Solved zero energy model in topological superconductor

Wei Cheng

The model

In the basics $|p_z,\uparrow\rangle$, $|p_z,\downarrow\rangle$, $|d_{xz+iyz},\downarrow\rangle$, $|d_{xz-iyz},\uparrow\rangle$ 其中 TI 的部分为 $H_{TI}(k) = M(k)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 + Ak_y\tau_2\sigma_2 + Ak_z\tau_2\sigma_3$, 其中 $M(k) = M_0 + M_1(k_x^2 + k_y^2) + M_2k_z^2$, 其中 τ 表示轨道, σ 表示自旋。

考虑超导,以及 z 方向的 vortex,在基矢 $(c_k, c_{-k}^T(i\sigma_y))$ 下,BdG 哈密顿量可以写为

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} H_k - \mu & H_{\Delta} \\ H_{\Delta}^{\dagger} & \mu - H_k \end{pmatrix} \tag{1}$$

其中

$$H_{\Delta} = \begin{pmatrix} \Delta(r) & & & \\ & \Delta(r) & & \\ & & \Delta(r) & \\ & & \Delta(r) \end{pmatrix} \tag{2}$$

其中 $\Delta(r) = \frac{\Delta_0}{\xi} r e^{-i\theta}$,其中 ξ 表示超导的相干长度.

因为 vortex 沿着 z 轴方向,因此 z 方向依然具有平移不变性, k_z 依然是一个好量子数,因此 H_{BdG} 可以按 k_z 分块对角,因为 TI 反带的点在 $k_z=0$ 或 π ,考虑 $k_z=0$ 。同时我们考虑系统在 k_x-k_y 平面有连续旋转对称性,因此可以定义角动量 $J_z=-i\partial_\theta+\frac{1}{2}s_3+\frac{1}{2}\sigma_3$ 。现在先来求解 H_k 的本征态

$$H_{TI} = (M_0 + Mk^2)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 + Ak_y\tau_2\sigma_2 \tag{3}$$

可以找到算符 $\tau_3\sigma_3$ 与其对易,按其本征值分块对角可以得到块对角矩阵为

$$\begin{pmatrix}
M(k) & -iAk_{-} & 0 & 0 \\
iAk_{+} & -M(k) & 0 & 0 \\
0 & 0 & M(k) & -iAk_{+} \\
0 & 0 & iAk_{-} & -M(k)
\end{pmatrix}$$
(4)

由此可以得到其能量本征值为

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{M(k)^2 + A^2 k^2} \tag{5}$$

同时可以解得 H_{TI} 的四个本征态为

$$|\psi_1^+\rangle = \frac{1}{a} \begin{pmatrix} E + M(k) \\ 0 \\ 0 \\ iAke^{i\theta} \end{pmatrix} |\psi_1^-\rangle = \frac{1}{b} \begin{pmatrix} -E + M(k) \\ 0 \\ 0 \\ iAke^{i\theta} \end{pmatrix}$$
 (6)

$$|\psi_2^+\rangle = \frac{1}{a} \begin{pmatrix} 0\\ E + M(k)\\ iAke^{-i\theta}\\ 0 \end{pmatrix} |\psi_2^-\rangle = \frac{1}{b} \begin{pmatrix} 0\\ -E + M(k)\\ iAke^{-i\theta}\\ 0 \end{pmatrix}$$
(7)

其中上标 \pm 表示能量的正负,下标 1,2 表示处于 $\tau_3\sigma_3$ 的不同本征值,a,b 表示归一 化系数。由此可以得到对角化 H_{TI} 哈密顿量为矩阵为

$$U = (|\psi_1^+\rangle, |\psi_2^+\rangle, |\psi_1^-\rangle, |\psi_2^-\rangle) \tag{8}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{E+M(k)}{a} & 0 & \frac{-E+M(k)}{b} & 0\\ 0 & \frac{E+M(k)}{a} & 0 & \frac{-E+M(k)}{b}\\ 0 & \frac{iAke^{-i\theta}}{a} & 0 & \frac{iAke^{-i\theta}}{b}\\ \frac{iAke^{i\theta}}{a} & 0 & \frac{iAke^{i\theta}}{b} & 0 \end{pmatrix}$$
(9)

将 H_{BdG} 写到动量空间并变换到极坐标系可得

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} H_k - \mu & i\Delta_e(\partial_{k_x} - i\partial_{k_y}) \\ i\Delta(\partial_{k_x} + i\partial_{k_y}) & \mu - H_k \end{pmatrix}$$
 (10)

$$= \begin{pmatrix} H_k - \mu & i\Delta_e e^{-i\theta} (\partial_k - i\frac{\partial_\theta}{k}) \\ i\Delta_e e^{i\theta} (\partial_k + i\frac{\partial_\theta}{k}) & \mu - H_k \end{pmatrix}$$
(11)

构造变换矩阵

$$S = \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} \tag{12}$$

可以得到

$$S^{\dagger} H_{BdG} S = \begin{pmatrix} U^{\dagger} \\ U^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_k - \mu & H_{\Delta} \\ H_{\Delta}^{\dagger} & \mu - H_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ U \end{pmatrix}$$
 (13)

$$= \begin{pmatrix} E(k) - \mu & U^{\dagger} H_{\Delta} U \\ U^{\dagger} H_{\Delta}^{\dagger} U & \mu - E(k) \end{pmatrix}$$
 (14)

其中

$$U^{\dagger}H_{\Delta}U = \begin{pmatrix} \langle \psi_{1}^{+} | \\ \langle \psi_{2}^{+} | \\ \langle \psi_{2}^{-} | \end{pmatrix} [i\Delta_{e}(\partial_{k} - i\frac{\partial_{\theta}}{k})] \left(|\psi_{1}^{+}\rangle \quad |\psi_{2}^{+}\rangle \quad |\psi_{1}^{-}\rangle \quad |\psi_{2}^{-}\rangle \right)$$

$$= \begin{pmatrix} i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - iA_{k}^{1+} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{1+}}{k}) & 0 & 0 \\ 0 & i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - iA_{k}^{2+} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{2+}}{k}) & 0 \\ 0 & 0 & i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - iA_{k}^{1-} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{1-}}{k}) \\ 0 & 0 & 0 & i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - iA_{k}^{1-} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{1-}}{k}) \end{pmatrix}$$

$$(15)$$

其中

$$A_k^{ij} = \langle \psi_i^j | \partial_k | \psi_i^j \rangle \qquad A_\theta^{ij} = \langle \psi_i^j | \partial_\theta | \psi_i^j \rangle \tag{17}$$

四个本征态均已求出,因此可以求出这些 Berry connection 的大小,可以注意到这些 Berry connection 都是关于 k 的函数,而与 θ 无关,这与我们考虑的系统具有连续旋转对称性有关。我们可以进一步考虑在费米面处的 Berry phase

$$\phi_{FS} = \oint_{FS} \vec{A} \cdot d\vec{k} = \iint \nabla \times \vec{A} dS \tag{18}$$

$$= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{k_F} \left[\partial_k \left(\frac{1}{k} A_\theta\right) - \frac{1}{k} \partial_\theta A_k\right] k dk \tag{19}$$

$$=2\pi \int_0^{k_F} \partial_k (\frac{1}{k} A_\theta) k dk \tag{20}$$

由此可以知道 Berry phase 的大小与 A_k 没有关系,由此可以做一个规范变换 $e^{i\int_0^k A_{k'}dk'}$ 可以使得 A_k 变为 0,而 A_θ 不发生改变,具体到我们所考虑的系统,容易知道 $A_k^{1+}=A_k^{2+}, A_k^{1-}=A_k^{2-}$,我们选择规范变换 $e^{i\int_0^k A_{k'}^{1+}dk'}$ 使得 A_k^{1+} 和 A_k^{2+} 变为 0,现在来计算 A_θ 的大小

$$A_{\theta}^{1+} = i \left\langle \psi_1^+ \middle| \partial_{\theta} \middle| \psi_1^+ \right\rangle \tag{21}$$

$$= -\frac{A^2k^2}{a^2} \tag{22}$$

$$A_{\theta}^{2+} = i \langle \psi_2^+ | \partial_{\theta} | \psi_2^+ \rangle \tag{23}$$

$$=\frac{A^2k^2}{a^2}\tag{24}$$

$$A_{\theta}^{1-} = -\frac{A^2 k^2}{b^2} \tag{25}$$

(26)

$$A_{\theta}^{2-} = \frac{A^2 k^2}{b^2} \tag{27}$$

(28)

由此即可以得到 H_{BdG} 变换到 H_k 本征表象之后的具体形式。然后我们关心费米面附近的物理,因此再将这个哈密顿量投影到费米面附近两条能带的本征子空间中,即投影到 $\{|\psi_1^+\rangle_e^-,|\psi_2^+\rangle_e^+,|\psi_1^+\rangle_h^+,|\psi_1^+\rangle_h^+\}$ 可以得到

$$H_{BdG}^{proj} = \begin{pmatrix} E(k) - \mu & 0 & i\Delta_e e^{-i\theta} (\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{1+}}{k}) & 0 \\ 0 & E(k) - \mu & 0 & i\Delta_e e^{-i\theta} (\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{2+}}{k}) \\ i\Delta_e e^{i\theta} (\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{1+}}{k}) & 0 & \mu - E(k) & 0 \\ 0 & i\Delta_e e^{i\theta} (\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{2+}}{k}) & 0 & \mu - E(k) \end{pmatrix}$$

$$= (E(k) - \mu) s_3 \tau_0 + i\Delta_e (\partial_k - \frac{i\partial_\theta}{k}) cos\theta s_1 \tau_0 + i\Delta_e (\partial_k - \frac{i\partial_\theta}{k}) sin\theta s_2 \tau_0 - i\frac{\Delta_e}{k} cos\theta A_\theta^{1+} s_1 \tau_3 - i\frac{\Delta_e}{k} sin\theta A_\theta^{1+} s_2 \tau_3$$

$$(30)$$

其中 s 表示 particle-hole, τ 表示轨道。易知其和 $s_0\tau_3$ 算符对易,因此将其分块对角变为

$$H_{BdG}^{proj} = \begin{pmatrix} E(k) - \mu & i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{1+}}{k}) & 0 & 0\\ i\Delta_{e}e^{i\theta}(\partial_{k} + \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{1+}}{k}) & \mu - E(k) & 0 & 0\\ 0 & 0 & E(k) - \mu & i\Delta_{e}e^{-i\theta}(\partial_{k} - \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{2+}}{k})\\ 0 & 0 & i\Delta_{e}e^{i\theta}(\partial_{k} + \frac{i\partial_{\theta} + A_{\theta}^{2+}}{k}) & \mu - E(k) \end{pmatrix}$$
(31)

由此可以得到

$$H_{BdG}^{re} \begin{pmatrix} E(k) - \mu & i\Delta_e e^{-i\theta} (\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{1+}}{k}) \\ i\Delta_e e^{i\theta} (\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{1+}}{k}) & \mu - E(k) \end{pmatrix}$$
(32)

我们再来考虑角动量的投影,我们首先将角动量变换到 H_k 的本征空间

$$S^{\dagger}J_zS = S^{\dagger}(-i\partial_{\theta} + \frac{1}{2}s_3 + \frac{1}{2}\sigma_3)S \tag{33}$$

$$S^{\dagger}(-i\partial_{\theta})S = -i\partial_{\theta} - s_{0} \begin{pmatrix} A_{\theta}^{1+} & A_{\theta}^{1+1-} \\ A_{\theta}^{2+} & A_{\theta}^{2+2-} \\ A_{\theta}^{1-1+} & A_{\theta}^{1-} \\ A_{\theta}^{2-2+} & A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix}$$
(34)

$$S^{\dagger} \frac{1}{2} s_3 S = \frac{1}{2} s_3 \tag{35}$$

$$S^{\dagger} \frac{1}{2} \sigma_3 S \tag{36}$$

$$= \frac{1}{2} s_0 \begin{pmatrix} \frac{(E+M(k))^2 - A^2 k^2}{a^2} & 0 & \frac{-2A^2 k^2}{ab} & 0 \\ 0 & \frac{-(E+M(k))^2 + A^2 k^2}{a^2} & 0 & \frac{2A^2 k^2}{ab} \\ \frac{-2A^2 k^2}{ab} & 0 & \frac{(-E+M(k))^2 - A^2 k^2}{b^2} & 0 \\ 0 & \frac{2A^2 k^2}{ab} & 0 & \frac{-(-E+M(k))^2 + A^2 k^2}{b^2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} s_0 \begin{pmatrix} 1 + 2A_{\theta}^{1+} & 0 & 2A_{\theta}^{1+1-} & 0 \\ 0 & -1 + 2A_{\theta}^{2+} & 0 & 2A_{\theta}^{2+2-} \\ 2A_{\theta}^{1-1+} & 0 & 1 + 2A_{\theta}^{1-} & 0 \\ 0 & 2A_{\theta}^{2-2+} & 0 & -1 + 2A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} s_0 \begin{pmatrix} 1 + 2A_{\theta}^{1+} & 0 & 2A_{\theta}^{1+1-} & 0 \\ 0 & -1 + 2A_{\theta}^{2+} & 0 & 2A_{\theta}^{2+2-} \\ 2A_{\theta}^{1-1+} & 0 & 1 + 2A_{\theta}^{1-} & 0 \\ 0 & 2A_{\theta}^{2-2+} & 0 & -1 + 2A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix}$$

由此可以得到在 H_k 的本征函数空间,

$$J_z = -i\partial_\theta + \frac{1}{2}s_0 \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}s_3 \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$
(37)

然后投影到费米面附近的两条能带上面可以得到

$$J_z^{proj} = -i\partial_{\theta} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$
(38)

此时基矢为 $\{|\psi_1^+\rangle_e, \{|\psi_2^+\rangle_e, |\psi_1^+\rangle_h |\psi_2^+\rangle_h\}$, 将其投影到 $\{|\psi_1^+\rangle_e, |\psi_1^+\rangle_h\}$ 可得

$$J_z^{re} = -i\partial_\theta + \frac{1}{2}s_3 + \frac{1}{2} \tag{39}$$

此即 H^{re}_{BdG} 所对应的角动量,容易验证 $[J^{re}_z,H^{re}_{BdG}]=0$, 现在来求他们的共同本征 态, 易知 J_z 本征值为 j 的本征态为

$$\begin{pmatrix}
e^{i(j-1)\theta} f_1(k) \\
e^{ij\theta} f_2(k)
\end{pmatrix}$$
(40)

因为是在极坐标系,因此我们设本征态为

$$\psi(k,\theta) = \frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta} f_1(k) \\ -ie^{ij\theta} f_2(k) \end{pmatrix}$$
(41)

由此可以得到 $\binom{f_1(k)}{f_2(k)}$ 的等效哈密顿量为

$$H_{j} = \sqrt{k} \begin{pmatrix} e^{-i(j-1)\theta} \\ e^{-ij\theta} \end{pmatrix} H_{BdG}^{re} \frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta} \\ e^{ij\theta} \end{pmatrix}$$
(42)

$$= \begin{pmatrix} E(k) - \mu & \Delta_e(\partial_k + \frac{j - \frac{1}{2} - A_\theta^{1+}}{k}) \\ \Delta_e(\frac{j - \frac{1}{2} - A_\theta^{1+}}{k} - \partial_k) & \mu - E(k) \end{pmatrix}$$
(43)

$$= (E(k) - \mu)\sigma_z + i\Delta_e\partial_k\sigma_y + \frac{\Delta_e}{k}(j - \frac{1}{2} - A_\theta^{1+})\sigma_x \tag{44}$$

其等效为 Jackiw-Rebbi model, 可以得到

$$E_j = \frac{\Delta_e}{k_F} (j - \frac{1}{2} - A_\theta^{1+}(k_F)) \tag{45}$$

现在来分析费米面出的 Berry phase

$$\phi_{FS} = \oint_{FS} \vec{A} \cdot d\vec{k} \tag{46}$$

$$= \int_0^{2\pi} \langle \psi_1^+ | \frac{\partial_\theta}{k} | \psi_1^+ \rangle k d\theta \tag{47}$$

$$=2\pi A_{\theta}^{1+} \tag{48}$$

$$E_{j} = \frac{\Delta_{e}}{k_{F}} (j - \frac{1}{2} - \frac{\phi_{FS}}{2\pi}) \tag{49}$$

可以知道如果要有零能解, ϕ_{FS} 必须为 π 的奇数倍

$$\phi_{FS} = 2\pi A_{\theta}^{1+} \tag{50}$$

$$= -2\pi \frac{A^2 k^2}{a^2} \tag{51}$$

$$= -2\pi (\frac{1}{2} - \frac{M(k)}{2E}) \tag{52}$$

$$= -\pi + \pi \frac{M(k)}{2E} \tag{53}$$

由此可知当且仅当 M(k) = 0 时, ϕ_{FS} 为 π 的奇数倍,为 $-\pi$, 而存在这个解的条件就是 $M_0 + M_1 k^2 = 0$ 有解,即 M_0 和 M_1 要反号,可知此时对应的 $k_F = \sqrt{-\frac{M_0}{M_1}}$, 此时对应的能量为

$$E(k_F) = \sqrt{M(k_F)^2 + A^2 k_F^2}$$
 (54)

$$=Ak_F = A\sqrt{-\frac{M_0}{M_1}}\tag{55}$$

由此可以得到其发生拓扑相变的点为 $\mu=A\sqrt{-\frac{M_0}{M_1}}$, 同时可以看到当 $\phi_{FS}=-\pi$ 时,零能解所对应的角动量为 j=0

现在来考虑

$$H'_{TI} = M(k)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 - Ak_y\tau_2\sigma_2 + Ak_z\tau_2\sigma_3$$
(56)

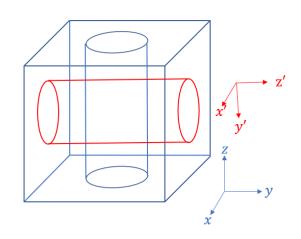
在 $k_z = 0$ 处其相当于在 $H_{TI} = M(k)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 - Ak_y\tau_2\sigma_2$ 上做一个 unitary 的变换 $C = \tau_0\sigma_1$,其角动量 $J_z' = -i\partial_\theta - \frac{1}{2}\sigma_3$ 变换之后可得 $J_z = -i\partial_\theta + \frac{1}{2}\sigma_3$,其形式与之前的一样,可知其相变所对应的角动量为 0。

是否可能与所加 vortex 的方向有关?虽然感觉坐标变换,应该不会改变,但是还是取成与数值计算的条件一样算一把,故考虑

$$H_{TI} = M(k)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 + Ak_y\tau_2\sigma_2 - Ak_z\tau_2\sigma_3 \tag{57}$$

考虑超导,以及在 y 方向上加 vortex,可以写出 BdG 哈密顿量为

$$\begin{pmatrix}
H_{TI}(k) - \mu & \Delta_e(x - iz) \\
\Delta_e(x + iz) & \mu - H_{TI}(k)
\end{pmatrix}$$
(58)



为了方便计算,将坐标轴绕 x 轴旋转 90 度,可知坐标的变换关系为

$$x \to x'$$
 $y \to z'$ $z \to -y'$ $k_x \to k_x'$ $k_y \to k_z'$ $k_z \to -k_y'$ (59)

由此可知在新坐标系下

$$H'_{TI}(k') = M(k')\tau_3\sigma_0 + Ak'_x\tau_2\sigma_1 + Ak'_z\tau_2\sigma_2 + Ak'_y\tau_2\sigma_3$$
(60)

其 BdG 哈密顿量变为

$$\begin{pmatrix}
H'_{TI}(k') - \mu & \Delta_e(x' + iy') \\
\Delta_e(x' - iy') & \mu - H'_{TI}(k')
\end{pmatrix}$$
(61)

由对易关系可知其角动量 $J_{z'}=-i\partial_{\theta}-\frac{1}{2}\sigma_{2}-\frac{1}{2}s_{3}$ 接下来求解 $H_{TI}^{'}(k')$ 的本征态, 为了书写方便,后面统一去掉1

$$H_{TI} = M(k)\tau_3\sigma_0 + Ak_x\tau_2\sigma_1 + Ak_y\tau_2\sigma_3 \tag{62}$$

$$= \begin{pmatrix} M(k) & 0 & -iAk_{y} & -iAk_{x} \\ 0 & M(k) & -iAk_{x} & iAk_{y} \\ iAk_{y} & iAk_{x} & -M(k) & 0 \\ iAk_{x} & -iAk_{y} & 0 & -M(k) \end{pmatrix}$$
(63)

可以找到其与算符 $\tau_3\sigma_2$ 对易,因此可以在其本征态下块对角,可以得到

$$\begin{pmatrix}
-M(k) & Ak_{-} & 0 & 0 \\
Ak_{+} & M(k) & 0 & 0 \\
0 & 0 & -M(k) & -Ak_{+} \\
0 & 0 & -Ak_{-} & M(k)
\end{pmatrix}$$
(64)

由此可以得到其四个本征态为

$$\psi_1^+ = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} -i(E+M(k)) \\ E+M(k) \\ iAke^{-i\theta} \\ Ake^{-i\theta} \end{pmatrix} \qquad \psi_1^- = \frac{1}{d} \begin{pmatrix} -i(-E+M(k)) \\ -E+M(k) \\ iAke^{-i\theta} \\ Ake^{-i\theta} \end{pmatrix}$$
(65)

$$\psi_2^+ = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} i(E+M(k)) \\ E+M(k) \\ iAke^{i\theta} \\ -Ake^{i\theta} \end{pmatrix} \qquad \psi_2^- = \frac{1}{d} \begin{pmatrix} i(-E+M(k)) \\ -E+M(k) \\ iAke^{i\theta} \\ -Ake^{i\theta} \end{pmatrix}$$
(66)

然后计算 Berry connection

$$A_{\theta}^{1+} = \frac{2A^2k^2}{c^2} \qquad A_{\theta}^{2+} = -\frac{2A^2k^2}{c^2} \tag{67}$$

$$A_{\theta}^{1-} = \frac{2A^2k^2}{d^2} \qquad A_{\theta}^{2-} = -\frac{2A^2k^2}{d^2} \tag{68}$$

$$A_{\theta}^{1+} = \frac{2A^{2}k^{2}}{c^{2}} \qquad A_{\theta}^{2+} = -\frac{2A^{2}k^{2}}{c^{2}}$$

$$A_{\theta}^{1-} = \frac{2A^{2}k^{2}}{d^{2}} \qquad A_{\theta}^{2-} = -\frac{2A^{2}k^{2}}{d^{2}}$$

$$A_{\theta}^{1+1-} = \frac{2A^{2}k^{2}}{cd} \qquad A_{\theta}^{2+2-} = -\frac{2A^{2}k^{2}}{cd}$$

$$(67)$$

$$(68)$$

然后计算角动量的投影. 即

$$S^{\dagger}J_zS = S^{\dagger}[-i\partial_{\theta} - \frac{1}{2}\sigma_2 - \frac{1}{2}s_3]S \tag{70}$$

$$S^{\dagger}[-i\partial_{\theta}]S = -i\partial_{\theta} - s_{0} \begin{pmatrix} A_{\theta}^{1+} & A_{\theta}^{1+1-} \\ A_{\theta}^{2+} & A_{\theta}^{2+2-} \\ A_{\theta}^{1-1+} & A_{\theta}^{1-} \\ A_{\theta}^{2-2+} & A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix}$$
(71)

$$S^{\dagger} \frac{1}{2} \sigma_{2} S = \frac{1}{2} s_{0} \begin{pmatrix} \langle \psi_{1}^{+} | \\ \langle \psi_{2}^{+} | \\ \langle \psi_{1}^{-} | \\ \langle \psi_{2}^{-} | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ i \\ & -i \end{pmatrix} \left(|\psi_{1}^{+} \rangle \quad |\psi_{2}^{+} \rangle \quad |\psi_{1}^{-} \rangle \quad |\psi_{2}^{-} \rangle \right)$$

$$(72)$$

$$\begin{split} &=\frac{1}{2}s_{0}\begin{pmatrix} \frac{2(E+M(k))^{2}-2A^{2}k^{2}}{c^{2}} & 0 & \frac{-4A^{2}k^{2}}{cd} & 0\\ 0 & \frac{-2(E+M(k))^{2}+2A^{2}k^{2}}{c^{2}} & 0 & \frac{4A^{2}k^{2}}{cd}\\ \frac{-4A^{2}k^{2}}{cd} & 0 & \frac{2(-E+M(k))^{2}-2A^{2}k^{2}}{d^{2}} & 0\\ 0 & \frac{4A^{2}k^{2}}{cd} & 0 & \frac{-2(-E+M(k))^{2}+2A^{2}k^{2}}{d^{2}} \end{pmatrix}\\ &=\frac{1}{2}s_{0}\begin{pmatrix} 1-2A_{\theta}^{1+} & 0 & -2A_{\theta}^{1+1-} & 0\\ 0 & -1-2A_{\theta}^{2+} & 0 & -2A_{\theta}^{2+2-}\\ -2A_{\theta}^{1-1+} & 0 & 1-2A_{\theta}^{1-} & 0\\ 0 & -2A_{\theta}^{2-2+} & 0 & -1-2A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix} \end{split}$$

$$= \frac{1}{2} s_0 \begin{pmatrix} 1 - 2A_{\theta}^{1+} & 0 & -2A_{\theta}^{1+1-} & 0\\ 0 & -1 - 2A_{\theta}^{2+} & 0 & -2A_{\theta}^{2+2-}\\ -2A_{\theta}^{1-1+} & 0 & 1 - 2A_{\theta}^{1-} & 0\\ 0 & -2A_{\theta}^{2-2+} & 0 & -1 - 2A_{\theta}^{2-} \end{pmatrix}$$

$$(73)$$

$$S^{\dagger} \frac{1}{2} s_3 S = \frac{1}{2} s_3 \tag{74}$$

由此可以得到投影之后的角动量为

$$J_z^{proj} = -i\partial_{\theta} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$
(75)

后面求解 H^{proj}_{BdG} 的过程与之前一样,可知在 $\{|\psi_1^+\rangle_e^-, |\psi_1^+\rangle_h^-\}$ 中角动量为

$$J_z^{re} = -i\partial_\theta - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{76}$$

最终可以得到

$$E_j = \frac{\Delta_e}{k_F} (j + \frac{1}{2} - A_\theta^{1+}) \tag{77}$$

因为 A_{θ}^{1+} 的值为正,所以可以得到其零能解出现在角动量 j=0 的位置。

Conclusion

通过完整计算 J_z 投影之后的结果,找到了之前角动量不为整数的问题。但是 这里的计算似乎表明不管系数是否变号,其角动量的相变点都在 $J_z=0$ 处。之前 讨论中提到可能与角动量的定义有关,这一点我还没有想明白。

对于各向异性的情况,即考虑 k_x,k_y 前面的系数不相等的时候,其费米面不再是一个圆,而是类似于椭圆。其拓扑相变点同样发生在其 Berry phase 为 π 的地方。对于 $H_{TI}=M(k)\tau_3\sigma_0+A_1k_x\tau_2\sigma_1+A_2k_y\tau_2\sigma_2$,其中一个能量本征态为

$$\psi_{1} = \frac{1}{a} \begin{pmatrix} E + m(k) \\ 0 \\ 0 \\ iA_{1}k_{x} - A_{2}k_{y} \end{pmatrix}$$
 (78)

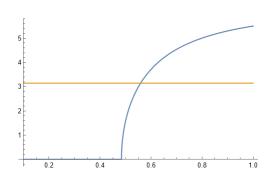
可求得

$$A_{k_x} = \frac{A_1 A_2 k_y}{a^2} \qquad A_{k_y} = -\frac{A_1 A_2 k_x}{a^2} \tag{79}$$

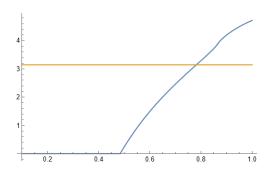
其在费米面处的方程为 $E^2 = M(k)^2 + A_1^2 k_x^2 + A_2^2 k_y^2$

$$\int_{FS} A_{k_x} dk_x + A_{k_y} dk_y = \iint \left(\frac{\partial A_{k_y}}{\partial k_x} - \frac{\partial A_{k_x}}{\partial k_y} \right) dk_x dk_y \tag{80}$$

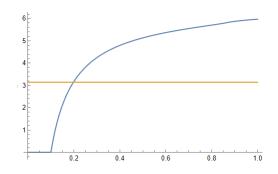
用 Mathematical 计算了一下



A1=A2



A1: A2=2:1



A1: A2=10:1 似乎随着 A1: A2 差别的增大, 拓扑相变点的能量先增大又减少。