超伝導体におけるトポロジカル不変量のフェルミ面公式

塩崎　謙

October 24, 2022

BdGハミルトニアンは

$$H_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} h_{\boldsymbol{k}} & \Delta_{\boldsymbol{k}} \\ \Delta_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} & -h_{-\boldsymbol{k}}^{T} \end{pmatrix}, \quad \Delta_{\boldsymbol{k}}^{T} = -\Delta_{-\boldsymbol{k}}. \tag{1}$$

これは以下のPHSを課すことと同値である．

$$CH_{\boldsymbol{k}}C^{-1} = -H_{-\boldsymbol{k}}, \quad C = \tau_x K. \tag{2}$$

1　1D，クラスDIII

さらにTRSを課す．一般化して，ある対称線上で有効的にTRSが存在する場合など，TRSの行列がk依存する場合を考えよう．

$$T_k H_k T_k^{-1} = H_{-k}, \quad T_k = \begin{pmatrix} u_{T,k} & \\ & u_{T,-k}^{*} \end{pmatrix} K, \quad u_{T,-k}u_{T,k}^{*} = -1. \tag{3}$$

以下と同値.

$$u_{T,k}h_k^{*}u_{T,k}^{\dagger} = h_{-k}, \quad u_{T,k}\Delta_k^{*}u_{T,-k}^{T} = \Delta_{-k} = -\Delta_k^{T}. \tag{4}$$

カイラル対称性は，

$$\Gamma_k = iT_{-k}C = \begin{pmatrix} & iu_{T,-k} \\ iu_{T,k}^{*} & \end{pmatrix}, \quad \Gamma_k^2 = 1, \tag{5}$$

$$\Gamma_k H_k = -H_k \Gamma_k. \tag{6}$$

$\Gamma_k = \pm$なる基底を導入する．

$$\mathcal{U}_{\pm,k} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \pm iu_{T,k}^{*} \end{pmatrix}. \tag{7}$$

基底$\mathcal{U}_{\pm,k}$は一般にk依存する． $(\mathcal{U}_{+,k}, \mathcal{U}_{-,k})$なる基底におけるハミルトニアン$H_k$の非対角の$(2,1)$成分を$q_k$とする．具体的には，

$$q_k = \mathcal{U}_{-,k}^{\dagger} H_k \mathcal{U}_{+,k} = h_k + i\Delta_k u_{T,k}^{*}. \tag{8}$$

$h_k^{\dagger} = h_k$に加えて

$$(\Delta_k u_{T,k}^{*})^{\dagger} = u_{T,k}^{T}\Delta_k^{\dagger} = u_{T,-k}\Delta_{-k}^{*} = \Delta_k u_{T,k}^{*} \tag{9}$$

であるから，$\Delta_k u_{T,k}^{*}$もエルミート行列であり，q_kの表式は実部と虚部の分解であることに注意．さらに，

$$q_k^{T} = (q_k^{\dagger})^{*} = (h_k - i\Delta_k u_{T,k}^{*})^{*} = h_k^{*} + i\Delta_k^{*}u_{T,k} \tag{10}$$

$$= u_{T,k}^{\dagger}h_{-k}u_{T,k} + i(u_{T,k}^{\dagger}\Delta_{-k}u_{T,-k}^{*})u_{T,k} = u_{T,k}^{\dagger}(h_{-k} + i\Delta_{-k}u_{T,-k}^{*})u_{T,k} = u_{T,k}^{\dagger}q_{-k}u_{T,k} \tag{11}$$

より,

$$(q_k u_{T,k})^T = -q_{-k} u_{T,k}. \tag{12}$$

したがって対称点$-k \equiv k$においてはパフィアンが定義できる.

$$\mathrm{Pf}\,[q_k u_{T,k}], \quad k = 0, \pi. \tag{13}$$

以下の量を導入する.

$$z[H_k] = \frac{\mathrm{Pf}\,[q_0 u_{T,0}]}{\mathrm{Pf}\,[q_\pi u_{T,\pi}]} \exp \frac{1}{2} \int_0^\pi d \log \det q_k \in \{\pm 1\}. \tag{14}$$

$z[H_k]$は行列$u_{T,k}$で決まる何らかの$\mathbb{Z}_2$値に量子化する：

$$z[H_k]^2 = \frac{\det[q_0 u_{T,0}]}{\det[q_\pi u_{T,\pi}]} \exp \int_0^\pi d \log \det q_k \in \{\pm 1\} = \frac{\det[u_{T,0}]}{\det[u_{T,\pi}]} \in U(1). \tag{15}$$

行列$u_{T,k}$はハミルトニアンに依存せず，ハミルトニアンが定義されている原子絶縁体のみによって決まる． ± 1に量子化し，かつ自明なハミルトニアンに対して1を与えるトポロジカル不変量を定義するには，自明なハミルトニアンにおける$z[H_k^{\mathrm{triv}}]$との比を取れば良い． $\mathbb{Z}_2$不変量を以下のように定義する．

$$(-1)^{\nu[H_k]} := \frac{z[H_k]}{z[H_k^{\mathrm{triv}}]} \in \pm 1. \tag{16}$$

注意として，$z[H_k], z[H_k^{\mathrm{triv}}]$の表式において，**共通の基底$\mathcal{U}_{\pm,k}$を取る．** 自明なハミルトニアン$H_k^{\mathrm{triv}}$とは，フェルミオンが一つも詰まっていない真空を考えることができる．具体的には，ケミカルポテンシャルが$\mu \to -\infty$の極限を考えて，自明なハミルトニアンは

$$h_k \equiv 1, \quad \Delta_k \equiv 0, \tag{17}$$

と取れば良い．すると，

$$q_k \equiv 1 \tag{18}$$

であるので,

$$z[H_k^{\mathrm{triv}}] = \frac{\mathrm{Pf}\,[u_{T,0}]}{\mathrm{Pf}\,[u_{T,\pi}]}. \tag{19}$$

よって，$\mathbb{Z}_2$不変量は以下で与えられる．

$$(-1)^{\nu[H_k]} = \frac{\mathrm{Pf}\,[q_0 u_{T,0}]/\mathrm{Pf}\,[u_{T,0}]}{\mathrm{Pf}\,[q_\pi u_{T,\pi}]/\mathrm{Pf}\,[u_{T,\pi}]} \exp \frac{1}{2} \int_0^\pi d \log \det q_k \in \{\pm 1\}. \tag{20}$$

1.1 フェルミ面公式

超伝導体のトポロジカル数はフェルミ面近傍でのみ決定される． $z[H_k]$を，

(i) $k = 0, \pi$にフェルミ面は存在しない．

(ii) Δ_kはフェルミ面の近傍でのみ微小な有限値を持つ．

(iii) フェルミ面に縮退はない．

という仮定もとで計算する．時間反転対称性だけ考えている場合は，(i),(ii)の範囲内でフェルミ面の縮退を連続的に消すことができる．他の対称性（例えば空間反転対称性）が存在する場合は(iii)の仮定が成り立たない場合があるが，縮退が避けられない場合は別途考える．

上記仮定より，$\det q_k$の位相はフェルミ面（$\det h_k = 0$）近傍でのみ変化する．フェルミ面をnでラベルし，フェルミ面上の状態を$|nk\rangle$と書く． $\varepsilon_{nk} = \langle nk|h_k|nk\rangle$とする．フェルミ面$n$近傍で$q_k$を近似すると，

$$h_k + i\Delta_k u^*_{T,k} \sim \left(\partial_k \varepsilon_{nk_{nF}}(k - k_{nF}) + i\delta_{nk_{nF}}\right) |nk\rangle \langle nk| + \sum_{m\neq n} \varepsilon_{mk} |mk\rangle \langle mk| . \tag{21}$$

ここで，

$$\delta_{nk_{nF}} = \langle nk|\Delta_k u^*_{T,k}|nk\rangle \,|_{k=k_{nF}} \in \mathbb{R}\backslash\{0\} \tag{22}$$

とおいた．また，$\sum_{m\neq n}$はフェルミ面以外のバンドからの寄与．フェルミ面n近傍から積分$\int d\log\det q_k$への寄与は，

$$\int_{k_{nF}-\delta k}^{k_{nF}+\delta k} \int d\log\det q_k = |\log|q_k||\big|_{k_{nF}-\delta k}^{k_{nF}+\delta k} - \pi i \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk_{nF}})\mathrm{sgn}(\delta_{nk_{nF}}) \tag{23}$$

となる．全てのフェルミ面の寄与を足し上げると，

$$\int_0^\pi d\log\det q_k = \log|\det q_\pi| - \log|\det q_0| - \pi i \sum_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk})\mathrm{sgn}(\delta_{nk}) \tag{24}$$

となる．よって，

$$\exp\frac{1}{2}\int_0^\pi d\log\det q_k = \frac{\sqrt{|\det q_\pi|}}{\sqrt{|\det q_0|}} \exp -\frac{\pi i}{2} \sum_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk})\mathrm{sgn}(\delta_{nk}). \tag{25}$$

符号$\sigma \in \pm 1$に対して，

$$e^{\frac{\pi i}{2}\sigma} = i \times \sigma \tag{26}$$

であるので，

$$\begin{aligned} \exp -\frac{\pi i}{2} \sum_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk})\mathrm{sgn}(\delta_{nk}) &= \prod_{\varepsilon_{nk}=0} -i\mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk})\mathrm{sgn}(\delta_{nk}) &(27)\\ &= \prod_{\varepsilon_{nk}=0} -i\mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk}) \prod_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\delta_{nk}) &(28)\\ &= (-i)^{\sum_{\varepsilon_{nk}=0}\mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk})} \prod_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\delta_{nk}) &(29) \end{aligned}$$

と書くことができる． $k = 0, \pi$においてフェルミ面が存在しないという仮定のもとで，$k = 0, \pi$における占有バンドの数N_0, N_πは不変．第一因子は$k = 0, \pi$における占有バンドの数N_0, N_πで決まる．

$$\sum_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk}) = N_0 - N_\pi. \tag{30}$$

TRSよりN_0, N_πは非負偶数であることに注意する．この段階で$\mathbb{Z}_2$不変量は

$$(-1)^{\nu[H_k]} = \frac{\mathrm{Pf}\,[q_0 u_{T,0}]/\mathrm{Pf}\,[u_{T,0}]}{\mathrm{Pf}\,[q_\pi u_{T,\pi}]/\mathrm{Pf}\,[u_{T,\pi}]} \times \frac{\sqrt{|\det q_\pi|}}{\sqrt{|\det q_0|}} \times (-1)^{\frac{N_0 - N_\pi}{2}} \times \prod_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\delta_{nk}) \tag{31}$$

となる．

パフィアンの符号$\mathrm{Pf}\,[q_0 u_{T,0}], \mathrm{sgn}\,\mathrm{Pf}\,[q_\pi u_{T,\pi}]$を計算する． $k = 0, \pi$として，kを略す．仮定(i),(ii)より，$k = 0, \pi$においては$\Delta_k \sim 0$と置き換えて良い．

$$\mathrm{Pf}\,[q u_T] = \mathrm{Pf}\,[h u_T]. \tag{32}$$

hを対角化する基底を導入する． Kramers対を$|\chi_\mathrm{I}\rangle, |\chi_\mathrm{II}\rangle$として，

$$u_T |\chi_\mathrm{I}\rangle^* = |\chi_\mathrm{II}\rangle, \quad u_T |\chi_\mathrm{II}\rangle^* = -|\chi_\mathrm{I}\rangle \tag{33}$$

なる基底$U = (|\chi_\mathrm{I}\rangle, |\chi_\mathrm{II}\rangle, \dots)$を取ると， $N \in 2\mathbb{Z}$を占有状態の数として，

$$hU = U\Lambda \otimes 1_2, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \epsilon_n \end{pmatrix}, \tag{34}$$

$$u_T U^* = U 1_n \otimes (-i\sigma_y) \tag{35}$$

とおける．ここで$2n \in 2\mathbb{Z}$は全バンド数であり，$\epsilon_j \neq 0$はクラマース縮退のエネルギー固有値．すると，

$$\begin{aligned} \mathrm{Pf}\,[hu_T] &= \mathrm{Pf}\,\left[U(\Lambda \otimes 1_2)U^\dagger u_T\right] &(36)\\ &= \mathrm{Pf}\,\left[U(\Lambda \otimes 1_2)(-u_T U^*)^T\right] &(37)\\ &= \mathrm{Pf}\,\left[U(\Lambda \otimes 1_2)(-U 1_n \otimes (-i\sigma_y))^T\right] &(38)\\ &= \mathrm{Pf}\,\left[U(\Lambda \otimes 1_2)(1_n \otimes (-i\sigma_y))U^T\right] &(39)\\ &= \mathrm{Pf}\,\left[U(\Lambda \otimes (-i\sigma_y))U^T\right] &(40)\\ &= \det U \mathrm{Pf}\,[\Lambda \otimes (-i\sigma_y)] &(41)\\ &= \det U \prod_{j=1}^{n} (-\epsilon_j). &(42) \end{aligned}$$

さらに，

$$\mathrm{Pf}\, u_T = \mathrm{Pf}\,[U 1_n \otimes (-i\sigma_y) U^T] = \det U (-1)^n, \tag{43}$$

$$\sqrt{|\det q|} = \sqrt{|\det h|} = \prod_{j=1}^{n} |\epsilon_j|, \tag{44}$$

に注意すると結局，

$$\frac{\mathrm{Pf}\,[qu_T]}{\mathrm{Pf}\,[u_T]\sqrt{|\det q|}} = \prod_{j=1}^{n} \mathrm{sgn}\,\epsilon_j = (-1)^{N/2} \tag{45}$$

を得る． Nは占有状態の数．

　以上より，$\mathbb{Z}_2$不変量のフェルミ面公式 [1]

$$(-1)^{\nu[H_k]} = \prod_{\varepsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}(\delta_{nk}) \tag{46}$$

を得る．

　最終的な表式はバンドが縮退している場合に拡張できる．縮退バンド内のラベルを$a = 1, \dots, I_n$とすると，

$$(-1)^\nu = \prod_{\epsilon_{nk}=0} \mathrm{sgn}\ \det(\langle nak|\Delta_k u^*_{T,k}|nbk\rangle)_{a,b=1,\dots,I_n} \tag{47}$$

となる．

1.2 例

内部自由度として，スピン1/2と軌道自由度を仮定し，

$$u_T = -i\sigma_y, \quad \Delta_k = (\psi_k + \boldsymbol{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma})(i\sigma_y) \tag{48}$$

とする． $\Delta_k u_T^* = \psi_k + \boldsymbol{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}$であり，$\Delta_k u_T^*$はエルミートであるので，$\psi_k, \boldsymbol{d}_k$はエルミート行列である．$\psi_k + \boldsymbol{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}$のフェルミ面上の状態$|nak\rangle$における固有値の符号の積が$\mathbb{Z}_2$不変量に寄与する．

さらに簡単な状況として，軌道自由度が存在せず，バンドがスピン空間で縮退する場合は，あるフェルミ面から$\mathbb{Z}_2$不変量への寄与は，

$$\mathrm{sgn}\ \det(\psi_k + \boldsymbol{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathrm{sgn}\,(\psi_k^2 - \boldsymbol{d}_k^2) \tag{49}$$

となる．

1.3 DIII＋偶の鏡映対称性

TRSに加えて，以下の波数を変化させないユニタリーな対称性がさらに存在する場合を考える．

$$m_k h_k m_k^\dagger = h_k, \quad m_k \Delta_k m_{-k}^T = \Delta_k, \quad m_k^2 = -1, \tag{50}$$

$$u_{T,k} m_k^* = m_{-k} u_{T,k}. \tag{51}$$

BdGハミルトニアンに対する対称性は

$$M_k = \begin{pmatrix} m_k & \\ & m_{-k}^* \end{pmatrix}. \tag{52}$$

関係式

$$M_k^2 = -1, \quad T_k M_k = M_{-k} T_k, \quad C M_k = M_{-k} C \tag{53}$$

より，有効的なAZクラスはAIII_Tであり，$M_k = \pm i$における巻き付き数$W_{\pm i}$が定義でき，W_i, W_{-i}の間には，カイラリティの定義に依存して，$W_i = \pm W_{-i}$の関係がつく． $M_k = i$セクターの巻き付き数を定義する．

前節と同様に，行列q_kを導入する．

$$q_k = h_k + i\Delta_k u_{T,k}^*. \tag{54}$$

すると，

$$m_k q_k m_k^\dagger = m_k h_k m_k^\dagger + i m_k \Delta_k m_{-k}^T m_{-k}^* u_{T,k}^* m_k^\dagger = h_k + i\Delta_k u_{T,k}^* = q_k \tag{55}$$

であるので， q_kは$m_k = \pm i$のセクターに分かれる． $m_k = \pm i$なる周期的な基底$\mathcal{B}_{\pm,k}, \mathcal{B}_{\pm,2\pi} = \mathcal{B}_{\pm,0}$を導入して，

$$q_{\pm,k} = h_{\pm,k} + i\tilde{\Delta}_{\pm,k}, \tag{56}$$

$$h_{\pm,k} = \mathcal{B}_{\pm,k}^\dagger h_k \mathcal{B}_{\pm,k}, \quad \tilde{\Delta}_{\pm,k} = \mathcal{B}_{\pm,k}^\dagger \Delta_k u_{T,k}^* \mathcal{B}_{\pm,k}, \tag{57}$$

とおき，巻き付き数を以下で定義する．

$$W_{\pm i} = \frac{1}{2\pi i} \oint d \log \det q_{\pm,k}. \tag{58}$$

フェルミ面公式は，

$$W_{\pm i} = -\frac{1}{2} \sum_{\varepsilon_{nk}^\pm = 0} \mathrm{sgn}(\partial_k \varepsilon_{nk}^\pm) \mathrm{sgn}(\delta_{nk}^\pm). \tag{59}$$

ただし，

$$\varepsilon^{\pm}_{nk} = \langle nk|h_{\pm,k}|nk\rangle\,, \quad \delta^{\pm}_{nk} = \langle nk|\tilde{\Delta}_{\pm,k}|nk\rangle\,. \tag{60}$$

$W_{\pm i}$の表式であるが，今の場合は$k \mapsto -k$なる対称性も存在するので，独立な領域$k \in [0,\pi]$においてトポロジカル不変量を定義したい． $u_{T,k}m^*_k = m_{-k}u_{T,k}$に注意すると，

$$\mathcal{B}_{-,k} = u_{T,-k}\mathcal{B}^*_{+,-k} \tag{61}$$

と置くことができる．すると，

$$\begin{aligned} q_{-,k} &= \mathcal{B}^\dagger_{-,k}(h_k + i\Delta_k u^*_{T,k})\mathcal{B}_{-,k} && (62)\\ &= \mathcal{B}^T_{+,-k}u^\dagger_{T,-k}(h_k + i\Delta_k u^*_{T,k})u_{T,-k}\mathcal{B}^*_{+,-k} && (63)\\ &= \mathcal{B}^T_{+,-k}(h^*_{-k} - i\Delta^*_{-k}u^T_{T,k})\mathcal{B}^*_{+,-k} && (64)\\ &= q^*_{+,-k}. && (65)\end{aligned}$$

これから，$W_i = W_{-i}$が確かめられる．独立な積分領域$k \in [0,\pi]$で不変量を定義するには， TRIMにおける関係式

$$q_{-,0} = q^*_{+,0}, \quad q_{-,\pi} = q^*_{+,\pi} \tag{66}$$

に注意すると，以下がwell-definedな巻き付き数であることがわかる．

$$W_m = \frac{1}{2\pi i}\left(\int_0^\pi d\log\det q_{+,k} + \int_\pi^0 d\log\det q^*_{-,k}\right) \in \mathbb{Z}. \tag{67}$$

変形して，

$$W_m = \frac{1}{2\pi i}\int_0^\pi (d\log\det q_{+,k} + d\log\det q_{-,k}) \in \mathbb{Z}. \tag{68}$$

$\mathcal{B}_{\pm,k}$のゲージに依存しない表式を得るには，

$$W_m[H_k] := \int_0^\pi d\log\det q_k \in \mathbb{R} \tag{69}$$

として，自明なハミルトニアンからの寄与を引けば良い．

$$W_m[H_k] - W_m[H^{\mathrm{triv}}_k] \in \mathbb{Z}. \tag{70}$$

フェルミ面公式は，

$$W_m[H_k] - W_m[H^{\mathrm{triv}}_k] = -\frac{1}{2}\sum_{\varepsilon_{nk}=0,k\in(0,\pi)} \mathrm{sgn}(\partial_k\varepsilon_{nk})\mathrm{sgn}(\delta_{nk}). \tag{71}$$

References

[1] Xiao-Liang Qi, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, *Topological invariants for the Fermi surface of a time-reversal-invariant superconductor*, Phys. Rev. B **81**, 134508 – Published 5 April 2010.