

2018 年度多体系の理論, 第 12 回講義資料 v1.2018.12.18 v2. 2019.1.13
 (非従来型超伝導体における表面束縛状態)

加藤雄介

2019 年 1 月 15 日

1 chiral p 波超伝導体の BdG 方程式

天下りだが、等方的な 2 次元フェルミ面を持つ超伝導体に対する以下の Bogoliubov-deGennes (BdG) 方程式を考える。

$$\begin{pmatrix} h & -\frac{\Delta}{k_F} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ +\frac{\Delta^*}{k_F} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) & -h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1)$$

磁場の効果は無視し、一体ハミルトニアン h は実演算子であるとした。以下に示す空間的に一様な系での平面波解から、上記の方程式が p 波超伝導を表すことがわかる。

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{\Omega}} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{pmatrix} \xi_k & -i\frac{\Delta}{k_F}(k_x - ik_y) \\ i\frac{\Delta^*}{k_F}(k_x + ik_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (3)$$

記号

$$\Delta = |\Delta_k|e^{i\theta}, \quad |\Delta_k| = \frac{|\Delta|k}{k_F}, \quad e^{i\alpha} = \frac{k_x + ik_y}{k}, \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \quad (4)$$

これらを用いて (3) を書き直し、

$$\begin{pmatrix} \xi_k & -i|\Delta_k|e^{i(\theta-\alpha)} \\ i|\Delta_k|e^{i(\alpha-\theta)} & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (5)$$

を得る。

$$\begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i(\frac{\alpha-\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \bar{u}_{\mathbf{k}} \\ e^{i(\frac{\alpha-\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \bar{v}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (6)$$

とゲージ変換すると

$$\begin{pmatrix} \xi_k & |\Delta_k| \\ |\Delta_k| & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_{\mathbf{k}} \\ \bar{v}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \bar{u}_{\mathbf{k}} \\ \bar{v}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (7)$$

この固有値方程式の解のうち、正の固有値を持つものは、

$$\epsilon = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} = \epsilon_k, \quad \begin{pmatrix} \bar{u}_{\mathbf{k}} \\ \bar{v}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\epsilon_k} \right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\epsilon_k} \right)} \end{pmatrix} \quad (8)$$

凝縮体波動関数のフーリエ変換 $F_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}$ は

$$F_{\mathbf{k}} = \frac{i|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{2\epsilon_{\mathbf{k}}^2} \frac{k_x + ik_y}{k} \quad (9)$$

となるので、これは軌道角運動量 $L_z = \hbar$ の p 波超伝導を表す（カイラル P 波という）。

2 カイラル p 波の表面束縛状態

$x > 0$ を占めるカイラル p 波超伝導体でエネルギーギャップ ($|\Delta_{\mathbf{k}}|$) よりも小さい励起エネルギーを持つ解を探す。BdG 方程式の波動関数 u, v は y によらず x にのみ依存するものとし、

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = e^{i(k+ik_F)x} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (10)$$

とおく。 k は実波数 ($|k| \sim k_F$)、 κ は正であるとする。 u_k, v_k が満たす方程式は

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(k+i\kappa)^2 - \mu & -i\frac{k+i\kappa}{k_F}\Delta \\ i\frac{k+i\kappa}{k_F}\Delta^* & -\frac{\hbar^2}{2m}(k+i\kappa)^2 + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (11)$$

この固有値問題の特性方程式は

$$\begin{aligned} & \epsilon^2 - \left(\frac{\hbar^2(k^2 - \kappa^2)}{2m} - \mu + \frac{i\hbar^2 k \kappa}{m} \right)^2 - \frac{|\Delta|^2(k^2 - \kappa^2)}{k_F^2} - \frac{i2|\Delta|^2 k \kappa}{k_F^2} \\ & = \epsilon^2 - \left(\frac{\hbar^2(k^2 - \kappa^2)}{2m} - \mu \right)^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) \left(\frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} \right) - \frac{|\Delta|^2(k^2 - \kappa^2)}{k_F^2} + i\frac{\hbar^2 k \kappa}{m} \left[\frac{|\Delta|^2}{\mu} - \frac{\hbar^2 k^2}{m} + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} + 2\mu \right] = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

で与えられる。左辺の虚部はゼロであることから、

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} = \frac{\hbar^2 k^2}{m} + \frac{|\Delta|^2}{\mu} - 2\mu \quad (13)$$

を得る。これを (12) の左辺の実部 (これもゼロである) に代入し、 κ を消去すると k^2 についての 2 次方程式

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} \right)^2 - 2 \left(\mu - \frac{|\Delta|^2}{\mu} \right) \left(\frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) + \epsilon^2 - |\Delta|^2 + \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2} = 0 \quad (14)$$

を得る。これを解いて

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} = \mu - \frac{|\Delta|^2}{2\mu} \pm (\mu^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} \quad (15)$$

これを (13) に代入して

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} = \left(\frac{|\Delta|^2}{2\mu} - \mu \pm (\mu^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (16)$$

を得る。 $|\Delta| \ll \mu$ なので、この複号は上符号をとる、すなわち

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} = \mu - \frac{|\Delta|^2}{2\mu} + (\mu^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \frac{\hbar^2 \kappa^2}{m} = \left(\frac{|\Delta|^2}{2\mu} - \mu + (\mu^2 - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (17)$$

となる。これらの表式は第二式の右辺が正になる

$$\epsilon \leq \left(|\Delta|^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

のときに正しい。(17)より

$$\frac{\hbar^2 |k| \kappa}{m} = \left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

$$\frac{|k|}{k_F} = \left(\frac{1}{2} \left(1 - \frac{|\Delta|^2}{2\mu^2} + \left(1 - \frac{\epsilon^2}{\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \sim 1, \quad \frac{\kappa}{k_F} = \left(\frac{|\Delta|^2}{4\mu^2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon^2}{\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \sim O(|\Delta|^2/\mu^2) \quad (20)$$

固有値方程式は

$$\begin{pmatrix} -\frac{|\Delta|^2}{2\mu} + i \operatorname{sgn}(k) \left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon & -i \frac{k+i\kappa}{k_F} \Delta \\ i \frac{k+i\kappa}{k_F} \Delta^* & \frac{|\Delta|^2}{2\mu} - i \operatorname{sgn}(k) \left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \quad (21)$$

これを $k/k_F \sim \operatorname{sgn}(k)$, $\kappa/k_F \sim 0$, $\frac{|\Delta|^2}{2\mu} \sim 0$ とおくと *

$$\begin{pmatrix} i \operatorname{sgn}(k) \left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 \right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon & -i \operatorname{sgn}(k) \Delta \\ i \operatorname{sgn}(k) \Delta^* & -i \operatorname{sgn}(k) \left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 \right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \quad (22)$$

これは s-wave のとき固有値問題と波線部を除いて一致している. $\epsilon/|\Delta| = \cos \phi$, $\Delta = |\Delta| e^{i\theta}$ とすると

$$\begin{pmatrix} -e^{\mp i\varphi} & \mp e^{i(\theta+\pi/2)} \\ \mp e^{-i(\theta+\pi/2)} & -e^{\pm i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \quad (23)$$

(上符号が $k > 0$ 下符号が $k < 0$). 一度位相変換

$$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{u}_k e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \\ \bar{v}_k e^{-i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \end{pmatrix} \quad (24)$$

をして固有値問題を

$$\begin{pmatrix} -e^{\mp i\varphi} & \mp 1 \\ \mp 1 & -e^{\pm i\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_k \\ \bar{v}_k \end{pmatrix} = 0 \quad (25)$$

(上符号が $k > 0$ 下符号が $k < 0$) と書きなおすとこの固有関数は

$$\begin{pmatrix} \bar{u}_k \\ \bar{v}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \quad k > 0, \quad \begin{pmatrix} \bar{u}_k \\ \bar{v}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad k < 0, \quad (26)$$

となる。両者は $\epsilon > 0$ では線形独立だが、 $\epsilon = 0$ では $\varphi = \pi/2$ のため縮退する。よって

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = c_1 e^{i|k|x - \kappa x} \begin{pmatrix} e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \\ -e^{-i\varphi} e^{-i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \end{pmatrix} + c_2 e^{-i|k|x - \kappa x} \begin{pmatrix} e^{i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \\ e^{i\varphi} e^{-i(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi}{4})} \end{pmatrix} \quad (27)$$

はエネルギー $\epsilon = 0$ のとき $c_2 = -c_1$ とすれば固定端の境界条件 $u(x=0) = v(x=0) = 0$ を満たすことが可能である。

追記 (2019.1.13)

(21) はその次の行に書かれた近似*を用いずにゼロ固有値を持ち、固定端の境界条件を満たす非自明な解があることが示せる。 $\epsilon = 0$ のとき

$$\frac{|k|}{k_F} = \left(1 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2}{4\mu^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \frac{\kappa}{k_F} = \frac{|\tilde{\Delta}|}{2} \quad (28)$$

ただし $\tilde{\Delta} = \Delta/\mu$ とした。このとき固有値方程式は

$$\begin{pmatrix} 1 & -e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \quad (29)$$

と単純な形になる。よって

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = (c_1 e^{i|k|x - \kappa x} + c_2 e^{-i|k|x - \kappa x}) \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} \\ e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \quad (30)$$

となるので、 $c_2 = -c_1$ とすれば固定端の境界条件 $u(x=0) = v(x=0) = 0$ を満たすことが可能である。

3 2次元d波超伝導体の BdG 方程式

次の BdG 方程式を用いて 2次元d波超伝導体を考える。

$$\begin{pmatrix} h & \frac{\Delta}{k_F^2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \frac{\Delta^*}{k_F^2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} & -h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (31)$$

4 d波の表面束縛状態

$x > 0$ を占める 2次元d波超伝導体でエネルギーギャップよりも小さい励起エネルギーを持つ解を探す。BdG 方程式の波動関数 u, v は y については平面波、 x については減衰振動型の空間依存性を持つものとし

$$\begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = e^{i(k+i\kappa)x+iqy} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (32)$$

とおく。 k, q は実波数とし、正の実数 κ は波動関数の空間的な減衰率を表す。 $\Delta = |\Delta|e^{i\theta}$ は $x > 0$ で一定、 $x < 0$ ではゼロとする。 u_k, v_k が満たす方程式は

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} ((k+i\kappa)^2 + q^2) - \mu & -\frac{\Delta(k+i\kappa)q}{k_F^2} \\ -\frac{(k+i\kappa)q}{k_F^2} \Delta^* & -\frac{\hbar^2}{2m} ((k+i\kappa)^2 + q^2) + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \quad (33)$$

この固有値問題の特性方程式は

$$\epsilon^2 - \left(\frac{\hbar^2(k^2 - \kappa^2 + q^2)}{2m} - \mu \right)^2 + \left(\frac{\hbar^2 k \kappa}{m} \right)^2 - \frac{|\Delta|^2(k^2 - \kappa^2)q^2}{k_F^4} - 2i k \kappa \left[\frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - \kappa^2 + q^2) - \mu \right) + \frac{|\Delta|^2 q^2}{k_F^4} \right] = 0 \quad (34)$$

で与えられる。無次元変数 $\tilde{\epsilon} = \epsilon/\mu$, $\tilde{\Delta} = \Delta/\mu$, $\tilde{q} = q/k_F$, $\tilde{k} = k/k_F$, $\tilde{\kappa} = \kappa/k_F$ を用いて上式を

$$\tilde{\epsilon}^2 - \left(\tilde{k}^2 - \tilde{\kappa}^2 + \tilde{q}^2 - 1 \right)^2 + \left(2\tilde{k}\tilde{\kappa} \right)^2 - |\tilde{\Delta}|^2 (\tilde{k}^2 - \tilde{\kappa}^2) \tilde{q}^2 - i 4\tilde{k}\tilde{\kappa} \left[\tilde{k}^2 - \tilde{\kappa}^2 + \tilde{q}^2 - 1 + \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{2} \right] = 0 \quad (35)$$

とあらわす。左辺の虚部はゼロであることから、

$$\tilde{k}^2 - \tilde{\kappa}^2 = 1 - \tilde{q}^2 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{2} \equiv f_1(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) \quad (36)$$

を得る。これを (35) の左辺の実部 (これもゼロである) に代入し、 $\tilde{k}^2 - \tilde{\kappa}^2$ を消去し、

$$\tilde{\epsilon}^2 - f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) + (2\tilde{k}\tilde{\kappa})^2 = 0 \quad f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) = |\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2 (1 - \tilde{q}^2 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{4}) \quad (37)$$

を得る。(36) と (37) を \tilde{k} と $\tilde{\kappa}$ について解き

$$\tilde{k} = \pm \sqrt{\frac{f_1(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) + f_3(\tilde{\Delta}, \tilde{q}, \tilde{\epsilon})}{2}} \equiv \pm \tilde{k}(\tilde{\epsilon}), \quad f_3(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) = \sqrt{f_1(\tilde{\Delta}, \tilde{q})^2 + f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) - \tilde{\epsilon}^2} = \sqrt{(1 - \tilde{q}^2)^2 - \tilde{\epsilon}^2} \quad (38)$$

$$\tilde{\kappa} = \sqrt{\frac{f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) - \tilde{\epsilon}^2}{2(f_1(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) + f_3(\tilde{\Delta}, \tilde{q}, \tilde{\epsilon}))}} \equiv \tilde{\kappa}(\tilde{\epsilon}) \quad (39)$$

$$(40)$$

固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\tilde{\Delta}| \tilde{q} e^{i\theta} (\pm \tilde{k}(\tilde{\epsilon}) + i \tilde{\kappa}(\tilde{\epsilon})) \\ \pm \sqrt{f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q}) - \tilde{\epsilon}^2} + \frac{i|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{2} - \tilde{\epsilon} \end{pmatrix} \quad (41)$$

(上符号が $k > 0$ 下符号が $k < 0$). ここで $\epsilon = 0$ とおくと

$$|\tilde{k}| = \sqrt{1 - \tilde{q}^2 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{4}} \quad \tilde{\kappa} = \frac{|\tilde{\Delta}| |\tilde{q}|}{2}, \quad \sqrt{f_2(\tilde{\Delta}, \tilde{q})} = |\tilde{\Delta}| |\tilde{q}| \sqrt{1 - \tilde{q}^2 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{4}} \quad (42)$$

より

$$\begin{pmatrix} \bar{u}_k \\ \bar{v}_k \end{pmatrix} = |\tilde{\Delta}| |\tilde{q}| \left(\pm \sqrt{1 - \tilde{q}^2 - \frac{|\tilde{\Delta}|^2 \tilde{q}^2}{4}} + i \frac{|\tilde{\Delta}| |\tilde{q}|}{2} \right) \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix} \quad (43)$$

となる。よって

$$\begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} = (c_1 e^{ik(q)x} + c_2 e^{-ik(q)x}) e^{-(|\Delta|/2\mu)|q|x+iqy} \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix}, \quad k(q) = \sqrt{k_F^2 - q^2 - \frac{|\Delta|^2 q^2}{4\mu^2}} \quad (44)$$

は $c_2 = -c_1$ とすれば固定端の境界条件 $u(x=0) = v(x=0) = 0$ を満たすゼロエネルギー状態である。

$|q| < \left(1 + \frac{|\Delta|^2}{4\mu^2}\right)^{-\frac{1}{2}} k_F$ のとき x 方向に減衰振動するゼロエネルギー解

$$\begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} = \sin[k(q)x] e^{-(|\Delta|/2\mu)|q|x+iqy} \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix}, \quad k(q) = \sqrt{k_F^2 - q^2 - \frac{|\Delta|^2 q^2}{4\mu^2}} \quad (45)$$

が存在する。

$|q| = \left(1 + \frac{|\Delta|^2}{4\mu^2}\right)^{-\frac{1}{2}} k_F$ のとき x 方向に臨界減衰するゼロエネルギー解

$$\begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} = x e^{-(|\Delta|/2\mu)|q|x+iqy} \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix} \quad (46)$$

が存在する。

$\left(1 + \frac{|\Delta|^2}{4\mu^2}\right)^{-\frac{1}{2}} k_F < |q| < k_F$ のとき x 方向に過減衰するゼロエネルギー解

$$\begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} = \sinh[\text{Im}(k(q))x] e^{-(|\Delta|/2\mu)|q|x+iqy} \begin{pmatrix} \text{sgn}(q) e^{i\theta} \\ i \end{pmatrix} \quad (47)$$

が存在する。