

基于拓扑不变量的拓扑超导研究

李玉轩

物理与电信工程学院

2021年6月1日



1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
5. 高阶拓扑奇宇称超导体

1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
5. 高阶拓扑奇宇称超导体

$$H = \sum_{\mathbf{k}} [\psi_{\mathbf{k}}^\dagger h_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} (\psi_{\mathbf{k}}^\dagger \Delta_{\mathbf{k}} \psi_{-\mathbf{k}}^{\dagger T}) + \text{H.c.}] \equiv \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (1)$$

$$\mathcal{T}^\dagger h_{\mathbf{k}} \mathcal{T} = h_{-\mathbf{k}}^T, \quad \mathcal{T}^2 = -1 \quad \mathcal{T}^\dagger \mathcal{T} = 1 \quad (2)$$

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}} - i\mathcal{T}\psi_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ \psi_{\mathbf{k}} + i\mathcal{T}\psi_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}, \quad H_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & h_{\mathbf{k}} + i\mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}^\dagger \\ h_{\mathbf{k}} - i\mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

注意

仅当哈密顿量同时具有时间反演与粒子空穴对称时，可以将其改写成这种形式。

¹Xiao-Liang Qi, *et al.*, PRB, 81, 134508

哈密顿量一定是厄米的, 所以 $h_{\mathbf{k}} + iT\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ 一般是非厄米的, 也就要求 $T\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ 是厄米的.

$$h_{\mathbf{k}} + iT\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger} = U_{\mathbf{k}}^{\dagger} D_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \quad (4)$$

$U_{\mathbf{k}}, V_{\mathbf{k}}$ 都是么正矩阵, $D_{\mathbf{k}}$ 是一个对角矩阵, 都是非负元素, 其实也就对应着哈密顿量 $H_{\mathbf{k}}$ 的正本征值.

对于一个 full gapped 的超导体, $D_{\mathbf{k}}$ 是正定的, 可以绝热的将其变化成单位矩阵 \mathbb{I} , 其中间不会发生超导能隙的关闭.

在绝热过程中, $D_{\mathbf{k}}$ 演化为单位矩阵, 则 $h_{\mathbf{k}} + iT\Delta_{\mathbf{k}}$ 则可以变成么正矩阵 $Q_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}$, 三维的拓扑超导, 其整数的拓扑不变量可以通过 $Q_{\mathbf{k}}$ 的 winding number 来表征²

$$N_w = \frac{1}{24\pi^2} \int d^3\mathbf{k} \epsilon^{ijk} \text{Tr}[Q_{\mathbf{k}}^{\dagger} \partial_i Q_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^{\dagger} \partial_j Q_{\mathbf{k}} Q_{\mathbf{k}}^{\dagger} \partial_k Q_{\mathbf{k}}] \quad (5)$$

²A.P.Schnyder, PRB, 78, 195125

考虑弱配对极限下的 $Q_{\mathbf{k}}$, 为了简单性, 假设此时费米面没有简并, 且没有节点或者节线, 在这种假设下电子配对 $\Delta_{\mathbf{k}}$ 可以仅在费米面附近存在, $\mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}$ 的元素中, 不同能带之间的贡献就可以忽略, 而只需要关注同一个能带内的电子配对即可.

$$h_{\mathbf{k}} + i\mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger} \simeq \sum_n (\epsilon_{n\mathbf{k}} + i\delta_{n\mathbf{k}}) |n, \mathbf{k}\rangle \langle n, \mathbf{k}| \quad (6)$$
$$\delta_{n\mathbf{k}} = \langle n, \mathbf{k} | \mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger} | n, \mathbf{k} \rangle \in \mathbb{R}$$

这里的 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 是 $h_{\mathbf{k}}$ 的本征矢量, $\delta_{n\mathbf{k}}$ 是 $\Delta_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ 关于 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 与其时间反演态 $|\bar{n}, -\mathbf{k}\rangle = \mathcal{T}^{\dagger}|n, \mathbf{k}\rangle$ 的矩阵元. 在这个近似下, 可以将矩阵 $A_{\mathbf{k}}$ 表示为

$$Q_{\mathbf{k}} = \sum_n e^{i\theta_{n\mathbf{k}}} |n, \mathbf{k}\rangle \langle n, \mathbf{k}| \quad (7)$$
$$e^{i\theta_{n\mathbf{k}}} = (\epsilon_{n\mathbf{k}} + i\delta_{n\mathbf{k}}) / |\epsilon_{n\mathbf{k}} + i\delta_{n\mathbf{k}}|$$

在弱配对极限下, 仅在费米面附近 $-\epsilon \leq E \leq \epsilon$ 时, $\delta_{n\mathbf{k}}$ 才不为零.

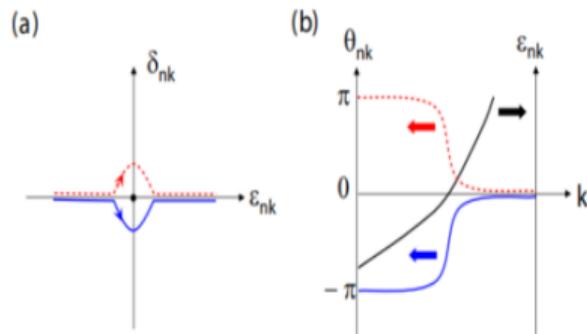


FIG. 1. (Color online) (a) The path of $\epsilon_{nk} + i\delta_{nk}$ in the complex plane for positive (red dashed) and negative (blue) δ_{nk} around the Fermi surface. (b) θ_{nk} and ϵ_{nk} vs momentum k . The change in θ_{nk} across k_F is $-\pi$ ($+\pi$) when δ_{nk} is positive (negative), as shown by the red dashed (blue) curve.

当越过费米面时，位相 θ_{nk} 将会从 0 变化为 $\pm\pi$ ，这取决于 δ_{nk} 在费米面附近的符号。

在越过费米面时候的这个位相畴壁, 可以表示为

$$\nabla\theta_{nk} = -\pi\mathbf{v}_{nk}\text{sgn}(\delta_{nk})\delta(\epsilon_{nk}) \quad \mathbf{v}_{nk} = \nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{nk} \text{为费米速度} \quad (8)$$

对于一个 full gapped 的超导体, δ_{nk} 在整个费米面上始终是非零的, 所以 δ_{nk} 的符号在每个费米面上都是固定的.

当 δ_{nk} 在布里渊区中被简化为 (8) 之后, 则 winding number (5) 可以简化为

$$N_W = \frac{1}{2} \sum_s \text{sgn}(\delta_s) C_{1s} \quad (9)$$
$$C_{1s} = \frac{1}{2\pi} \int_{FS_s} d\Omega^{ij} [\partial_i a_{sj}(\mathbf{k}) - \partial_j a_{si}(\mathbf{k})] \quad a_{si} = -i\langle \mathbf{s}\mathbf{k} | \partial / \partial k_i | \mathbf{s}\mathbf{k} \rangle$$

$\text{sgn}(\delta_s)$ 表示的是 δ_{nk} 在第 s 个费米面上的符号.

3D

一个时间反演不变的超导体可以由费米面上的电子配对和第一陈数决定

$$\delta_{nk} \equiv \langle n, \mathbf{k} | \mathcal{T} \Delta_{\mathbf{k}}^\dagger | n, \mathbf{k} \rangle \quad (10)$$

$$N_W = \frac{1}{2} \sum_s \text{sgn}(\delta_s) C_{1s} \quad (11)$$

$$C_{1s} = \frac{1}{2\pi} \int_{FS_s} d\Omega^{ij} [\partial_i a_{sj}(\mathbf{k}) - \partial_j a_{si}(\mathbf{k})] \quad a_{si} = -i \langle s\mathbf{k} | \partial / \partial k_i | s\mathbf{k} \rangle$$

$\text{sgn}(\delta_s)$ 表示的是 δ_{nk} 在第 s 个费米面上的符号.

考虑一个两带模型

$$h_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2m - \mu + \alpha \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (12)$$

当化学势 $\mu > 0$ 时, 在 $\mathbf{k} = 0$ 附近存在两个嵌套的费米面, 分别将内外两个费米面上的电子态标记为 $|\mathbf{k}, +(-)\rangle$, 可以得到 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}|\mathbf{k}, \pm\rangle = \pm|\mathbf{k}||\mathbf{k}, \pm\rangle$

$$\begin{aligned} C &= \int d\mathbf{k} \Omega(\mathbf{k}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{k} \frac{1}{2|h_{\mathbf{k}}|^3} h_{\mathbf{k}} \cdot [\partial_{k_x} h_{\mathbf{k}} \times \partial_{k_y} h_{\mathbf{k}}]. \end{aligned} \quad (13)$$

在内外两个费米面上, 对应的 Chern 数分别是 +1 与 -1, 根据公式 (11) 可以判断出, 若要得到拓扑超导, 此时两个费米面上的电子配对符号要相反.

$$\mathcal{T} = i\sigma_y \quad \Delta_{\mathbf{k}} = i\Delta_0\sigma_y \rightarrow i\mathcal{T}\Delta_{\mathbf{k}}^\dagger = \Delta_0\mathbb{I} \quad (14)$$

此时两个费米面上的电子配对符号相同, 则对应的 $N_w = 0$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = i\Delta_0\sigma_y\sigma \cdot \mathbf{k} \rightarrow iT\Delta_{\mathbf{k}}^\dagger = \Delta_0\sigma \cdot \mathbf{k} \quad (15)$$

此时当 $\Delta_0 > 0$, 两个费米面上的电子配对符号是相反的, $N_w = 1$.

当 $\alpha \rightarrow 0$, 此时得到的是一个具有二次色散动能向的拓扑超导, 配对形式为 $\Delta_{\mathbf{k}} = i\Delta_0\sigma_y\sigma \cdot \mathbf{k}$ 正是 $^3\text{He-B}$ 的 BdG 哈密顿量.

简并情况

如果费米面是简并的, 可以在哈密顿量中加入正比于 $T\Delta_{\mathbf{k}}$ 的微扰来打开简并, 但这个微扰项并不会改变体系的拓扑性质.

2D 与 3D 时候的对称性是相同的, 所以 2D 时候的哈密顿量还是可以表示为 (3) 的形式, 同样的也可以定义出矩阵 $Q_{\mathbf{k}} \in U(N)$. 当 $\theta \in [0, \pi]$ 可以找到一个平滑的形变 $Q_{\mathbf{k}, \theta}$, 可以插入到 $Q_{\mathbf{k}}$ 和 \mathbb{I} 之间

$$Q_{\mathbf{k}, \theta} = \begin{cases} \mathbb{I}, & \theta = 0 \\ Q_{\mathbf{k}}, & \theta = \pi \end{cases} \quad (16)$$

由于时间反演对称性, $Q_{\mathbf{k}}$ 满足 $\mathcal{T}^\dagger Q_{\mathbf{k}} \mathcal{T} = Q_{-\mathbf{k}}^T$, 在 $\theta \in [0, \pi]$ 中定义 $Q_{\mathbf{k}, -\theta} = \mathcal{T}^\dagger Q_{-\mathbf{k}, \theta}^T \mathcal{T}$, 可以得到 $Q_{\mathbf{k}, \theta}$ 在 $\theta \in [-\pi, \pi]$ 中是连续的, 且当 $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$ 时是周期的. 如果将 θ 视作额外维度的动量, 那么 $Q_{\mathbf{k}, \theta}$ 则可以用来描述 3D 时间反演不变的拓扑超导体.

如果可以在 \mathbb{I} 与 $Q_{\mathbf{k}}$ 之间可以插入两个不同的 $Q_{\mathbf{k}, \theta}$ 与 $Q'_{\mathbf{k}, \theta}$, 由于时间反演对称性的存在这二者对应的 winding number 的差一定是偶数.

$$N_w(Q) - N_w(Q') = 0 \pmod{2} \quad (17)$$

到这里可以发现宇称 $(-1)^{N_w(Q)}$ 与路径选择 Q 是没有关系的, 因此它是一个由 Q_k 决定的 \mathbb{Z}_2 拓扑不变量.

在弱配对极限下, 在 \mathbb{I} 与 Q_k 之间插入 $Q_{k,\theta}$ 等价于在 3D 参数化 (k_x, k_y, θ) 的布里渊区中, 将 2D 正常态 h_k 的一个 1D 的费米圈插入到 3D 布里渊区的费米面中.

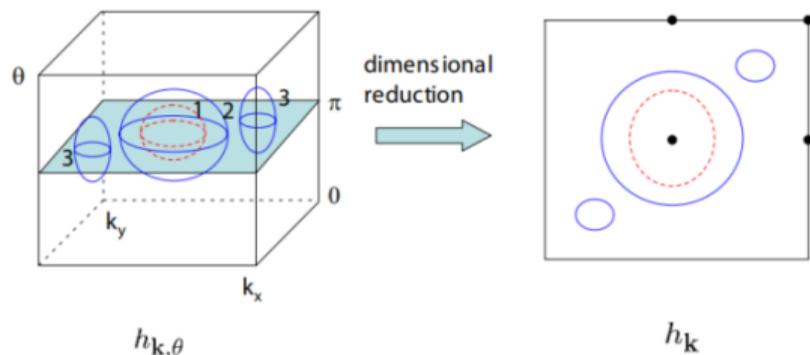


FIG. 2. (Color online) Dimensional reduction from a 3D TRI superconductor to a 2D TRI superconductor. The 2D TRI superconductor corresponds to the $\theta = \pi$ section of a 3D superconductor. The Fermi surfaces with blue (red dashed) color are those with positive (negative) pairing amplitude δ_s .

$$N_{2D} = (-1)^{N_W} = (-1)^{1/2 \sum_s \text{sgn}(\delta_s) C_{1s}} = \prod_s [i \cdot \text{sgn}(\delta_s)]^{C_{1s}} \quad (18)$$

2D

一个 2D TRI 超导体, 当有奇数个费米面上的电子配对为负时, 它就是非平庸的, 否则是平庸的.

(1) 每个费米面上的 Chern 数满足 $(-1)^{C_{1s}} = (-1)^{m_s}$, 这里 m_s 是第 s 个费米面包含的时间反演不变动量点的数目.

(2) 由于体系满足 TRI, 所以整个体系的 Chern 数一定为零, $\sum_s C_{1s} = 0$.

$$N_{2D} = \prod_s [\text{sgn}(\delta_s)]^{m_s} \quad (19)$$

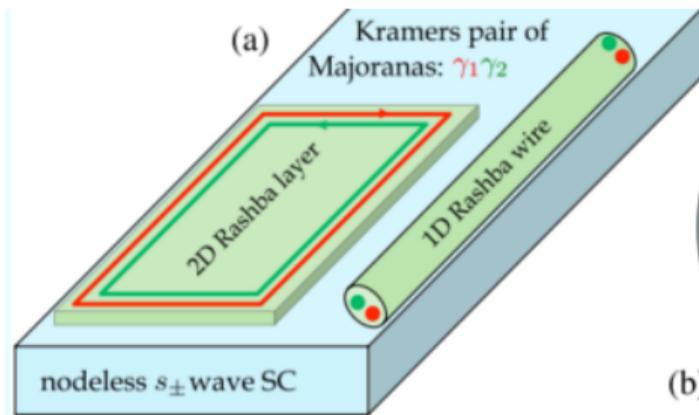
对于 1D 时间反演不变系统, 每个"费米面"总是会包含一个时间反演不动量点, 则其拓扑判据为

$$N_{1D} = \Pi_s [\text{sgn}(\delta_s)] \quad (20)$$

这里求和 s 是对 0 到 π 之间所有的费米点进行的.

一个 1D 的 TRI 超导体, 当在 0 到 π 之间有奇数个费米点具有负电子配对, 那么它就是非平庸的, 否则就是平庸的.

1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
5. 高阶拓扑奇宇称超导体



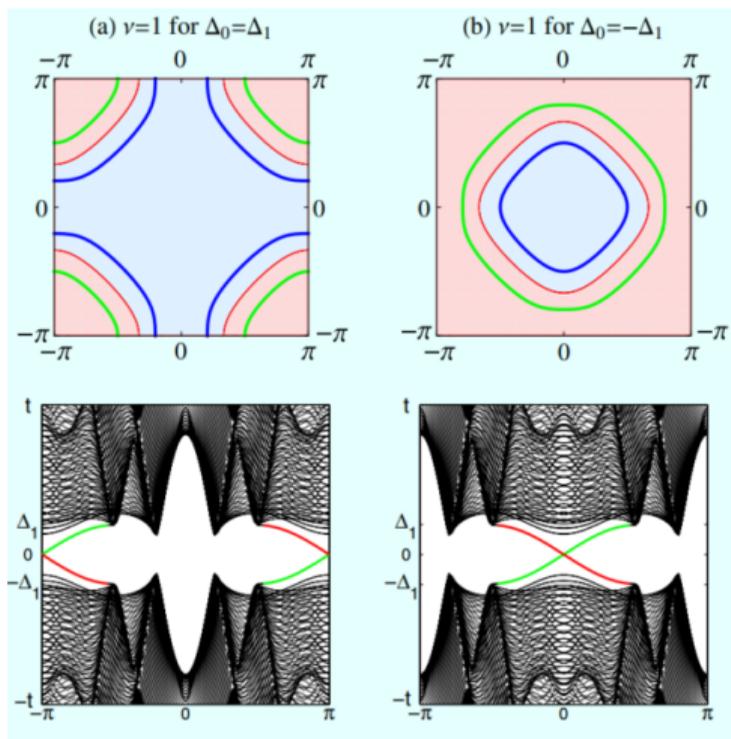
$$\mathcal{H} = [-2t(\cos k_x + \cos k_y) + h_{\mathbf{k}}^R - \mu]\tau_z + \Delta_{\mathbf{k}}\tau_x$$

$$h_{\mathbf{k}}^R = 2\lambda_R(\sin k_x\sigma_y - \sin k_y\sigma_x)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_0 + 2\Delta_1(\cos k_x + \cos k_y)$$
(21)

当 $0 \leq |\Delta_0| \leq 4\Delta_1$ 时, s_{\pm} 配对会在 $\Gamma = (0, 0)$ 与 $M(\pi, \pi)$ 处发生反号.

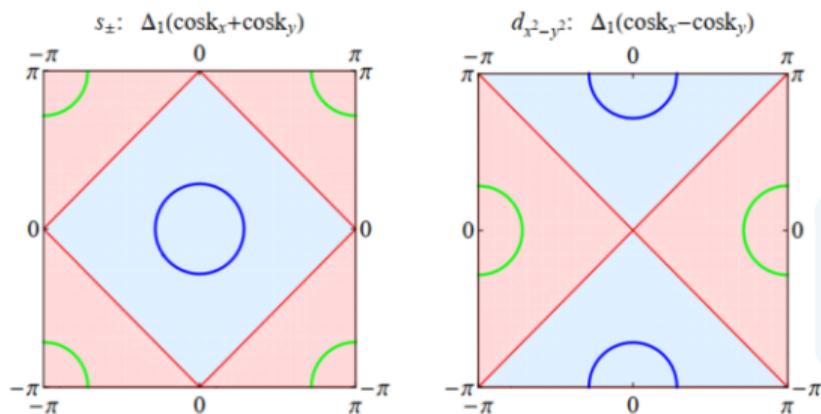
³Fan Zhang, el.PRL,111,056402



$$E_{\mathbf{k}}^{\text{BdG}} = \pm \sqrt{[2t(\cos k_x + \cos k_y) + \mu \pm \epsilon_{\mathbf{k}}^R]^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^R = 2\lambda_R \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}$$

(22)



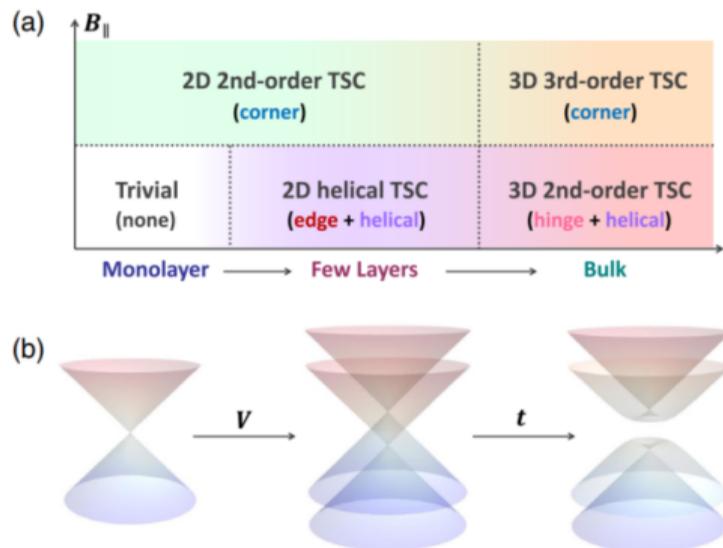
利用有两个表面态的弱拓扑绝缘体和 s_{\pm} 或者 $d_{x^2-y^2}$ 超导体形成异质结同样可以实现拓扑超导体.

FIG. 1: In each panel, the blue and green circles denote two Fermi surfaces of the surface state of a weak topological insulator, and the red line separates two regions in which $\Delta_{\mathbf{k}}$ has opposite signs.

1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
5. 高阶拓扑奇宇称超导体

$$h_{\text{eff}}(\mathbf{k}) = v_F \rho_z \otimes (k_x s_y - k_y s_x) + t \rho_x + V \rho_z - \mu \quad s_i \rightarrow \text{Spin} \quad \rho_i \rightarrow \text{Layer} \quad (23)$$

t 代表层间隧穿, 当加入沿面外方向的电场后, 对上下表面的影响不同, V 即反映加入电场后引起的结构反演不对称 (SIA).



SIA 项在破坏了空间反演对称后, 将会驱动 Dirac 表面态变成类似 2D Rashba 能带的结构.

⁴Rui-Xinag, Zhang, et al, PRL, 126, 137001

$$E = \pm \sqrt{(vk \pm V)^2 + t^2} - \mu \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (24)$$

当 $\mu > t > 0$ 时, $h_{\text{eff}}(\mathbf{k})$ 的 Rashba 属性表明此时存在两个分离的费米面 $\text{FS}^{(+)}$ 与 $\text{FS}^{(-)}$, 当 $V > 0$ 时, 费米动量为

$$k_F^{(\pm)} = \frac{\sqrt{\mu^2 - t^2} \pm V}{v_F} \quad \text{for } \mu > \sqrt{t^2 + V^2} \quad (25)$$

$$k_F^{(\pm)} = \frac{V \pm \sqrt{\mu^2 - t^2}}{v_F} \quad \text{for } t < \mu < \sqrt{t^2 + V^2}$$

体态的 s_{\pm} 波配对 $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + \Delta_1(\cos k_x + \cos k_y)$ 可以给 Dirac 表面态提供一个自近邻效应, 而且在 BZ 中心和角落处会发生符号反转, 而且在 BZ 中也存在 $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ 的闭合环路

$$k_{\Delta} = \sqrt{2\left(\frac{\Delta_0}{\Delta_1} + 2\right)} \quad (26)$$

拓扑判据

当 $FS^{(+)}$ 和 $FS^{(-)}$ 上的电子配对符号是相反的时候, 就会出现 helical TSC.

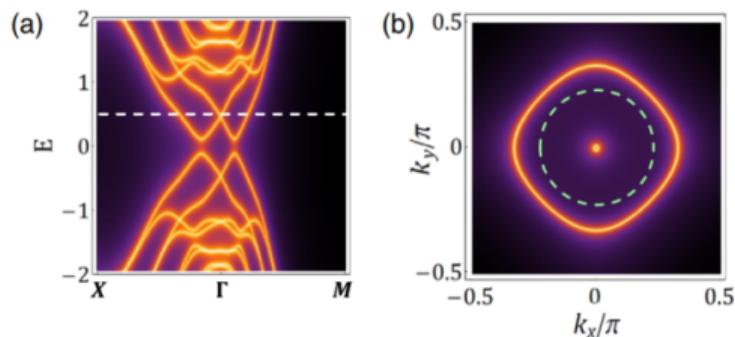
要实现 TSC 的条件为

$$k_F^{(-)} < k_\Delta < k_F^{(+)} \quad (27)$$

$$H_0(\mathbf{k}) = v_k(\sin k_x \gamma_1 + \sin k_y \gamma_2 + \sin k_z \gamma_3) + M(\mathbf{k})\gamma_5 \quad (28)$$
$$M(\mathbf{k}) = M_0 - M_1(\cos k_x + \cos k_y) - M_2 \cos k_z$$

γ 矩阵为 $\gamma_1 = \sigma_x \otimes s_x, \gamma_2 = \sigma_x \otimes s_y, \gamma_3 = \sigma_x \otimes s_z, \gamma_4 = \sigma_y \otimes s_0, \gamma_5 = \sigma_z \otimes s_0, \sigma$ 表示轨道自由度. 当 $v = 1, M_0 = -4, M_1 = -2, M_2 = 2$ 时, $H_0(\mathbf{k})$ 在 $Z = (0, 0, \pi)$ 处发生能带反转, 两条能带具有相反的宇称, 这个模型可以反映 $FeTe_{1-x}Se_x$ 以及其他一些拓扑铁基超导的能带结构.

根据 Fu-Kane 判据, 在此时的参数选择下 $H_0(\mathbf{k})$ 是一个强拓扑绝缘体, 每个表面上都会存在 2D 无能隙的表面态.



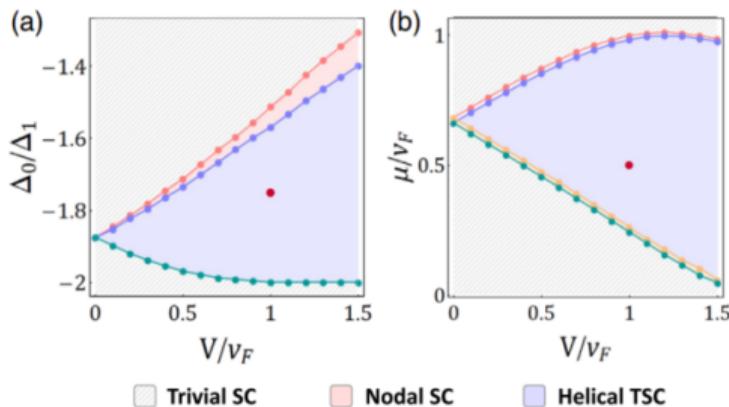
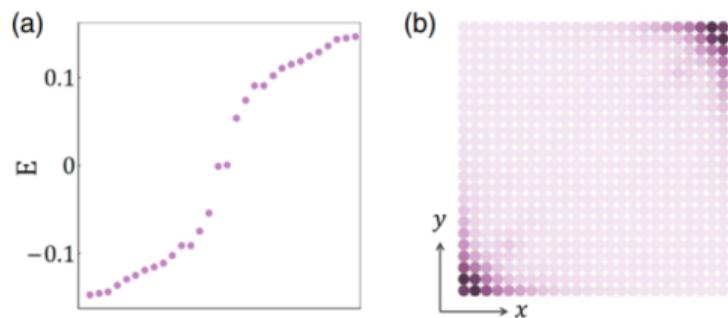
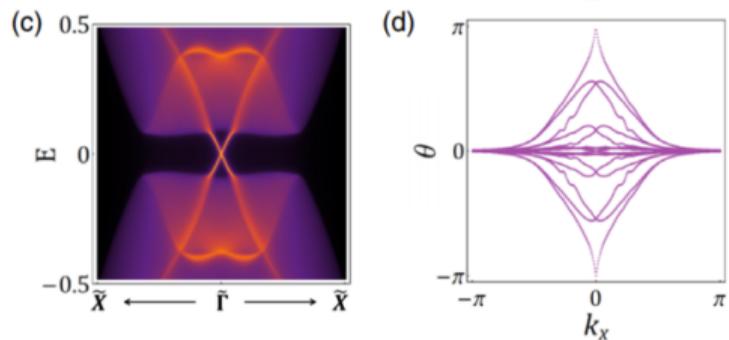
在 z 方向构建 $H_0(\mathbf{k})$ 的 slab 模型, 并分别在上下表面加入 $\pm V/2$ 的占位能, 当 $V = 1$ 时可以清楚的看到在 Γ 点由 SIA 诱导出较大的 Rashba 能带劈裂, 当 $\mu = 0.5$ 时 (白色虚线) 可以看到存在两个费米面, 如图上图 (a) 所示.

在上图 (b) 中, 可以清楚的看到两个分离的费米面, 而这种费米面结构的存在正是形成 helical TSC 相的一个起点.

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{\text{TF}}(\mathbf{k}) - \mu & -i\Delta(\mathbf{k})s_y \\ i\Delta(\mathbf{k})s_y & \mu - H_{\text{TF}}^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + \Delta_1(\cos k_x + \cos k_y) \quad (29)$$

当选取何时的参数使得 $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ 的节线环位置处于两个费米面之间时 (绿色虚线所示), 此时电子配对符号以及费米面的位置恰好满足前面的拓扑判据, 则此时可以实现 helical TSC.



$$H_{\text{Zeeman}} = g(\cos \varphi \tau_z \otimes \sigma_z \otimes s_x + \sin \varphi \tau_0 \otimes \sigma_z \otimes s_y) \quad (30)$$

沿面内方向加入一个 Zeeman 场, 将会在一般边界上其 Zeeman 能隙为正, 一般边界上为负, 将会在 Zeeman 能隙反号的边界上对 helical 的 Majorana 模产生一对质量畴壁, 此处将会束缚 Majorana 零能态.

1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
5. 高阶拓扑奇宇称超导体

$$\mathbb{Z}_2 = \begin{cases} (1; 0, 0, 0) & \text{强拓扑绝缘体} \\ (0; 1, 0, 0) & \text{弱拓扑绝缘体} \end{cases} \quad (31)$$

- 强拓扑绝缘体: 每个表面上存在奇数个 Dirac 锥 \rightarrow TSC
- 弱拓扑绝缘体: 每个表面上存在偶数个 Dirac 锥 $\xrightarrow{?}$ TSC

考虑在 $\Gamma = (0, 0, 0)$ 与 $Z = (0, 0, \pi)$ 两个位置上都存在能带反转的弱拓扑绝缘体, 此时 Dirac 表面态仅出现在侧边界面上, 而且每个侧面上的 Dirac 锥的数目是偶数.

$$H_{\text{BdG}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}(\mathbf{k}) - \mu & -i\Delta(\mathbf{k})s_y \\ i\Delta^\dagger(\mathbf{k})s_y & \mu - \mathcal{H}^*(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{j=x,y,z} (m_0 - t_j \cos k_j) \sigma_z s_0 + \sin k_j \sigma_x s_j$$

体积超导体中的 s_\pm 波配对的

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + \Delta_1(\cos k_x + \cos k_y) \quad (33)$$

⁵arXiv:2103.01825v1

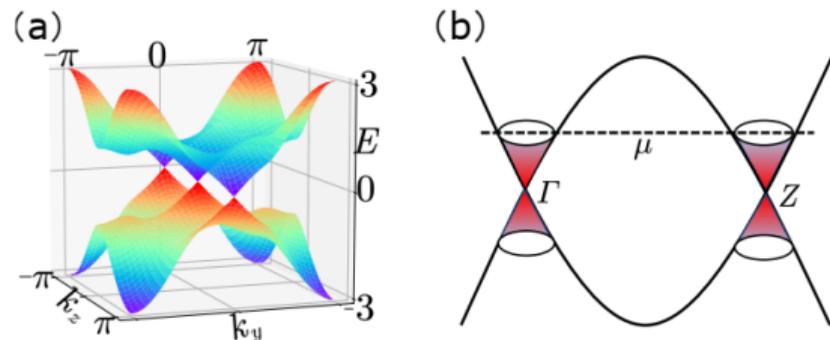


FIG. 1. (a): The energy spectrum of two Dirac cones on (100) surface is plotted. Model parameters are taken as $m = 2, t_x = t_y = 2, t_z = 1$. (b): Schematic plot of the two Fermi surfaces around the two surface Dirac cones.

此时在 (001) 面上时不存在拓扑表面态的, 而在侧边界的每个面上都存在两个 Dirac 锥表面态.

当化学势位于体态电子能隙中间时, 在每个 Dirac 锥附近都存在一个费米面, 当考虑体态的 s_{\pm} 配对后, 弱拓扑绝缘体表面态由 2D 无质量的 Dirac 方程描述, 此时因为电子配对的存在而诱导出质量.

s_{\pm} 波与 s 波配对不同, 会在 BZ 中心及角落处符号相反, 所以在同一个侧面上的两个 Dirac 锥将会诱导出相反的质量项. 而这也正好对应着此时有奇数个费米面上的电子配对符号是负的, 根据前面提到的拓扑判据, 此时的侧表面是时间反演不变的拓扑超导体, 但是它的体态仍然是个平庸的超导态.

从边界态理论出发

$$H_{\text{BdG}}^{\gamma(z)} = (m_{\gamma(z)} + t_x/2k_x^2 + t_y/2k_y^2 \pm t_z/2k_z^2)\tau_z\sigma_z + k_x\sigma_xs_x + k_y\tau_z\sigma_xs_y \pm k_z\sigma_xs_z + [\bar{\Delta} - \Delta_1/2(k_x^2 + k_y^2)]\tau_ys_y \quad (34)$$

在 Γ 与 Z 点的能带反转位置处 $m_{\gamma(z)} = m_0 - t_x - t_u \pm t_z < 0$, $\bar{\Delta} = \Delta_0 + 2\Delta_1$ 取 $k_x \rightarrow -i\partial_x$ 后进行微扰计算

$$H_0^{\gamma(z)} = (m_{\gamma(z)} - \frac{t_x}{2}\partial_x^2)\tau_z\sigma_z - i\partial_x\sigma_xs_x \quad (35)$$

$$H_p^{\gamma(z)} = k_y\tau_z\sigma_xs_y \pm k_z\sigma_xs_z + [\bar{\Delta} + \frac{\Delta_1}{2}\partial_x^2]\tau_ys_y$$

在满足边界条件 $|\psi_\alpha^{\gamma(z)}(x=0)\rangle = |\psi_\alpha^{\gamma(z)}(x=-\infty)\rangle = 0$ 时求解本征方程 $H_0^{\gamma(z)}|\psi_\alpha^{\gamma(z)}(x)\rangle = 0$, 可以得到四个零能解

$$\begin{aligned} |\psi_\alpha^{\gamma(z)}(x)\rangle &= \mathcal{N}_{\gamma(z)} \sin(\kappa_1^{\gamma(z)} x) e^{\kappa_2 x} |\xi_\alpha\rangle \\ \tau_z \sigma_y s_x |\xi_\alpha\rangle &= |\xi_\alpha\rangle, \end{aligned} \quad (36)$$

$\mathcal{N}_{\gamma(z)}$ 是归一化系数, $\kappa_1^{\gamma(z)} = \sqrt{2|m_{\gamma(z)}|/t_x - 1/t_x^2}$, $\kappa_2 = 1/t_x$. 将 H_p 投影到由 4 个零能本征态张开的子空间中, 可以得到表面有效的哈密顿量为

$$\tilde{H}^{\gamma(z)} = k_y \tilde{\tau}_x \tilde{s}_z \pm k_z \tilde{\tau}_y s_0 + \Delta_x^{\gamma(z)} \tilde{\tau}_z \tilde{s}_0 \quad (37)$$

这里的 $\Delta_x^{\gamma(z)}$ 表示在 (100) 面上超导电子配对在 Dirac 表面态上诱导出的配对能隙大小, 而且在两个 Dirac 锥的位置上 Δ_x^γ 与 Δ_x^z 的大小是不同的, 虽然超导电子配对 $\Delta(\mathbf{k})$ 并不依赖于动量 k_z .

Γ 点与 Z 点处的体态电子能隙 $m_{\gamma(z)}$ 不同, 从而导致了这两个位置有不同的衰减相干长度, 这个效应正好在投影过程中由 $\Delta(x)$ 来反应.

$$\tilde{H}^{\gamma(z)} = k_y \tilde{\tau}_x \tilde{s}_z \pm k_z \tilde{\tau}_y s_0 + \Delta_x^{\gamma(z)} \tilde{\tau}_z \tilde{s}_0 \quad (38)$$

表面有效哈密顿量同时具有时间反演 $\tilde{T} = i\tilde{s}_y \mathcal{K}$ 和粒子空穴对称 $\tilde{P} = \tilde{\tau}_x \mathcal{K}$, 根据十重分类表, 属于 DIII 类, 拓扑分类为 \mathbb{Z}_2 . 表面哈密顿量的拓扑性质完全由在 Γ 与 Z 处费米面上的电子配对函数 $\Delta(x)$ 的符号决定, 由 $\Delta^\gamma(x)\Delta^z(x) > 0$ 到 $\Delta^\gamma(x)\Delta^z(x) < 0$, 表面能隙一定会发生关闭, 表明发生了表面的拓扑相变.

当 $\Delta^\gamma(x)\Delta^z(x) < 0$ 时, 在 (100) 面上将会有奇数个费米面具有负超导配对, 则根据前面得到的拓扑判据, 此时 (100) 面一定会是一个时间反演不变的拓扑超导体.

表面拓扑不变量 \mathbb{Z}_2 表示为

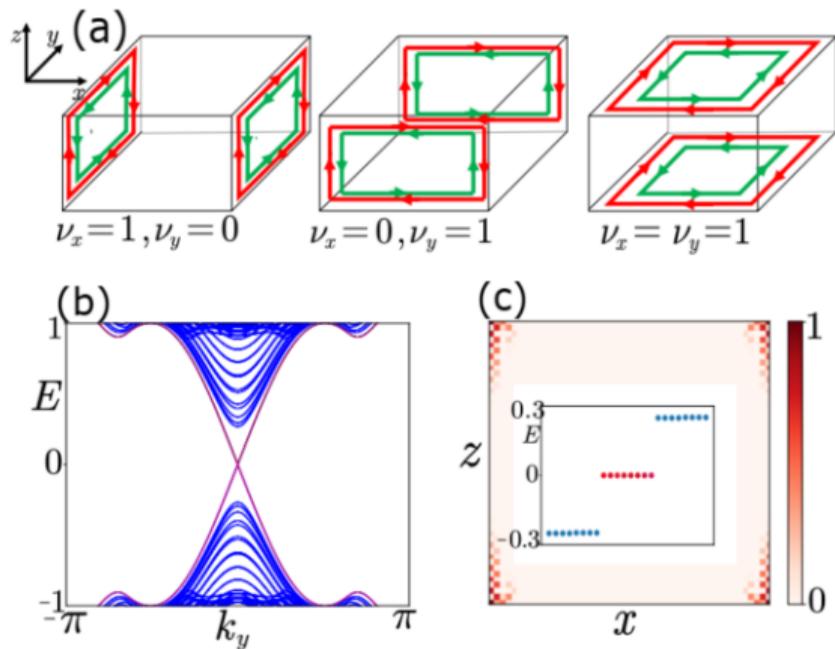
$$(-1)^{\nu_x} = \text{sgn}(\Delta_x^\gamma \Delta_x^z) \quad (39)$$

当 $\nu_x = 1$ 时可以得到实现表面时间反演不变拓扑超导体的区域为

$$-2 + |m_z|/t_x < \Delta_0/\Delta_1 < -2 + |m_\gamma|/t_x \quad (40)$$

对于 (010) 表面上的分析与 (100) 完全相似, 最终也同样可以得到表面的 \mathbb{Z}_2 拓扑不变量

$$(-1)^{\nu_y} = \text{sgn}(\Delta_y^\gamma \Delta_y^z) \quad (41)$$



- $\nu_x = 1, \nu_y = 0$, 在 (100) 面上存在 helical 边界态.
- $\nu_x = 0, \nu_y = 1$, 在 (010) 面上存在 helical 边界态.
- $\nu_x = 1, \nu_y = 1$, 在 (100) 与 (010) 面的公共边界上, 将会存在两对 \mathbb{Z}_2 保护的 helical 边界态, 两者之间会发生耦合, 从而在公共边界上并不会出现边界态, 从而边界态出现在 (001) 面的边界上.

对于 3D 体系, 此时边界态都出现在表面的边界上, 所以整个系统是时间反演对称保护的二阶拓扑超导体, 属于 DIII 类.

当沿 (100) 方向加入 Zeeman 场 $V_x \tau_z s_x$ 破坏时间反演, 此时它不会影响 (010) 表面态, 但是由超导引起的能隙 $\Delta_x^{\gamma(z)}$ 将在 Zeeman 场存在的会分开成两个不同的能隙 $|\Delta_x^{\gamma(z)} \pm V_x|$. 当 Zeeman 场大小从零开始增加当 $|\Delta_x^\gamma|, |\Delta_x^z|_{\min} = |V_x|$ 时将会发生一次表面能隙的关闭, 随着 V_x 的继续增加能隙又会打开. 这意味着有一次发生了表面拓扑相变, 无简并的表面 Dirac 锥经历了打开-关闭-打开的过程. 而这种有质量 Dirac 锥能隙关闭-打开的过程一定会伴随着 Chern 数发生改变.

当在 (100) 方向上存在 Zeeman 场时, 这个表面会变成由表面 Chern 数表征的 chiral TSC.

$$\tilde{H}^{\gamma(z)} = k_y \tilde{\tau}_x \tilde{s}_z \pm k_z \tilde{\tau}_y s_0 + \Delta_x^{\gamma(z)} \tilde{\tau}_z \tilde{s}_0 + V_x \tilde{\tau}_z \tilde{s}_z \quad (42)$$

因为此时每个 (100) 表面上有两个 Dirac 锥, 表面 Chern 数表示为

$$\begin{aligned} C_x &= C_x^\gamma + C_x^z \\ C_x^\gamma &= (\text{sgn}[\Delta_x^\gamma + V_x] - \text{sgn}[\Delta_x^\gamma - V_x])/2 \\ C_x^z &= (\text{sgn}[\Delta_x^z - V_x] - \text{sgn}[\Delta_x^z + V_x])/2 \end{aligned} \quad (43)$$

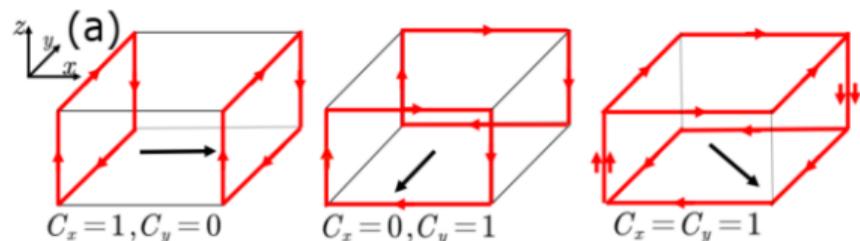
当 Zeeman 场大小满足 $\{|\Delta_x^\gamma|, |\Delta_x^z|\}_{\min} < V_x < \{|\Delta_x^\gamma|, |\Delta_x^z|\}_{\max}$, 表面 Chern 数为 +1 或者 -1, 表面 Chern 数可以表示为

$$C_x = \text{sgn}[V_x] \text{sgn}[|\Delta_x^z| - |\Delta_x^\gamma|] \quad (44)$$

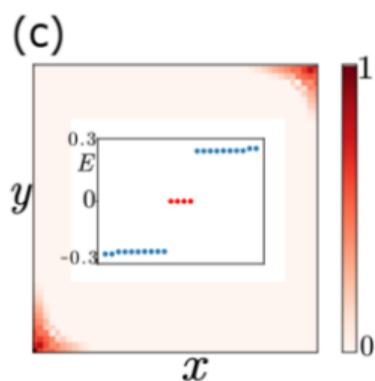
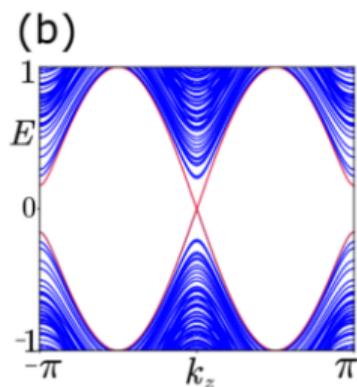
当 Zeeman 场沿 (010) 方向时, 同样可以得到相似的判据结论. 在 $\{|\Delta_y^\gamma|, |\Delta_y^z|\}_{\min} < V_y < \{|\Delta_y^\gamma|, |\Delta_y^z|\}_{\max}$ 时, 表面 Chern 数 C_y 表示为

$$C_y = -\text{sgn}[V_y] \text{sgn}[|\Delta_y^z| - |\Delta_y^\gamma|]. \quad (45)$$

通过对磁场的调控可以改变表面 Chern 数, 从而改变表面 chiral TSC 上边界流的方向. 而且通过外加磁场和超导的调控可以实现不同拓扑分类之间的变化.



- $C_x = 1, C_y = 0$, 在 (100) 边界上存在 chiral 边界态
- $C_x = 0, C_y = 1$, 在 (010) 边界上存在 chiral 边界态
- $C_x = 1, C_y = 1$, (100) 与 (010) 公共边界上的 chiral 边界态并不会耦合, 从而将 (001) 与 (00-1) 面上的边界态联合起来, 构成了一个循环流.



这里从 Dirac 理论来解释 helical 边界态与 chiral 边界态的稳定性. 要判断拓扑相的拓扑分类是 \mathbb{Z} 还是 \mathbb{Z}_2 , 需要考察当把几个最小哈密顿量直和起来就可以加入额外的质量项. 比如, 当把两个最小哈密顿量直和起来, 就可以加入额外的质量项, 则说明两个拓扑态的直和是个平庸态, 那么它对应的拓扑分类就是 \mathbb{Z}_2 .

$$H(\mathbf{k}) = m\sigma_z + k_x\sigma_x + k_y\sigma_y \quad (46)$$

三个 Pauli 矩阵外加一个单位矩阵, 可以构成二维矩阵的完备基矢, 所以此时无法找到另外的 2×2 的厄米矩阵同时与三个 Pauli 矩阵都反对易. 当把两个 (46) 直和起来之后, $\tau_0 \otimes H(\mathbf{k})$, 此时仍然无法加入满足要求的质量项. 如果把质量符号相反的最小模型直和起来, $\tau_z \otimes H(\mathbf{k})$, 此时就可以加入形如 $\tau_x\sigma_0$ 的额外质量项. 实际上, 我们将任意多个质量同号的 Chern 绝缘体直和起来, 都不能加入额外的质量项; 而每一对质量相反的 Chern 绝缘体之间总是可以加入额外的质量项, 这说明无对称性的二维系统具有 \mathbb{Z} 的拓扑分量, 其中拓扑不平庸的态统称为 Chern 绝缘体.

时间反演不变的二维系统, $\mathcal{T}^2 = -1$, 假设时间反演操作为 $\mathcal{T} = -i\sigma_y\mathcal{K}$, 那么一个满足对称性的最小哈密顿量为

$$H(\mathbf{k}) = m\tau_y\sigma_z + k_x\tau_0\sigma_x + k_y\tau_0\sigma_y \quad (47)$$

此时可以加入的反对易质量项为 $\tau_x\sigma_z, \tau_z\sigma_z$, 但是这两项都破坏了时间反演对称, 所以此时并不存在额外的质量项, 可以在满足对称性的条件下仍然和 (47) 中的每一项都反对易. 接下来考虑两个最小模型的直和形式, $\mu_0 \otimes H(\mathbf{k})$, 可以发现此时可以加入形如 $\mu_y \otimes \tau_x\sigma_z$ 的项, 既满足对称性要求同时和所有的 γ 矩阵满足反对易关系. 而对于质量相反的直和形式 $\mu_z \otimes H(\mathbf{k})$ 可以加入 $\mu_x\tau_0\sigma_0$ 这样的额外质量项. 由此可以得到时间反演不变的二维系统的拓扑分类是 \mathbb{Z}_2 . 虽然此时无法加入满足时间反演不变的质量项, 但是却可以加入破坏时间反演的质量项, 这说明 \mathbb{Z}_2 分类中不平庸的态在破缺时间反演之后会变成平庸态, 因此这个态被称为时间反演保护的拓扑绝缘体.

		TRS	PHS	SLS	$d=1$	$d=2$	$d=3$
Standard (Wigner-Dyson)	A (unitary)	0	0	0	-	\mathbb{Z}	-
	AI (orthogonal)	+1	0	0	-	-	-
	AII (symplectic)	-1	0	0	-	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2
Chiral (sublattice)	AIII (chiral unitary)	0	0	1	\mathbb{Z}	-	\mathbb{Z}
	BDI (chiral orthogonal)	+1	+1	1	\mathbb{Z}	-	-
	CII (chiral symplectic)	-1	-1	1	\mathbb{Z}	-	\mathbb{Z}_2
BdG	D	0	+1	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	-
	C	0	-1	0	-	\mathbb{Z}	-
	DIII	-1	+1	1	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}
	CI	+1	-1	1	-	-	\mathbb{Z}

1. 拓扑超导体判据
2. 高温拓扑超导体
3. 高阶拓扑超导体
4. 弱拓扑 \rightarrow 高阶拓扑
- 5. 高阶拓扑奇宇称超导体**

对于一般的超导哈密顿量 $H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} H(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}$, 基矢选择为 $\Psi_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k}}, c_{-\mathbf{k}}^{\dagger})^T$,

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^{\dagger}(\mathbf{k}) & -\epsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (48)$$

奇宇称超导体满足 $\Delta(\mathbf{k}) = -\Delta(-\mathbf{k})$, 电子配对在时间反演不变动量点自然为零. 当正常态是金属时, 奇宇称超导体配对节点一般具有 Dirac 点的性质, 所以当费米面含括配对节点之后, 将会具有非平庸的 Berry 位相, 这也是非平庸拓扑相的起源.

在 2D 和 3D, 如果费米面包含时间反演不变动量点的数目是奇数个, 那么一个由能隙的奇宇称超导体是一阶拓扑超导体^a. 当一阶拓扑是平庸的时候, 体系的费米面一定是可以收缩的, 它们可以进行连续形变收缩成一个点或者相互之间消失, 且中间并不会穿过时间反演不变动量点.

^aM. Sato, PRB, 81, 220504; L. Fu, PRL, 105, 097001

⁶ZB-Yan, PRL, 123, 177001

虽然在平庸相时, 费米面变形可以不穿过时间反演不变动量点, 但是如果在一般的动量点存在 Dirac 点, 在其收缩或者相互消失的时候就会有体态能隙的关闭的过程. 在拓扑性质上, 高阶拓扑奇宇称超导体 (HOTOSC) 与平庸的超导体是不同的, 所以费米面上存在不平庸的 Berry 位相是实现 HOTOSC 的一个条件.

- 费米面包含一般动量点处的 Dirac 点.
- 正常态能带是个拓扑半金属, 能带本身具有拓扑性质.

