超伝導体におけるマヨラナ粒子

永井佑紀

平成 28 年 8 月 5 日

超伝導体中にゼロエネルギー準粒子があった場合、それはマヨラナ粒子であることを示す。

1 固体中のマヨラナ粒子

1.1 マヨラナ粒子の定義

マヨラナ粒子とは、ある粒子の反粒子が自分自身となっている粒子のことを言う。これは、粒子を生成することと反粒子を生成することが等価であることを意味する。第二量子化の観点から言えば、粒子の生成演算子が反粒子の生成演算子と等価であれば良い。一方、反粒子の生成演算子とは粒子の消滅演算子に他ならないので、粒子の生成演算子を $\gamma^{\dagger}$ とすると、

$$\gamma^{\dagger} = \gamma \tag{1}$$

が満たされるような粒子はマヨラナ粒子である（マヨラナ条件を満たす）と言える。

1.2 固体中のマヨラナ粒子

さて、次に、固体中を考える。固体中の電子の反粒子は正孔である。したがって、電子の反粒子である正孔が電子となる場合、電子はマヨラナ粒子であると言える。しかしながら、電子は負の電荷を持ち、その反粒子である正孔は正の電荷を持つために、マヨラナ粒子にはなれない。一方、固体中では、様々な秩序相が存在するため、電子より準粒子を考えた方が都合が良い。金属相などでは、ある電子の生成演算子を $c_i^{\dagger}$ とすると、準粒子の生成演算子は

$$\gamma_i^{\dagger} = \sum_j U_{ij} c_j^{\dagger} \tag{2}$$

となり、消滅演算子は

$$\gamma_i = \sum_j U_{ij}^{*} c_j \tag{3}$$

である。電子の生成演算子と消滅演算子は等価ではないため、このように表現される準粒子はマヨラナ粒子にはなりえない。

それでは、どのような準粒子ならマヨラナ条件を満たすだろうか。もし、準粒子の生成演算子が

$$\gamma_i^{\dagger} = \sum_j \left[U_{ij} c_j^{\dagger} + V_{ij} c_j \right] \tag{4}$$

と書けていれば、その消滅演算子は

$$\gamma_i = \sum_j \left[U_{ij}^{*} c_j + V_{ij}^{*} c_j^{\dagger} \right] \tag{5}$$

と書くことができ、$U_{ij} = V_{ij}^*$ を満たすことができれば、

$$\gamma_i^\dagger = \gamma_i \tag{6}$$

となるので、マヨラナ条件を満たす。つまり、電子と正孔を同時に生成するような準粒子が存在すれば、その固体中にマヨラナ粒子が存在することになる。そんな都合の良い準粒子を持つ系が存在するか？実は超伝導状態における準粒子である Bogoliubov 準粒子であれば、マヨラナ条件を満たしうるのである。

2 超伝導状態における準粒子

2.1 BCS ハミルトニアンと対角化

超伝導状態を Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS) 理論で考えるとする。簡単のため、実空間を離散的に取る為に N 自由度を持つ強束縛模型を採用する。スピンや軌道などの自由度はすべてこの自由度の中に押し込められているとする。この時、超伝導状態のハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ji}^* c_i c_j \tag{7}$$

と書く。ここで、ハミルトニアンはエルミートでなければならないので、

$$\left(\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j\right)^\dagger = \sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}*} c_j^\dagger c_i \tag{8}$$

$$= \sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j \tag{9}$$

より $H_{ji}^{\mathrm{N}*} = H_{ij}^{\mathrm{N}}$ である。また、

$$\frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger = -\frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_j^\dagger c_i^\dagger \tag{10}$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ji} c_i^\dagger c_j^\dagger \tag{11}$$

より $\Delta_{ij} = -\Delta_{ji}$ を満たさなければならない。このハミルトニアンの固有状態を求める為に、以下のように式変形を行う：

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ji}^* c_i c_j \tag{12}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} \left[\delta_{ij} - c_j c_i^\dagger\right] + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ji}^* c_i c_j \tag{13}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ij}^{\mathrm{N}} c_i^\dagger c_j - \frac{1}{2}\sum_{ij} H_{ji}^{\mathrm{N}} c_i c_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \frac{1}{2}\sum_{ij} \Delta_{ji}^* c_i c_j + \sum_i H_{ii}^{\mathrm{N}} \tag{14}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} c_1^\dagger & \cdots & c_N^\dagger & c_1 & \cdots & c_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{H}^{\mathrm{N}} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^{\mathrm{N}*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_N \\ c_1^\dagger \\ \vdots \\ c_N^\dagger \end{pmatrix} + \sum_i H_{ii}^{\mathrm{N}} \tag{15}$$

$$= \frac{1}{2}\boldsymbol{c}^\dagger \check{H} \boldsymbol{c} + \sum_i H_{ii}^{\mathrm{N}} \tag{16}$$

以降、第二項は定数項であるために無視する。第一項は行列の形で書けているので、$\check{H}$ を対角化するユニたりー行列 $\check{U}$ を見つけることで

$$\check{U}^\dagger \check{H} \check{U} = \check{E} \tag{17}$$

となり、対角行列 $\check{E}$ を見つけることができる。この $\check{U}$ を用いれば、ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \frac{1}{2}\boldsymbol{c}^\dagger \check{U}\check{U}^\dagger \check{H} \check{U}\check{U}^\dagger \boldsymbol{c} && (18)\\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}^\dagger \check{E} \boldsymbol{\alpha} && (19)\\
&= \frac{1}{2}\sum_i^{2N} E_i \alpha_i^\dagger \alpha_i && (20)
\end{aligned}$$

となり、これは自由粒子のハミルトニアンと見なすことができる。

2.2 電子正孔対称性

次に、上述したハミルトニアンに電子正孔対称性が存在することを示す。まず、$\vec{c} \equiv (c_1, \cdots, c_N)^T$ として、ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \vec{c}^\dagger & \vec{c}^T \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{H}^{\mathrm{N}} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^{\mathrm{N}*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vec{c} \\ (\vec{c}^\dagger)^T \end{pmatrix} \tag{21}$$

と書く。このハミルトニアンを対角化するには、

$$\begin{pmatrix} \hat{H}^{\mathrm{N}} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^\dagger & -\hat{H}^{\mathrm{N}*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vec{u}_i \\ \vec{v}_i \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} \vec{u}_i \\ \vec{v}_i \end{pmatrix} \tag{22}$$

という固有値問題を解く必要がある。この方程式を Bogoliubov-de Gennes(BdG) 方程式と呼ぶ。この固有値方程式は

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{\mathrm{N}}\vec{u}_i + \hat{\Delta}\vec{v}_i &= E_i \vec{u}_i && (23)\\
\hat{\Delta}^\dagger \vec{u}_i - \hat{H}^{\mathrm{N}*}\vec{v}_i &= E_i \vec{v}_i && (24)
\end{aligned}$$

と書き直すことができる。さて、この固有値問題を解くことで、固有値 E_i と固有状態 $(\vec{u}_i^T, \vec{v}_i^T)^T$ が求められたとしよう。この時、上式の複素共役をとって

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{\mathrm{N}*}\vec{u}_i^* + \hat{\Delta}^*\vec{v}_i^* &= E_i \vec{u}_i^* && (25)\\
\hat{\Delta}^T \vec{u}_i^* - \hat{H}^{\mathrm{N}}\vec{v}_i^* &= E_i \vec{v}_i^* && (26)
\end{aligned}$$

となり、$\Delta_{ij} = -\Delta_{ji}$ より、

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{\mathrm{N}*}\vec{u}_i^* - \hat{\Delta}^\dagger\vec{v}_i^* &= E_i \vec{u}_i^* && (27)\\
-\hat{\Delta} \vec{u}_i^* - \hat{H}^{\mathrm{N}}\vec{v}_i^* &= E_i \vec{v}_i^* && (28)
\end{aligned}$$

となるので、上の式と下の式を入れ替えて符号を整理すると、

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{\mathrm{N}}\vec{v}_i^* + \hat{\Delta}\vec{u}_i^* &= -E_i \vec{v}_i^* && (29)\\
\hat{\Delta}^\dagger \vec{v}_i^* - \hat{H}^{\mathrm{N}*}\vec{u}_i^* &= -E_i \vec{u}_i^* && (30)
\end{aligned}$$

となり、

$$\left(\begin{array}{cc} \hat{H}^{\mathrm{N}} & \hat{\Delta} \\ \hat{\Delta}^{\dagger} & -\hat{H}^{\mathrm{N}*} \end{array}\right)\left(\begin{array}{c} \vec{v}_i^* \\ \vec{u}_i^* \end{array}\right) = -E_i \left(\begin{array}{c} \vec{v}_i^* \\ \vec{u}_i^* \end{array}\right) \tag{31}$$

が得られる。これは、固有値 E_i と固有状態 $(\vec{u}_i^T, \vec{v}_i^T)^T$ が求められた時、状態 $(\vec{v}_i^{*T}, \vec{u}_i^{*T})^T$ は固有値 $-E_i$ の固有状態であることを意味する。つまり、BdG ハミルトニアンは正の固有値と負の固有値を持ち、

$$\check{U}^{\dagger}\check{H}\check{U} = \left(\begin{array}{cc} \hat{E} & 0 \\ 0 & -\hat{E} \end{array}\right) \tag{32}$$

と対角化できるということである。また、この時のユニタリー行列 $\check{U}$ も、

$$\check{U} = \left(\begin{array}{cc} \hat{u} & \hat{v}^* \\ \hat{v} & \hat{u}^* \end{array}\right) \tag{33}$$

という構造を持つ。ここで、$\hat{u} \equiv (\vec{u}_1, \cdots, \vec{u}_N)$,$\hat{v} \equiv (\vec{v}_1, \cdots, \vec{v}_N)$ である。

2.3 反交換関係と基底状態

ここまできて、式 (20) の中身が明らかになる。

$$\check{U}^{\dagger}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{\alpha} = \left(\begin{array}{c} \vec{\alpha}^1 \\ \vec{\alpha}^2 \end{array}\right) \tag{34}$$

とすれば、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_i^N E_i \alpha_i^{1\dagger}\alpha_i^1 - \frac{1}{2}\sum_i^N E_i \alpha_i^{2\dagger}\alpha_i^2 \tag{35}$$

と書ける。ここで $E_i > 0$ である。そして、α を電子の生成消滅演算子で書くと、

$$\vec{\alpha}^1 = \hat{u}^{\dagger}\vec{c} + \hat{v}^{\dagger}(\vec{c}^{\dagger})^T \tag{36}$$

$$\vec{\alpha}^2 = \hat{v}^T\vec{c} + \hat{u}^T(\vec{c}^{\dagger})^T \tag{37}$$

となり、成分表示すれば、

$$\alpha_i^1 = \sum_j \left[\hat{u}_{ji}^* c_j + \hat{v}_{ji}^* c_j^{\dagger}\right] \tag{38}$$

$$\alpha_i^2 = \sum_j \left[\hat{v}_{ji} c_j + \hat{u}_{ji} c_j^{\dagger}\right] \tag{39}$$

となる。$\alpha_i^{1\dagger}$ は

$$\alpha_i^{1\dagger} = \sum_j \left[\hat{u}_{ji} c_j^{\dagger} + \hat{v}_{ji} c_j\right] \tag{40}$$

となり、二つの消滅演算子は、

$$\alpha_i^2 = \alpha_i^{1\dagger} \tag{41}$$

という関係で結ばれていることがわかる。

また、この演算子 α_i^1 の反交換関係は

$$\left[\alpha_i^1, \alpha_j^{1\dagger}\right]_+ = \left(\sum_k \left[\hat{u}_{ki}^* c_k + \hat{v}_{ki}^* c_k^\dagger\right]\right)\left(\sum_{k'} \left[\hat{u}_{k'j} c_{k'}^\dagger + \hat{v}_{k'j} c_{k'}\right]\right) + \left(\sum_{k'} \left[\hat{u}_{k'j} c_{k'}^\dagger + \hat{v}_{k'j} c_{k'}\right]\right)\left(\sum_k \left[\hat{u}_{ki}^* c_k + \hat{v}_{ki}^* c_k^\dagger\right]\right) \tag{42}$$

$$= \sum_{kk'} \left[\hat{u}_{ki}^* \hat{u}_{k'j} [c_k, c_{k'}^\dagger]_+ + \hat{u}_{ki}^* \hat{v}_{k'j} [c_k, c_{k'}]_+ + \hat{v}_{ki}^* \hat{u}_{k'j} [c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger]_+ + \hat{v}_{ki}^* \hat{v}_{k'j} [c_k^\dagger, c_{k'}]_+\right] \tag{43}$$

$$= \sum_k \left[\hat{u}_{ki}^* \hat{u}_{kj} + \hat{v}_{ki}^* \hat{v}_{kj}\right] \tag{44}$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{u}_i^\dagger & \vec{v}_i^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_j \\ \vec{v}_j \end{pmatrix} \tag{45}$$

$$= \delta_{ij} \tag{46}$$

となるので、演算子 α^1 はフェルミオンの反交換関係を満たす。ここで、電子の生成消滅演算子の反交換関係

$$[c_k, c_{k'}^\dagger]_+ = \delta_{kk'} \tag{47}$$

$$[c_k, c_{k'}]_+ = 0 \tag{48}$$

$$[c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger]_+ = 0 \tag{49}$$

を用いた。また、$(\vec{u}_i^T, \vec{v}^T)^T$ は固有ベクトルでありそれぞれが直交することを用いた。

以上から、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i, E_i > 0}^{N} E_i \alpha_i^{1\dagger} \alpha_i^1 - \frac{1}{2} \sum_{i, E_i > 0}^{N} E_i \alpha_i^1 \alpha_i^{1\dagger} \tag{50}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i}^{N} E_i \alpha_i^{1\dagger} \alpha_i^1 + \frac{1}{2} \sum_{i}^{N} E_i \alpha_i^{1\dagger} \alpha_i^1 - \frac{1}{2} \sum_i E_i \tag{51}$$

$$= \sum_{i, E_i > 0}^{N} E_i \alpha_i^{1\dagger} \alpha_i^1 - \frac{1}{2} \sum_i E_i \tag{52}$$

となる。$E_i > 0$ より、α が一つもいない α に関する真空状態 $|0\rangle$ が一番エネルギーが低く、そのエネルギーは $-\frac{1}{2}\sum_i E_i$ である。そして、演算子 $\alpha^\dagger$ で生成される準粒子のことを、Bogoliubov 準粒子と呼ぶ。

2.4 超伝導状態におけるマヨラナ準粒子

式 (40) より、超伝導体中の準粒子である Bogoliubov 準粒子は、電子の生成演算子を消滅演算子の線形結合で表されることがわかった。したがって、マヨラナ条件を満たす可能性がある。式 (40) より、演算子 α_i がマヨラナ条件を満たすためには、

$$\hat{u}_{ji} = \hat{v}_{ji}^* \tag{53}$$

でなければならない。

さて、ここで、BdG 方程式がゼロ固有値を持つとしよう。このとき、系は

$$\hat{H}^{\mathrm{N}} \vec{u}_i + \hat{\Delta} \vec{v}_i = 0 \tag{54}$$

$$\hat{\Delta}^\dagger \vec{u}_i - \hat{H}^{\mathrm{N}*} \vec{v}_i = 0 \tag{55}$$

の二つの式を同時に満たさなければならない。ここで、下の式の複素共役を取れば、

$$\hat{H}^{\mathrm{N}} \vec{u}_i + \hat{\Delta} \vec{v}_i = 0 \tag{56}$$

$$-\hat{\Delta} \vec{u}_i^* - \hat{H}^{\mathrm{N}} \vec{v}_i^* = 0 \tag{57}$$

となる。したがって、二つの方程式を満たすためには、

$$\vec{u}_i = \vec{v}_i^* \tag{58}$$

である必要がある。つまり、ゼロ固有値を持つ固有状態は成分レベルで

$$[\vec{u}_i]_j = [\vec{v}_i]_j^* \tag{59}$$

を満たす必要があり、これは、マヨラナ条件に他ならない！　つまり、超伝導状態におけるゼロエネルギー Bogoliubov 準粒子はマヨラナ準粒子である。

2.5　マヨラナ粒子は何個あるか

BdG 方程式の中に何個マヨラナ粒子が含まれているかを考える。電子正孔対称性より、エネルギー E_i の固有値を持つ固有状態として

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \begin{pmatrix} \vec{u}_1 \\ \vec{v}_1 \end{pmatrix} \tag{60}$$

が存在した時、エネルギー $-E_i$ の固有値を持つ

$$\boldsymbol{\psi}_1' = \begin{pmatrix} \vec{v}_1^* \\ \vec{u}_1^* \end{pmatrix} \tag{61}$$

が存在することを意味する。上述したように、ゼロエネルギー固有値を持つ状態では、$\vec{u}_i = \vec{v}_i^*$ である。この時、

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \boldsymbol{\psi}_1' \tag{62}$$

となってしまう。この式が意味するのは、ゼロエネルギー状態は一つしかない、ということである。一方、有限系においては、電子正孔対称性より、N 個の正の固有値と N 個の負の固有値がなければならない。ゼロ固有値以外の固有値はすべて正と負でペアになっているため、ゼロエネルギー状態が一つ、という状態は有限系では取ることができない。つまり、有限系でゼロエネルギー固有値を出すためには、**マヨラナ粒子が二つなければならない**。より一般的には、有限系の BCS ハミルトニアンでゼロエネルギー固有値が出るとすれば、その固有値は $2m$ 重に縮退していなければならない。

さて、二重縮退している場合を考えよう。ゼロ固有値を持つ二つの状態ベクトルを

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \begin{pmatrix} \vec{u}_1 \\ \vec{u}_1^* \end{pmatrix} \tag{63}$$

$$\boldsymbol{\psi}_2 = \begin{pmatrix} \vec{u}_2 \\ \vec{u}_2^* \end{pmatrix} \tag{64}$$

とする。この形で書くと、一般性を失わずに、ゼロ固有値を持つ固有状態が満たすべき条件 $\vec{u}_i = \vec{v}_i^*$ を満たしている。固有値が縮退している時は、二つの状態ベクトルの任意の線形結合をとって良いので、

$$\boldsymbol{\phi}_1 = a\boldsymbol{\psi}_1 + b\boldsymbol{\psi}_2 \tag{65}$$

などとして良い。このベクトルの他に、このベクトルに直交する $\boldsymbol{\phi}_2$ が存在する。このようにどのような線形結合を取っても、ゼロ固有値であるから $\vec{u}_i = \vec{v}_i^*$ が満たされている。ゆえに、この二つのベクトルも二つのマヨラナ粒子を表している。もし、4 重縮退している場合には、同じように 4 本の異なるベクトルを用いて線形結合によってゼロエネルギー固有状態が作られるが、やはりゼロ固有値であるために $\vec{u}_i = \vec{v}_i^*$ が満たされている。以上から、**BCS ハミルトニアンのゼロエネルギー固有値の数だけマヨラナ粒子が存在する**と言える。