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、

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

ここで

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

より、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は、

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

これを、式 (1) に代入して計算していく。
このとき、
(以下、まだ訂正してない)

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}^\dagger_{k_y}(x) e^{-ik_y y} \tilde{H} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} = {} & e^{-ik_y y} \left[\Psi^\dagger_\uparrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F \right) + \Psi^\dagger_\downarrow \Delta_0^* \right] \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \\ & + e^{-ik_y y} \left[\Psi^\dagger_\downarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F \right) - \Psi^\dagger_\uparrow \Delta_0^* \right] \Psi_\downarrow e^{ik'_y y} \\ & + e^{-ik_y y} \left[-\Psi_\downarrow \Delta_0 + \Psi_\uparrow \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi^\dagger_\uparrow e^{ik'_y y} \\ & + e^{-ik_y y} \left[\Psi_\uparrow \Delta_0 + \Psi_\downarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi^\dagger_\downarrow e^{ik'_y y} \end{aligned} \tag{4}$$

また、

$$
\begin{aligned}
&\int \left(\sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^{\dagger}(k) e^{-ik_y y} \Psi(k') e^{ik'_y y} \right) dy \\
&\quad = L_y \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^{\dagger}(k) \Psi(k') \delta\left(k - k'\right) \\
&\qquad = L_y \sum_{k_y} \Psi^{\dagger}(k) \Psi(k)
\end{aligned} \tag{5}
$$

$$
\nabla^2 \left[\Psi_{\uparrow} e^{ik'_y y} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-k_y^2 \Psi e^{ik'_y y} + e^{ik'_y y} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) \tag{6}
$$

から、式 (1) は、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} \Bigg[&\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \Delta_0^{*} \Psi_{\uparrow} \\
&+ \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} - \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^{*} \Psi_{\downarrow} \cdots \Bigg]
\end{aligned} \tag{7}
$$

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、

$$
\Psi\left(x + h\right) = \Psi\left(x\right) + h \frac{\partial}{\partial x} \Psi\left(x\right) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi\left(x\right) \tag{8}
$$

$$
\Psi\left(x - h\right) = \Psi\left(x\right) - h \frac{\partial}{\partial x} \Psi\left(x\right) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi\left(x\right) \tag{9}
$$

よって、差分近似は式 (8), 式 (9) の方程式で求めることができ、刻み幅 $h = 1$ とすると、

$$
\frac{\partial}{\partial x} \Psi\left(x\right) = \frac{\Psi\left(x + 1\right) - \Psi\left(x - 1\right)}{2} \tag{10}
$$

$$
\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi\left(x\right) = \Psi\left(x + 1\right) - 2\Psi\left(x\right) + \Psi\left(x - 1\right) \tag{11}
$$

1.3 x を離散化せよ

式 (11) を式 (7) 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。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow}(x \pm 1) \tag{12}$$

代入した式は、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k_y} \left[\Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{i\uparrow} + \Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\Psi_{i+1\uparrow}(x) - 2\Psi_{i\uparrow}(x) + \Psi_{i-1\uparrow}(x) \right) + \Psi_{i\downarrow}^{\dagger} \Delta_0^* \Psi_{i\uparrow} \cdots \right] \tag{13}$$

$N = 3$ と置くとき、ハミルトニアンを 2 次形式で表すと、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & -\Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\downarrow}^{\dagger} \end{bmatrix} \tag{14}$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu_F \tag{15}$$

$$\mathit{\Lambda} = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{16}$$

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。