

文献阅读笔记

YuXuan-Li

2022 年 3 月 7 日

目录

1 Topological Superconductivity in an Extended s-Wave Superconductor and Its Implication to Iron-Based Superconductors	2
1.1 空间群对称性分析	2
1.2 模型研究	7
1.3 推广到三维	10

1 Topological Superconductivity in an Extended s-Wave Superconductor and Its Implication to Iron-Based Superconductors

当存在空间反演和时间反演时， s 波配对的超导体通常都是平庸的，这里研究了空间群是非点式空间群的情况，发现了一个例外，在中心对称空间群 $P4/nmm$ 中，存在着镜面对称保护的二阶拓扑超导态，且给出了相应的拓扑不变量，以及通过费米面判据同样得到了拓扑不变量。这里的研究发现之前在铁基超导中提出的在电子口袋上符号改变的 s 波配对就是这样的一种拓扑态，因此通过这个研究可以对铁基超导体中的电子配对形式给出一个确定的答案。

In crystallography, a centrosymmetric point group contains an inversion center as one of its symmetry elements.

在之前的研究中，通过 C, P, T 对称性，AZ 分类给出了在不同空间维度下体系的拓扑分类，但是晶体的对称性同样在体系的拓扑性质中伴随着重要的角色。比如一个 $DIII$ 类且具中心对称的超导体总是属于平庸的表示，因此通常情况下 s 波的配对总是平庸的态。这里的研究发现在中心对称体系中， s 波配对是可以具有非平庸的拓扑态的，不过此时需要具有非点式的对称操作。

1.1 空间群对称性分析

这里研究的是 129 空间群 $G = P4/nmm$ ，考虑的是准二维结构，空间群关于平移操作的商群为

$$G/T = D_{2d} \otimes Z_2 \quad (1.1)$$

这个商群的生成元为

$$\{M_y|0\}, \{S_{4z}|0\}, \{I|\tau_0\} \quad \tau_0 = \mathbf{a}_1/2 + \mathbf{a}_2/2 \quad (1.2)$$

点群操作满足

$$\begin{aligned} M_y &: (x, y, z) \rightarrow (x, -y, z) \\ S_{4z} &: (x, y, z) \rightarrow (y, -x, -z) \\ I &: (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z) \end{aligned} \quad (1.3)$$

这里点群 D_{2d} 是定义在格点位置上的，而 Z_2 包含的反演操作中心在两个最近邻位置的中点处。

由于空间群具有特殊的结构 (1.1)，文章中给出了下面两个结论

- D_{2d} 和 Z_2 是定义在不等价格点上的两个点群，所以空间群 G 是非点式空间群，操作元中包含了滑移镜面和螺旋操作。
- 点群 Z_2 中的反演操作并不与点群 D_{2d} 中的操作对易

$$\{I|\tau_0\}\{M_y|0\} = \{E|\mathbf{a}_2\}\{M_y|0\}\{I|\tau_0\} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned}
(x, y, z) &\xrightarrow{\{M_y|\mathbf{0}\}} (x, -y, z) \xrightarrow{\{I|\tau_0\}} (-x + \frac{\mathbf{a}_1}{2}, y + \frac{\mathbf{a}_2}{2}, z) \\
(x, y, z) &\xrightarrow{\{I|\tau_0\}} (-x + \frac{\mathbf{a}_1}{2}, -y + \frac{\mathbf{a}_2}{2}, z) \xrightarrow{\{M_y|\mathbf{0}\}} (-x + \frac{\mathbf{a}_1}{2}, y - \frac{\mathbf{a}_2}{2}, z)
\end{aligned} \tag{1.5}$$

在准二维结构的 BZ 中考虑两条高对称路径

$$\begin{aligned}
\Sigma_Y : M &\rightarrow Y \rightarrow M \xrightarrow{\text{Invariant}} C_{2v} \otimes Z_2 \\
\Sigma_G : X &\rightarrow G \rightarrow X
\end{aligned} \tag{1.6}$$

群的操作元包括

$$\begin{aligned}
&\{E|\mathbf{0}\}, \{C_{2z}|\mathbf{0}\}, \{I|\tau_0\}, \{M_z|\tau_0\} \\
&\{M_x|\mathbf{0}\}, \{M_y|\mathbf{0}\}, \{C_{2x}|\tau_0\}, \{C_{2y}|\tau_0\}
\end{aligned} \quad \tau_0 = \frac{\mathbf{a}_1}{2} + \frac{\mathbf{a}_2}{2} \tag{1.7}$$

除了晶体对称性，同样可以考虑

$$\{I|\tau_0\}\Theta \quad \Theta \rightarrow \text{时间反演对称} \tag{1.8}$$

对称操作 $\{I|\tau_0\}\Theta$ 是反幺正的，可以令 BZ 中的每个 \mathbf{k} 都保持不变，所以可以利用这个对称性来对高对称位置上的本征态进行分类标记。

- 对称操作的推导

首先系统的哈密顿量为 H ，它满足本征方程

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

假设现在有一个对称操作 P 要作用到系统上，那么就有

$$PH|\psi\rangle = EP|\psi\rangle$$

可以看到这个方程不再是一个本征方程了，而在量子力学中通常就喜欢处理本征值问题，所以将上面的形式改变一下

$$PHP^{-1}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

那么这时候问题就变成了 PHP^{-1} 的本征方程，接下来的问题就是系统的哈密顿量在对称操作 P 下面到底是如何变化的。

在凝聚态系统里面，处理的哈密顿量都是带有动量 k 的 $H(k)$ ，它与系统本来的哈密顿量 H 之间的关系是

$$H(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$$

而 \hat{C}_m 是 H 的对称操作满足

$$\hat{C}_m H \hat{C}_m^{-1} = H$$

将这个操作作用到 $H(\mathbf{k})$

$$\hat{C}_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} H e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} = \hat{C}_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} H \hat{C}_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1}$$

下面的问题就是看看对称操作如何对 $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$ 作用，取一个本征态 $|\mathbf{r}\rangle$ ，有下面的关系

$$\hat{C}_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} |\mathbf{r}\rangle = \hat{C}_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |R_m^{-1}\mathbf{r}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot(R_m^{-1}\cdot\mathbf{r})} \hat{C}_m |R_m^{-1}\mathbf{r}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot(R_m^{-1}\cdot\mathbf{r})} |\mathbf{r}\rangle$$

$$\hat{C}_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} |\mathbf{r}\rangle = \hat{C}_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |R_m^{-1}\mathbf{r}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(R_m^{-1}\cdot\mathbf{r})} \hat{C}_m |R_m^{-1}\mathbf{r}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(R_m^{-1}\cdot\mathbf{r})} |\mathbf{r}\rangle$$

这里将矢量进行转动

$$\mathbf{k} \cdot (R_m^{-1} \cdot \mathbf{r}) = R_m \cdot \mathbf{k} \cdot R_m (R_m^{-1} \cdot \mathbf{r}) = R_m \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$$

这里的含义就是同时对两个矢量进行相同的转动操作，二者之间的点积是相同的。将上面这些关系综合起来就可以得到

$$\hat{C}_m e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} H \hat{C}_m e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{C}_m^{-1} = e^{iR_m \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} H e^{-iR_m \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = H(R_m \mathbf{k}) = C_m H(\mathbf{k}) C_m^{-1}$$

所以这里最重要的就是推导出

$$H(R_m \mathbf{k}) = C_m H(\mathbf{k}) C_m^{-1}$$

在上面提到 $\{I|\tau_0\}\Theta$ 对每个 \mathbf{k} 都是保持不变的，所以就有

$$H(\mathbf{k}) = (\{I|\tau_0\}\Theta) H(\mathbf{k}) (\{I|\tau_0\}\Theta)^{-1}$$

因此可以利用 $\{I|\tau_0\}\Theta$ 这个操作的本征值来对 Bloch 态进行分类标记。这里来关注镜面操作 $\{M_y|\mathbf{0}\}$ ，对易 spinfull 的系统满足

$$(\{M_y|\mathbf{0}\})^2 = -1 \quad m_y = \pm i \quad (1.9)$$

在 spinfull 系统中，这个对称性满足

$$(\{I|\tau_0\}\Theta)(\{I|\tau_0\}\Theta)|\phi(\mathbf{k})\rangle = -|\phi(\mathbf{k})\rangle \quad (1.10)$$

$$(\{I|\tau_0\}\Theta)\{M_y|\mathbf{0}\}|\phi(\mathbf{k})\rangle = e^{ik_y} \{M_y|\mathbf{0}\}(\{I|\tau_0\}\Theta)|\phi(\mathbf{k})\rangle \quad (1.11)$$

这里推导 (1.11) 时使用了

$$\{I|\tau_0\}\{M_y|\mathbf{0}\} = \{E|\mathbf{a}_2\}\{M_y|\mathbf{0}\}\{I|\tau_0\}$$

这里没有考虑到磁性，所以在顺磁相中，时间反演对称操作和晶体对称性是对易的。

从这里可以看到操作 $\{I|\tau_0\}\Theta$ 在每个 \mathbf{k} 点存在 Kramers 简并。

$$(\{I|\tau_0\}\Theta)\{M_y|\mathbf{0}\}|\phi(\mathbf{k})\rangle = e^{ik_y} \{M_y|\mathbf{0}\}(\{I|\tau_0\}\Theta)|\phi(\mathbf{k})\rangle$$

这个对称操作之间满足的关系是和 k_y 相关的，所以可以看到，在不同的高对称路径上有

$$k_y = \pi : [\{I|\tau_0\}\Theta, \{M_y|\mathbf{0}\}]_+ = 0 \quad (1.12)$$

$$k_y = 0 : [\{I|\tau_0\}\Theta, \{M_y|\mathbf{0}\}]_- = 0 \quad (1.13)$$

这里的 $[\cdot]_-, [\cdot]_+$ 分别表示对易关系和反对易关系，从公式 (1.10) – (1.13) 可以得到下面结论

如何有一个本征值为 m_y 的 Bloch 态，那么在 Σ_G 上会有一个本征值为 $-m_y$ 的简并态，在 Σ_Y 上存在本征值为 m_y 的简并态。

在高对称线 Σ_Y 的高对称点 Y, M 上，除了上面讨论的对称性之外，还存在着两重旋转对称 $\{C_{2z}|\mathbf{0}\}$ ，这个操作具有如下性质

$$C_{2z} : m_y \rightarrow -m_y \quad (1.14)$$

它将镜面本征值为 m_y 的态映射到 $-m_y$ ，所以高对称点 Y, M 一定是四重简并的。这里 X 点上的简并度同样是 4，因为 X 和 Y 点之间是用过空间群的四重旋转对称操作相联系的。

$$\begin{aligned} (x, y) &\xrightarrow{C_{2z}} (-x, -y) \xrightarrow{M_y} (-x, y) \\ (x, y) &\xrightarrow{M_y} (x, -y) \xrightarrow{C_{2z}} (-x, y) \end{aligned} \quad [C_{2z}, M_y]_- = 0 \quad (1.15)$$

接下来考虑体系中存在 s 波配对的情况，这里关注的是 $DIII$ 类这一分类，当考虑晶体对称性的时候，会对这些拓扑指标产生限制。比如当存在空间反演的时候， $DIII$ 类中的 \mathcal{Z}_2 指标在 s 波配对的时候总是平庸的。下面给出证明过程，在 $1D$ 和 $3D$ 时，对应的拓扑指标是 \mathcal{Z} ，其实也就是 $1D$ 和 $3D$ 时的 winding number，因为 $DIII$ 类是存在 Chiral symmetry 的，对于 s 波超导体，手性对称性和反演对称操作满足

$$[\mathcal{C}, \mathcal{I}] = 0 \quad \mathcal{I}\mathbf{k} = -\mathbf{k} \quad \det(\mathcal{I}) = -1 \quad (1.16)$$

对于 $2D$ 的情况，此时超导体的拓扑指标为 \mathcal{Z}_2 ，与时间反演对称保护的拓扑绝缘体相似，不过直接计算 \mathcal{Z}_2 是比较困难的，但是当空间反演存在的时候，可以将其表示为

$$\mathcal{Z}_2 : (-1)^\mu = \Pi_i \Pi_{m=1}^N \xi_{2m}(\Gamma_i) \quad (1.17)$$

这里的 Γ_i 是 $2D$ 时 BZ 中的 4 个时间反演不变动量点， ξ_{2m} 则是第 $2m$ 个能量为负的态的宇称。这里因为存在时间反演对称性，所以每个态满足 kramers 简并，也就是说每个能量 E 下的态都是两重简并的，构成了 Kramers 对，而且 Kramers 对的宇称是相同的。这里同样存在 Chiral 对称性

$$\mathcal{C}H(\mathbf{k})\mathcal{C}^{-1} = -H(\mathbf{k}) \quad (1.18)$$

可以 Chiral 对称性可以将相同宇称能量相反的状态联系起来

$$[E(\mathbf{k}), \xi_0] \rightarrow [-E(\mathbf{k}), \xi_0] \quad [\mathcal{C}, \mathcal{I}] = 0 \quad (1.19)$$

到这里就可以看出，此时 \mathcal{Z}_2 的取值只能有一个，所以在 s 波配对的情况下，系统总是平庸的。

对于 $1D$ 系统，当其存在额外的晶体对称性 g 的时候 $g\mathcal{H}(k)g^{-1} = H(\mathbf{g}k)$ ，此时这个对称性对

winding number 的限制为

$$\begin{aligned}
w &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} [\mathcal{C}\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_k\mathcal{H}(k)] \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} \left\{ \mathcal{C} [g\mathcal{H}(\mathbf{g}^{-1}k)g^{-1}]^{-1} \partial_k [g\mathcal{H}(\mathbf{g}^{-1}k)g^{-1}] \right\} \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} [g^{-1}\mathcal{C}g\mathcal{H}^{-1}(\mathbf{g}^{-1}k)\partial_k\mathcal{H}(\mathbf{g}^{-1}k)] \\
&= \int_{-g^{-1}\pi}^{g^{-1}\pi} \frac{d(\mathbf{g}k)}{2\pi} \text{tr} [g^{-1}\mathcal{C}g\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{\mathbf{g}k}\mathcal{H}(k)] \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} [g^{-1}\mathcal{C}g\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_k\mathcal{H}(k)] \cdot \det(\mathbf{g}) \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr} [\mathcal{C}\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_k\mathcal{H}(k)] \cdot \det(\mathbf{g})
\end{aligned} \tag{1.20}$$

同样的在 3D 情况下有

$$\begin{aligned}
w_{3D} &= \int \frac{d^3k}{48\pi^2} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \text{tr} [\mathcal{C}\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\alpha}\mathcal{H}(k)\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\beta}\mathcal{H}(k)\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\gamma}\mathcal{H}(k)] \\
&= \int \frac{d^3k}{48\pi^2} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \text{tr} \left\{ \mathcal{C} [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}]^{-1} \partial_{k_\alpha} [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}] [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}]^{-1} \right. \\
&\quad \left. \times \partial_{k_\beta} [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}] [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}]^{-1} \partial_{k_\gamma} [\mathcal{I}\mathcal{H}(-\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}] \right\} \\
&= \int \frac{d^3k}{48\pi^2} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \text{tr} [\mathcal{C}\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\alpha}\mathcal{H}(k)\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\beta}\mathcal{H}(k)\mathcal{H}^{-1}(k)\partial_{k_\gamma}\mathcal{H}(k)] \cdot \det(\mathcal{I}) \\
&= -w_{3D} = 0,
\end{aligned} \tag{1.21}$$

上面就证明了，当存在反演对称操作的时候， s 波电子配对情况下 $DIII$ 类在 1D, 3D 情况是总是平庸的。

虽然 \mathcal{Z}_2 时平庸的，但是可以发现在这个系统中 s 波配时系统是镜面对称保护的拓扑超导体，在 $DIII$ 类中总是存在 Chiral 对称性，它是粒子空穴对称和时间反演对称的积，而且在 s 波配对的情况下，Chiral 对称性和晶体对称性之间满足对易关系，而且在每个镜面操作 $\{M_y|\mathbf{0}\}$ 的不变子空间中，同样也存在 Chiral 对称性，下面就来考虑 BZ 中两条 $\{M_y|\mathbf{0}\}$ 操作不变的线 Σ_Y, Σ_G ，分别将其看作是一维的系统，那么此时在镜面子空间中，沿着高对称线 Σ_Y/G 的 winding number 为

$$w_{Y/G}^{\pm i} = \int_{Y/G} \frac{dk_x}{2\pi} \text{tr} [\mathcal{C}\mathcal{H}_{\pm i}^{-1}(\mathbf{k})\partial_{k_x}\mathcal{H}_{\pm i}(\mathbf{k})] \tag{1.22}$$

这里的 $\mathcal{H}_{\pm i}(\mathbf{k})$ 是在镜面操作本征值 $m_y = \pm i$ 子空间中的超导哈密顿量。

$$k_y = \pi : [\{I|\tau_0\}\Theta, \{M_y|\mathbf{0}\}]_+ = 0$$

$$k_y = 0 : [\{I|\tau_0\}\Theta, \{M_y|\mathbf{0}\}]_- = 0$$

所以镜面 winding number 也是不同的。下面同时考虑时间反演，空间反演和 (1.12, 1.13) 的限制。

首先来考虑在 $\{M_y|\mathbf{0}\}$ 的子空间中，沿着高对称线 $\Sigma_{Y/G}$ 的 winding number，首先因为存在 $\{I|\tau_0\}\Theta$ 这个对称性，每条能带都是两重简并的，而且这些对称性在 $\Sigma_{Y/G}$ 上满足

$$\begin{aligned}
(\{I|\tau_0\}\Theta)\{M_z|\tau_0\}|\varphi(\mathbf{k})\rangle &= e^{-2i\mathbf{k}\cdot\tau_0}\{M_z|\tau_0\}(\{I|\tau_0\}\Theta)|\varphi(\mathbf{k})\rangle \\
(\{I|\tau_0\}\Theta)\{M_y|\mathbf{0}\}|\varphi(\mathbf{k})\rangle &= e^{ik_y}\{M_y|\mathbf{0}\}(\{I|\tau_0\}\Theta)|\varphi(\mathbf{k})\rangle \\
\{M_z|\tau_0\}\{M_y|\mathbf{0}\}|\varphi(\mathbf{k})\rangle &= -e^{ik_y}\{M_y|\mathbf{0}\}\{M_z|\tau_0\}|\varphi(\mathbf{k})\rangle
\end{aligned} \tag{1.23}$$

也就是满足

$$\begin{aligned} k_y = \pi : [\{I | \tau_0\} \Theta, \{M_y | \mathbf{0}\}]_+ &= 0, [\{M_z | \tau_0\}, \{M_y | \mathbf{0}\}]_- = 0 \\ k_y = 0 : [\{I | \tau_0\} \Theta, \{M_y | \mathbf{0}\}]_- &= 0, [\{M_z | \tau_0\}, \{M_y | \mathbf{0}\}]_+ = 0 \end{aligned} \quad (1.24)$$

通过上面的这些限制，可以得到下面的结论

- 在 Σ_Y 上，两个简并态处在相同的镜面子空间时，可以通过 $\{M_z | \tau_0\}$ 解耦，这里的两重简并处因为存在 $\{I | \tau_0\} \Theta$ 对称性，满足 $w_Y^{m_y, m_z} = w_Y^{m_y, -m_z}$ ，这里 $m_y = \pm i, m_z = \pm i e^{i\mathbf{k} \cdot \tau_0}$ ，当考虑时间反演对称的限制后，可以得到 $w_Y^{+i} = -w_Y^{-i} = 2\mathcal{Z}$ 。
- 在 Σ_G 上，考虑空间反演 $\{I | \tau_0\}$ 满足 $\{M_y | \mathbf{0}\} \{I | \tau_0\} |\phi(\mathbf{k})\rangle = e^{ik_y} \{I | \tau_0\} \{M_y | \mathbf{0}\} |\phi(\mathbf{k})\rangle = \{I | \tau_0\} \{M_y | \mathbf{0}\} |\phi(\mathbf{k})\rangle$ 。很明显反演操作 $\{I | \tau_0\}$ 会将 \mathbf{k} 的态映射到 $-\mathbf{k}$ ，它们属于相同的镜面子空间，根据 (1.20) 可以得到 $w_G^{+i} = -w_G^{-i} = 0$

上面的结果同样可以通过计算 1D 时候的 winding number 来理解，此时的 winding number 可以通过费米面判据来计算

$$w = \frac{1}{2} \sum_j \text{sgn}[v(k_{F,j}) \Delta(k_F, j)] \quad (1.25)$$

这里的 $v(k_F, j)$ 和 $\Delta(k_F, j)$ 分别表示在第 j 个费米点上的费米速度和超导电子配对，通过公式 (1.25) 就可以计算两个高对称路径上 Σ_G/Y 上的镜面 winding number。对于 s 波配对的电子，配对序参量 $\Delta(\mathbf{k})$ 关于动量 \mathbf{k} 是偶函数，在 Σ_G 上，在每个镜面子空间中，费米速度关于 \mathbf{k} 是奇函数，所以如果利用 (1.25) 进行计算可以得到

$$w_G^{\pm i} = \frac{1}{2} \sum_j \text{sgn}[v(k_{F,j}) \Delta(k_F, j)] = 0 \quad (1.26)$$

在 Σ_Y 上，能带在 \mathbf{k} 和 $-\mathbf{k}$ 的位置处不是对称的，所以也就不会像在 Σ_G 上的时候对称的 \mathbf{k} 位置上费米速度相反，如果配对序参量在能带上有符号相反的情况，此时就会有非零的 winding number

$$w_Y^{\pm i} = \frac{1}{2} \sum_j \text{sgn}[v(k_{F,j}) \Delta(k_F, j)] \neq 0 \quad (1.27)$$

这个拓扑数表面在 (10) 边界上 $k_y = \pi$ 的位置处将会有 $|w_Y^{\pm i}|$ 个 Dirac 锥。

在中心对称超导体中，这种拓扑态的存在完全是因为非点式空间群中存在非点式对称性导致的能带上的简并所产生的。

1.2 模型研究

这里考虑 p_x, p_y 轨道构建一个有效模型

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & t \cos k_x s_0 (\sigma_0 + \sigma_3) \eta_0 + t \cos k_y s_0 (\sigma_0 - \sigma_3) \eta_0 + 4t_1 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{k_y}{2} s_0 \sigma_0 \eta_1 - 4t_2 \sin \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} s_0 \sigma_1 \eta_1 \\ & - \lambda_R \sin k_x s_2 (\sigma_0 + \sigma_3) \eta_3 - \lambda_R \sin k_y s_1 (\sigma_0 - \sigma_3) \eta_3 + \frac{\lambda}{2} s_3 \sigma_2 \eta_0 \end{aligned} \quad (1.28)$$

这里的 s_i, σ_i, η_i 分别是自旋, 轨道, 子晶格自由度。s 波超导配对表示为

$$\mathcal{H}_{sc} = [\Delta_0 + 2\Delta_1(\cos k_x + \cos k_y)]s_0\sigma_0\eta_0 \quad (1.29)$$

此时的基矢为

$$\psi^\dagger(\mathbf{k}) = [c^\dagger(\mathbf{k}), i s_2 c(-\mathbf{k})]$$

总的哈密顿量表示为

$$\mathcal{H}_{\text{BdG}} = (\mathcal{H}_0 - \mu)\tau_3 + \mathcal{H}_{sc}\tau_1 \quad (1.30)$$

这里的 τ_i 是 Nambu 空间自由度, 满足的对称性为

$$\Theta = i s_2 \sigma_0 \eta_0 \tau_0 \mathcal{K} \quad \mathcal{C} = s_0 \sigma_0 \eta_0 \tau_2 \quad \mathcal{P} = \mathcal{C} \Theta \quad (1.31)$$

在这个基矢的表示喜爱, 空间群商群的生成元为

$$\mathcal{I} = e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_0} s_0 \sigma_0 \eta_1 \tau_0 \quad M_y = i s_2 \sigma_3 \eta_0 \tau_0 \quad S_{4z} = i e^{i s_3 \pi / 4} \sigma_2 \eta_0 \tau_0 \quad (1.32)$$

电子配对节点位置 $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ 和费米面的位置之间有两种构型 可以看到, 在 (10) 边界上, 在

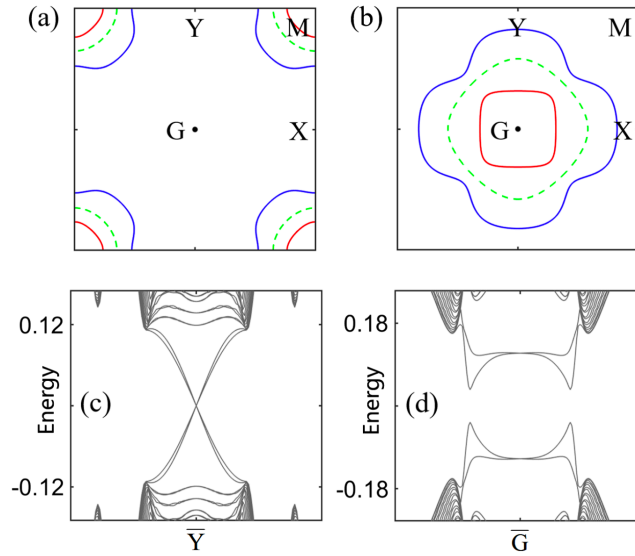


图 1.1:

不同构型下边界态也是不同的。这里需要说明的是, 如果是 (01) 边界, 这些结果也都是相似的, 只不过此时这些态是由 $\{M_x|\mathbf{0}\}$ 保护的, 两个不同方向上的对称性通过四重旋转对称相联系。

这里镜面保护的拓扑超导体实际上是一个二阶拓扑态, 在这个体系中存在 Majorana corner 态, 此时在构型一的参数下, 如果演者 (11) 边界, 此时既没有 $\{M_y|\mathbf{0}\}$ 也没有 $\{M_x|\mathbf{0}\}$ 对称性, 沿着这个方向上是不存在边界态的, 在 (11) 边界和 (1 $\bar{1}$) 边界相交处存在 corner 态。这里 corner 态的存在是由镜面对称 $\{M_x|\mathbf{0}\}, \{M_y|\mathbf{0}\}$ 保证, 可以通过边界态理论来证明。首先来研究 (10) 边界上的边界态, 如图 1.2(c) 所示, 其对应着图 1.1(c) 中的边界态, 此时边界态的对应着 $|w_Y^\pm| = 2$ 的情况, 这个边界上有时间反演对称性, 粒子空穴对称性, 手性对称, 镜面对称

$$\begin{aligned} \Theta \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(k_y) \Theta^{-1} &= \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(-k_y), & \mathcal{P} \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(k_y) \mathcal{P}^{-1} &= -\mathcal{H}_{\text{eff,I}}(-k_y) \\ \mathcal{C} \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(k_y) \mathcal{C}^{-1} &= -\mathcal{H}_{\text{eff,I}}(k_y), & \mathcal{M}_y \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(k_y) \mathcal{M}_y^{-1} &= \mathcal{H}_{\text{eff,I}}(-k_y) \end{aligned} \quad (1.33)$$

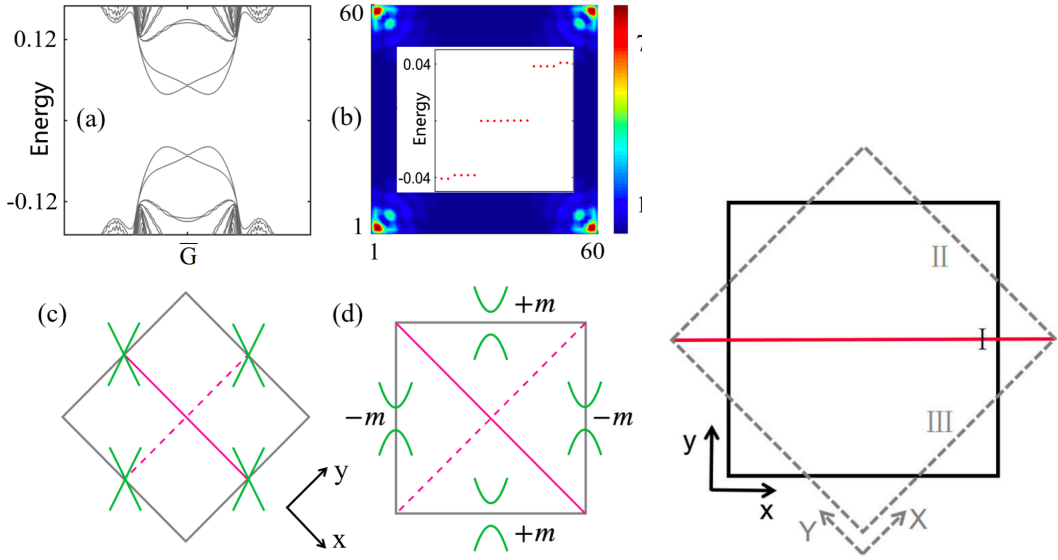


图 1.2:

这里选择一个规范之后，队形操作满足

$$[\Theta, \mathcal{M}]_- = [\mathcal{P}, \mathcal{M}]_- = [\mathcal{C}, \mathcal{M}_y]_- = 0 \quad (1.34)$$

这里的对称操作的具体形式为

$$\Theta = i s_2 \kappa_0 \mathcal{K} \quad \mathcal{P} = i s_2 \kappa_2 \mathcal{K} \quad \mathcal{C} = s_0 \kappa_2 \quad (1.35)$$

通过这些对称性的约束，可以得到边界上的有效哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{eff},I} = v k_y \sum_{i=1}^3 (\alpha_i s_i \kappa_1 + \beta_i s_i \kappa_3) + m (\alpha_0 s_0 \kappa_1 + \beta_0 s_0 \kappa_3) \quad (1.36)$$

根据规范选择 (1.34) 可以得到镜面对称操作的形式为

$$\mathcal{M}_y = i s_o \kappa_2 \quad (1.37)$$

将镜面对称作用到边界有效哈密顿量 (1.36) 可以得到

$$\mathcal{H}_{\text{eff},I} = v k_y \sum_{i=1}^3 (\alpha_i s_i \kappa_1 + \beta_i s_i \kappa_3) \quad (1.38)$$

为了简化可以将其形式选择为

$$\mathcal{H}_{\text{eff},I} = v k_y s_3 \kappa_3 \quad (1.39)$$

这里虽然边界 I 是镜面操作不变的边界，但是 II 和 III 确实镜面操作相联系的边界，它们上面是可以存在质量项，所以这两个边界上的有效哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{eff},II} = v k_Y s_3 \kappa_3 + m_{II} s_0 \kappa_1, \quad \mathcal{H}_{\text{eff},III} = v k_X s_3 \kappa_3 + m_{III} s_0 \kappa_1 \quad (1.40)$$

而且这里因为 II 和 III 这两个边界是通过镜面操作相联系的

$$\mathcal{M}_y \mathcal{H}_{\text{eff},II} \mathcal{M}_y^{-1} = \mathcal{H}_{\text{eff},III} \rightarrow m_{II} = -m_{III} \quad (1.41)$$

1.3 推广到三维

将前面二维的结构进行堆垛构建三维体系，不过此时对于每一个固定的 k_z^0 都存在的 winding number

$$w_0^{\pm i}(k_z^0) \rightarrow (k_x, 0, k_z^0) \quad w_\pi^{\pm i}(k_z^0) \rightarrow (k_x, \pi, k_z^0) \quad (1.42)$$

相对应的就会有 $|w_{0/\pi}^{\pm i}(k_z^0)|$ 对零能模在 (100) 面上出现在 $(0/\pi, k_z^0)$ 的位置处，这里 BZ 的动量指标为 (k_y, k_z) 。winding number 的改变一定与体态能谱 gapless 点的位置相关，考虑如图??(a) 中所

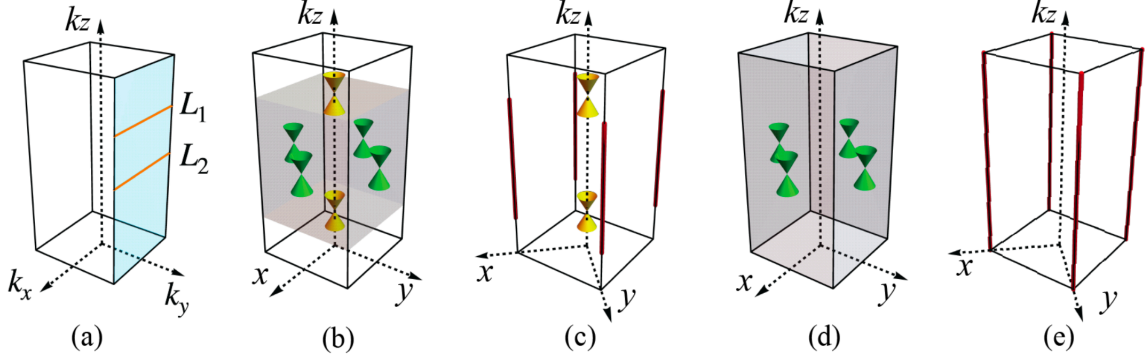


图 1.3:

示的两条线，假设其对应的 winding number 为 $w_\pi^{\pm i}(k_z^1), w_\pi^{\pm i}(k_z^2)$ ，如果 $w_\pi^{\pm i}(k_z^1) \neq w_\pi^{\pm i}(k_z^2)$ ，那么在从 $k_z^1 \rightarrow k_z^2$ 的过程中 winding number 一定经历了拓扑相变，也就是说在 $k_y = \pi$ 的平面上，在 $k_z^2 < k_z < k_z^1$ 的路径上体态能带存在 gapless 的点。

另一方面，与 3D 情况相通，对称操作 $\{I|\tau_0\}$ 同样要求本征值为 m_y 的 Bloch 态与本征值为 $-m_y$ 的态在 $k_y = 0$ 的面上是简并的，与 m_y 的态在 $k_y = \pi$ 的平面上是简并的。因此对于 s 波配对的态，winding number $w_{0/\pi}^{\pm i}(k_z^0)$ 在 $(k_x, 0, k_z^0)$ 这条线上的分析，在考虑了 $\{C_{2z}|\mathbf{0}\}$ 的时候和 2D 情况是完全相似的。即就是无论哪种电子配对都有

$$w_0^i(k_z^0) = -w_0^{-i}(k_z^0) = 0 \quad w_\pi^i(k_z^0) = -w_\pi^{-i}(k_z^0) = 2\mathbb{Z} \quad (1.43)$$

此时边界态与 corner 态斗鱼 2D 情况下是相似的。

基于上面的分析，在 3D 情况下有三种不同的相

- Full-gap trivial phase \rightarrow 图1.3(d)
- Full-gap second-order topological superconductor \rightarrow 图1.3(e)
- gapless second-order topological superconductor(second-order topological Dirac superconductor) \rightarrow 图1.3(b,c)