

第I部

BdG モデルハミルトニアンについて

1 問題 2

1.1 ハミルトニアン \mathcal{H} をフーリエ変換せよ

今度は、 $\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \hat{\sigma}_1$ のときを考える。求める式は、

$$\mathcal{H} = \int \int \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \right) \tilde{H} \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} \right) dx dy \quad (1)$$

ここで

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2)$$

より、ハミルトニアン \mathcal{H} は、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} & 0 \\ 0 & \Delta_0^* \frac{i\partial x}{k_F} & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F & 0 \\ \Delta_0^* \frac{i\partial x}{k_F} & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \quad (3)$$

これを、式 (1) に代入して計算していく。

以下

$$\eta = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \quad (4)$$

$$\eta' = \Delta_0^* \frac{i\partial x}{k_F} \quad (5)$$

とする

このとき、

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \tilde{H} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} &= e^{-ik_y y} \left[\Psi_\uparrow^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right) + \Psi_\downarrow^\dagger \eta \right] \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \\ &+ e^{-ik_y y} \left[\Psi_\downarrow^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right) + \Psi_\uparrow^\dagger \eta \right] \Psi_\downarrow e^{ik'_y y} \\ &+ e^{-ik_y y} \left[\Psi_\downarrow \eta' + \Psi_\uparrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\uparrow^\dagger e^{ik'_y y} \\ &+ e^{-ik_y y} \left[\Psi_\uparrow \eta' + \Psi_\downarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\downarrow^\dagger e^{ik'_y y} \end{aligned} \quad (6)$$

また、

$$\begin{aligned}
& \int \left(\sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^\dagger(k) e^{-ik_y y} \Psi(k') e^{ik'_y y} \right) dy \\
&= L_y \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^\dagger(k) \Psi(k') \delta(k - k') \\
&= L_y \sum_{k_y} \Psi^\dagger(k) \Psi(k)
\end{aligned} \tag{7}$$

$$\nabla^2 \left[\Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-k_y^2 \Psi e^{ik'_y y} + e^{ik'_y y} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) \tag{8}$$

から、式 (1) は、

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} & \left[\Psi_\uparrow^\dagger \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\uparrow + \Psi_\uparrow^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\uparrow + \Psi_\downarrow^\dagger \eta \Psi_\uparrow \right. \\
& \left. + \Psi_\downarrow^\dagger \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\downarrow + \Psi_\downarrow^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\downarrow - \Psi_\uparrow^\dagger \eta \Psi_\downarrow \dots \right]
\end{aligned} \tag{9}$$

1.2 差分近似をしよう

刻み幅を 1 として、差分近似をする。微小変化 h 周りにマクローリン展開を行うと、

$$\Psi(x+h) = \Psi(x) + h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \tag{10}$$

$$\Psi(x-h) = \Psi(x) - h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \tag{11}$$

よって、差分近似は式 (10), 式 (11) の方程式で求めることができ、刻み幅 $h = 1$ とすると、

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \frac{\Psi(x+1) - \Psi(x-1)}{2} \tag{12}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = \Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1) \tag{13}$$

1.3 x を離散化せよ

式 (13) を式 (9) に代入して、行列で表す。このとき、離散化した波動関数を以下の式に定義する。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm 1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow}(x \pm 1) \quad (14)$$

代入した式は、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{k_y} \left[\Psi_{i\uparrow}^\dagger \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{i\uparrow} + \Psi_{i\uparrow}^\dagger (\Psi_{i+1\uparrow}(x) - 2\Psi_{i\uparrow}(x) + \Psi_{i-1\uparrow}(x)) + \Psi_{i\downarrow}^\dagger \Delta_0^* \Psi_{i\uparrow} \cdots \right] \quad (15)$$

このとき、 η のなかの微分を考慮する。 $N = 3$ と置くと、ハミルトニアンを2次形式で表すと、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta' & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & \zeta \\ 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & \zeta & 0 \\ 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta' & \Lambda & 0 \\ -\zeta' & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta' & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (16)$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu_F \quad (17)$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (18)$$

$$\zeta = \frac{\Delta_0}{2k_F} i \quad (19)$$

$$\zeta' = \frac{\Delta_0^*}{2k_F} i \quad (20)$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (21)$$

とおく

2 結果

\mathcal{H} を数値計算で対角化した。 $N = 100$ 、 k_y を横軸、固有値を縦軸として分散関係をプロットした。結果は以下のとおりである。