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

加藤雄介

2018 年 12 月 17 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。

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

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。

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \frac{e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\Omega}} \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\begin{pmatrix} \xi_k & -\mathrm{i}\frac{\Delta}{k_{\mathrm{F}}}(k_x - \mathrm{i}k_y) \\ \mathrm{i}\frac{\Delta^*}{k_{\mathrm{F}}}(k_x + \mathrm{i}k_y) & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{3}$$

記号

$$\Delta = |\Delta_k| e^{\mathrm{i}\theta}, \quad |\Delta_k| = \frac{|\Delta| k}{k_{\mathrm{F}}}, \quad e^{\mathrm{i}\alpha} = \frac{k_x + \mathrm{i}k_y}{k}, \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \tag{4}$$

これらを用いて (3) を書き直し、

$$\begin{pmatrix} \xi_k & -\mathrm{i}|\Delta_k| e^{-\mathrm{i}\alpha} \\ \mathrm{i}|\Delta_k| e^{\mathrm{i}\alpha} & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{5}$$

を得る。

$$\begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} \\ v_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\mathrm{i}\left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\pi}{4}\right)} \bar{u}_{\boldsymbol{k}} \\ e^{\mathrm{i}\left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\pi}{4}\right)} \bar{v}_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{6}$$

とゲージ変換すると

$$\begin{pmatrix} \xi_k & |\Delta_k| \\ |\Delta_k| & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_{\boldsymbol{k}} \\ \bar{v}_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \bar{u}_{\boldsymbol{k}} \\ \bar{v}_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \tag{7}$$

この固有値方程式の解のうち、正の固有値を持つものは、

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

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

$$F_{\boldsymbol{k}} = \frac{\mathrm{i}|\Delta_k|^2}{2\epsilon_k^2}\frac{k_x + \mathrm{i}k_y}{k} \tag{9}$$

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 ($|\Delta_k|$) 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、

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

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

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

この固有値問題の特性方程式は

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

で与えられる。左辺の虚部はゼロであることから、

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

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

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

を得る。これを解いて

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

これを (13) に代入して

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

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

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

となる。これらの表式は第二式の右辺が正になる

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

のときに正しい。(17) より

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

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

固有値方程式は

$$\begin{pmatrix} -\frac{|\Delta|^2}{2\mu} + \mathrm{isgn}(k)\left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2}\right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon & -\mathrm{i}\frac{k+\mathrm{i}\kappa}{k_{\mathrm{F}}}\Delta \\ \mathrm{i}\frac{k+\mathrm{i}\kappa}{k_{\mathrm{F}}}\Delta^* & \frac{|\Delta|^2}{2\mu} - \mathrm{isgn}(k)\left(|\Delta|^2 - \epsilon^2 - \frac{|\Delta|^4}{4\mu^2}\right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \tag{21}$$

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

$$\begin{pmatrix} \mathrm{isgn}(k)\left(|\Delta|^2 - \epsilon^2\right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon & -\mathrm{isgn}(k)\Delta \\ \mathrm{isgn}(k)\Delta^* & -\mathrm{isgn}(k)\left(|\Delta|^2 - \epsilon^2\right)^{\frac{1}{2}} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = 0 \tag{22}$$

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．$\epsilon/|\Delta| = \cos\phi$、$\Delta = |\Delta|e^{\mathrm{i}\theta}$ とすると

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

(上符号が $k > 0$　下符号が $k < 0$). この固有関数は

$$\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} \quad k > 0, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ e^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} \quad k < 0, \tag{24}$$

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

$$c_1 e^{\mathrm{i}|k|x - \kappa x}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} + c_2 e^{-\mathrm{i}|k|x - \kappa x}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} \tag{25}$$

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。