

# Kitaev chain model

REF

[1]A. Yu Kitaev, Unpaired Majorana fermions in quantum wires, Phys. Usp. 44, 131 (2001).

[2]Xingyao Guo, Xinglei Ma, Xuzhe Ying, K. T. Law. Majorana Zero Modes in the Lieb-Kitaev Model with Tunable Quantum Metric arXiv:2406.05789

[3]B. Andrei Bernevig, Topological Insulators and Topological Superconductors

## Introduction

在平带超导中的Lieb-Kitaev模型中，由于开放边界条件发现了边界态的奇特模式。边界态majorana波函数在靠近边界的地方按照BCS的衰减模式，在体内按照QML的衰减模式。具体可以在我的上一篇文章中看到，从一个比大小的角度来看，这是因为QML:  $\sqrt{2}aJ/V$   $J \gg V$ , BCS:  $\xi_{\text{BCS}} = -2a/\ln\left(\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right) = 2a/\ln O(1)$ ，表示对于衰减函数  $e^{-x/\xi}$  来说，boundary附近对应了  $x=0$ ，应当由小的BCS主导，内部由大的QML主导。在这篇文章中我将介绍为什么Kiteev模型对应非平带超导时，它的edge mode是BCS的衰减模式。在引入了平带时，BCS衰减失效，torma(2016)认为superfluid density可以描述一个多带超导，在平带的时候superfluid density中的QML项留存了下来，以描述平带超导。

## Kitaev Model

### BCS localization length

考虑一个开放一维链,存在hopping和pairing:

$$H_1 = \sum_j \left( -w \left( a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j \right) - \mu \left( a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) + \Delta a_j a_{j+1} + \Delta^* a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right) \quad (1)$$

其中  $\Delta = |\Delta|e^{i\theta}$ ，定义:

$$c_{2j-1} = e^{i\frac{\theta}{2}} a_j + e^{-i\frac{\theta}{2}} a_j^\dagger, \quad c_{2j} = -ie^{i\frac{\theta}{2}} a_j + ie^{-i\frac{\theta}{2}} a_j^\dagger \quad (2)$$

容易发现，这些majorana算符满足:

$$c_i c_j + c_j c_i = 2\delta_{ij}$$

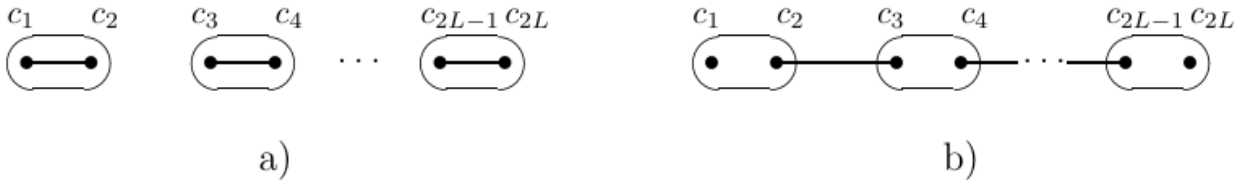
$$c_i^\dagger = c_i$$

Kitaev模型想要模拟的是存在一对majorana的p-wave超导体，不妨假设体系存在于某个三维超导体表面上的一条量子线。我们需要这个哈密顿量至少满足一些条件来产生马约拉纳算符。第一是该哈密顿量破坏了  $U(1)$  对称性到  $Z_2$  对称性。因为马约拉纳算符  $c = a^\dagger + a$  在  $a \rightarrow ae^{i\theta}$  下规范变化。而  $c$  只能满足  $c \rightarrow -c$  的变化下，产生的majorana配对才不变，才能产生  $c_i c_j$  这样一对。那么超导体满足  $Z_2$  而不满足  $U(1)$ 。第二需要模拟的是p-wave超导，从宇称的角度来看，p-wave空间轨道角动量  $l=1$  奇宇称，则自旋应当三重态，可以不妨假设自旋同向，从而不把自旋写入哈密顿量中。将该变换代入原哈密顿量中得到:

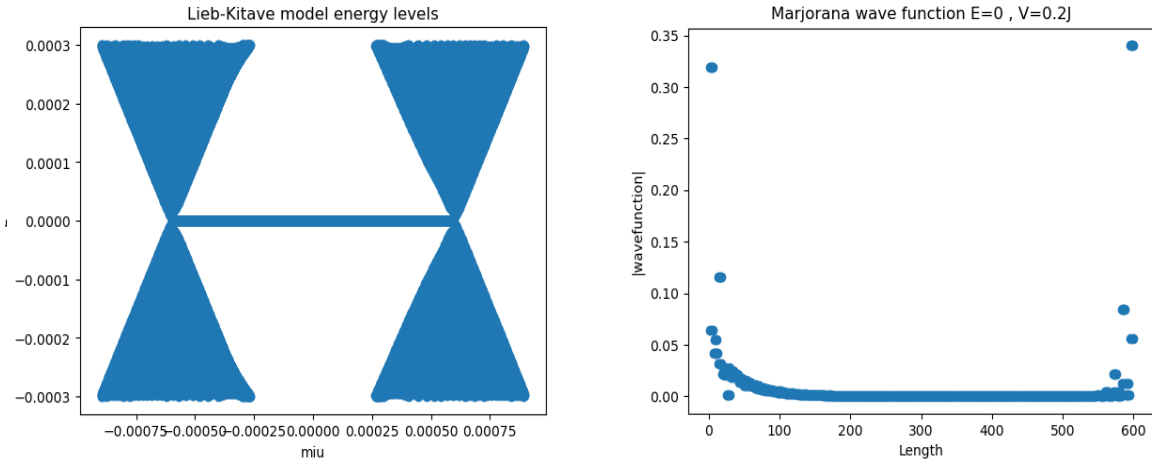
$$H_1 = \frac{i}{2} \sum_i \left( -\mu c_{2j-1} c_{2j} + (w + |\Delta|) c_{2j} c_{2j+1} + (-w + |\Delta|) c_{2j-1} c_{2j+2} \right) \quad (3)$$

注意到majorana算符  $c_{2j-1}$  和  $c_{2j}$  属于同一个格点  $j$ ，而算符  $c_{2j}$  和  $c_{2j+1}$  属于不同格点  $j$  与  $j+1$ 。如果希望在开放边界一维链的两端空余了两个majorana，应当做的是把属于不同格点的majorana算符配对,如下图b。因此需要

$|\Delta| = w > 0, \mu = 0$ ， $H_1 = iw \sum_j c_{2j} c_{2j+1}$ 。



这个哈密顿量可以对角化，定义  $a_j = \frac{1}{2}(c_{2j} + ic_{2j+1})$ ,  $a_j^\dagger = \frac{1}{2}(c_{2j} - ic_{2j+1})$ ,  $H = 2w \sum_{j=1}^{L-1} (a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2})$ 。算符  $a$  实际代表了 "bond"。比如图 b 的  $c_2, c_3$  之间连线，总共有  $L-1$  个 bond。而  $c_1, c_{2L}$ ，不被配对，不存在于哈密顿量中，但仍然存在希尔伯特空间中。求解哈密顿量给出波函数  $2$  至  $2L-1$  格点情况，对于波函数在  $1, 2L$  格点存在两种情况， $H, c_1 = 0; H, c_{2L} = 0$ ，在 **kitaev** 链的两端存在两个零能的激发，称为两个 (**majorana zero modes; MZM**)，对应两个  $E=0$  的能级  $d = \frac{1}{2}(c_1 + ic_{2L})$ ,  $d^\dagger = \frac{1}{2}(c_1 - ic_{2L})$ ，



下面要求解 **majorana** 波函数，得到 **kitaev** 模型的 **bulk** 的性质是容易的，这就是一个 **PBC** 条件下的 **BDG** 哈密顿量，把 **PBC** 的公式 (1) 变换到 **K** 空间就能得到：

$$H_{BDG} = \tau^z (-\mu - 2w \cos k) - \Delta \tau^y \sin k \quad (3)$$

其中有特征值  $\epsilon(k) = \pm \sqrt{(2w \cos k + \mu)^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2 k}$ 。在上一次读书会上的文章中，求解 **boundary** 性质是构造哈密顿量  $H = H_{BDG} + H_1$ ,  $H_1$  就是一维链边界上的相互作用，从 **PBC** 中扣掉这部分构造 **OBC**，但同时可以利用 **PBC** 的能带线性组合出 **OBC** 的零能边界态。过程中 **OBC** 需要不同对于 **K** 求和，由于实空间波函数是一系列 **bloch** 函数的组合： $\psi = \sum_k w_{nk} g_{n,\alpha}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}r}$ ，求和可以通过奇点求和完成。

在这里用一种抓住 **majorana** 物理的近似去做。直接写出 **majorana** 波函数的待定系数形式，它肯定是指数衰减的： $(q < 1)$

$$\psi(x) \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} e^{-qx}$$

在边界点  $x=0$  处，边界外面就是无限高势垒，边界点处波函数肯定是零，这说明整体波函数是两支 **majorana** 波函数的相减：

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (e^{-q_1 x} - e^{-q_2 x})$$

在这里并不会引入 **OBC** 的哈密顿量，而是对 **PBC** 的哈密顿量做 **bulk** 到 **boundary** 的演变，解  $q$  完全可以是 **bulk** 哈密顿量的解，只要让波函数呈现出衰减的形式就可以了。实际上，对比 **bulk** 波函数与 **boundary** 波函数：

$$\psi = \sum_k w_{nk} g_{n,\alpha}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}r}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (e^{-q_1 x} - e^{-q_2 x})$$

前者呈现波动的性质，后者呈现指数衰减的性质，无非是前者指数上是 $ik$ 后者是实数 $q$ ，就是同一个**bulk**波函数的两类解。把BDG哈密顿量的 $ik$ 部分替换为 $q$ 就可以得到解，实际上就是求解哈密顿量的指数 $e^{Ax}$ 波动解无穷远处不为零，则 $A$ 实部为零，否则解出 $A$ 的实部。

$$\begin{aligned}
 H &\rightarrow \tau^z (-\mu/2 - \omega (e^q + q^{-q})) + i \frac{\Delta}{2} \tau_y (e^{-q} - e^q) \\
 e^{-2q}(\omega + \Delta) + 2e^{-q}\mu + (\omega - \Delta) &= 0 \\
 e^{-q} &= \frac{-\mu/2 \pm \sqrt{\mu^2/4 - (\omega^2 - \Delta^2)}}{(\omega + \Delta)} \quad (4)
 \end{aligned}$$

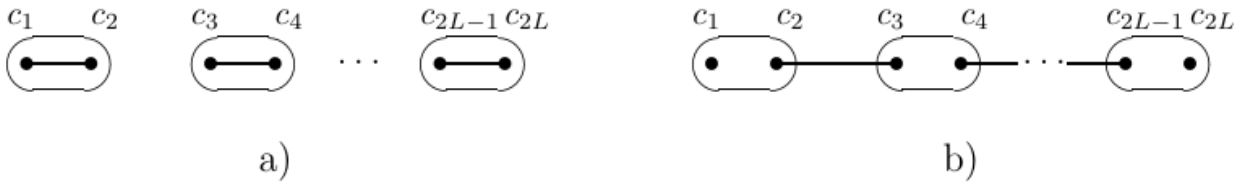
定义这两个解为 $x_+, x_-$ 对比Lieb-Kiatev模型解出的BCS衰减长度 $\xi_{\text{BCS}} = -2a/\ln\left(\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right)$ 。这里让 $\mu = 2\omega$ 两者一致，这就是平带情况( $\epsilon$ 和 $t$ 的尺度接近)。之前说两个**majorana**波函数可以表达为两个零能**majorana**算符的激发： $c_1|0\rangle$ 和 $c_{2L}|0\rangle$ ，现在这两个算符可以表示为：

$$c_1 = \sum_j (\alpha'_+ x_+^j + \alpha'_- x_-^j) c_{2j-1} c_{2L} = \sum_j (\alpha''_+ x_+^{-j} + \alpha''_- x_-^{-j}) c_{2j}$$

这样在实空间中去看 $\langle 0d|n_i|d0\rangle$ 的两支，可以得到衰减的函数。 $\alpha_+, \alpha_-$ 为比例系数。这种近似得到**majorana**波函数的方法也存在不严谨性，就是有限尺寸下两个**MZM**会相互作用，不能看作线性组合。

## Bulk - Boundary correspondance

对角化Kitaev哈密顿量，看到在不同的极限下有**a,b**两种基态，其中称只有**b**是拓扑的：



$$\epsilon(k) = \pm \sqrt{(2w \cos k + \mu)^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2 k}$$

$$H_1 = \frac{i}{2} \sum_i (-\mu c_{2j-1} c_{2j} + (w + |\Delta|) c_{2j} c_{2j+1} + (-w + |\Delta|) c_{2j-1} c_{2j+2}) \quad (3)$$

(a) 发生在 $|\omega| = |\Delta| = 0, \mu < 0$ 的情况下，而相位(b)对应 $|\Delta| = w > 0, \mu = 0$ 。实际上改变 $\omega, \mu$ 在 $2|\omega| < |\mu|$ 都对应了(a)，当 $|\omega| = |\Delta| = 0, \mu < 0$ 时， $\omega/\mu = 0$ 而 $\epsilon(k) = \pm\mu$ ，另一面 $|\Delta| = w > 0, \mu = 0$ 时 $\epsilon(k) = \pm 2\sqrt{2}\omega$ 。**bulk**始终是**gapped**的，只有当 $2|\omega| = |\mu|$ 时，**bulk**存在**gapless**。而**boundary**

$$\begin{aligned}
 c_1 &= \sum_j (\alpha'_+ x_+^j + \alpha'_- x_-^j) c_{2j-1} \\
 x_{\pm} &= \frac{-\mu/2 \pm \sqrt{\mu^2/4 - (\omega^2 - \Delta^2)}}{(\omega + \Delta)} \quad (4)
 \end{aligned}$$

当 $2|\omega| < |\mu|$ 时，有 $|x_+| > 1, |x_-| < 1$  or  $|x_+| < 1, |x_-| > 1$ ，如果 $x > 1$ 这不是衰减的形式了。所以两个参数 $\alpha_+, \alpha_-$ 必有一个为零。之前说过，为了让边界处波函数为零波函数必须要写作：

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (e^{-q_1 x} - e^{-q_2 x})$$

也就是两个比例系数需要一正一负，现在一个是零，另一个无论如何不能满足边界条件，实际这个边界态就不存在，这个相(a)是普通的。另一面，当 $2\omega > |\mu|, \Delta \neq 0$ 时，有 $|x_+|, |x_-| < 1$ ，边界方程写作：

$$\alpha'_+ + \alpha'_- = 0, \quad \alpha''_+ x_+^{-(L+1)} + \alpha''_- x_-^{-(L+1)} = 0$$

解是存在的，这解释了上面的图片， $E = 0$  的边界态只在一个范围内存在。称从  $2|\omega| < |\mu|$  到  $2\omega > |\mu|$  发生了一次拓扑相变，表现为拓扑保护边界态的出现，以及体态能隙闭合与重新打开，即从常规超导态，经由正常金属态到拓扑超导态的过程。

## Pfaffian

拓扑的一个关键特性是拓扑已经暗含在**bulk**的性质中，也就是说考虑**PBC**的哈密顿量足以判断拓扑。以  $Z_2$  为代表的 **Kitaev** 链中，拓扑的性质可以由链的宇称来刻画。实际上 **OBC** 的 **kitaev** 链的基态是一组奇宇称与偶宇称的简并： $d|0\rangle$  和  $d^\dagger|0\rangle$

$$d = \frac{1}{2}(c_1 + ic_{2L}), \quad d^\dagger = \frac{1}{2}(c_1 - ic_{2L})$$

系统的总宇称算符定义为费米子数算符的指数：

$$P = (-1)^N = \prod_j (1 - 2a_j^\dagger a_j),$$

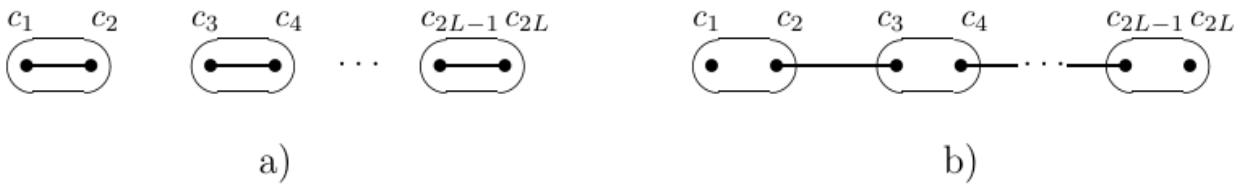
在单site费米子情况下，就是没有粒子  $P=1$  有粒子  $P=0$ 。任意多格点就是偶数个费米子  $P=1$ ，奇数  $P=0$ 。对于 **majorana** 体系做变量代换  $c_{2j-1} = a_j + a_j^\dagger, c_{2j} = -i(a_j - a_j^\dagger)$ ，得到宇称算符：

$$P = \prod_j (-ic_{2j-1}c_{2j}).$$

因此，可以借此判断两个简并的 **majorana** 态的宇称：

$$\begin{aligned} P(d, d^\dagger)|0\rangle &= \prod_j (-ic_{2j-1}c_{2j}) \frac{1}{2}(c_1 \pm ic_{2L})|0\rangle \\ &= (-1)^{n_d}(d, d^\dagger)|0\rangle = \pm(d, d^\dagger)|0\rangle \end{aligned}$$

当引入 **PBC** 条件时，链的首尾耦合，此时两个 **Majorana** 零模通过  $i\epsilon\gamma_1\gamma_{2L}$  耦合， $\epsilon \sim e^{-L/\xi}$  为耦合能。此时有效哈密顿量在低能下为  $H_{\text{coupling}} = i\epsilon\gamma_{2L}\gamma_1 = -\epsilon(2d^\dagger d - 1)$ （注意 **majorana** 算符反对易性质，一定要按照一个顺序排列）。对于  $n_d = 0$  的偶宇称态，能量大于零；对于  $n_d = 1$  的奇宇称态，能量小于零。说明 **PBC** 的引入破坏了边界态，让系统基态成为奇宇称，这也对应了 **p** 波超导奇宇称的性质。尤其当考虑一个 **2L** 长度的 **majorana** 哈密顿量，如下图所示，



其中 **a** 时平凡相，**a** 的 **majorana** 两两配对，具有偶宇称，加入 **PBC** 亦是偶宇称；对于 **b** 这个拓扑项，具有简并的宇称，加入 **PBC** 时 **majorana** 能级劈裂，基态具有奇宇称。定义拓扑不变量  $M = \pm 1$ ,  $M = -1$  对应拓扑相，可以以此来定义  $M$ ：**(Kitaev** 原文献有证明该式子成立，利用把两条奇数链拼接起来的方法，在此略去)

$$M = P(H_{\text{bulk}, 2L}) \quad (5)$$

为了计算  $M$  的值，可以利用哈密顿量的矩阵形式。 $Z_2$  拓扑不变量可以用 **Pfaffian** 数来构造，具体构造和含义太复杂了，也不讨论严格的数学证明，这里仅讨论其在 **Kitaev** 模型以及 **Lieb-Kitaev** 模型上的应用。简单来说，**Pfaffian** 数就是，对于反对称矩阵 **A**：

$$Pf(A) = A \text{ 矩阵的行列式再开根号}$$

严格的定义为：(其中  $S$  为  $2N$  个元素的全排列)

$$Pf A = \frac{1}{2^N N!} \sum_{\tau \in S_{2N}} \text{sgn}(\tau) A_{\tau(1), \tau(2)} \cdots A_{\tau(2N-1), \tau(2N)}. \quad (6)$$

或者可以理解为：

$$\text{Pf} A = \sum_{\text{全排列}} (-1)^{i_1 i_2 \dots i_N \text{排列的逆序数}} A_{1,i_1} \cdot A_{2,i_2} \cdot \dots \cdot A_{N,i_N}$$

A矩阵的行列式再开根号有两个，在矩阵表示中需要规定在选取一组基下面的**Pfaffian**数的正负号，比如**kitaev**模型的反对称矩阵，定义在基(a, b)下面，为：

$$A = \begin{pmatrix} S & C \\ -C^T & S^* \end{pmatrix}, \quad \text{Pf}(A) = r$$

那么也可以定义在基(b, a)下面，此时两个矩阵行列式相同，为：

$$A' = \begin{pmatrix} S & -C^T \\ C & S^* \end{pmatrix}, \quad \text{Pf}(A) = -r$$

交换基，可以通过变换W来完成，同时改变**Pfaffian**数。这也代表着如果W不保宇称的话（变换需要交换费米子顺序），变换W就会对**Pfaffian**数有影响，有一个数学结论：

$$\text{Pf}(WAW^T) = \text{Pf}(A) \det(W). \quad (7)$$

从中看出**Pfaffian**数的符号和宇称有某种相关，不如将**majorana**算符做W描述的线性变换：

$$\gamma_i \rightarrow \gamma'_i = \sum_{j=1}^{2N} W_{ij} \gamma_j,$$

宇称算符变为：

$$P' = \prod_{j=1}^N \left( i \sum_{k=1}^{2N} W_{2j-1,k} \gamma_k \sum_{l=1}^{2N} W_{2j,l} \gamma_l \right)$$

关键是关注到**majorana**算符的反对易性质：

$$P' = \prod_{j=1}^N \left( i \sum_{k<l} (W_{2j-1,k} W_{2j,l} - W_{2j-1,l} W_{2j,k}) \gamma_k \gamma_l + i \sum_k W_{2j-1,k} W_{2j,k} \right)$$

这几乎是行列式形式，可以不太严谨地认为：

$$P' = \text{sgn}(\det(W)) \prod_{j=1}^N (i \gamma_{2j-1} \gamma_{2j}) = \text{sgn}(\det(W)) P.$$

因此：

$$P(H) = \text{sgn} \det W$$

我们认为A是哈密顿量对应的矩阵，变换W变换到反对称对角矩阵。**kitaev**模型的2N个本征值具有粒子空穴对称性，可以把矩阵写作： $(\epsilon_i > 0)$

$$WAW^T = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_1 & & & & \\ -\epsilon_1 & 0 & & & & \\ & & \dots & & & \\ & & & 0 & \epsilon_N & \\ & & & -\epsilon_N & 0 & \end{pmatrix}$$

这个矩阵的**Pfaffian**数有数学结论，为 $\epsilon_1 \cdot \epsilon_2 \cdot \dots \cdot \epsilon_N$ ，故  $\text{sgn} \text{Pf}(WAW^T) = 1$ ，因此：

$$P(H) = \text{sgn} \det W = \text{sgn} \frac{\text{Pf}(WAW^T)}{\text{Pf}(A)} = \text{sgn} \text{Pf}(A) \quad (8)$$

这就说明了，拓扑的判断可以通过实空间哈密顿量的**Pfaffian**数来完成，当然先要选择一组基固定正负号，可以看到从拓扑到非拓扑的区间有一个正负号的变化。现在求k空间的形式。傅里叶变换写作：

$$A(k) = FA_{ij}F^\dagger$$

$$F_{ki} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik \cdot r_i}$$

利用傅里叶变换酉矩阵的性质,  $|\det(F)| = 1$ , 得到:

$$Pf(A) = pf(F \prod_k A_k F^\dagger) = pf(\prod_k A(k)) \cdot \det(F) = pf(\prod_k A(k))$$

$\mathbf{k}$ 还需要做选择, 首先 $\mathbf{k}$ 是离散的,  $k = 2\pi \frac{z}{L} \pmod{2\pi}$ ,  $z = 0, \dots, N-1$ . 其次对于满足粒子空穴对称性的傅里叶变换生成的两个动量 $k, k'$ 只有 $k = -k'$ 成立, 这就是说 $\tilde{A}^\dagger(k) = -\tilde{A}(k) = \tilde{A}^T(-k)$ . 因此 $pf \tilde{A}^\dagger(k) = pf \tilde{A}^T(-k)$ , 因此正负一对 $\mathbf{k}$  Pfaffian数, 乘起来符号肯定是正的, 除非这个 $\mathbf{q}$ 没有它对应的负值.  $L$ 是奇数,  $\mathbf{q}$ 只能为零. 我们需要的majorana链 $L$ 是偶数,  $\mathbf{q}$ 可以是0或者 $\pi$ . 综上所述, 拓扑不变量在可以借由 $\mathbf{K}$ 空间的PBC哈密顿量计算:

$$\mathcal{M}(H_{2L}) = \text{sgn}(\text{Pf} \tilde{H}(k=0)) \text{sgn}(\text{Pf} \tilde{H}(k=\pi)) \quad (9)$$

其中 $\tilde{H}$ 因为希望傅里叶变换后的哈密顿量矩阵仍然有反对称的形式, 还需要做变换.

下面可以利用这个结论计算Lieb-Kitaev模型的拓扑不变量:

$$H_0 = H_{\text{BdG}} = \sum_k \hat{\Psi}^\dagger(k) \mathcal{H}(k) \hat{\Psi}(k) = \sum_k \hat{\Psi}^\dagger(k) \begin{pmatrix} h(k) & -i2\Delta \sin(ka) \mathbb{I}_3 \\ i2\Delta \sin(ka) \mathbb{I}_3 & -h^*(-k) \end{pmatrix} \hat{\Psi}(k),$$

$$h(k) = (-\mu - 2t \cos(ka)) \mathbb{I}_3 + \begin{pmatrix} -V & a_k & 0 \\ a_k^* & 0 & a_k^* \\ 0 & a_k & V \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad a_k = -J(1 + e^{ika}).$$

转换到非平带表象, 仍然用非平带QML表示平带:

$$X(k) = \begin{pmatrix} u_-(k) & 0 & u_0(k) & 0 & u_+(k) & 0 \\ 0 & u_-(-k) & 0 & u_0(-k) & 0 & u_+(-k) \end{pmatrix}$$

$$h(k)u_n(k) = \epsilon_n(k)u_n(k).$$

反对称化的么正矩阵为:

$$U^a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & & \\ i & -i & & & & \\ & & 1 & 1 & & \\ & & i & -i & & \\ & & & & 1 & 1 \\ & & & & i & -i \end{pmatrix}$$

$$\tilde{H}(k) = U^a X(k) \mathcal{H}(k) X^\dagger(k) U^{a\dagger},$$

得到的形式类似: 所以只要做 $\epsilon_1 \cdot \epsilon_2 \cdot \dots \cdot \epsilon_N$ 就可以了.

$$WAW^T = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_1 & & & & \\ -\epsilon_1 & 0 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & & 0 & \epsilon_N \\ & & & & -\epsilon_N & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Pf}[i\tilde{H}(k=0)] = (-\mu - 2t - \sqrt{V^2 + 8J^2}) (-\mu - 2t) (-\mu - 2t + \sqrt{V^2 + 8J^2})$$

$$\text{Pf}\left[i\tilde{H}\left(k = \frac{\pi}{a}\right)\right] = (-\mu + 2t - V)(-\mu + 2t)(-\mu + 2t + V).$$

观察这两个数相乘后的符号, 如果想要为-1, 即拓扑相, 需要参数在以下区间之一:

$$-\sqrt{V^2 + 8J^2} - 2t < \mu < -V + 2t$$

$$-2t < \mu < 2t$$

$$V + 2t < \mu < \sqrt{V^2 + 8J^2} - 2t$$

在文中的参数设置中,  $V \gg t$ 因此实际观察到的区间只是 $-2t < \mu < 2t$  这也是和kitaev模型所预言的相同的结论.