Six-band

Wei Cheng

In the basics $|p_z,\uparrow\rangle, |p_z,\downarrow\rangle, |d_{xz+iyz},\downarrow\rangle, |d_{xz-iyz},\uparrow\rangle, |d_{xz+iyz},\uparrow\rangle, |d_{xz-iyz,\downarrow}\rangle$，考虑 $k_z=0$

$$H=\begin{pmatrix} M(k) & 0 & 0 & -iA_1k_- & -iA_2k_+ & 0 \\ 0 & M(k) & -iA_1k_+ & 0 & 0 & -iA_2k_- \\ 0 & iA_1 & -M(k) & 0 & 0 & 0 \\ iA_1k_+ & 0 & 0 & -M(k) & 0 & 0 \\ iA_2k_- & 0 & 0 & 0 & -M(k)+\delta & 0 \\ 0 & iA_2k_+ & 0 & 0 & 0 & -M(k)+\delta \end{pmatrix} \tag{1}$$

做一个基矢变换

$$U=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

可以得到

$$H^{'}=\begin{pmatrix} M(k) & -iA_1k_- & -iA_2k_+ & & & \\ iA_1k_+ & -M(k) & 0 & & & \\ iA_2k_- & 0 & -M(k)+\delta & & & \\ & & & M(k) & -iA_1K_+ & 0 \\ & & & iA_1k_- & -M(k) & 0 \\ & & & iA_2k_+ & 0 & -M(k)+\delta \end{pmatrix} \tag{3}$$

先考虑其中一个块的内容，其能量本征值满足

$$E^3+(M(k)-\delta)E^2-[M(k)^2+A_1^2k^2+A_2^2k^2]E-M(k)^3+\delta M(k)^2-M(k)[A_1k^2+A_2^2k^2]+\delta A_1^2k^2=0 \tag{4}$$

考虑 $\delta=0$ 的情况，可以解得

$$E_1=-M(k)\qquad E_2=-\sqrt{M(k)^2+2A^2k^2}=-E\qquad E_3=\sqrt{M(k)^2+2A^2k^2}=E \tag{5}$$

三个本征态为

$$|\psi_1\rangle_e=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\-e^{2i\theta}\\1\end{pmatrix}\quad |\psi_2\rangle_e=\frac{1}{a}\begin{pmatrix}i(-M(k)+E)e^{i\theta}\\Ake^{2i\theta}\\Ak\end{pmatrix}\quad |\psi_3\rangle_e=\frac{1}{b}\begin{pmatrix}-i(M(k)+E)e^{i\theta}\\Ake^{2i\theta}\\Ak\end{pmatrix} \tag{6}$$

在 basics$|p_z,\uparrow\rangle_e\,,|d_{xz-iyz},\uparrow\rangle_e\,,|d_{xz+iyz},\uparrow\rangle_e\,,|p_z,\downarrow\rangle_h\,,|d_{xz+iyz},\downarrow\rangle_h\,,|d_{xz-iyz},\downarrow\rangle_h$ 中，可以写出考虑 Vortex 的 BdG 哈密顿量为

$$H_{BdG}=\begin{pmatrix}M(k)-\mu & -iAk_- & -iAk_+ & \Delta & 0 & 0\\ iAk_+ & -M(k)-\mu & 0 & 0 & \Delta & 0\\ iAk_- & 0 & -M(k)-\mu & 0 & 0 & \Delta\\ \Delta^\dagger & 0 & 0 & \mu-M(k) & iAk_- & iAk_+\\ 0 & \Delta^\dagger & 0 & -iAk_+ & \mu+M(k) & 0\\ 0 & 0 & \Delta^\dagger & -iAk_- & 0 & \mu+M(k)\end{pmatrix} \tag{7}$$

将其变换到 H 的本征函数空间可以得到

$$\begin{pmatrix}E_1-\mu & 0 & 0 & \Delta_{11} & \Delta_{12} & \Delta_{13}\\ 0 & E_2-\mu & 0 & \Delta_{21} & \Delta_{22} & 0\\ 0 & 0 & E_3-\mu & \Delta_{31} & 0 & \Delta_{33}\\ \Delta_{11}^\dagger & \Delta_{12}^\dagger & \Delta_{13}^\dagger & \mu-E_1 & 0 & 0\\ \Delta_{21}^\dagger & \Delta_{22}^\dagger & 0 & 0 & \mu-E_2 & 0\\ \Delta_{31}^\dagger & 0 & \Delta_{33}^\dagger & 0 & 0 & \mu-E_3\end{pmatrix} \tag{8}$$

其中 $\Delta_{ii}=i\Delta_e e^{-i\theta}(\partial_k-\frac{i\partial_\theta+A_\theta^{11}}{k})\qquad \Delta_{ij}=-i\Delta_e e^{-i\theta}\frac{A_\theta^{ij}}{k}$, 值得注意的是 $\Delta_{23}=\Delta_{32}=0$, 即 2 的电子和 3 的空穴没有耦合，为了方便起见，将其写在基矢 $|\psi_2\rangle_e\,,|\psi_2\rangle_h\,,|\psi_1\rangle$

下，可以得到

$$\begin{pmatrix} E_2-\mu & \Delta_{22} & 0 & \Delta_{21} & 0 & 0 \\ \Delta_{22}^{\dagger} & \mu-E_2 & \Delta_{21}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{12} & E_1-\mu & \Delta_{11} & 0 & \Delta_{13} \\ \Delta_{12}^{\dagger} & 0 & \Delta_{11}^{\dagger} & \mu-E_1 & \Delta_{13}^{\dagger} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{31} & E_3-\mu & \Delta_{33} \\ 0 & 0 & \Delta_{31}^{\dagger} & 0 & \Delta_{33}^{\dagger} & \mu-E_3 \end{pmatrix} \tag{9}$$

当费米面靠近 E_1, E_2 的时候，可以将其投影到费米面附近的 E_1, E_2 处，由此可以得到

$$\begin{pmatrix} E_2-\mu & i\Delta_e e^{-i\theta}(\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{22}}{k}) & 0 & -i\Delta_e e^{-i\theta}\frac{A_\theta^{21}}{k} \\ i\Delta_e e^{i\theta}(\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{22}}{k}) & \mu-E_2 & i\Delta_e e^{i\theta}\frac{A_\theta^{21}}{k} & 0 \\ 0 & -i\Delta_e e^{-i\theta}\frac{A_\theta^{12}}{k} & E_1-\mu & i\Delta_e e^{-i\theta}(\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{11}}{k}) \\ i\Delta_e e^{i\theta}\frac{A_\theta^{12}}{k} & 0 & i\Delta_e e^{i\theta}(\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{11}}{k}) & \mu-E_1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

做一个变换

$$U = \frac{1}{\sqrt{k}} \begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta} & & & \\ & -ie^{ij\theta} & & \\ & & e^{i(j-1)\theta} & \\ & & & -ie^{ij\theta} \end{pmatrix} \tag{11}$$

可以得到

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} E_2-\mu & \Delta_e(\partial_k + \frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}}{k}) & 0 & -\Delta_e\frac{A_\theta^{21}}{k} \\ \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}}{k} - \partial_k) & \mu-E_2 & -\Delta_e\frac{A_\theta^{21}}{k} & 0 \\ 0 & -\Delta_e\frac{A_\theta^{12}}{k} & E_1-\mu & \Delta_e(\partial_k + \frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}}{k}) \\ -\Delta_e\frac{A_\theta^{12}}{k} & 0 & \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}}{k} - \partial_k) & \mu-E_1 \end{pmatrix} \\ &= i\Delta_e\partial_k s_0\tau_y + \frac{1}{2}(E_1+E_2-2\mu)s_0\tau_z + \frac{1}{2}(E_1-E_2)s_z\tau_z + \begin{pmatrix} \ \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{12}$$

前面部分可以看做 4*4 的 Jackiw-Rebbi

$$H_0 = i\Delta_e\partial_k s_0\tau_y + \frac{1}{2}(E_1+E_2-2\mu)s_0\tau_z + \frac{1}{2}(E_1-E_2)s_z\tau_z \tag{13}$$

设其本征态为 $\psi(k)$, 考虑零能解，可以得到

$$i\Delta_e\partial_k s_0\tau_y\psi(k) = [\frac{1}{2}(E_1+E_2-2\mu)s_0\tau_z + \frac{1}{2}(E_1-E_2)s_z\tau_z]\psi(k) \tag{14}$$

两边同时乘以 $s_0\tau_y$ 可以得到

$$\partial_k\psi(k) = \frac{1}{\Delta_e}[\frac{1}{2}(E_1+E_2-2\mu)s_0\tau_x + \frac{1}{2}(E_1-E_2)s_z\tau_x]\psi(k) \tag{15}$$

$\psi(k)$ 必定是 $\frac{1}{2}(E_1+E_2-2\mu)s_0\tau_x+\frac{1}{2}(E_1-E_2)s_z\tau_x$ 的本征态，可以求得其本征态为

$$\psi_1^+=\begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}\qquad \psi_1^-=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\\0\end{pmatrix}\psi_2^+=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\1\end{pmatrix}\qquad \psi_2^-=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\-1\end{pmatrix} \tag{16}$$

由此可得

$$\partial_k\psi_1(k)=\eta\frac{E_1-\mu}{\Delta_e}\psi_1(k) \tag{17}$$

$$\partial_k\psi_2(k)=\eta\frac{E_2-\mu}{\Delta_e}\psi_2(k) \tag{18}$$

其中 $\eta=\pm$, 由此可以得到

$$\psi_1(k)=Ce^{\int^k\eta\frac{E_1-\mu}{\Delta_e}dk'} \tag{19}$$

$$\psi_2(k)=Ce^{\int^k\eta\frac{E_2-\mu}{\Delta_e}dk'} \tag{20}$$

其零能解出现在 $E_1-\mu$ 或 $E_2-\mu$ 改变符号的地方。当这个部分能量为 0 的时候，系统的能量由

$$\begin{pmatrix}0 & \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}) & 0 & -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{21}\\ \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}) & 0 & -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{21} & 0\\ 0 & -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{12} & 0 & \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{11})\\ -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{12} & 0 & \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{11}) & 0\end{pmatrix} \tag{21}$$

将其分块对角，即

$$\begin{pmatrix}\frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{22}) & -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{21}\\ -\frac{\Delta_e}{k}A_\theta^{12} & \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A_\theta^{11})\end{pmatrix}\qquad=\frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-\begin{pmatrix}A_\theta^{22} & A_\theta^{21}\\ A_\theta^{12} & A_\theta^{11}\end{pmatrix}) \tag{22}$$

后面这个矩阵可与两条 band 的 SU(2) 的 Berry phase 联系起来，可以证明费米面处的 SU(2)Berry phase 就是其乘以 2π, 从这里可以得出结论就是当费米面处的 Berry phase 的本征值为 π 的奇数倍时，会有零能解。可得

$$A_\theta^{22}=-1\qquad A_\theta^{11}=-1\qquad A_\theta^{21}=\frac{\sqrt{2}Ak}{\sqrt{(-M(k)+E)^2+2A^2k^2}} \tag{23}$$

这个矩阵的本征值为

$$E=-1\pm\frac{\sqrt{2}Ak}{\sqrt{(-M(k)+E)^2+2A^2k^2}} \tag{24}$$

因为后面那一项明显大于 0，小于 1，要使其为半整数，只能等于 $\frac{1}{2}$, 即可以得到

$$\frac{\sqrt{2}Ak}{\sqrt{(-M(k)+E)^2+2A^2k^2}}=\frac{1}{2} \tag{25}$$

可以得到

$$3M^2(k)-2A^2k^2=0 \tag{26}$$

可以取参数与数值计算的对应，但目前对照得还是有点问题，可能是某个地方有问题, 即这两条 band 相变的能量不一样，一个是 $-M(k)$, 另外一个是 $-2M(k)$。

$$|\psi_1\rangle_e=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\-1\\1\end{pmatrix}\quad |\psi_2\rangle_e=\frac{1}{a}\begin{pmatrix}i(-M(k)+E)e^{i\theta}\\Ak\\Ak\end{pmatrix}\quad |\psi_3\rangle_e=\frac{1}{b}\begin{pmatrix}-i(M(k)+E)e^{i\theta}\\Ak\\Ak\end{pmatrix} \tag{27}$$

做同样的变换之后容易发现 $\Delta_{21}=\Delta_{31}=0$ 即耦合项全部没了，因此变换到本征基矢表象下后可以完全的分块对角。而且此时容易发现 $A_\theta^{11}=0$ 不可能为半整数，因此 1 这条带不会有拓扑相变。此时可以计算

$$A_\theta^{22}=-\frac{(-M(k)+E)^2}{(-M(k)+E)^2+2A^2k^2} \tag{28}$$

要想使其为半整数，容易分析知必为 $-\frac{1}{2}$ 由此可以得到 $M(k)=0$ 带入参数 $M0=-1, M1=1, A=0.5$ 可以得到相变点的 $k=\pm1$, 相变的能量为 $-\sqrt{2}0.5=0.707$, 对于 E_3 同样分析也可以得到其相变能量为 0.707，这一点与数值计算吻合。

1 Conclusion

在只有两个相变点的时候，与数值计算的结果能够对应起来，有四个相变点的时候对应有问题，数值上当 $\Delta_{so}=0$ 的时候，四个相变点是两两重合的，但是目前我算的有点错位，即中间那条带的相变能量与另外两条不一样，我感觉上应该是计算上的问题。