此阶段工作主要是为了找能带简并点，然后调模型参数，令能带经历：

打开 -> 简并点 -> 打开 的过程，这是存在拓扑界面态的必要条件？（不清楚是不是）

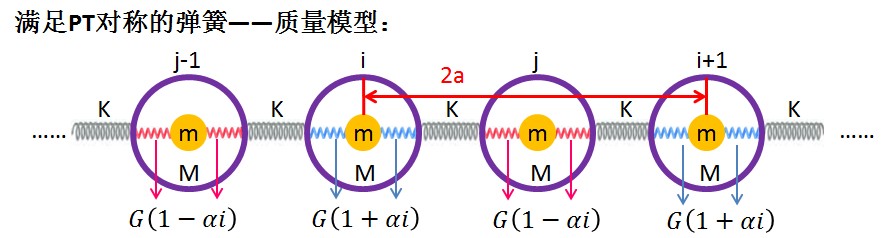


图 1所研究的模型结构

结构所遵循的公式如下：

用矩阵表示

如果，存在非0解，则要求系数行列式为0，所以有：

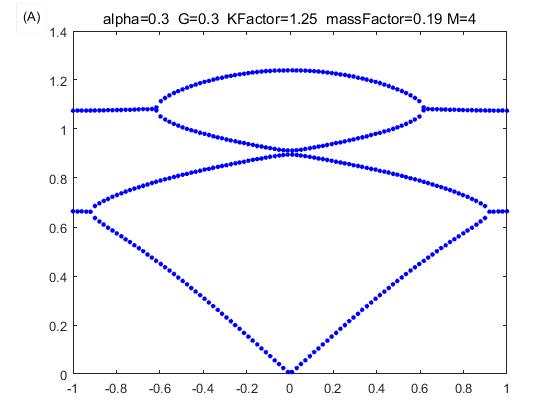
详细推导在前面的论文模型总结中给出。

如果展开公式中的和将会看到这是一个复杂的一元八次方程，所以通过修改参数比较能带的方式研究。

从图中及公式中可以看到可以调整的参数如下：

|  |  |
| --- | --- |
| K | 每个单元之间弹簧的劲度系数 |
| G | 内核和包层之间弹簧的劲度系数 |
| M | 包层质量 |
| m | 内核质量 |
| α | 施加在内核与包层之间弹簧的劲度系数上虚部的大小 |

经过调节，发现K=1.25，G=0.3,M=4，m=0.76，α=0.3的时候出现了疑似能带简并点，然后减小m的数值与增大的数值均可以令简并点的带隙打开。详细如图所示。



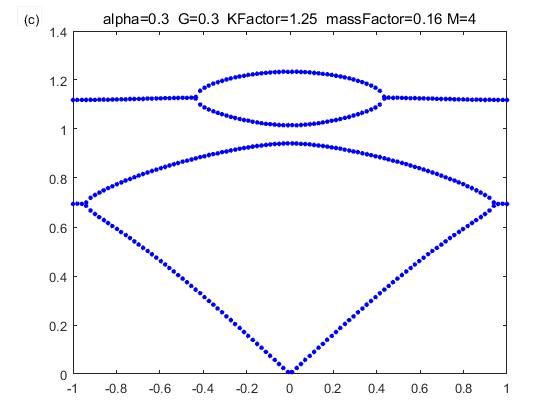
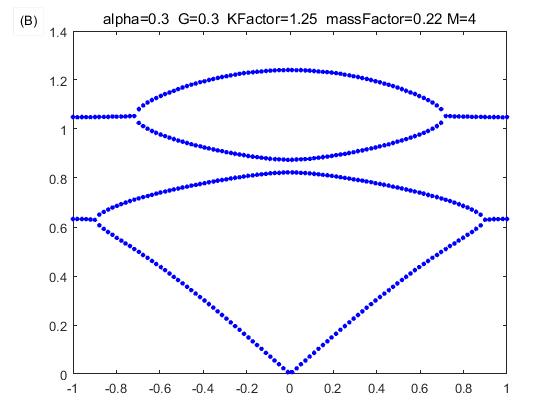


图 2（A）K=1.25，G=0.3，M=4，m=0.76，α=0.3时的能带；（B）m增加到0.88，其余参数不变时的能带；（C）m减小到0.64，其余参数不变时的能带。

虽然能带是发生了打开 -> 简并点 -> 打开的过程，但是从图中可以发现，两次带隙对应的频率范围以及简并点其实并不重合，为了更加清楚看到这个问题，现将三种情况的能带画到一张图上。重点关注中间部分，可以看到能带的下移。

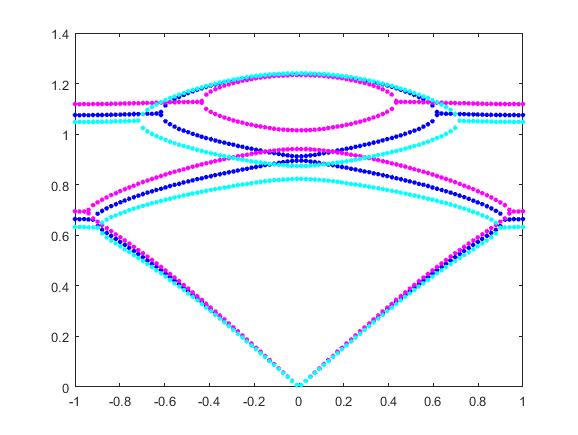


图3三种情况的能带在同一张图上画出，深蓝色的能带曲线对应于图2（A），浅蓝色的能带曲线对应于图2（B），紫色的能带曲线对应于图2（C）。

因为能带总体是随着m的增大一直往下移动的，要令带隙有公共部分，思路是扩大带隙的范围，所以可以尝试令m进一步减小和增大，但是依然不能令这两种情况下的带隙有公共部分且包含简并点。

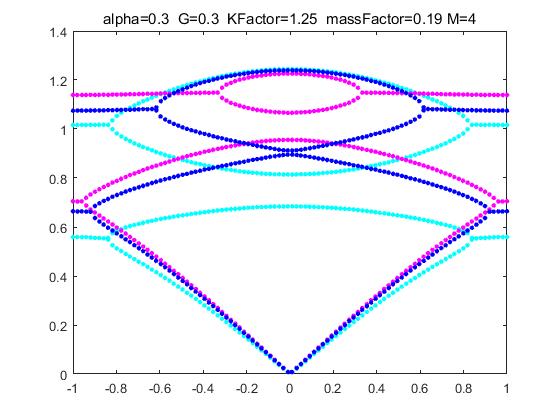


图4图中紫色的能带曲线对应的参数为K=1.25，G=0.3，M=4，m=0.6，α=0.3时的能带，即对应m进一步减小的情况，浅蓝色的能带曲线对应K=1.25，G=0.3，M=4，m=1.2，α=0.3时的能带，即对应m进一步增大的情况，深蓝色能带依然是图2（A）。

所以现在想办法令图4中紫色的能带带隙下移，令浅蓝色的能带上移，令紫色能带下移可以通过增大M与m实现，而令浅蓝色能带上移可以通过改变G实现，结果如下图所示

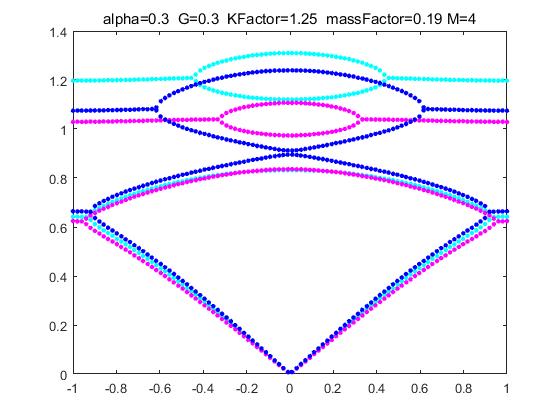


图 5将图4的紫色能带中的M增大到5，m增大到0.75，其余参数不变，同时将图4中的紫色能带中的G改为0.55，其余参数不变。

通分别过计算紫色能带与浅蓝色能带在波矢为0处上限频率与下限频率处的本征矢的正负号来初步验证这里是否存在拓扑界面态。

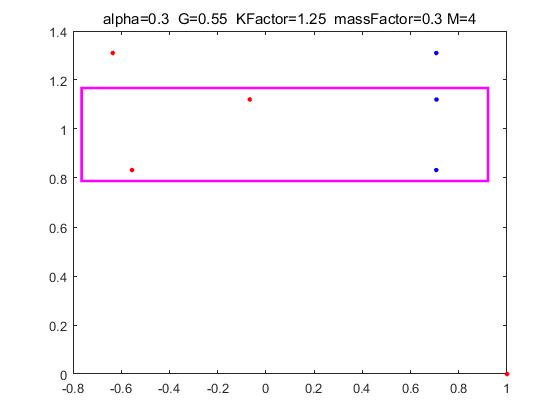
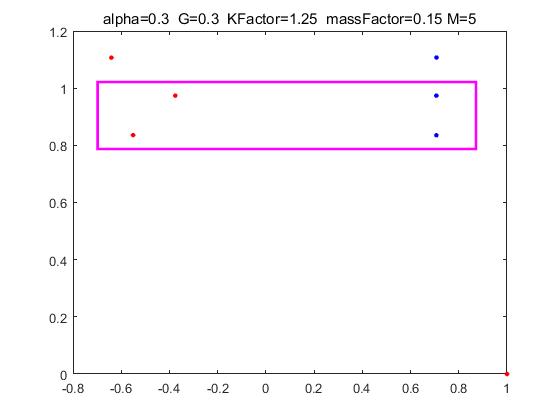


图 6左图紫色框内对应的是图5紫色能带波矢为0时候上下限频率对应的本征矢的值，右图紫色框内对应图5中的浅蓝色能带波矢为0时候上下限频率对应的本征矢的值。两图的红色点为增益小球位移，蓝色点位衰减小球位移

在图6可以看到，两种结构的增益与衰减小球位移从下限频率到上限频率都是从，无法直接判断，下一步通过计算超原胞能带观察，超元胞为左边8个图6左图的参数对应的结构，右边8个图6右图的参数对应的结构共16个原胞拼接在一起，计算出的超原胞能带带隙如图7所示。

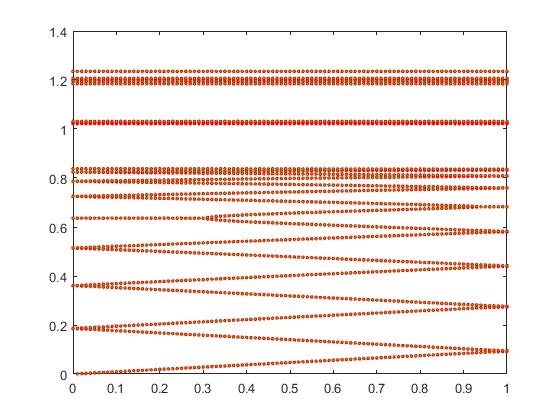


图 7 超原胞(16个)的能带

把两种结构的原胞能带放到同一张图可以发现，在带隙中无通带如图8所示。

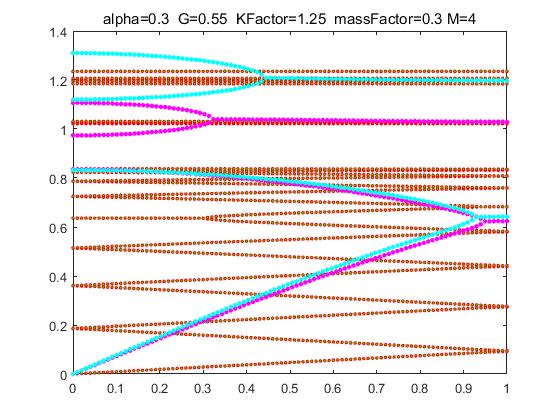


图 8 超原胞(16个)的能带加上两种结构的原胞能带