

波動関数のトポロジーと超伝導

東京大学 工学部物理工学科 村上 修一¹、永長 直人²

量子ホール効果や異常ホール効果においては、波動関数の位相に由来する、 $\mathbf{k}$ 空間におけるトポロジー [1] が重要な役目を果たしている。最近我々は、超伝導においてもそうした $\mathbf{k}$ 空間でのトポロジーが顔を出している、つまり波動関数のトポロジー構造と超伝導ギャップ関数のそれとは関係があることを示した [2]。3次元の場合には、 n 番目のバンドについて波動関数のトポロジー構造を特徴づける関数を $\mathbf{A}_{(n)}(\mathbf{k}) = -i\langle \mathbf{k}n | \nabla_{\mathbf{k}} | \mathbf{k}n \rangle$ 、 $\mathbf{B}_{(n)}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}_{(n)}(\mathbf{k})$ 、 $\rho_{(n)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}_{(n)}(\mathbf{k})$ と定義し、ギャップ関数のトポロジー構造を特徴づける関数を $\mathbf{A}^{\Delta}(\mathbf{k}) = -\nabla_{\mathbf{k}} \text{Im} \ln \Delta(\mathbf{k}) = -\nabla_{\mathbf{k}} \arg \Delta(\mathbf{k})$ 、 $\mathbf{B}^{\Delta} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}^{\Delta}(\mathbf{k})$ 、 $\rho^{\Delta}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \nabla_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{B}^{\Delta}(\mathbf{k})$ と定義すると、 $\Delta_{\alpha\beta}$ (α, β はスピン) に対して

$$\rho_{\alpha\beta}^{\Delta}(\mathbf{k}) = \rho_{\alpha}(\mathbf{k}) - \rho_{\beta}(-\mathbf{k}) \quad (1)$$

が成り立つということである。これについての一般的な性質については [2, 3] で議論したので、ここでは主にこの定理がどうして成り立つのか、特に、 $\mathbf{k}$ 空間にモノポールがある状況はどのようなものであり、それがどうして超伝導ギャップ関数に継承されるのかを分かりやすく解説したい。

波動関数のモノポールについては、注目している n 番目のバンドが他のバンドとエネルギー的に接する点 (diabolical point という) でのみ nonzero になりえて、しかもモノポールの強さは整数に量子化している [1]。つまり、 $\rho_{(n)}(\mathbf{k}) = \sum_l q_{ln} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{ln})$ (q_{ln} : 整数) と表される。なぜ整数に量子化されるかということ、diabolical point の周りで波動関数が単一連続関数と表せず、"patching" が必要になるからで、これは 2 次元系での量子ホール効果の場合に似ている [4]。diabolical point の性質を議論するために、例えば $H = \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ (σ_i はパウリ行列) という系を考える。エネルギーは $E = \pm k$, $k = |\mathbf{k}|$ であり、上のバンド $E = k$ に注目すると、波動関数は k_z が正か負かに応じて

$$\mathbf{v}_+ = \frac{1}{\sqrt{2k(k+k_z)}} \begin{pmatrix} k+k_z \\ k_x + ik_y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_- = \frac{1}{\sqrt{2k(k-k_z)}} \begin{pmatrix} k_x - ik_y \\ k - k_z \end{pmatrix} = \mathbf{v}_+ e^{-i\varphi(\mathbf{k})} \quad (2)$$

と表される (φ は球座標での方位角)。波動関数にはゲージ (つまり位相) の自由度があるので波動関数の書き方は上記以外にも無数にある。ただ原点 $k = 0$ を囲む球面上では波動関数を単一連続関数として書くことは出来ず、例えば球面を二つに分けてそれぞれの領域で別個に波動関数を書き、領域間の境界では両方の波動関数は位相の分だけ異なる、という形にしか表せない。これが上で言及した patching である。この patch 同士の境界を上では $k_z = 0$ に取っているが、この取り方も任意性がある。 $\mathbf{A}(\mathbf{k})$ はゲージに依存し、 k_z の正負に応じて $\mathbf{A}^{\pm}(\mathbf{k}) = -iv_{\pm}^{\dagger} \nabla_{\mathbf{k}} v_{\pm}$ となる

¹ E-mail: murakami@appi.t.u-tokyo.ac.jp

² E-mail: nagaosa@appi.t.u-tokyo.ac.jp

が、他方 $\mathbf{B}(\mathbf{k})$ と $\rho(\mathbf{k})$ はゲージによらない。まず $\mathbf{k} \neq 0$ では $\rho(\mathbf{k}) = 0$ であり、

$$\int_{\mathbf{k} \leq \epsilon} d^3\mathbf{k} \rho(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathbf{k}=\epsilon, k_z=0} d\mathbf{k} \cdot (\mathbf{A}^+(\mathbf{k}) - \mathbf{A}^-(\mathbf{k})) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\mathbf{k}=\epsilon, k_z=0} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \varphi = 1$$

より、 $\rho(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k})$ 。即ち強さ 1 のモノポールが原点にあり、patching 構造から nonzero のモノポール密度が出てくることになる。つまり逆に言えば波動関数のモノポールの周りでは、波動関数には必然的に patch の構造があり、第 2 量子化すると消滅演算子 $c_{(n)\mathbf{k}}$ にもこうした patch 構造が必要になる。こうしたバンドが超伝導になると、BCS ペアリング $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\alpha} c_{-\mathbf{k},\beta}$ のゲージ不変性の要請から、ギャップ関数 $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ にも patch の構造が継承される。これが (1) の内容である。

例えば singlet pairing の場合は $\rho_{\uparrow\downarrow}^{\Delta}(\mathbf{k}) = \rho_{\uparrow}(\mathbf{k}) - \rho_{\downarrow}(-\mathbf{k})$ である。時間反転対称性が保たれている時は $\rho_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \rho_{\downarrow}(-\mathbf{k})$ より $\rho_{\uparrow\downarrow}^{\Delta}(\mathbf{k}) = 0$ となり、波動関数にはモノポールは存在しうが、ギャップ関数においては $(\mathbf{k}, \uparrow)$ と $(-\mathbf{k}, \downarrow)$ のモノポールが打ち消しあって結果としてモノポールが出ないことになる。それに対して磁性がある場合や外部磁場がある場合は、ギャップ関数にモノポールが出うる。バンド構造によってはあるフェルミ面が囲むモノポールの強さの総和が nonzero になることもあり、その場合はフェルミ面上でのギャップ関数に patch 構造が必要になる。例としてフェルミ面の囲むモノポールの強さの総和が 1 の場合の例を図 1 に掲げた。ここでは、 C を定数、 φ を球座標での方位角として、北半球で $\Delta^N(\mathbf{k}) = C(1 - \cos \theta)e^{-i\varphi}$ 、南半球で $\Delta^S(\mathbf{k}) = C(1 - \cos \theta)$ としている。赤道上では $\Delta^N = \Delta^S e^{-i\varphi}$ となり、両者はゲージのみ異なる。

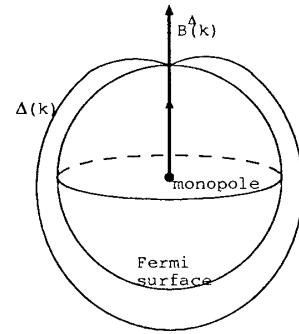


図 1: フェルミ面がモノポールを囲んでいるような例。●はモノポール。

上述のような、フェルミ面が囲むモノポールの強さは、normal state での波動関数のトポロジーにのみ依っていて、引力相互作用の詳細にはよらない。バンド計算により波動関数がすべての $\mathbf{k}$ 点で決められれば、フェルミ面の位置とモノポールの位置が分かり、各フェルミ面が囲むモノポールの強さの総数も決定できる。それが nonzero であれば、ギャップ関数とそのフェルミ面上で単一連続関数で表されないことになり興味深い。singlet の場合、 $\rho_{\uparrow}(\mathbf{k})$ と $\rho_{\downarrow}(-\mathbf{k})$ とのずれは、磁性モーメントの大きさ及びスピン軌道相互作用に比例するため、重い元素を用いた超伝導体のほうが、こうした物理が実現している可能性が高いと推定される。

参考文献

- [1] M. V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984); G. E. Volovik, JETP Lett. **46**, 98 (1987).
- [2] S. Murakami and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **90** 057002 (2003).
- [3] 村上 修一、永長 直人、物性研究 **79**(6) (2003) 掲載予定。
- [4] M. Kohmoto, Ann. Phys. (NY) **160**, 343 (1985).