Analytic of VPT in iron-based superconductor

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 $k_z=0$

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

其中 $M(k)=M_0+M_1(k_x^2+k_y^2), k_+=k_x+ik_y, k_-=k_x-ik_y$ 做一个基矢变换可将其分块对角

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

可以得到

$$H_k=\begin{pmatrix} M(k) & -iAk_- & -iAk_+ & & & \\ iAk_+ & -M(k) & 0 & & & \\ iAk_- & 0 & -M(k)+\delta & & & \\ & & & M(k) & -iAk_+ & -iAk_- \\ & & & iAk_- & -M(k) & 0 \\ & & & iAk_+ & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{3}$$

即可以得到电子在 $\{|p_z,\uparrow\rangle_e, |d_{xz-iyz},\uparrow\rangle_e, |d_{xz+iyz},\uparrow\rangle_e\}$ 的哈密顿量为

$$H_{e\uparrow}(k)=\begin{pmatrix} M(k) & -iAk_- & -iAk_+ \\ iAk_+ & -M(k) & 0 \\ iAk_- & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{4}$$

其在 $\{|p_z,\downarrow\rangle_e, |d_{xz+iyz},\downarrow\rangle_e, |d_{xz-iyz},\downarrow\rangle_e\}$ 的哈密顿量为

$$H_{e\downarrow}(k) = \begin{pmatrix} M(k) & -iAk_+ & -iAk_- \\ iAk_- & -M(k) & 0 \\ iAk_+ & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{5}$$

将其写到空穴空间即 $\{|p_z,\downarrow\rangle_h, |d_{xz+iyz},\downarrow\rangle_h, |d_{xz-iyz},\downarrow\rangle_h\}$, 可以得到空穴的哈密顿量为

$$H_{h\downarrow}(k) = -H^*_{e\downarrow}(-k) = -\begin{pmatrix} M(k) & -iAk_+ & -iAk_- \\ iAk_- & -M(k) & 0 \\ iAk_+ & 0 & -M(k) \end{pmatrix} = -H_{e\uparrow}(k) \tag{6}$$

我们接下来求解 $H_{e\uparrow}(k)$ 的本征值与本征函数，我们可以将其写在 k 空间的极坐标系下可以得到

$$H_{e\uparrow}(k) = \begin{pmatrix} M(k) & -iAke^{-i\theta} & -iAke^{i\theta} \\ iAke^{i\theta} & -M(k) & 0 \\ iAke^{-i\theta} & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{7}$$

可得其能量本征值为

$$E_\pm = \pm\sqrt{M(k)^2 + 2A^2k^2} \qquad E_0 = -M(k) \tag{8}$$

可以看到能量的大小只与 k 的大小有关，与 θ 无关，系统具有连续旋转对称性，由此可以在 k 空间定义一个角动量

$$J_z = -i\partial_\theta + J_{basis} = -i\partial_\theta + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & & \\ & -\frac{1}{2} & \\ & & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \tag{9}$$

在动量空间中的轨道角动量的形式证明如下

$$L_z = (\vec{r} \times \vec{p})_z = xp_y - yp_x \tag{10}$$
$$= ip_y\partial_{p_x} - ip_x\partial_{p_y} \tag{11}$$

在动量空间的极坐标系中有

$$\partial_{p_x} = cos(\theta)\partial_p - \frac{1}{p}sin(\theta)\partial_\theta \tag{12}$$
$$\partial_{p_y} = sin(\theta)\partial_p + \frac{1}{p}cos(\theta)\partial_\theta \tag{13}$$

由此可以得到

$$
\begin{aligned}
L_z &= ip_y\partial_{p_x} - ip_x\partial_{p_y} && (14)\\
&= ipsin(\theta)[cos(\theta)\partial_p - \frac{1}{p}sin(\theta)\partial_\theta] - ipcos(\theta)[sin(\theta)\partial_p + \frac{1}{p}cos(\theta)\partial_\theta] && (15)\\
&= -i\partial_\theta && (16)
\end{aligned}
$$

由于 $[H_{e\uparrow}(k), J_z] = 0$, 因此我们可以求其共同本征态，对于 J_z 而言，其本征态为

$$
\psi(k,\theta)^j = \begin{pmatrix} e^{i(j-\frac{1}{2})\theta}u_1(k) \\ e^{i(j+\frac{1}{2})\theta}u_2(k) \\ e^{i(j-\frac{3}{1})\theta}u_3(k) \end{pmatrix} \tag{17}
$$

由此我们可以定义一个变换

$$
U = \begin{pmatrix} e^{i(j-\frac{1}{2})\theta} & & \\ & e^{i(j+\frac{1}{2})\theta} & \\ & & e^{i(j-\frac{3}{2})\theta} \end{pmatrix} \tag{18}
$$

由此可以得到

$$
U^\dagger H_{e\uparrow}(k)U = \begin{pmatrix} M(k) & -iAk & -iAk \\ iAk & -M(k) & 0 \\ iAk & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{19}
$$

可以解得其本征态为

$$
|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm\rangle = \frac{1}{a_\pm}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E) \\ Ak \\ Ak \end{pmatrix} \tag{20}
$$

其中 $E = \sqrt{M(k)^2 + 2A^2k^2}, a_\pm$为归一化系数，由此我们可以得到角动量为 j 的本征态为

$$
|\psi_0^j\rangle_e = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -e^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ e^{i(j-\frac{3}{2}\theta)} \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm^j\rangle_e = \frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{i(j-\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j-\frac{3}{2})\theta} \end{pmatrix} \tag{21}
$$

对于空穴部分，由于 $H_{h\downarrow}(k) = -H_{e\uparrow}(k)$, 用同样的方法进行，其能量的本征值与电子部分差一个负号，其本征态应与电子部分一致，即

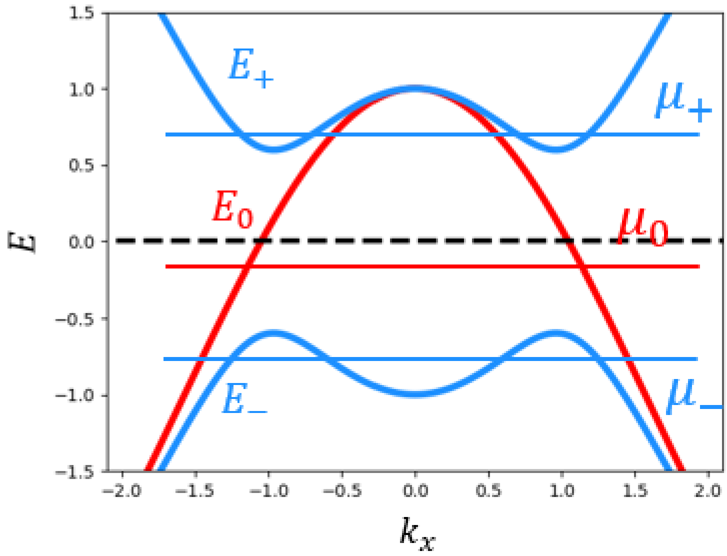
$$
|\psi_0^j\rangle_h = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -e^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ e^{i(j-\frac{3}{2}\theta)} \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm^j\rangle_h = \frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{i(j-\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j-\frac{3}{2})\theta} \end{pmatrix} \tag{22}
$$

为了方便计算，可取 $j=\frac{1}{2}$，此时可得

$$|\psi_0\rangle_e = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix}0\\ -e^{i\theta}\\ e^{-i\theta}\end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm\rangle_e = \frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix}-i(M(k)\pm E)\\ Ake^{i\theta}\\ Ake^{-i\theta}\end{pmatrix} \tag{23}$$

$$|\psi_0\rangle_h = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix}0\\ -e^{i\theta}\\ e^{-i\theta)}\end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm\rangle_h = \frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix}-i(M(k)\pm E)\\ Ake^{i\theta}\\ Ake^{-i\theta}\end{pmatrix} \tag{24}$$

可以画出电子的能带图如下，取 $M0=-1, M1=1, A=0.5k_y=0$, 沿着 k_x 方向 当费米面在 μ_0 附近



时，费米面附近只有 E_0 一条带，可以将 H_{BdG} 投影到这条 band 上，可以写出在基矢 $\{|\psi_0\rangle_e, |\psi_0\rangle_h\}$ 中的 H_{BdG} 为

$$H^{00}_{BdG} = \begin{pmatrix} E-\mu & i\Delta_e e^{-i\theta}(\partial_k - \frac{i\partial_\theta + A^{00}_\theta}{k}) \\ i\Delta_e e^{i\theta}(\partial_k + \frac{i\partial_\theta + A^{00}_\theta}{k}) & \mu - E\end{pmatrix} \tag{25}$$

因为 vortex 并不会破坏体系的旋转对称性，由此可以定义角动量

$$J_z = L_z + J_{basis} + J_{vortex} = -i\partial_\theta + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tau_z \tag{26}$$

其本征函数为

$$\psi(k,\theta) = \frac{1}{\sqrt{k}}\begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta}u_1(k) \\ -ie^{ij\theta}u_2(k)\end{pmatrix} \tag{27}$$

由此可以做一个变换

$$U = \begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta} & \\ & -ie^{ij\theta} \end{pmatrix} \tag{28}$$

由此可以得到

$$(H^{00}_{BdG})^j = U^\dagger H^{00}_{BdG} U = \begin{pmatrix} E-\mu & \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A^{00}_\theta}{k}+\partial_k) \\ \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A^{00}_\theta}{k}-\partial_k) & \mu-E \end{pmatrix} \tag{29}$$

$$= (E-\mu)\sigma_z + i\Delta_e\partial_k + \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A^{00}_\theta) \tag{30}$$

前两项构成一个 Jack-Rebbi，由此可以得到

$$E_j = \frac{\Delta_e}{k}(j-\frac{1}{2}-A^{00}_\theta) \tag{31}$$

而 $A^{00}_\theta = i_e \langle\psi_0|\partial_\theta|\psi_0\rangle_h = -1$ 不可能为半整数，因此在 μ_0 附近没有相变点。

当费米面在 μ_- 附近的时候，费米能级附近有 E_0, E_- 两条 band，将 H_{BdG} 投影到这两条 band 上，我们忽略同一个 k, 不同 θ 之间的耦合，为了计算方便，我们在能量空间进行计算，即将 (k,θ)变换为(E,θ)，然后我们将 H_{BdG} 写在基矢 $\{|\psi_0(E,\theta)\rangle_e, |\psi_-(E,\theta)\rangle_e, |\psi_0(E,\theta)\rangle_h, |\psi_-\rangle(E,\theta)_h\}$

$$\begin{pmatrix} E-\mu & & \Delta_{11} & \Delta_{12} \\ & E-\mu & \Delta_{21} & \Delta_{22} \\ \Delta^\dagger_{11} & \Delta^\dagger_{12} & \mu-E & \\ \Delta^\dagger_{21} & \Delta^\dagger_{22} & & \mu-E \end{pmatrix} \tag{32}$$

其中

$$\Delta_{11} = i\Delta_e e^{-i\theta}(\frac{dE}{dk_-}\partial_E - \frac{i\partial_\theta + A^{00}_\theta}{k_-(E)}) \tag{33}$$

$$= i\Delta_e e^{-i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E - \frac{i\partial_\theta + A^{00}_\theta}{k_-(E)}) \tag{34}$$

$$\Delta_{12} =_e \langle\psi_0(k_0,\theta)|\,\Delta_0 tanh(\frac{r}{\xi})e^{-i\theta}\,|\psi_-(k_-,\theta)\rangle_h \tag{35}$$

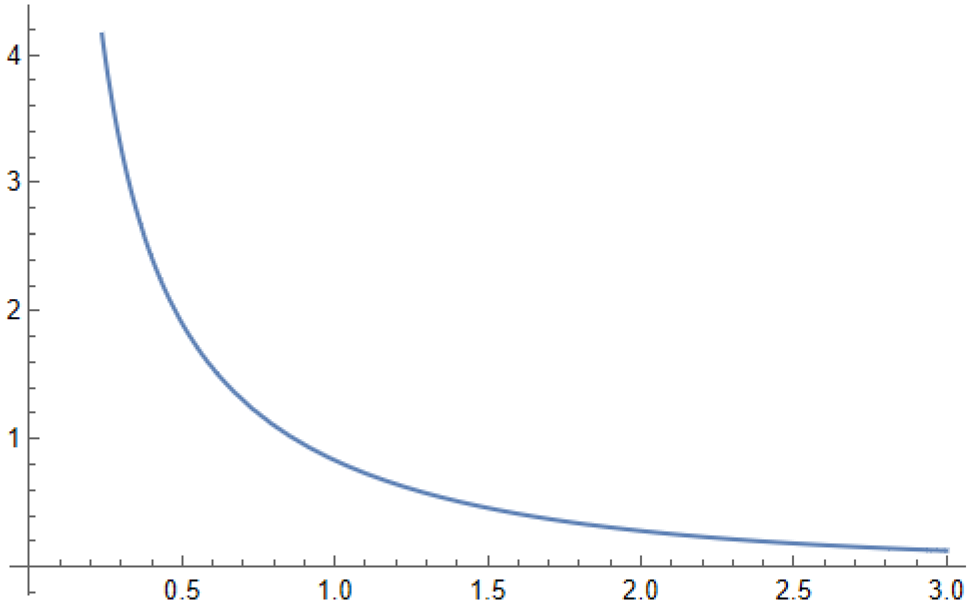
$$=_e \langle\psi_0(k_0,\theta)|\,\Delta_e r e^{-i\theta}\frac{tanh(\frac{r}{\xi})}{\frac{r}{\xi}}\,|\psi_-(k_-,\theta)\rangle_h \tag{36}$$

$$= -\frac{\Delta_e}{k_-}A^{12}_{\theta\ e}\langle\psi_0(k_0,\theta)|\,\frac{tanh(\frac{r}{\xi})}{\frac{r}{\xi}}\,|\psi_-(k_-,\theta)\rangle_h \tag{37}$$

其中右侧积分的大小可以通过数值计算得到

```
In[44]:= Plot[NIntegrate[r * BesselJ[1, a * r] * Tanh[r]/r, {r, 0, ∞}], {a, 0, 3}]
         绘图    数值积分                  第一类贝塞尔函数
```

Out[44]=



其中横坐标表示 k_0 与 k_- 之间的矢径的大小,，可以看到其随着他们之间的差值近似指数衰减，这与我们只考虑两条 band 中最近邻的两个 k 之间的耦合是自洽的。我们将这个积分等效为将 k_- 变为 $k_m = \frac{k_0+k_-}{2}$(近似合理性的证明) 由此可以得到

$$\Delta_{12} = -\frac{\Delta_e}{k_m} A_\theta^{12} \tag{38}$$

同时

$$\Delta_{22} = i\Delta_e e^{-i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E - iA_E^{22} - \frac{i\partial_{\theta+A_\theta^{22}}}{k}) \tag{39}$$

其中 A_E^{22} 可以通过做规范变化 $|\psi_-(E,\theta)\rangle \to e^{i\int^E A_{E'}^{22}}dE'$ 将其消掉, 由此我们便可以得到 H_{BdG}, 为了计算方便, 我们将相同 band 的电子空穴写到一起, 即在基矢 $\{|\psi_0(E,\theta)\rangle_e, |\psi_0(E,\theta)\rangle_h, |\psi_-(E,\theta)\rangle_e, |\psi_-\rangle(E,\theta)_h$ 中

$$\begin{pmatrix} E-\mu & i\Delta_e e^{-i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{00}}{k_-(E)}) & 0 & -\frac{\Delta_e}{k_m}e^{-i\theta}A_\theta^{0-} \\ i\Delta_e e^{i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{00}}{k}) & \mu - E & -\frac{\Delta_e}{k_m}e^{i\theta}A_\theta^{-0} & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta_e}{k_m}e^{-i\theta}A_\theta^{0-} & E-\mu & i\Delta_e e^{-i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E - \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{--}}{k_-(E)}) \\ -\frac{\Delta_e}{k_m}e^{i\theta}A_\theta^{-0} & 0 & i\Delta_e e^{i\theta}(\hbar v_{k_-}\partial_E + \frac{i\partial_\theta + A_\theta^{--}}{k}) & E-\mu \end{pmatrix} \tag{40}$$

因为系统具有连续旋转对称性，可以定义角动量

$$J_z = -i\partial_\theta + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tau_z \tag{41}$$

由此其波函数可以写作

$$\psi(E,\theta)=\frac{1}{\sqrt{k\_(E)}}\begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta}u_1(k) \\ -ie^{ij\theta}u_2(k) \\ e^{i(j-1)\theta}u_3(k) \\ -ie^{ij\theta}u_4(k) \end{pmatrix} \tag{42}$$

由此可以做一个变换

$$U=\frac{1}{\sqrt{k\_(E)}}\begin{pmatrix} e^{i(j-1)\theta} & & & \\ & -ie^{ij\theta} & & \\ & & e^{i(j-1)\theta} & \\ & & & -ie^{ij\theta} \end{pmatrix} \tag{43}$$

由此可得

$$\begin{pmatrix} E-\mu & \Delta_e(\hbar v_{k\_}\partial_E+\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{00}}{k}) & 0 & -\Delta_e\frac{A_\theta^{0-}}{k} \\ \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{00}}{k}-\hbar v_{k\_\partial_E}) & \mu-E & -\Delta_e\frac{A_\theta^{0-}}{k} & 0 \\ 0 & -\Delta_e\frac{A_\theta^{-0}}{k} & E-\mu & \Delta_e(\hbar v_{k\_}\partial_E+\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{--}}{k}) \\ -\Delta_e\frac{A_\theta^{-0}}{k} & 0 & \Delta_e(\frac{j-\frac{1}{2}-A_\theta^{--}}{k}-\hbar v_{k\_}\partial_E) & \mu-E \end{pmatrix} \tag{44}$$

$$=(E-\mu)s_0\tau_z+i\Delta_e\hbar v_{k\_}\partial_E s_0\tau_y+\frac{\Delta_e}{k\_(E)}(j-\frac{1}{2})s_0\tau_x-\begin{pmatrix} 0 & \frac{\Delta_e}{k\_(E)}A_\theta^{00} & 0 & \frac{\Delta_e}{k_m}A_\theta^{0-} \\ \frac{\Delta_e}{k\_(E)}A_\theta^{00} & 0 & \frac{\Delta_e}{k_m}A_\theta^{0-} & 0 \\ 0 & \frac{\Delta_e}{k_m}A_\theta^{-0} & 0 & \frac{\Delta_e}{k\_(E)}A_\theta^{--} \\ \frac{\Delta_e}{k_m}A_\theta^{-0} & 0 & \frac{\Delta_e}{k\_(E)}A_\theta^{--} & 0 \end{pmatrix} \tag{45}$$

前面两项构成一个 4*4 的 JR, 其取零模的时候能量由后面的部分决定, 可求得

$$A_\theta^{00}=0 \qquad A_\theta^{--}=0 \qquad A_\theta^{0-}=\frac{\sqrt{2}Ak\_(E)}{a\_} \tag{46}$$

由此可以得到

$$E_j=\frac{\Delta_e}{k\_(E)}(j-\frac{1}{2})s_0\tau_x-\frac{\Delta_e}{k_m}A_\theta^{0-}s_x\tau_x \tag{47}$$

可以得到其能量本征值为

$$E=\frac{\Delta_e}{k\_(E)}(j-\frac{1}{2}\pm\frac{k\_(E)}{k_m}A_\theta^{0-}) \tag{48}$$

要想使其取得零能解，即 $\frac{k\_(E)}{k_m}A_\theta^{0-}$ 为半整数，容易分析知道其值大于 0 而且小于 0，故其为半整数

的话只能取 $\frac{1}{2}$

$$\frac{k_-(E)}{k_m}A_\theta^{0-}=\frac{k_-(E)}{\frac{k_0(E)+k_-(E)}{2}}\frac{\sqrt{2}Ak_-(E)}{a_-}=\frac{1}{2} \tag{49}$$

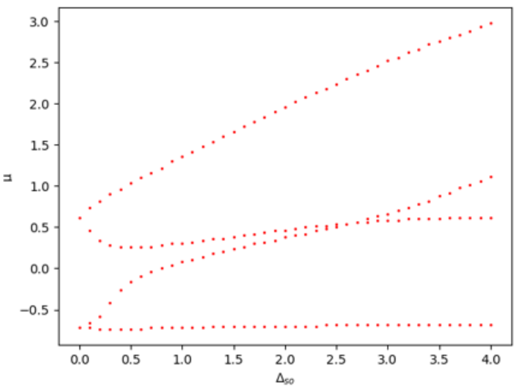
带入数值计算的参数，即 $M0=-1,M1=1,A=0.5$，为了简化计算，我对 $\frac{k_-(E)}{\frac{k_0(E)+k_-(E)}{2}}$ 做了一个简单的估计，我用一个大约的值 0.81 做了一个简单的代替 [从计算得到的能带图上大概估计是 0.9/1.1 约等于 0.81 左右]，做了一下初略的估计

```
Solve[0.81*Sqrt[2]*0.5* x/Sqrt[((-1+x^2+Sqrt[(-1+x^2)^2+0.5*x^2])^2+0.5*x^2)] == 0.5, x]
解方程          平方根

{{x → 1.09035}}

x2 = 1.090347871187568`

1.09035

-Sqrt[(-1+x2^2)^2+0.5*x2^2]
 平方根

-0.793786
```

用同样的方法初步估算了下当费米面位于 μ_+ 附近的时候，其结果大概是

```
Solve[0.81*Sqrt[2]*0.5* x/Sqrt[((1-x^2+Sqrt[(-1+x^2)^2+0.5*x^2])^2+0.5*x^2)] == 0.5, x]
解方程          平方根

{{x → 0.917138}}

x1 = 0.9171384898572194`
Sqrt[(-1+x1^2)^2+0.5*x1^2]
平方根

0.917138

0.667688
```

即相变点的能量大概是在 0.66 和 0.79 附近，数值计算的结果为



其相变点的位置基本是吻合的，同时由

$$E=\frac{\Delta_e}{k\_(E)}(j-\frac{1}{2}\pm\frac{k\_(E)}{k_m}A_\theta^{0-}) \tag{50}$$

可知当 $\frac{k\_(E)}{k_m}A_\theta^{0-}$ 取 $\frac{1}{2}$ 时，j 可取 0,1，即相变点处的 $C_{2z}=1or-1$, 后面我在更具体的将两个零能的波函数具体的写出来。当把 DSM 中 k_y 前面的系数反号之后，其电子部分的哈密顿量变为

$$H_{e\uparrow}(k)=\begin{pmatrix} M(k) & -iAke^{-i\theta} & -iAke^{-i\theta} \\ iAke^{i\theta} & -M(k) & 0 \\ iAke^{i\theta} & 0 & -M(k) \end{pmatrix} \tag{51}$$

此时的角动量就变为了

$$J_z=-i\partial_\theta+\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & & \\ & -\frac{1}{2} & \\ & & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{52}$$

用上面同样的方法可以求得此时 $H_{e\uparrow}(k)$ 的本征态为

$$|\psi_0^j\rangle_e=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -e^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ e^{i(j+\frac{1}{2}\theta)} \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm^j\rangle_e=\frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{i(j-\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{3}{2})\theta} \end{pmatrix} \tag{53}$$

同样的对于空穴部分由

$$|\psi_0^j\rangle_h=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -e^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ e^{i(j+\frac{1}{2}\theta)} \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm^j\rangle_h=\frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{i(j-\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \\ Ake^{i(j+\frac{1}{2})\theta} \end{pmatrix} \tag{54}$$

同样的为了计算方便可以取 $j=-\frac{1}{2}$, 此时可得

$$|\psi_0\rangle_e=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm\rangle_e=\frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{-i\theta} \\ Ak \\ Ak \end{pmatrix} \tag{55}$$

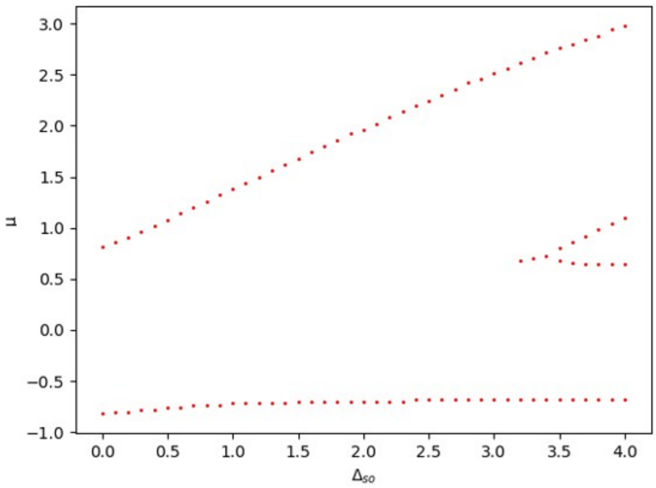
$$|\psi_0\rangle_h=\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\psi_\pm\rangle_h=\frac{1}{a_\pm\sqrt{2\pi}}\begin{pmatrix} -i(M(k)\pm E)e^{-i\theta} \\ Ak \\ Ak \end{pmatrix} \tag{56}$$

此时注意到中间的 $|\psi_0\rangle_e$ 与 k,θ 均无关，因此可得其与另外两条 band 的耦合均为 0，所以可以直

接在 (k,θ) 中考虑，用同样的方法，可求出当

$$A_{\theta}^{--} = -\frac{(-M(k)+E)^2}{(-M(k)+E)^2+2A^2k^2} \tag{57}$$

为半整数的时候，其发生相变，最终可以得到当 $M(k)=0$ 的时候发生相变，带入数值，可计算得相变的能量为 ±0.707，与数值计算比较吻合。



1 结论

用 Vishwanath 的方法比较完整的推到导了三带模型的拓扑相变问题，从推导的结果来看，在没有改变系数的情况下，中间那条带与另外的两条带都有耦合，从而会有一个非阿贝尔的贝里相位，使得在某个能量 E 处会有两个角动量不相同的相变点。而当改变系数的符号之后，使得角动量发生了改变，从而导致中间那条 band 与另外的两条 band 都没有了耦合，此时就只有另外的两条 band 提供相变，情况与一个简单 TI 的情形类似。在推导过程中关于不同 k 之间的耦合系数的合理性后面再更有理由的估计一下，然后就是将两个零能解得具体波函数写出来。然后就是改变系数之后的情况，因为和之前的推导一样，所以这里暂时就没详细整理，后续将其补充完整。