专题：探索凝聚态中的马约拉纳粒子

基于 Yu-Shiba-Rusinov 态的拓扑超导理论*

李伟[1)2)†]

1) (西湖大学理学院, 杭州 310024)

2) (浙江西湖高等研究院理学研究所, 杭州 310024)

(2020 年 6 月 2 日收到; 2020 年 6 月 5 日收到修改稿)

Yu-Shiba-Rusinov 态是由磁性杂质原子在超导体中诱导出的超导能隙内的束缚态. 它们可以作为构造拓扑超导态的基本单元. 本文阐述了基于 Yu-Shiba-Rusinov 态的不同维度拓扑超导的统一理论框架, 并通过简单的特例加以解释. 这里的理论是理解多个相关实验的基础.

关键词： 拓扑相, 拓扑超导体, 马约拉纳费米子, 磁性杂质, Yu-Shiba-Rusinov 态

PACS： 74.20.–z, 74.25.–q, 74.25.Jb, 03.65.Vf **DOI:** 10.7498/aps.69.20200831

近年来人们对拓扑物质态, 尤其是拓扑超导体[1–10]的兴趣主要有两个方面: 一是它为一个传统的科学领域——固体物理学带来的研究范式的革新, 二是它在另一个方兴未艾的领域——量子计算中的潜在应用[1,11,12]. 基于 Yu-Shiba-Rusinov (YSR) 态[13–15]的拓扑超导体系[16–34]是体现这两点的一个好例子. YSR 态指的是由磁性杂质原子在 (常规) 超导体中诱导的超导能隙内的束缚态. 这种束缚态的存在被于渌[13], Shiba[14] 和 Rusinov[15]于 1960 年代各自独立发现, 并被 Yazdani 等[35]于 1997 年首次通过扫描隧道显微镜实验观察到. 另一方面, 作为最接近可行的拓扑量子计算方案的基础[36], 拓扑超导态的形成往往有着对于超导、自旋轨道耦合以及磁性这三者关联的微妙要求[37–39]. 在多种构建拓扑超导的路径之中[3,23,37,38,40–48], YSR 态自然成为了一种有效的元件. 这里重要的是: 在实验上, 需要将磁性“杂质”原子进行有序的组装甚至操控[23,29,30,33,34,48]; 在理论上, 需要对 YSR 态组成的超导能隙内的“能带”和边界态进行刻画和拓扑分类[22,24,28,31,49]. 这两方面在现阶段都已经取得了重要的进展, 并直接导致了在相关体系中对马约拉纳零能模的成功观测和甄别[23,29,30,33,34,48]. 本文受限于作者的专长, 将集中讨论基于 YSR 态的拓扑超导理论框架. 作为一篇总结性的文章, 将着重于理论的自完备性和通用性, 并辅以简单的特例作解释. 我们推荐读者从引文中获取更多细节, 尤其是关于这里所展示的理论如何应用于实际体系[24,31,49].

作为出发点, 考虑一个由常规超导体 (SC) 和磁性原子 (M) 晶格组成的复合平均场模型,

$$\hat{H}_{\rm YSR} = \hat{H}_{\rm SC} + \hat{H}_{\rm M} + \hat{H}_{\rm T}, \tag{1}$$

$$\hat{H}_{\rm SC} = \int {\rm d}\boldsymbol{k}\Bigg[\sum_{\substack{\alpha\alpha'\\ ss'}} \xi_{\alpha s,\alpha' s'}(\boldsymbol{k}) c^\dagger_{\alpha s}(\boldsymbol{k}) c_{\alpha' s'}(\boldsymbol{k}) + \sum_{\alpha} \varDelta c^\dagger_{\alpha\uparrow}(\boldsymbol{k}) c^\dagger_{\alpha\downarrow}(-\boldsymbol{k}) + {\rm h.c.}\Bigg], \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm M} &= \sum_{\boldsymbol{r}_{\rm M},\boldsymbol{r}'_{\rm M}} \sum_{\substack{\beta\beta'\\ ss'}} h_{\beta s,\beta' s'}(\boldsymbol{r}_{\rm M} - \boldsymbol{r}'_{\rm M}) d^\dagger_{\beta s}(\boldsymbol{r}_{\rm M}) d_{\beta' s'}(\boldsymbol{r}'_{\rm M}) \\ &= \int_{BZ} {\rm d}\boldsymbol{k}_{\rm M} \sum_{\substack{\beta\beta'\\ ss'}} h_{\beta s,\beta' s'}(\boldsymbol{k}_{\rm M}) d^\dagger_{\beta s}(\boldsymbol{k}_{\rm M}) d_{\beta' s'}(\boldsymbol{k}_{\rm M}),\end{aligned} \tag{3}$$

---

* 国家自然科学基金 (批准号: 11774317) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lijian@westlake.edu.cn

$$\hat{H}_{\rm T}=\sum_{\boldsymbol{r}_{\rm M}}\sum_{\substack{\alpha\beta\\ ss'}}\int{\rm d}\boldsymbol{r}\, v_{\alpha s,\beta s'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{\rm M})c^{\dagger}_{\alpha s}(\boldsymbol{r})d_{\beta s'}(\boldsymbol{r}_{\rm M})+{\rm h.c.}, \tag{4}$$

这里α和β分别代表超导体 (c算符) 和磁性原子 (d算符) 中除自旋 (s) 外的自由度 (例如轨道), $\bar{\alpha}$是α的时间反演; $\xi_{\alpha s,\alpha' s'}$, $h_{\beta s,\beta' s'}$和$v_{\alpha s,\beta s'}$皆为矩阵元; $\varDelta$为超导配对序参量, 被设为实的常数 (不依赖于α); $\boldsymbol{r}_{\rm M}\in\varLambda_{\rm M}$是磁性原子的位置, 这些位置的集合$\varLambda_{\rm M}$可以是一个点 ($D_{\rm M}=0$), 一条链 ($D_{\rm M}=1$), 或一个二维晶格 ($D_{\rm M}=2$), 我们把垂直于这个集合构成的子空间的位置矢量记为$\boldsymbol{r}_{\perp}$, 而这个子空间本身属于$\boldsymbol{r}_{\perp}=0$; 当$D_{\rm M}>0$, $\boldsymbol{k}_{\rm M}$表示磁性原子晶格的波矢 (动量), BZ表示其布里渊区.

首先考虑超导体. 选取动量空间的 Nambu 基矢 $\left(\boldsymbol{c}^{\dagger}_{\uparrow}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{c}^{\dagger}_{\downarrow}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{c}_{\downarrow}(-\boldsymbol{k}),-\boldsymbol{c}_{\uparrow}(-\boldsymbol{k})\right)$, 其中黑体的$\boldsymbol{c}_{\rm s}$代表了特定自旋 s 不同轨道$\alpha$的 c算符组成的矢量. 以此为基, 超导体的 BdG 哈密顿量为

$$H_{\rm SC}(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k}) & \varDelta\\ \varDelta & -\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k})\end{pmatrix}, \tag{5}$$

这里黑体的$\boldsymbol{\xi}$代表了矩阵形式的$\xi_{\alpha{\rm s},\alpha'{\rm s}'}$. 在上面的形式中用到了正常态部分$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k})$的时间反演不变性: $\boldsymbol{T}\boldsymbol{\xi}(-\boldsymbol{k})\boldsymbol{T}^{-1}=\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k})$, 其中$\boldsymbol{T}$为时间反演算符 ($\boldsymbol{T}^2=-1$). 相应地, 超导体自身在能隙中的格林函数为

$$\begin{aligned}&{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(|E|<\varDelta,\boldsymbol{k})\equiv[E-H_{\rm SC}(\boldsymbol{k})]^{-1}=\\ &[E^2-\varDelta^2-\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k})^2]^{-1}\begin{pmatrix}E+\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k}) & \varDelta\\ \varDelta & E-\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k})\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{6}$$

这里因为能隙中没有极点, 暂且省略E附带的无穷小虚部, 只在需要时把它加回去.

然后对隧穿哈密顿量做一定的简化. 假设磁性原子和超导体间的隧穿是完全局域的, 并且不依赖于位置或自旋: $v_{\alpha{\rm s},\beta{\rm s}'}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{\rm M})=v_{\alpha\beta}\delta_{{\rm ss}'}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_{\rm M})$. 由此隧穿哈密顿量变成

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\rm T}&=\sum_{\boldsymbol{r}_{\rm M}}\sum_{\alpha\beta{\rm s}}v_{\alpha\beta}c^{\dagger}_{\alpha{\rm s}}(\boldsymbol{r}_{\rm M})d_{\beta{\rm s}}(\boldsymbol{r}_{\rm M})+{\rm h.c.}\\ &=\int_{\rm BZ}{\rm d}\boldsymbol{k}_{\rm M}\sum_{\alpha\beta{\rm s}}v_{\alpha\beta}\left[\sum_{\boldsymbol{n}}c^{\dagger}_{\alpha{\rm s}}(\boldsymbol{k}_{\rm M}+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{K}_{\rm M},\boldsymbol{r}_{\perp}=0)\right]\\ &\quad\times d_{\beta{\rm s}}(\boldsymbol{k}_{\rm M})+{\rm h.c.},\end{aligned}$$

其中$\boldsymbol{K}_{\rm M}$为磁性原子的倒格子基矢 (当$D_{\rm M}>0$), $\boldsymbol{n}$为整数组成的矢量. 这里对$\boldsymbol{n}$的求和可以理解为将超导态的动量平移进磁性原子晶格的布里渊区.

由此得到磁性原子在能隙中 (由超导体带来) 的自能为

$$\varSigma_{\rm M}(|E|<\varDelta,\boldsymbol{k}_{\rm M})=V^{\dagger}\tilde{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(E,\boldsymbol{k}_{\rm M})V, \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(E,\boldsymbol{k}_{\rm M})&\equiv\sum_{\boldsymbol{n}}{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(E,\boldsymbol{k}_{\rm M}+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{K}_{\rm M},\boldsymbol{r}_{\perp}=0)\\ &=\sum_{\boldsymbol{n}}\int{\rm d}\boldsymbol{k}_{\perp}{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(E,\boldsymbol{k}_{\rm M}+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{K}_{\rm M},\boldsymbol{k}_{\perp}),\end{aligned} \tag{8}$$

其中$\boldsymbol{k}_{\perp}$为对应于$\boldsymbol{r}_{\perp}$的动量; $V=\begin{pmatrix}\boldsymbol{v} & \\ & -\boldsymbol{v}\end{pmatrix}$, 而黑体$\boldsymbol{v}$代表矩阵形式的$v_{\alpha\beta}$. 这里已经选择了$\left(\boldsymbol{d}^{\dagger}_{\uparrow}(\boldsymbol{k}_{\rm M}),\boldsymbol{d}^{\dagger}_{\downarrow}(\boldsymbol{k}_{\rm M}),\boldsymbol{d}_{\downarrow}(-\boldsymbol{k}_{\rm M}),-\boldsymbol{d}_{\uparrow}(-\boldsymbol{k}_{\rm M})\right)$作为磁性原子的 Nambu 基矢 (下同), 并用到了$\boldsymbol{v}$的时间反演不变性: $\boldsymbol{T}\boldsymbol{v}\boldsymbol{T}^{-1}=\boldsymbol{v}$.

进一步, 磁性原子的完全格林函数为

$$G_{\rm M}(E^+,\boldsymbol{k}_{\rm M})=\left[E^+-H_{\rm M}(\boldsymbol{k}_{\rm M})-\varSigma_{\rm M}(E^+,\boldsymbol{k}_{\rm M})\right]^{-1}, \tag{9}$$

其中$H_{\rm M}(\boldsymbol{k}_{\rm M})=\begin{pmatrix}\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k}_{\rm M}) & \\ & -\boldsymbol{T}\boldsymbol{h}(-\boldsymbol{k}_{\rm M})\boldsymbol{T}^{-1}\end{pmatrix}$, 而黑体$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k}_{\rm M})$代表矩阵形式的$h_{\beta s,\beta' s'}(\boldsymbol{k}_{\rm M})$. 这一格林函数将是研究能谱和拓扑性质的主要对象.

值得一提的是, 如果把磁性原子当成完全的经典自旋$\boldsymbol{S}$, 并假设它与超导体通过局域的交换相互作用$\sum_{\boldsymbol{r}_{\rm M}}J\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}(\boldsymbol{r}_{\rm M})$进行耦合, 则方程 (9) 中的格林函数应替换为

$${\rm G}^{(\rm M)}_{\rm SC}(E^+,\boldsymbol{k}_{\rm M})=\left[\tilde{\rm G}^{(0)}_{\rm SC}(E^+,\boldsymbol{k}_{\rm M})^{-1}-J\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\right]^{-1}. \tag{10}$$

${\rm G}_{\rm M}(E^+,\boldsymbol{k}_{\rm M})$ 在$|E|<\varDelta$ 范围内的极点可以给出 YSR 束缚态 ($D_{\rm M}=0$) 或 YSR 能带 ($D_{\rm M}>0$) 的能谱. 当能谱在零能存在能隙时, 定义如下“有效哈密顿量”:

$$\begin{aligned}H(\boldsymbol{k}_{\rm M})&\equiv-G_{\rm M}(E=0,\boldsymbol{k}_{\rm M})^{-1}\\ &=H_{\rm M}(\boldsymbol{k}_{\rm M})+\varSigma_{\rm M}(E=0,\boldsymbol{k}_{\rm M}).\end{aligned} \tag{11}$$

注意虽然$H(\boldsymbol{k}_{\rm M})$具有哈密顿量的形式 (其厄密性易证), 它并不能用来有效描述系统的动力学 (除非系统在超导能隙中间存在非常低能的 YSR 态),它的主要用途是帮助我们得到拓扑不变量[50]. 为此, 先证明$H(\boldsymbol{k}_{\rm M})$满足粒子-空穴对称性: $\boldsymbol{P}H(\boldsymbol{k}_{\rm M})\boldsymbol{P}^{-1}=-H(-\boldsymbol{k}_{\rm M})$, 其中$\boldsymbol{P}$为粒子-空穴变换算符. 在已经选定的 Nambu 基下, 粒子-空穴变换算符形式如下:

$$\boldsymbol{P} \equiv (\mathrm{i}\tau_2) \otimes \boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} & \boldsymbol{T} \\ -\boldsymbol{T} & \end{pmatrix}, \tag{12}$$

其中τ_2为对应于粒子-空穴自由度的泡利算符. 已知磁性原子自身的哈密顿量$H_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$, 超导体自身的哈密顿量$H_{\mathrm{SC}}(\boldsymbol{k})$, 以及两者的耦合项 V在构造时均已满足粒子-空穴对称性. 由此不难证明

$$\boldsymbol{P}\mathrm{G}_{\mathrm{SC}}^{(0)}(E=0,\boldsymbol{k})\boldsymbol{P}^{-1} = -\mathrm{G}_{\mathrm{SC}}^{(0)}(E=0,-\boldsymbol{k}), \tag{13}$$

$$\boldsymbol{P}\Sigma_{\mathrm{M}}(E=0,\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\boldsymbol{P}^{-1} = -\Sigma_{\mathrm{M}}(E=0,-\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}). \tag{14}$$

从而可见$H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$确实满足粒子-空穴对称性, 在一般情形下属于 Altland-Zirnbauer 对称类[51]中的 D 类 ($\boldsymbol{P}^2=1$).

依据对拓扑分类的已有知识[4–6,9], 可以基于$H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$来定义拓扑不变量. 依赖于维度$D_{\mathrm{M}}$, 拓扑不变量的定义如下.

1) $D_{\mathrm{M}}=0$. 这是传统的 YSR 束缚态情形[13–15]. H完全局域 (不存在动量$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}$), 且 $\boldsymbol{P}H\boldsymbol{P}^{-1}=-H$. 拓扑不变量$\nu_0\in\mathbb{Z}_2$即为系统基态的费米子奇偶性[1],

$$(-1)^{\nu_0} = \mathrm{sgn}\left[\mathrm{Pf}(A)\right], \tag{15}$$

$$A \equiv -\mathrm{i}U^{\dagger}HU, \tag{16}$$

其中 Pf 代表 Pfaffian, U为使得$U^{\dagger}\boldsymbol{P}U=\boldsymbol{K}$的幺正矩阵, 而$\boldsymbol{K}$代表复共轭. 这里易证 U总是存在, 且 A 为实的反对称矩阵.

2) $D_{\mathrm{M}}=1$. 这是一维磁性原子链的情形[18,23,24,29–31,33]. $G_{\mathrm{M}}(E^+,\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$的极点构成一维 YSR 能带. $H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$在$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}=0,\pi$(选取自然单位) 两处具有动量空间局域的对称性: $\boldsymbol{P}H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}=0,\pi)\boldsymbol{P}^{-1} = -H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}=0,\pi)$. 这类似于上面零维的情形. 拓扑不变量$\nu_1\in\mathbb{Z}_2$即为这两处费米子奇偶性的异同[1],

$$(-1)^{\nu_1} = \mathrm{sgn}\left[\mathrm{Pf}(A_0)\mathrm{Pf}(A_{\pi})\right], \tag{17}$$

$$A_{0,\pi} \equiv -\mathrm{i}U^{\dagger}H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}=0,\pi)U. \tag{18}$$

3) $D_{\mathrm{M}}=2$. 这是二维磁性原子晶格的情形[25,28,34]. $G_{\mathrm{M}}(E^+,\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$的极点构成二维 YSR 能带. 拓扑不变量$\nu_2\in\mathbb{Z}$即为对应此二维能带的陈数[25,28,52],

$$\nu_2 = \frac{1}{2\pi}\sum_{E_b<0}\int_{\mathrm{BZ}}\mathrm{d}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}}\cdot\nabla_{\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}}\times\langle u_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})|\mathrm{i}\nabla_{\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}}u_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\rangle, \tag{19}$$

其中$\mathrm{d}\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}}$为布里渊区的积分面积元; $E_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$和$u_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$为$H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$的本征值和本征矢 ($b$为不同本征矢的标记, 对应于“能带”标记). 注意$E_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$具有不依赖于$\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}$的确定符号 (已经假设零能处有能隙). 这里尤其需要注意的是$E_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$和$u_b(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$并非真正的 YSR 能带, 它们仅用于帮助计算拓扑不变量ν_2[50].

以上讨论了一般性理论, 下面研究一些简单的例子. 在这些例子中忽略除自旋外的其他内部自由度. 因此, 耦合项成为常数 (不妨设为实) $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}\sigma_0$, 其中$\sigma_0$为对应于自旋的单位矩阵; 时间反演算符可以写为$\boldsymbol{T}=\mathrm{i}\sigma_2\boldsymbol{K}$; 使得$U^{\dagger}\boldsymbol{P}U=\boldsymbol{K}$的幺正矩阵可以选为

$$U = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sigma_0 & \mathrm{i}\sigma_1 \\ -\mathrm{i}\sigma_2 & \mathrm{i}\sigma_3 \end{pmatrix}. \tag{20}$$

考虑最简单的三维超导体

$$\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{k}) = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)\sigma_0, \tag{21}$$

其中$k\equiv|\boldsymbol{k}|$. 以下再次分不同的维度D_{M}进行讨论.

零维 YSR 束缚态 ($D_{\mathrm{M}}=0$) 这种情况下, 对所有的动量进行积分, 得到[22]

$$\tilde{\mathrm{G}}_{\mathrm{SC}}^{(0)}(|E|<\varDelta,\boldsymbol{r}=0) \simeq -\frac{\pi\rho}{\sqrt{\varDelta^2-E^2}}(E\tau_0+\varDelta\tau_1)\sigma_0, \tag{22}$$

其中ρ为超导体在正常态下费米能处的态密度; τ和σ分别是对应于粒子-空穴和自旋自由度的泡利矩阵. 由此$\Sigma_{\mathrm{M}}(|E|<\varDelta)\simeq -\dfrac{\varGamma}{\sqrt{\varDelta^2-E^2}}(E\tau_0+\varDelta\tau_1)$, 其中$\varGamma\equiv\pi\rho v^2$通常被称为耦合函数或线宽函数.

假设$\boldsymbol{h}=\varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3-\mu_{\mathrm{M}}\sigma_0$, 相应的$H_{\mathrm{M}}=\varepsilon_{\mathrm{M}}\tau_0\sigma_3-\mu_{\mathrm{M}}\tau_3\sigma_0$, 则

$$\mathrm{G}_{\mathrm{M}}(E^+) = \left[\left(1+\frac{\varGamma}{\sqrt{\varDelta^2-E^2}}\right)E^+ - \varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3 + \mu_{\mathrm{M}}\tau_3 + \frac{\varGamma\varDelta}{\sqrt{\varDelta^2-E^2}}\tau_1\right]^{-1}, \tag{23}$$

$$H = \varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3 - \mu_{\mathrm{M}}\tau_3 - \varGamma\tau_1. \tag{24}$$

此处及下文中在不产生歧义的情况下省略单位矩阵σ_0和τ_0. 注意在 H中, 耦合函数$\varGamma$等效地取代了$\varDelta$.

从$\mathrm{G}_{\mathrm{M}}(E^+)$的极点, 得到 YSR 束缚态的能谱:

$$E_{\mathrm{YSR}} \simeq \pm\varDelta\frac{\varGamma^2+\mu_{\mathrm{M}}^2-\varepsilon_{\mathrm{M}}^2}{\sqrt{(\varGamma^2+\mu_{\mathrm{M}}^2-\varepsilon_{\mathrm{M}}^2)^2+(2\varGamma\varepsilon_{\mathrm{M}})^2}}. \tag{25}$$

此处及下文中都假设$\varGamma\gg\varDelta$. 上面的结果在$\mu_{\mathrm{M}}=0$时退化为熟悉的形式[13–15]:

$$E_{\mathrm{YSR}}(\mu_{\mathrm{M}}=0) = \pm\varDelta\frac{1-(\varepsilon_{\mathrm{M}}/\varGamma)^2}{1+(\varepsilon_{\mathrm{M}}/\varGamma)^2}. \tag{26}$$

另一方面, 根据方程 (15), 从 H 得到对应于系统基态费米子奇偶性的拓扑不变量 ν_0:

$$(-1)^{\nu_0}=\mathrm{sgn}(\Gamma^2+\mu_{\mathrm{M}}^2-\varepsilon_{\mathrm{M}}^2). \tag{27}$$

这显然与上面的 YSR 能谱自洽: 当 $E_{\mathrm{YSR}}=0$ 时, ν_0 失去定义, 对应于临界点. 从 (27) 式也可以看到, 当磁性原子的自旋劈裂能量 $|\varepsilon_{\mathrm{M}}|$ 足够大时, 只有一个自旋态被占据, 系统基态费米子奇偶性为奇; 但是增强超导体和磁性原子之间的耦合 Γ 可以导致这一奇偶性的反转.

一维 YSR 链 ($D_{\mathrm{M}}=1$) 在这种情况下, 先对所有垂直于链的动量 $\boldsymbol{k}_{\perp}$ 进行积分, 但是保留平行于链的动量 $k_{//}$ 作为参数, 得到[31]

$$\begin{aligned}&G_{\mathrm{SC}}^{(0)}(|E|<\Delta,k_{//},\boldsymbol{r}_{\perp}=0)\\&\simeq-\frac{\pi\rho(k_{//})}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}(E+\Delta\tau_1).\end{aligned} \tag{28}$$

这与方程 (22) 形式相同, 但是这里的 (二维能带) 费米面处的态密度 ρ 会依赖于 $k_{//}$. 由此得到自能

$$\Sigma_{\mathrm{M}}(|E|<\Delta,k_{\mathrm{M}})\simeq-\frac{\Gamma(k_{\mathrm{M}})}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}(E+\Delta\tau_1), \tag{29}$$

其中 $\Gamma(k_{\mathrm{M}})\equiv\sum_n\pi v^2\rho(k_{\mathrm{M}}+2n\pi)$ 是依赖于动量 k_{M} 的耦合函数.

在一维链中假设

$$\boldsymbol{h}(k_{\mathrm{M}})=\varepsilon_0(k_{\mathrm{M}})-\mu_{\mathrm{M}}+\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}})\sigma_2+\varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3, \tag{30}$$

其中动能项 $\varepsilon_0(k_{\mathrm{M}})$ 是 k_{M} 的偶函数, 而自旋轨道耦合项 $\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}})$ 是 k_{M} 的奇函数, 这两项都满足时间反演不变性. 注意在实际的物理体系中, 自旋轨道耦合项可以主要通过具有强自旋轨道耦合的超导体 (例如铅) 经由自能引入. 这里仅为简单起见, 直接在磁性原子的哈密顿量中引入自旋轨道耦合.

进一步, 磁性原子链的完全格林函数以及零能处的"等效哈密顿量"为

$$\begin{aligned}&\mathrm{G}_{\mathrm{M}}(E^+,k_{\mathrm{M}})\\&=\Bigg\{\left(1+\frac{\Gamma(k_{\mathrm{M}})}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}\right)E^++\frac{\Gamma(k_{\mathrm{M}})\Delta}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}\tau_1\\&\quad-[\varepsilon_0(k_{\mathrm{M}})-\mu_{\mathrm{M}}+\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}})\sigma_2]\tau_3-\varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3\Bigg\}^{-1},\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}H(k_{\mathrm{M}})=&[\varepsilon_0(k_{\mathrm{M}})-\mu_{\mathrm{M}}+\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}})\sigma_2]\tau_3\\&+\varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3-\Gamma(k_{\mathrm{M}})\tau_1.\end{aligned} \tag{32}$$

从 $G_{\mathrm{M}}(E^+,k_{\mathrm{M}})$ 的极点, 得到 YSR 能带的能谱 (仍假设 $\forall\, k_{\mathrm{M}}:\Gamma(k_{\mathrm{M}})\gg\Delta$)[31]:

$$E_{\mathrm{YSR}}(k_{\mathrm{M}})\simeq\pm\Delta\sqrt{\frac{(P-\varepsilon_{\mathrm{SO}}^2)^2+4\varepsilon_{\mathrm{SO}}^2\Gamma^2}{(P-\varepsilon_{\mathrm{SO}}^2)^2+4(\varepsilon_{\mathrm{M}}^2+\varepsilon_{\mathrm{SO}}^2)\Gamma^2}}, \tag{33}$$

$$P(k_{\mathrm{M}})\equiv\Gamma(k_{\mathrm{M}})^2+[\varepsilon_0(k_{\mathrm{M}})-\mu_{\mathrm{M}}]^2-\varepsilon_{\mathrm{M}}^2. \tag{34}$$

这里在 (33) 式右侧省略了 P, $\varepsilon_{\mathrm{SO}}$ 和 Γ 作为 k_{M} 的函数的标记. 时间反演不变性要求 $\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}}=0,\pi)=0$, 因此只要假设 $\varepsilon_{\mathrm{SO}}(k_{\mathrm{M}}\neq0,\pi)\neq0$ (同时 $\Gamma(k_{\mathrm{M}})\neq0$ 已经由 $\Gamma(k_{\mathrm{M}})\gg\Delta$ 所满足), 则 YSR 能带只能在 $k_{\mathrm{M}}=0$ 或 π 两处闭合, 且闭合需满足条件 $P(k_{\mathrm{M}}=0$ 或 $\pi)=0$. 一旦能隙存在, 根据方程 (17) 从 $H(k_{\mathrm{M}})$ 得到拓扑不变量 ν_1:

$$(-1)^{\nu_1}=\mathrm{sgn}[P(k_{\mathrm{M}}=0)P(k_{\mathrm{M}}=\pi)]. \tag{35}$$

当 $\nu_1=1$ 时, 一维 YSR 链处于拓扑非平庸相. 很明显, (35) 式与我们对 YSR 能谱的分析就拓扑相变的临界条件而言是自洽的. 值得再次注意的是, 在 $H(k_{\mathrm{M}})$ 中, 耦合函数 Γ 等效地取代了 Δ. 事实上, 正是这种等效替换使得拓扑超导相中的马约拉纳零能模的衰减长度 ($\propto1/\Gamma$) 远小于超导相干长度 ($\propto1/\Delta$)[24,31,49].

二维 YSR 格子 ($D_{\mathrm{M}}=2$) 类似于上面的计算, 先对垂直于二维格子的动量 $k_{\perp}$ 进行积分, 但是保留平行于二维格子的动量 $\boldsymbol{k}_{//}$ 作为参数, 得到

$$\begin{aligned}&G_{\mathrm{SC}}^{(0)}(|E|<\Delta,\boldsymbol{k}_{//},r_{\perp}=0)\\&\simeq-\frac{\pi\rho(\boldsymbol{k}_{//})}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}(E+\Delta\tau_1),\end{aligned} \tag{36}$$

这里的 ρ 为依赖于 $\boldsymbol{k}_{//}$ 的 (一维能带) 费米面处的态密度. 由此得到自能

$$\Sigma_{\mathrm{M}}(|E|<\Delta,\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\simeq-\frac{\Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})}{\sqrt{\Delta^2-E^2}}(E+\Delta\tau_1), \tag{37}$$

其中 $\Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\equiv\sum_{\boldsymbol{n}}\pi v^2\rho(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}+2\pi\boldsymbol{n})$ 是依赖于动量 $\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}$ 的耦合函数.

对二维磁性原子晶格假设

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})=\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})-\mu_{\mathrm{M}}+\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\cdot\boldsymbol{\sigma}_{//}+\varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3, \tag{38}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}_{//}\equiv(\sigma_1,\sigma_2)$, 而黑体的 $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}$ 亦代表一个二维矢量. 时间反演不变性要求动能项 $\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 是 $\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}$ 的偶函数, 而自旋轨道耦合项 $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 是 $\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}$ 的奇函数. 再次注意在实际的物理体系中, 自旋轨道耦合项更加可能主要通过具有强自旋轨道耦合的超导体经自能引入. 这里直接在磁性原子的哈密顿量中加入自旋轨道耦合项仅为简单起见.

这样的二维磁性原子晶格的完全格林函数以及零能处的"等效哈密顿量"分别为

$$G_{\mathrm{M}}(E^+, \boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) = \left\{\left(1 + \frac{\Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}}\right)E^+ + \frac{\Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\Delta}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}}\tau_1 - [\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) - \mu_{\mathrm{M}} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{//}]\tau_3 - \varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3\right\}^{-1}, \tag{39}$$

$$H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) = [\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) - \mu_{\mathrm{M}} + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{//}]\tau_3 + \varepsilon_{\mathrm{M}}\sigma_3 - \Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\tau_1. \tag{40}$$

此处 YSR 能带的能谱与方程 (33) 及 (34) 一致, 仅需定义 $\varepsilon_{\mathrm{SO}} \equiv |\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}|$, 以及注意这里的动量为二维. 同样类似于一维的情况, 只要假设在 $\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}} \in \mathrm{TRIM} \equiv \{(0,0), (0,\pi), (\pi,0), (\pi,\pi)\}$ 之外 $\varepsilon_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}}) \neq 0$, 则 YSR 能带只能在以上四处时间反演不变动量点闭合, 且闭合需满足条件 $P(k_{\mathrm{M}} \in \mathrm{TRIM}) = 0$. 如果能隙存在, 理论上可以根据方程 (19) 从 $H(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 得到拓扑不变量 ν_2. 但是在不对 $\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 和 $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathrm{SO}}(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 的函数形式做进一步假设的前提下, ν_2 作为各参量的函数的闭合表达式很难写出. 因此仅给出 ν_2 的奇偶性判据[28]:

$$(-1)^{\nu_2} = \mathrm{sgn}\left[\prod_{\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}} \in \mathrm{TRIM}} P(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})\right]. \tag{41}$$

当 ν_2 为奇数时, 二维 YSR 晶格一定处于拓扑非平庸相. 拓扑平庸与非平庸相之间的相变可以通过改变磁性原子的能带 $\varepsilon_0(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$、化学势 μ_{M}、自旋劈裂能 ε_{M} 或耦合函数 $\Gamma(\boldsymbol{k}_{\mathrm{M}})$ 而实现[25,28].

通过以上的讨论, 本文构建了基于 YSR 态的拓扑超导理论基本框架. 本文聚焦于 (当 $D_{\mathrm{M}} > 0$ 时) 对 YSR 晶格体态的讨论. 因为这是定义拓扑不变量的关键, 但是没有讨论拓扑非平庸超导态的直接产物, 也是拓扑超导体最引人注目的特性: 马约拉纳零能模/边界态[8,10,53,54]. 这一方面是因为马约拉纳零能模/边界态的存在性已经可以由非平庸拓扑不变量通过本体-边界对应原理[9]给出, 另一方面是因为马约拉纳零能模/边界态作为钉扎在缺陷上的特殊本征态, 其具体形式依赖模型细节, 从而不适于本文对通用性的考虑. 值得强调的是, 作为研究拓扑超导态的最主要动机之一, 拓扑量子计算的进展正是有赖于由马约拉纳零能模构筑的拓扑量子比特以及对其的 (编织) 操作[1,11,12,55]. 实现这些步骤, 包含提出切实可行的理论方案和提供没有歧义的实验证据, 是当前正待解决的问题. 另外, 本文的理论假设忽略了至少两个可能的重要额外因素: 电子相互作用和无序. 就前者而言, 已知相互作用的存在可以改变某些系统的拓扑分类[56,57]; 就后者而言, 已知的一种有趣情形是, 即使磁性原子呈 (二维) 无定形排布, 它们仍然可能诱导出非平庸拓扑超导态[32]. 另外, 对于考虑上面两种额外因素后如何刻画拓扑超导 (无论是否基于 YSR 态) 的细致深入研究也是需要努力的方向.

作者感谢 Alex Weström 的有益讨论. 作者希望以本文向 Yu-Shiba-Rusinov 中 Yu(于渌) 致敬——他于 1965 年同样发表于《物理学报》的工作 (引文 [13]) 是本文理论的基石之一.

参考文献

[1] Kitaev A Y 2001 *Physics-Uspekhi* **44** 131
[2] Read N, Green D 2000 *Phys. Rev. B* **61** 10267.
[3] Fu L, Kane C L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 096407
[4] Kitaev A 2009 *AIP Conference Proceedings* **1134** 22
[5] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, Ludwig A W W 2009 *AIP Conference Proceedings* **1134** 10
[6] Ryu S, Schnyder A P, Furusaki A, Ludwig A W W 2010 *New J. Phys.* **12** 065010
[7] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
[8] Beenakker C 2013 *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **4** 113
[9] Chiu C K, Teo J C, Schnyder A P, Ryu S 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 035005
[10] Lutchyn R M, Bakkers E P A M, Kouwenhoven L P, Krogstrup P, Marcus C M, Oreg Y 2017 *arXiv: 1707.04899*
[11] Kitaev A Y 2003 *Ann. Phys.* **303** 2
[12] Nayak C, Simon S, Stern A, Freedman M, Das Sarma S 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 1083
[13] Yu L 1965 *Acta Phys. Sin.* **21** 75 (in Chinese) [于渌 1965 物理学报 **21** 75]
[14] Shiba H 1968 *Pro. Theo. Phys.* **40** 435
[15] Rusinov A I 1969 *Soviet Phys. JETP* **29** 1101
[16] Choy T P, Edge J M, Akhmerov A R, Beenakker C W J 2011 *Physi. Rev. B* **84** 195442
[17] Martin I, Morpurgo A F 2012 *Phys. Rev. B* **85** 144505
[18] Nadj-Perge S, Drozdov I K, Bernevig B A, Yazdani A 2013 *Phys. Rev. B* **88** 020407
[19] Klinovaja J, Stano P, Yazdani A, Loss D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 186805
[20] Braunecker B, Simon P 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 147202
[21] Vazifeh M M, Franz M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 206802
[22] Pientka F, Glazman L I, von Oppen F 2013 *Phys. Rev. B* **88** 155420
[23] Nadj-Perge S, Drozdov I K, Li J, et al. 2014 *Science* **346** 602
[24] Li J, Chen H, Drozdov I K, Yazdani A, Bernevig B A, MacDonald A H 2014 *Phys. Rev. B* **90** 235433
[25] Röntynen J, Ojanen T 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 236803
[26] Westström A, Pöyhönen K, Ojanen T 2015 *Phys. Rev. B* **91** 064502
[27] Li J, Neupert T, Bernevig B A, Yazdani A 2016 *Nat.*

Commun. **7** 10395
[28] Li J, Neupert T, Wang Z, MacDonald A H, Yazdani A, Bernevig B A 2016 *Nat. Commun.* **7** 12297
[29] Feldman B E, Randeria M T, Li J, et al. 2017 *Nat. Phys.* **13** 286
[30] Jeon S, Xie Y, Li J, Wang Z, Bernevig B A, Yazdani A 2017 *Science* **358** 772
[31] Li J, Jeon S, Xie Y, Yazdani A, Bernevig B A 2018 *Phys. Rev. B* **97** 125119
[32] Pöyhönen K, Sahlberg I, Westström A, Ojanen T 2018 *Nat. Commun.* **9** 2103
[33] Kim H, Palacio-Morales A, Posske T, et al. 2018 *Science Advances* **4** eaar5251
[34] Palacio-Morales A, Mascot E, Cocklin S, et al. 2019 *Science Advances* **5** eaav6600
[35] Yazdani A, Jones B A, Lutz C P, Crommie M F, Eigler D M 1997 *Science* **275** 1767
[36] Sarma S D, Freedman M, Nayak C 2015 *npj Quantum Information* **1** 15001
[37] Lutchyn R M, Sau J D, Das Sarma S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 077001
[38] Oreg Y, Refael G, von Oppen F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 177002
[39] Alicea J 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 076501
[40] Mourik V, Zuo K, Frolov S M, Plissard S R, Bakkers E P A M, Kouwenhoven L P 2012 *Science* **336** 1003
[41] Das A, Ronen Y, Most Y, Oreg Y, Heiblum M, Shtrikman H 2012 *Nat. Phys.* **8** 887
[42] Rokhinson L P, Liu X, Furdyna J K 2012 *Nat. Phys.* **8** 795
[43] Deng M T, Yu C L, Huang G Y, Larsson M, Caroff P, Xu H Q 2012 *Nano Lett.* **12** 6414
[44] Sun H H, Zhang K W, Hu L H, et al. 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 257003
[45] Hu L H, Li C, Xu D H, Zhou Y, Zhang F C 2016 *Phys. Rev. B* **94** 224501
[46] Wang D, Kong L, Fan P, et al. 2018 *Science* **362** 333
[47] Liu Q, Chen C, Zhang T, et al. 2018 *Phys. Rev. X* **8** 041056
[48] Jäck B, Xie Y, Li J, Jeon S, Bernevig B A, Yazdani A 2019 *Science* **364** 1255
[49] Peng Y, Pientka F, Glazman L I, von Oppen F 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 106801
[50] Duan W, Li J *unpublished*
[51] Altland A, Zirnbauer M R 1997 *Phys. Rev. B* **55** 1142
[52] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 405
[53] Wilczek F 2009 *Nat. Phys.* **5** 614
[54] Elliott S R, Franz M 2015 *Rev. Mod. Phys.* **87** 137
[55] Ivanov D A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 268
[56] Fidkowski L, Kitaev A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 134509
[57] Fidkowski L, Kitaev A 2011 *Phys. Rev. B* **83** 075103

SPECIAL TOPIC—Majorana in condensed matter

Theory of topological superconductivity based on Yu-Shiba-Rusinov states*

Li Jian [1)2)†]

1) (*School of Science, Westlake University, Hangzhou* 310024, *China*)

2) (*Institute of Natural Sciences, Westlake Institute for Advanced Study, Hangzhou* 310024, *China*)

(Received 2 June 2020; revised manuscript received 5 June 2020)

Abstract

Yu-Shiba-Rusinov states are subgap bound states induced by magnetic impurity atoms in a superconductor. These states can be used as building blocks in constructing an effective topological superconductor. Here we formulate a unified theory of topological superconductivity in different dimensions based on Yu-Shiba-Rusinov states, and demonstrate its application with simple but illustrative examples. Such a theory underlies a number of recent experiments on the related platform.

Keywords: topological phase, topological superconductivity, Majorana fermion, magnetic impurity, Yu-Shiba-Rusinov state

PACS: 74.20.–z, 74.25.–q, 74.25.Jb, 03.65.Vf **DOI:** 10.7498/aps.69.20200831

* Project supported by the National Natural Foundation of China (Grant No. 11774317).

† Corresponding author. E-mail: lijian@westlake.edu.cn