

ノート： C_4 対称な超伝導体における回位欠陥ゼロ状態について

塩崎 謙

February 16, 2022

Abstract

Teo-Hughesで議論された回位 (disclination) 欠陥におけるゼロ状態 [1]について、 $p_x + ip_y$ 波超伝導体の模型について数値計算によってゼロ状態の存在を確認した。

4回対称性の存在する系を考える。

$$\hat{C}_4 f_i^\dagger(x, y) \hat{C}_4^{-1} = f_j^\dagger(-y, x) u_{ji}. \quad (1)$$

この対称性変換を用いて、模型に回位欠陥を導入することができる。回位欠陥は C_4 対称性のみを用いて導入できるが、並進対称性が存在する場合は、ゼロ状態を特徴づける \mathbb{Z}_2 不変量の波数空間不変量を用いた表示がTeo-Hughesによって与えられている [1]。本ノートではゼロ状態の数値計算結果について記録するに留め、Teo-Hughesの公式を検証は行わない。

1 模型

$p_x + ip_y$ 超伝導を例として回位欠陥の導入を説明する。整数サイト上に複素フェルミオン $f_{\mathbf{x}}^\dagger$ を置く。 $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^2$ である。無限に広がった平面上の模型は

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{x}} (t f_{\mathbf{x}+\hat{x}}^\dagger f_{\mathbf{x}} + t f_{\mathbf{x}+\hat{y}}^\dagger f_{\mathbf{x}} + \text{h.c.}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \{ \Delta(\mathbf{x}) (i f_{\mathbf{x}+\hat{x}}^\dagger f_{\mathbf{x}}^\dagger - f_{\mathbf{x}+\hat{y}}^\dagger f_{\mathbf{x}}^\dagger) + \text{h.c.} \}. \quad (2)$$

ここで、 $\Delta(\mathbf{x})$ はサイト依存する \mathbb{C} 数である。 $\Delta(\mathbf{x})$ が一定の場合は次の変換で定義される C_4 対称性を持つ。

$$\hat{C}_4 f_{\mathbf{x}}^\dagger \hat{C}_4^{-1} = \pm e^{\frac{\pi i}{4}} f_{c_4 \mathbf{x}}^\dagger, \quad \hat{C}_4^4 = (-1)^F. \quad (3)$$

ここで $c_4 \mathbf{x} = (-y, x)$ である。 \pm の任意性はフェルミオンパリティ対称性から来る。 $\hat{C}_4^4 = (-1)^F$ であるから、 $(-1)^F$ 対称性は \mathbb{Z}_8 の \hat{C}_4 対称性の一部とみなすことができることに注意。以下では $\Delta(\mathbf{x})$ が一定の場合を考え、 $\Delta(\mathbf{x}) \equiv \Delta$ と書く。

回位欠陥を導入する。まず第一象限の自由度を消す。具体的には、 $x \geq 0$ かつ $y > 0$ の自由度を消す。次に、半直線 $x > 0, y = 0$ 上の自由度の y 方向の飛び移り項を、 C_4 回転対称性を用いて構成する。具体的には、

$$\sum_{x>0, y=0} \{ t (\hat{C}_4 f_{\mathbf{x}+\hat{y}}^\dagger \hat{C}_4^{-1}) f_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \Delta (-1) (\hat{C}_4 f_{\mathbf{x}+\hat{y}}^\dagger \hat{C}_4^{-1}) f_{\mathbf{x}}^\dagger \} + \text{h.c.} \quad (4)$$

$$= \sum_{x>0, y=0} \{ t (\pm e^{\frac{\pi i}{4}}) f_{c_4 \mathbf{x}-\hat{x}}^\dagger f_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \Delta (-1) (\pm e^{\frac{\pi i}{4}}) f_{c_4 \mathbf{x}-\hat{x}}^\dagger f_{\mathbf{x}}^\dagger \} + \text{h.c.} \quad (5)$$

と定義する。図1を見よ。

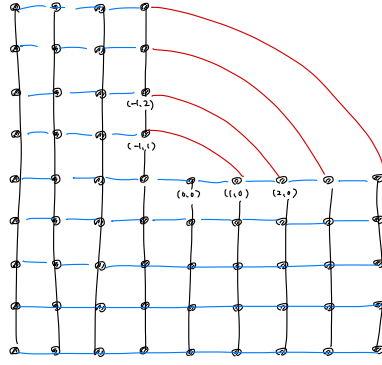


Figure 1: サイト中心の C_4 回転によって構成された回位欠陥.

数値計算における実装は以下のようにすれば良い. L を自然数とし, サイトを $x, y = -L, \dots, L$ とする. 波数空間の模型は

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = (t \cos k_x + t \cos k_y - \mu)\tau_z + \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\sin k_x + i \sin k_y) \\ \Delta^*(\sin k_x - i \sin k_y) & 0 \end{pmatrix}_\tau. \quad (6)$$

サイト中心の C_4 対称性は

$$u(\mathbf{k})H(\mathbf{k})u(\mathbf{k})^{-1} = H(c_4\mathbf{k}), \quad u(\mathbf{k}) = U, \quad U = \pm e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}, \quad (7)$$

である. 実空間模型を得るには, $n_x, n_y \in \mathbb{Z}$ 方向の飛び移り項 $h(n_x, n_y)$ を

$$h(n_x, n_y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_x dk_y e^{in_x k_x + in_y k_y} \mathcal{H}(\mathbf{k}) \quad (8)$$

として得られる. C_4 回転のサイトへの作用を

$$C_4 : (x, y) \mapsto (-y, x) \quad (9)$$

とする. x, y 方向ともに開放端条件を考える. 回位欠陥の存在しない模型は

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta_{\mathbf{x}+\hat{x}, \mathbf{x}'} t(1, 0) + \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'+\hat{x}} t(-1, 0) + \delta_{\mathbf{x}+\hat{y}, \mathbf{x}'} t(0, 1) + \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'+\hat{y}} t(0, -1) + \delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'} t(0, 0). \quad (10)$$

とする. 上記模型 \mathcal{H} から回位欠陥を含む模型を得るには, まず, 存在しない自由度を含む飛び移り項を消す. 具体的には

$$\mathcal{H}(\mathbf{x} + \hat{x}, \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \hat{x}) = 0, \quad x = -1, \dots, L-1, y = 1, \dots, L, \quad (11)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x} + \hat{y}, \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \hat{y}) = 0, \quad x = 0, \dots, L, y = 0, \dots, L-1, \quad (12)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = E_{\text{big}}, \quad x = 0, \dots, L, y = 1, \dots, L, \quad (13)$$

と再設定する. ここで, 低エネルギーの固有値に現れないように $E_{\text{big}} \gg 1$ を適当に決める. C_4 回転対称性で繋ぐ部分は

$$\mathcal{H}((-1, x), (x, 0)) = Ut(0, 1), \quad \mathcal{H}((x, 0), (-1, x)) = t(0, -1)U^{-1}, \quad x = 1, \dots, L, \quad (14)$$

とする. 図2に固有状態の密度プロットの例を示す.

この設定の下で, パラメータ $t, \mu, U = \pm e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}$ の符号を変化させた場合に, ゼロ状態の有無について数値計算すると, 以下の結果を得た.

- Chern数の絶対値が ± 1 であるパラメータ領域, つまり $|\mu| < 2|t|, \mu \neq 0$ で, かつ $U = -e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}$ の場合に限り回位欠陥に局在するゼロ状態が出現する.

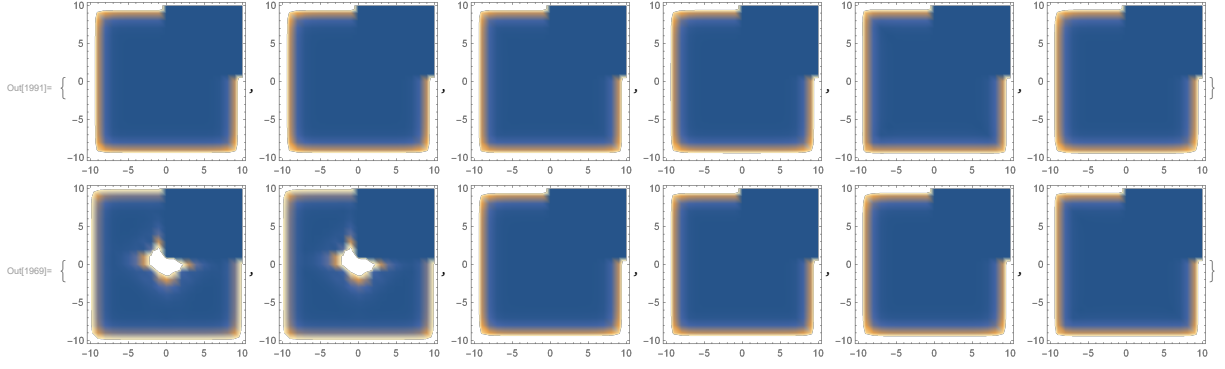


Figure 2: $L = 10, t = 1, \mu = 1.2, \Delta = 1$ におけるエネルギー固有状態の密度プロット. 固有値の絶対値の小さい方から6つを示した. 上図は $U = e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}$. 下図は $U = -e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}$. 非ゼロのChern数に由来する端状態が確認できる. 有限サイズ効果により回位欠陥ゼロ状態は端ゼロ状態と重ね合わせ状態を組む.

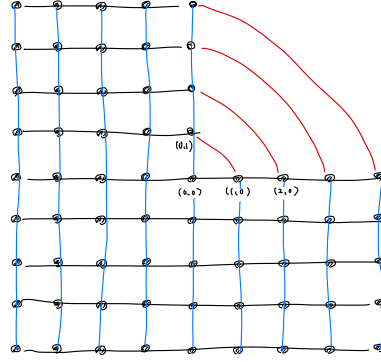


Figure 3: $(1/2, 1/2)$ 中心の回位欠陥.

1.1 C_4 回転の中心を $(1/2, 1/2)$ に取った場合

模型は並進対称性が存在するので, $(1/2, 1/2)$ 中心の C_4 回転対称性も存在する.

$$c_4 : (x, y) \mapsto (-y + 1, x). \quad (15)$$

対応する回位欠陥を図3に示す.

回位欠陥ゼロ状態の有無が $(0, 0)$ 中心の C_4 回転の場合と比べて変化する. 波数空間における対称性は

$$u(\mathbf{k})\mathcal{H}(\mathbf{k})u(\mathbf{k})^{-1} = \mathcal{H}(c_4\mathbf{k}), \quad u(\mathbf{k}) = Ue^{ik_y}, \quad U = \pm e^{\frac{\pi i}{4}\tau_z}, \quad (16)$$

である. 因子 e^{ik_y} に注意. 因子 e^{ik_y} は波数空間における高対称点の不変量に影響する.

回位欠陥の模型は以下のように構成する. まず, 存在しない自由度を含む飛び移り項を消す. 具体的には

$$\mathcal{H}(\mathbf{x} + \hat{x}, \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \hat{x}) = 0, \quad x = 0, \dots, L-1, y = 1, \dots, L, \quad (17)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x} + \hat{y}, \mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \hat{y}) = 0, \quad x = 1, \dots, L, y = 0, \dots, L-1, \quad (18)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = E_{\text{big}}, \quad x = 1, \dots, L, y = 1, \dots, L, \quad (19)$$

と再設定する. C_4 回転対称性で繋ぐ部分は

$$\mathcal{H}((0, x), (x, 0)) = Ut(0, 1), \quad \mathcal{H}((x, 0), (0, x)) = t(0, -1)U^{-1}, \quad x = 1, \dots, L, \quad (20)$$

とする。図2に固有状態の密度プロットの例を示す。

この設定の下で、パラメータ $t, \mu, U = \pm e^{\frac{\pi i}{4} \tau_z}$ の符号を変化させた場合に、ゼロ状態の有無について数値計算すると、以下の結果を得た。

- Chern数の絶対値が ± 1 であるパラメータ領域、つまり $|\mu| < 2|t|, \mu \neq 0$ において、(i) t と μ が同符号でかつ $U = -e^{\frac{\pi i}{4} \tau_z}$ の場合、及び、(ii) t と μ が異符号でかつ $U = e^{\frac{\pi i}{4} \tau_z}$ の場合に、回位欠陥に局在するゼロ状態が出現する。

2 コメント

回位欠陥を導入することは、円錐上の模型を考えることと等価であり、特に、ねじれ境界条件によって導入される線欠陥を複素フェルミオンの $U(1)$ 位相回転によって“ならず”ことができる場合は、模型のパラメータが断熱的に実空間変化する円錐上の模型と等価。この場合の円錐上の $p_x + ip_y$ 超伝導体のゼロ状態については、[2]で議論されている。ゼロ状態はバルクギャップが保たれている限り安定であるので、任意の中心角の円錐に対して、ギャップ関数の位相の巻き付きに類似の指数定理、あるいは半古典的なトポロジカル不変量が存在するはずである。

References

- [1] Jeffrey C. Y. Teo and Taylor L. Hughes, “Existence of Majorana-Fermion Bound States on Disclinations and the Classification of Topological Crystalline Superconductors in Two Dimensions”, Phys. Rev. Lett. **111**, 047006 (2013).
- [2] A. Quelle, C. Morais Smith, T. Kvorning, and T. H. Hansson, “Edge Majoranas on locally flat surfaces: The cone and the Möbius band” Phys. Rev. B **94**, 125137 – Published 21 September 2016