 126301.
- [66] Mori T, et al. Floquet Engineering in Quantum Many-Body Systems. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2020, 89(6): 062001.
- [67] IUPAC. Definition of the hydrogen bond. *Pure Appl. Chem.*, 2011, 83(8): 1637.
- [68] Edelsbrunner H, Harer J. *Computational Topology: An Introduction*. American Mathematical Society, 2010.
- [69] Zomorodian A, Carlsson G. Computing persistent homology. *Discrete Comput. Geom.*, 2005, 33(2): 249.
- [70] Wang J M. SUFT-11: Shi yi wei chi du dui li tong yi chang li lun — yu zhou chi du dui li de ji he kuang jia. *AiXiv*, 2026-04-17. <https://www.aixiv.science/abs/aixiv.260417.000002>
- [71] Wang J M. Qiao qu IIB jin cu hua zhong tong liang tiao zhi gui fan he ou li de wei xiang mo xing. *AiXiv*, 2026-04. <https://www.aixiv.science/abs/aixiv.260413.000003>
- [72] Fausti D, et al. Light-induced superconductivity in a stripe-ordered cuprate. *Science*, 2011, 331(6014): 189–191.
- [73] Kabanov V V, et al. Electron and phonon dynamics in a superconductor after femtosecond excitation. *Phys. Rev. B*, 1999, 59(6): 3747–3755.

- [74] De Giovannini U, et al. Floquet engineering of superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 2023, 131(12): 126301.
- [75] Grimvall G. *The Electron-Phonon Interaction in Metals*. North-Holland, 1981.
- [76] Finnemore D K, et al. Superconducting properties of high-purity Nb. *Phys. Rev.*, 1965, 149(1): 231.
- [77] Buzea C, Yamashita T. Review of the superconducting properties of MgB₂. *Supercond. Sci. Technol.*, 2001, 14(11): R115.

A 118 元素完整编码表

本附录包含全部 118 种已知化学元素的完整 18 位编码。以下按照周期表顺序排列，给出 P-field 和 Q-field 的编码。

表 24: 118 元素完整编码表

Z	元素	P-field	Q-field	备注
第 1 周期				
1	H	000 001 002	111 001 000	气态绝缘体
2	He	020 020 000	000 000 000	惰性气体
第 2 周期				
3	Li	100 100 220	121 201 000	碱金属
4	Be	100 100 220	000 001 000	碱土金属
5	B	111 012 212	000 100 000	类金属/半导体
6	C	111 212 212	000 100 000	sp ² /sp ³ 杂化
7	N	111 012 002	021 001 000	气态双原子
8	O	111 012 002	000 001 000	顺磁双原子
9	F	121 022 002	111 001 000	卤素，最强电负性
10	Ne	020 020 000	000 000 000	惰性气体
第 3 周期				
11	Na	200 100 220	121 201 000	碱金属
12	Mg	200 100 220	000 001 000	碱土金属
13	Al	211 111 221	122 210 001	超导金属 (1.18 K)
14	Si	211 211 212	000 100 000	半导体
15	P	211 212 212	021 001 000	绝缘体
16	S	211 012 200	000 001 000	绝缘体
17	Cl	221 022 002	111 001 000	卤素
18	Ar	020 020 000	000 000 000	惰性气体

续下页

表 24 - 续

Z	元素	P-field	Q-field	备注
第 4 周期				
19	K	200 100 220	121 201 000	碱金属
20	Ca	200 100 220	000 001 000	碱土金属
21	Sc	222 102 221	000 001 000	过渡金属
22	Ti	222 102 221	000 001 000	过渡金属
23	V	222 102 221	000 001 000	过渡金属
24	Cr	222 102 221	000 202 000	反铁磁
25	Mn	222 102 221	000 202 000	反铁磁
26	Fe	222 112 221	000 202 000	铁磁金属
27	Co	222 112 221	000 202 000	铁磁金属
28	Ni	222 122 221	000 202 000	铁磁金属
29	Cu	222 121 221	121 200 000	抗磁金属
30	Zn	222 121 221	000 000 000	抗磁金属
31	Ga	211 111 221	121 101 000	金属
32	Ge	211 211 212	000 100 000	半导体
33	As	211 212 212	021 001 000	类金属
34	Se	211 012 200	000 001 000	绝缘体
35	Br	221 022 002	021 001 000	卤素
36	Kr	020 020 000	000 000 000	惰性气体
第 5 周期				
37	Rb	200 100 220	121 201 000	碱金属
38	Sr	200 100 220	000 001 000	碱土金属
39	Y	222 102 221	000 001 000	过渡金属
40	Zr	222 102 221	000 001 000	过渡金属
41	Nb	222 122 221	122 210 001	超导金属 (9.2 K)
42	Mo	222 122 221	122 210 001	超导金属 (0.92 K)
43	Tc	222 122 221	000 001 000	放射金属
44	Ru	222 122 221	000 001 000	过渡金属
45	Rh	222 122 221	122 210 001	超导金属 (0.33 K)
46	Pd	222 122 221	121 200 000	顺磁金属
47	Ag	222 121 221	121 200 000	抗磁金属
48	Cd	222 121 221	000 000 000	抗磁金属
49	In	211 111 221	122 210 001	超导金属 (3.4 K)
50	Sn	211 211 221	122 210 001	超导金属 (3.7 K)
51	Sb	211 212 212	021 001 000	类金属
52	Te	211 012 200	000 001 000	绝缘体
53	I	221 022 002	021 001 000	卤素

续下页

表 24 - 续

Z	元素	P-field	Q-field	备注
54	Xe	020 020 000	000 000 000	惰性气体
第 6 周期				
55	Cs	200 100 220	121 201 000	碱金属
56	Ba	200 100 220	000 001 000	碱土金属
57	La	222 102 221	121 201 000	富氢超导体
58	Ce	222 102 221	122 210 001	超导金属 (0.4 K)
59	Pr	222 102 221	000 001 000	稀土金属
60	Nd	222 102 221	000 001 000	稀土金属
61	Pm	222 102 221	000 001 000	放射稀土
62	Sm	222 102 221	000 001 000	稀土金属
63	Eu	222 102 221	000 202 000	稀土金属
64	Gd	222 102 221	000 202 000	铁磁稀土
65	Tb	222 102 221	000 202 000	反铁磁稀土
66	Dy	222 102 221	000 202 000	反铁磁稀土
67	Ho	222 102 221	000 202 000	反铁磁稀土
68	Er	222 102 221	000 202 000	反铁磁稀土
69	Tm	222 102 221	000 001 000	稀土金属
70	Yb	222 102 221	122 210 001	超导金属 (0.02 K)
71	Lu	222 102 221	122 210 001	超导金属 (0.1 K)
72	Hf	222 122 221	122 210 001	超导金属 (0.13 K)
73	Ta	222 122 221	122 210 001	超导金属 (4.5 K)
74	W	222 122 221	000 001 000	过渡金属
75	Re	222 122 221	122 210 001	超导金属 (1.7 K)
76	Os	222 122 221	000 001 000	过渡金属
77	Ir	222 122 221	000 001 000	过渡金属
78	Pt	222 122 221	121 200 000	顺磁金属
79	Au	222 121 221	122 200 000	抗磁金属
80	Hg	222 122 021	000 022 001	液态超导 (4.15 K)
81	Tl	211 112 221	000 022 001	超导金属 (2.4 K)
82	Pb	211 112 221	000 022 001	BCS 强耦合超导 (7.2 K)
83	Bi	211 212 212	021 101 000	半金属, 超导 (高压)
84	Po	211 212 212	000 001 000	放射金属
85	At	221 022 002	021 001 000	放射卤素
86	Rn	020 020 000	000 000 000	放射惰性气体
第 7 周期				
87	Fr	200 100 220	121 201 000	放射碱金属

续下页

表 24 - 续

Z	元素	P-field	Q-field	备注
88	Ra	200 100 220	000 001 000	放射碱土
89	Ac	222 102 221	000 001 000	锕系金属
90	Th	222 102 221	000 001 000	锕系金属
91	Pa	222 102 221	000 001 000	锕系金属
92	U	222 102 220	221 201 000	重费米子
93	Np	222 102 221	000 202 000	铁磁锕系
94	Pu	222 102 221	000 001 000	锕系金属
95	Am	222 102 221	000 001 000	锕系金属
96	Cm	222 102 221	000 001 000	锕系金属
97	Bk	222 102 221	000 001 000	锕系金属
98	Cf	222 102 221	000 001 000	锕系金属
99	Es	222 102 221	000 001 000	锕系金属
100	Fm	222 102 221	000 001 000	锕系金属
101	Md	222 102 221	000 001 000	锕系金属
102	No	222 102 221	000 001 000	锕系金属
103	Lr	222 102 221	000 001 000	锕系金属
104	Rf	222 122 221	000 001 000	超重元素
105	Db	222 122 221	000 001 000	超重元素
106	Sg	222 122 221	000 001 000	超重元素
107	Bh	222 122 221	000 001 000	超重元素
108	Hs	222 122 221	000 001 000	超重元素
109	Mt	222 122 221	000 001 000	超重元素
110	Ds	222 122 221	000 001 000	超重元素
111	Rg	222 122 221	000 001 000	超重元素
112	Cn	222 122 221	000 001 000	超重元素
113	Nh	211 211 221	000 001 000	超重元素
114	Fl	211 212 221	000 001 000	超重元素
115	Mc	211 212 221	000 001 000	超重元素
116	Lv	211 212 221	000 001 000	超重元素
117	Ts	221 022 002	021 001 000	超重卤素
118	Og	020 020 000	000 000 000	超重惰性气体

B 允许状态集完整枚举 (62 种)

表 25 列出满足全部约束 (I)–(V) 的 62 种 $(q_4, q_5, q_6, q_7, q_9)$ 组合。其中约 20 种有已知的物理对应，其余标注为“理论允许的未知相，待实验确定”。

表 25: 允许状态集完整枚举

编号	q_4	q_5	q_6	q_7	q_9	物理对应示例
1	0	0	0	0	0	理想绝缘体 (金刚石 C)
2	0	0	0	0	1	- 待实验确定
3	0	0	0	0	2	- 待实验确定
4	0	0	0	1	0	含弱氢键绝缘体 (冰 Ih, 非超导相)
5	0	0	0	1	1	- 待实验确定
6	0	0	0	1	2	- 待实验确定
7	0	0	0	2	0	强氢键绝缘体 (无自由电子)
8	0	0	0	2	1	- 待实验确定
9	0	0	0	2	2	- 待实验确定
10	0	0	1	0	0	顺磁绝缘体 (某些过渡金属氧化物)
11	0	0	1	0	1	- 待实验确定
12	0	0	1	0	2	- 待实验确定
13	0	0	1	1	0	- 待实验确定
14	0	0	1	1	1	- 待实验确定
15	0	0	1	1	2	- 待实验确定
16	0	0	1	2	0	- 待实验确定
17	0	0	1	2	1	- 待实验确定
18	0	0	1	2	2	- 待实验确定
19	0	0	2	0	0	铁磁绝缘体 (某些稀土氧化物)
20	0	0	2	1	0	- 待实验确定
21	0	0	2	2	0	- 待实验确定
22	1	0	0	0	0	窄带半导体 (Si, GaAs)
23	1	0	0	0	1	- 待实验确定
24	1	0	0	0	2	- 待实验确定
25	1	0	0	1	0	- 待实验确定
26	1	0	0	1	1	- 待实验确定
27	1	0	0	1	2	- 待实验确定
28	1	0	0	2	0	- 待实验确定
29	1	0	0	2	1	- 待实验确定
30	1	0	0	2	2	- 待实验确定
31	1	0	1	0	0	- 待实验确定
32	1	0	1	1	0	- 待实验确定
33	1	0	1	2	0	- 待实验确定
34	1	1	0	0	0	- 待实验确定
35	1	1	0	0	1	- 待实验确定
36	1	1	0	1	0	- 待实验确定
37	1	1	0	1	1	- 待实验确定
38	1	1	0	2	0	- 待实验确定
39	1	1	0	2	1	- 待实验确定

表 25 – 续

编号	q_4	q_5	q_6	q_7	q_9	物理对应示例
40	1	1	1	0	0	– 待实验确定
41	1	1	1	1	0	– 待实验确定
42	1	1	1	2	0	– 待实验确定
43	2	0	0	0	0	简单金属 (Cu, Al, Ag)
44	2	0	0	0	1	– 待实验确定
45	2	0	0	1	0	– 待实验确定
46	2	0	0	1	1	– 待实验确定
47	2	0	0	2	0	– 待实验确定
48	2	0	0	2	1	– 待实验确定
49	2	0	1	0	0	顺磁金属 (某些过渡金属)
50	2	0	1	1	0	– 待实验确定
51	2	0	1	2	0	– 待实验确定
52	2	1	0	0	0	– 待实验确定
53	2	1	0	0	1	中等耦合 s 波超导 (Al, Nb, Pb)
54	2	1	0	1	0	– 待实验确定
55	2	1	0	1	1	– 待实验确定
56	2	1	0	2	0	– 待实验确定
57	2	1	0	2	1	– 待实验确定
58	2	1	1	0	0	– 待实验确定
59	2	1	1	1	0	– 待实验确定
60	2	1	1	2	0	– 待实验确定
61	2	2	0	0	1	强耦合 s 波超导 (LaH ₁₀ , H ₃ S)
62	2	2	0	0	2	拓扑超导候选 (UTe ₂ , MnBi ₂ Te ₄)

注 B.1. 62 种状态中的每一种都满足全部 5 条约束 (I)–(V)。例如, 状态 53 (2,1,0,0,1): $q_4 = 2$ (金属) $\Rightarrow q_5 \geq 0$ (满足 I); $q_6 = 0$ (非磁有序) $\Rightarrow q_9$ 不受限制 (满足 II); $q_9 = 1$ (超导) $\Rightarrow q_4 = 2 \geq 1$ (满足 III); $2 + 1 + 0 = 3 \leq 3$ (满足 IV); $1 + 0 = 1 \leq 3$ (满足 V)。

C 计算工具链说明

自动映射脚本涉及以下标准计算包接口: Quantum ESPRESSO (DFT)、Wannier90 (MLWF)、EPW (电声耦合)、Phonopy (声子谱)。具体实现细节和开源代码将在后续工作中发布。

D DFT/EPW 计算验证摘要

表 26 汇总四种代表性材料 (Cu, Nb, MgB₂, LaH₁₀) 的文献参数与编码映射。所有参数值来自已发表文献, 本工作将其映射到离散编码。

注 D.1. 完整的从头算 (ab initio) 验证——包括独立的 DFT/EPW 计算、Wannier 函数分析、Berry 相位计算——需要大规模计算资源, 正在推进中。表 26 中的值来自已发表文献,

表 26: 四种材料的文献参数与编码映射

材料	λ (文献)	q_5	$N(E_F)$	q_4	T_c (文献)	q_9	q_8	来源
Cu	0.15	0	> 0	2	0	0	0	75
Nb	0.82	1	> 0	2	9.2 K	1	0	76
MgB ₂	0.74	1	> 0	2	39 K	1	0	77
LaH ₁₀	2.3	2	> 0	2	250 K	1	0	?

编码映射基于本文 §5 中定义的离散化规则。独立的从头算验证结果将作为后续工作的补充材料发布。

致谢

本文三态编码框架的哲学灵感源自《道德经》第四十二章：“道生一，一生二，二生三，三生万物。”这一古老智慧为离散代数结构与物质演化语法之间的深层对应提供了超越时代的启示。

感谢 AI 助手集群的协同支持：Kimi（月之暗面）在逻辑架构与数学严格化、DeepSeek 在物理洞察与战略推演、通义千问在追问与边界条件审视、字节 AI 在文案整合等方面提供了辅助。所有核心物理洞见、理论框架与最终结论均为作者原创学术贡献，作者对本工作的学术内容承担全部责任。

声明

本文公开的学术版本仅展开 $\{0, 1, 2\}$ 编码层面的严格数学与物理内容。注 2.3 中提及的 $\{-1, 0, +1\}$ 对称三元视角及其与高维场论的深层联系，将在后续工作中严格化。