

# 高温超导异质结中的旋转对称破缺和部分马约拉纳角态

答辩人：李玉轩

专业：凝聚态物理

指导老师：周涛 教授

March 19, 2021



## 1. 研究背景

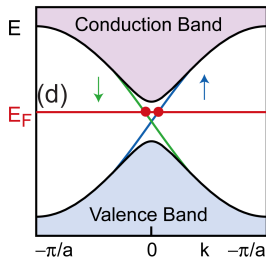
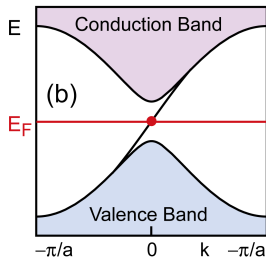
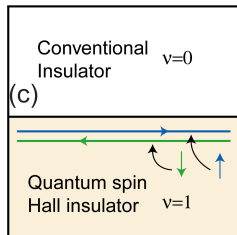
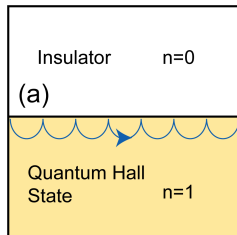
## 2. 基本理论

## 3. 计算结果

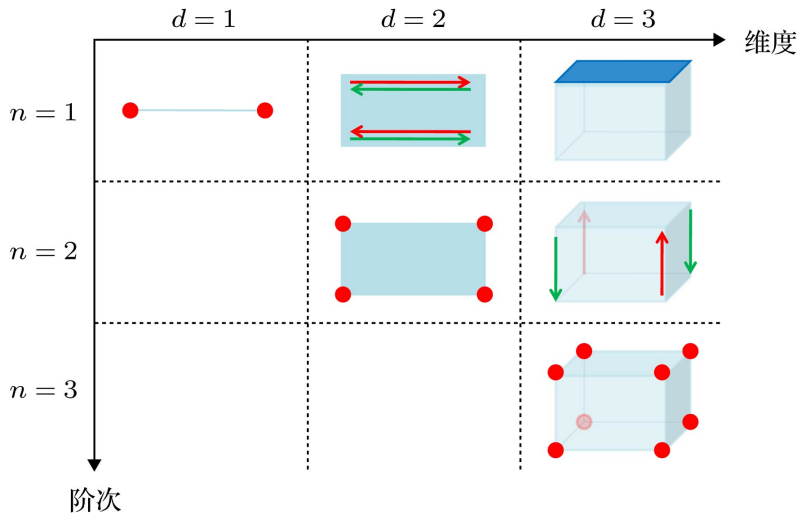
## 1. 研究背景

## 2. 基本理论

## 3. 计算结果



$$n = \frac{1}{2} \int_{\text{BZ}} d^2k \nabla_k \times i \sum_{l \in \text{bands}} \langle \varphi_l | \nabla_k | \varphi_l \rangle \quad (1)$$



$$H_c(\mathbf{k}) = (M + t \sum_i \cos k_i) \tau_z \sigma_0 + \Delta_1 \sum_i \sin k_i \tau_x \sigma_i + \Delta_2 (\cos k_x - \cos k_y) \tau_y \sigma_0 \quad (2)$$

$$(\hat{C}_4^z \mathcal{T}) H_c(\mathbf{k}) (\hat{C}_4^z \mathcal{T})^{-1} = H_c(D_{\hat{C}_4^z \mathcal{T}} \mathbf{k}), \quad D_{\hat{C}_4^z \mathcal{T}} \mathbf{k} = (k_y, -k_x, -k_z) \quad (3)$$

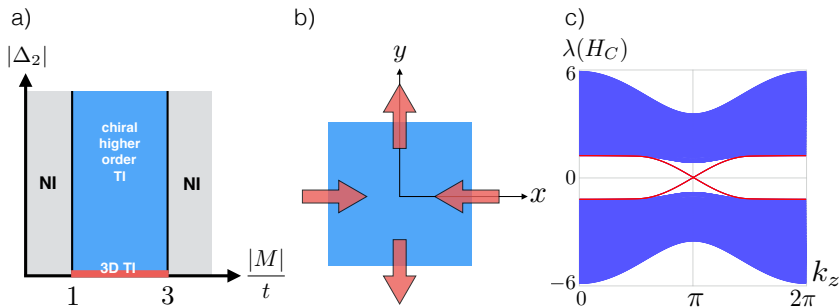
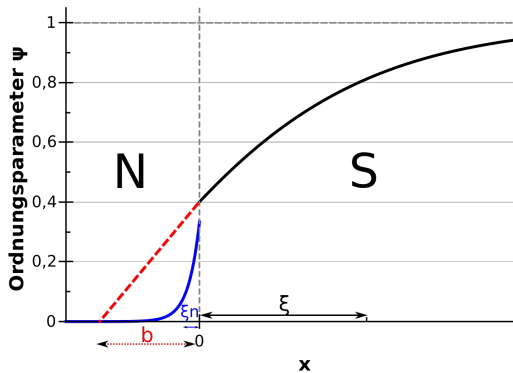


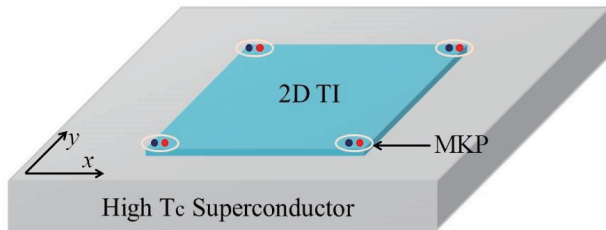
Figure: 手性高阶拓扑绝缘体; (a) 哈密顿量 (2) 的相图, (b) 一个元胞内满足  $\hat{C}_4^z \mathcal{T}$  的非共线反铁磁, (c) 存在手性棱态 (红色) 的哈密顿量 (2) 的能谱图



$$H(\mathbf{k}) = M(\mathbf{k})\sigma_z\tau_z + A_x \sin k_x \sigma_x s_z + A_y \sin k_y \sigma_y \tau_z + \Delta(\mathbf{k})s_y\tau_y - \mu\tau_z \quad (4)$$

$$M(\mathbf{k}) = m_0 - t_x \cos k_x - t_y \cos k_y$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_x + \Delta_x \cos k_x + \Delta_y \cos k_y \quad (5)$$



**Figure:** 示意图展示；一个 2D 拓扑绝缘体长在  $d$ -波或者  $s_{\pm}$ -波的高温超导体上，零能马约拉纳 Kramers 对 (MKP) 将会出现在 2D 拓扑绝缘体的角落。



首先将哈密顿量 (4) 在  $\Gamma = (0, 0)$  处做低能展开, 并保留到二阶

$$H(\mathbf{k}) = (m + \frac{t_x}{2}k_x^2 + \frac{t_y}{2}k_y^2)\sigma_z\tau_z + \lambda_x k_x \sigma_x s_z + \lambda_y k_y \sigma_y \tau_z - \frac{1}{2}(\Delta_x k_x^2 + \Delta_y k_y^2)s_y\tau_y \quad (6)$$

取  $x$  方向在实空间  $k_x \rightarrow -i\partial_x$ , 将哈密顿量 (6) 分解成两部分  $H = H_0 + H_p$

$$\begin{aligned} H_0(-i\partial_x, k_y) &= (m - t_x\partial_x^2/2)\sigma_z\tau_z - i\lambda_x\sigma_x s_z\partial_x \\ H_p(-i\partial_x, k_y) &= \lambda_y k_y \sigma_y \tau_z + \frac{\Delta_y}{2}s_y\tau_y\partial_x^2 \end{aligned} \quad (7)$$

在边界条件  $\psi_\alpha(0) = \psi_\alpha(\infty)$  下来求解  $H_0\psi_\alpha(x) = E_\alpha\psi_\alpha(x)$  可以得到四个零能解, 其形式为

$$\psi_\alpha(x) = \mathcal{N}_x \sin(\kappa_1 x) e^{-\kappa_2 x} e^{ik_y y} \xi_\alpha \quad (8)$$

归一化系数为  $|\mathcal{N}_x|^2 = 4|\kappa_2(\kappa_1^2 + \kappa_2^2)/\kappa_1^2|$ 。(符号简记,  $\kappa_1 = \sqrt{|(2m_x/t_x)| - (\lambda_x^2/t_x^2)}$ ,  $\kappa_2 = (\lambda_x/t_x)$ )。旋量部分  $\xi_\alpha$  满足  $\sigma_y s_z \tau_z = -\xi_\alpha$ , 可以将旋量部分选取为

$$\begin{aligned}\xi_1 &= |\sigma_y = -1\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\tau = +1\rangle \\ \xi_2 &= |\sigma_y = +1\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes |\tau = +1\rangle \\ \xi_3 &= |\sigma_y = +1\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\tau = -1\rangle \\ \xi_4 &= |\sigma_y = -1\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes |\tau = -1\rangle\end{aligned}\tag{9}$$

在这个基矢的选取下, 微扰部分  $H_p$  计算为

$$H_{I,\alpha\beta}(k_y) = \int_0^\infty dx \psi_\alpha^*(x) H_p(-i\partial_x, k_y) \psi_\beta(x);\tag{10}$$

最后得到有效哈密顿量为

$$H_I(k_y) = -A_y k_y s_z + M_I s_y \tau_y\tag{11}$$

$$M_I = \frac{\Delta_x}{2} \int_0^\infty dx \psi_\alpha^*(x) \partial_x^2 \psi_\alpha(x) = \Delta_x \frac{m}{t_x} \quad (12)$$

其它三个边界上的有效哈密顿量也可以通过相似方式求解得到，结果为

$$\begin{aligned} H_I &= -A_y k_y s_z + M_I s_y \tau_y \\ H_{II} &= A_x k_x s_z + M_{II} s_y \tau_y \\ H_{III} &= A_y k_y s_z + M_{III} s_y \tau_y \\ H_{IV} &= -A_x k_x s_z + M_{IV} s_y \tau_y \end{aligned} \quad (13)$$

每条边界上的质量项满足  $M_{II} = M_{IV} = \Delta_y m/t_y$ ,  $M_I = M_{III} = \Delta_x m/t_x$ 。

这里以逆时针方向为绕行正方向，可以将低能边界理论整理为

$$H_{\text{edge}} = -iA(l)s_z\partial_l + M(l)s_y\tau_y \quad (14)$$

这里的动能系数  $A(l)$  与 Dirac 质量项  $M(l)$  都是阶跃函数： $A(l) = A_y, A_x, A_y, A_x$ ， $M(l) = \Delta_d m/t_x, -\Delta_d m/t_y, \Delta_d m/t_x, -\Delta_d m/t_y (l = \text{I, II, III, IV})$ 。

从这里可以看出，在系统的每个角落，系数  $A_{x,y}$  并不会改变符号，但是 Dirac 质量项  $M(l)$  因为  $d$ -波配对  $\Delta_x = -\Delta_y$  的原因，在每个角落的位置都会反号，从而在每个角落处产生一个质量畴壁，形成类似于 Jackiw-Rebbi 零能模的束缚态。例如在边界 (I) 与 (II) 形成的角落中，零能束缚态波函数为

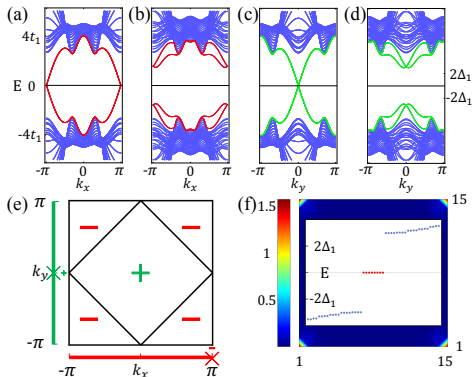
$$|\Psi_{\text{MKP}}^{\pm}\rangle \sim e^{-\int^l dl' M(l')/A(l')} |s_x = \tau_y = 1\rangle \quad (15)$$

由于哈密顿量满足时间反演不变，它保证了这两个零能态之间不会相互耦合并产生能隙。

$$H^{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = (h^{\text{TI}}(\mathbf{k}) - \mu)\tau_z + \Delta(\mathbf{k})\tau_x$$

$$h^{\text{TI}}(\mathbf{k}) = [2t(\cos k_x - \cos k_y) + 4t_1 \cos k_x \cos k_y] \sigma_z + 2\lambda(\sin k_x s_y - \sin k_y s_x) \sigma_x \quad (16)$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + 2\Delta_1(\cos k_x + \cos k_y)$$



$$H(\mathbf{k}) = 2\lambda_x \sin k_x \sigma_x s_z \tau_z + 2\lambda_y \sin k_y \sigma_y \tau_z + (\xi_k \sigma_z - \mu) \tau_z + \Delta_0 \tau_x + \mathbf{h} \cdot \mathbf{s} \quad (17)$$

$$\xi_k = \epsilon_0 - 2t_x \cos k_x - 2t_y \cos k_y$$

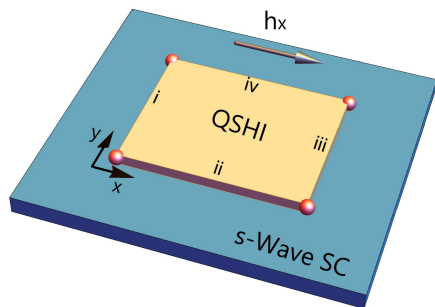


Figure: 量子自旋霍尔效应与  $s$ -波超导构成异质结，并在面内存在一个各项异性的磁场，马约拉纳零能模出现在系统的四个拐角处。

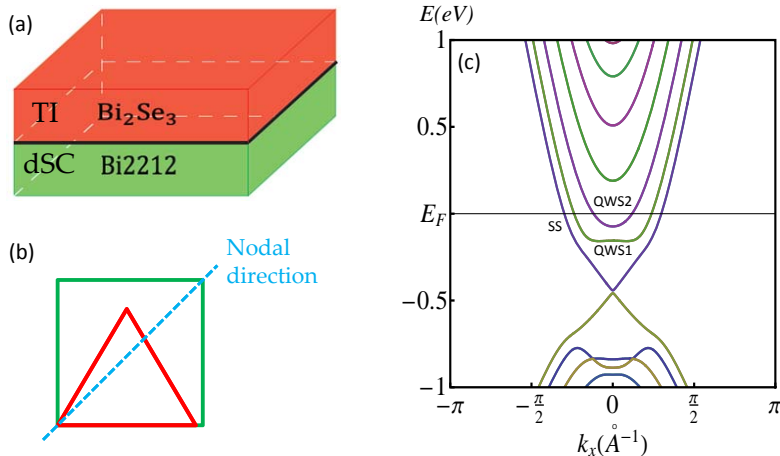


Figure: (a) 拓扑绝缘体/高温超导体异质结。(b)  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  与  $\text{Bi2212}$  的相对晶格取向，沿着超导配对节线方向，体系波坏了  $90^\circ$  旋转和反射对称。(c) 拓扑绝缘体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  的能带结构

## 1. 研究背景

## 2. 基本理论

## 3. 计算结果



$$H = H_{TI} + H_{SC} + H_I \quad (18)$$

$$H_{TI} = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\dagger} (h_{\mathbf{k}} \sigma_3 s_0 + 2\lambda_0 \sin k_x \sigma_1 s_3 + 2\lambda_0 \sin k_y \sigma_2 s_0) C_{\mathbf{k}}, \quad (19)$$

$$H_{SC} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} (d_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + h.c.), \quad (20)$$

$$H_I = -t_{\perp} \sum_{\mathbf{k}\tau\sigma} (c_{\mathbf{k}\tau\sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c.). \quad (21)$$

这里  $h_{\mathbf{k}} = h_0 - 2t(\cos k_x + \cos k_y)$ ,  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$ . 整个的哈密顿量可以被写成矩阵形式。在动量空间中它是一个  $12 \times 12$  的矩阵  $\hat{M}$ ,  $H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{M} \Psi_{\mathbf{k}}$

## 1. 研究背景

## 2. 基本理论

## 3. 计算结果

$$G_{ij}(E) = \sum_n \frac{u_{in} u_{jn}^*}{E - E_n + i\Gamma}. \quad (22)$$

这里  $u_{in}$  和  $E_n$  分别代表着矩阵的本征矢量和本征值。在动量空间中，2D 拓扑绝缘体层的谱函数可以通过格林函数计算

$$A(\mathbf{k}, E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{p=1}^4 \text{Im} G_{pp}(\mathbf{k}, E). \quad (23)$$

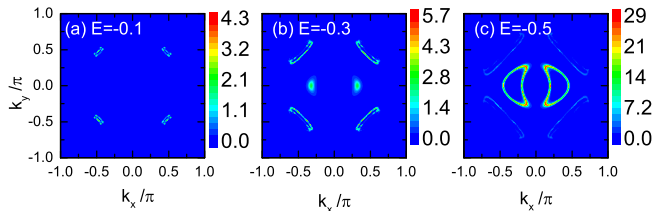


Figure: 2D 拓扑绝缘体层谱函数强度分布。(a)  $E = -0.1$ , (b)  $E = -0.3$ , (c)  $E = -0.5$

$$C_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}} C_{\mathbf{r}}^{\dagger} \quad C_{\mathbf{r}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}} C_{\mathbf{r}}^{\dagger} \quad (24)$$

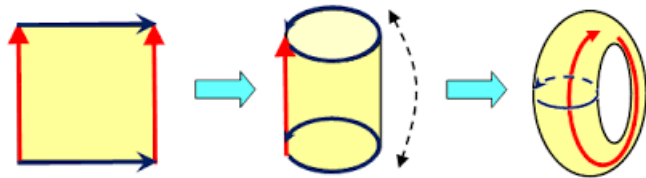
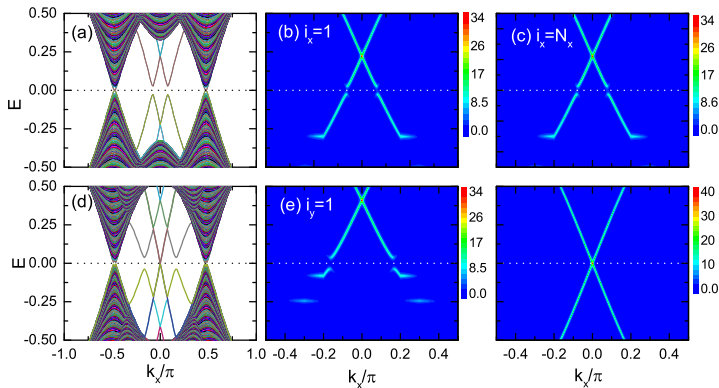
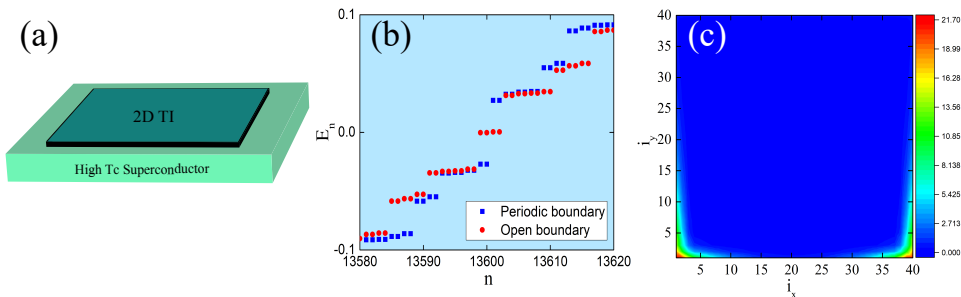


Figure: 圆柱形结构示意图



**Figure:** 考虑圆柱形结构的数值计算结果。(a) 沿  $x$  方向开边界时哈密顿量本征值, (b)  $i_x = 1$  边界处的谱函数, (c)  $i_x = N_x$  边界处的谱函数, (d) 沿  $y$  方向开边界时哈密顿量本征值, (e)  $i_y = 1$  边界处的谱函数, (f)  $i_y = N_y$  边界处的谱函数

$$\rho_i(E) = -\frac{1}{\pi} \sum_{p=1}^4 \text{Im} G_{m+p, m+p}(E). \quad (25)$$



**Figure:** (a) 2D 拓扑绝缘体生长在  $d$ -波高温超导体上, (b) 实空间哈密顿量本征值 (c) 2D 拓扑绝缘体实空间中零能态电子局域态密度

$$\Delta_{\tau}(\mathbf{k}) = \langle c_{\mathbf{k}\tau\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\tau\downarrow}^{\dagger} \rangle = \sum_n u_{\tau,n}^*(\mathbf{k}) u_{\tau+6,n}(\mathbf{k}) f(E_n), \quad (26)$$

$$\Delta_s(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\Delta_1(\mathbf{k}) + \Delta_1(-\mathbf{k})] \quad \Delta_t(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\Delta_1(\mathbf{k}) - \Delta_1(-\mathbf{k})] \quad (27)$$

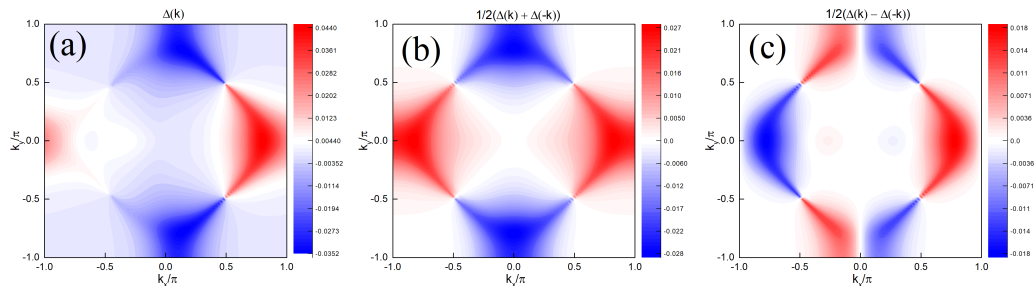


Figure: (a) 轨道 1 的超导序参量 (b) 轨道 1 单重态通道的序参量 (c) 轨道 1 三重态通道的序参量

$$\Delta_{ij}^{\tau} = \sum_n u_{h(i),n}^* u_{h(j)+6,n} f(E_n), \quad (28)$$

$$\Delta_i^{\tau} = | \Delta_{i,i+\hat{x}}^{\tau} + \Delta_{i,i-\hat{x}}^{\tau} - \Delta_{i,i+\hat{y}}^{\tau} - \Delta_{i,i-\hat{y}}^{\tau} |. \quad (29)$$

在系统的边界上,  $\Delta_i^{\tau}$  表示为

$$\Delta_i^{\tau} = | 2(\Delta_{i,i+\hat{\alpha}}^{\tau} + \Delta_{i,i-\hat{\alpha}}^{\tau}) | \quad (\alpha = x, y). \quad (30)$$

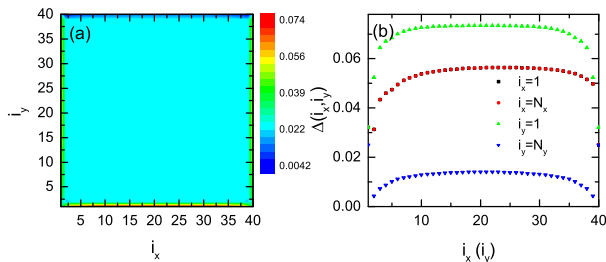


Figure: (a) 2D 拓扑绝缘体轨道 1 实空间中的  $d$ -波序参量 (b) 实空间四条边界上的  $d$ -波序参量分布



对于 2D 拓扑绝缘体，其轨道  $\tau$  的有效配对可以由反常格林函数  $F_{\tau}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \langle c_{\mathbf{k}\tau\uparrow}^{\dagger} | c_{-\mathbf{k}\tau\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle$

$$F_{\tau}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_n \frac{u_{\tau,n}^*(\mathbf{k}) u_{\tau+6,n}(\mathbf{k})}{\omega - E_n + i\Gamma} \quad (31)$$

同样的，他可以解析的通过下面的运动方程来求解

$$\omega \langle \langle A | B \rangle \rangle = \langle [A, B]_+ \rangle + \langle \langle [A, H] | B \rangle \rangle \quad (32)$$

$$H = H_{\text{TI}} + H_{\text{SC}} + H_{\text{I}} \quad (33)$$

先做一些简化的记号  $x_1 = \langle \langle c_{\mathbf{k}1\uparrow}^{\dagger} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  $x_2 = \langle \langle c_{\mathbf{k}2\uparrow}^{\dagger} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  $x_3 = \langle \langle d_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  
 $x_4 = \langle \langle d_{-\mathbf{k}\downarrow} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  $x_5 = \langle \langle c_{-\mathbf{k}1\downarrow} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$ ,  $x_6 = \langle \langle c_{-\mathbf{k}2\downarrow} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle \rangle_{\omega}$

$$ax_1 = fx_2 + t_{\perp}x_3 \quad (34a)$$

$$bx_2 = ex_1 + t_{\perp}x_3 \quad (34b)$$

$$cx_3 = gx_4 + t_{\perp}(x_1 + x_2) \quad (34c)$$

$$dx_4 = gx_3 - t_{\perp}(x_5 + x_6) \quad (34d)$$

$$bx_5 = 1 - fx_6 - t_{\perp}x_4 \quad (34e)$$

$$ax_6 = -ex_5 - t_{\perp}x_4, \quad (34f)$$

这里  $a = \omega - h_{\mathbf{k}}$ ,  $b = \omega + h_{\mathbf{k}}$ ,  $c = \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ ,  $d = \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}}$ ,  $e = 2\lambda_0 \sin(k_x) - 2i\lambda_0 \sin(k_y)$ ,  $f = 2\lambda_0 \sin(k_x) + 2i\lambda_0 \sin(k_y)$ , 并且令  $g = \Delta_{\mathbf{k}}$ .

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}1\uparrow}^{\dagger} | c_{-\mathbf{k}1\downarrow}^{\dagger} \rangle\rangle = \frac{\Delta_{\mathbf{k}} t_{\perp}^2 (a - e)(b + f)}{\Omega} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}} t_{\perp}^2 (C_{\text{even}} + C_{\text{odd}})}{\Omega}, \quad (35)$$

$$C_{\text{even}} = \omega^2 - h_{\mathbf{k}}^2 - 4\lambda_0 [\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)], \quad C_{\text{odd}} = 4\omega\lambda_0 \sin(k_y) - 4h_{\mathbf{k}}\lambda_0 \sin(k_x)$$

$$F_{\tau}(\mathbf{k}) = - \int_{-\infty}^0 \text{Im} F_{\tau}(\mathbf{k}, \omega) d\omega. \quad (36)$$

$$F_s(\mathbf{k}) = 1/2[F_1(\mathbf{k}) + F_1(-\mathbf{k})] \quad (37)$$

$$F_t(\mathbf{k}) = 1/2[F_1(\mathbf{k}) - F_1(-\mathbf{k})]$$

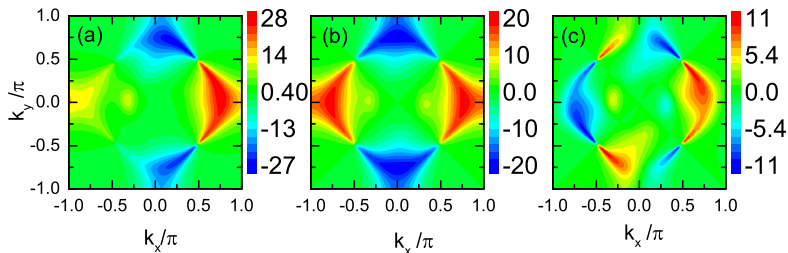


Figure: (a) 反常格林函数计算轨道 1 的超导序参量 (b) 轨道 1 单重态通道的序参量 (c) 轨道 1 三重态通道的序参量

Thank you for your attention!

Questions?