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。

以下

$$\eta = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \tag{4}$$

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

とする

このとき、

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

また、

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

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

から、式 (1) は、

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

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、

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

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

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、

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

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

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。

$$
\vec{\Psi}=\begin{bmatrix}\Psi_{1\uparrow}\\ \Psi_{1\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{1\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{1\downarrow}\\ \Psi_{2\uparrow}\\ \cdot\\ \cdot\end{bmatrix},\Psi_{n\pm1\uparrow}=\Psi_{n\uparrow}\left(x\pm1\right) \tag{14}
$$

代入した式は、

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

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

$$
\mathcal{H}=\begin{bmatrix}\Psi^{\dagger}_{1\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{1\downarrow}\\ \Psi_{1\uparrow}\\ \Psi_{1\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{2\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{2\downarrow}\\ \Psi_{2\uparrow}\\ \Psi_{2\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{3\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{3\downarrow}\\ \Psi_{3\uparrow}\\ \Psi_{3\downarrow}\end{bmatrix}^T
\begin{bmatrix}
\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & -\zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -\zeta^{'} & \varLambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^{'} & 0 & 0 & \varLambda & 0 & 0 & 0 & 0\\
-\varLambda & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & 0 & 0 & \zeta\\
0 & -\varLambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & -\zeta & 0\\
0 & \zeta^{'} & \varLambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -\zeta^{'} & \varLambda & 0\\
-\zeta^{'} & 0 & 0 & \varLambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^{'} & 0 & 0 & \varLambda\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varLambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta^{'} & \varLambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta^{'} & 0 & 0 & \varLambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}\Psi_{1\uparrow}\\ \Psi_{1\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{1\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{1\downarrow}\\ \Psi_{2\uparrow}\\ \Psi_{2\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{2\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{2\downarrow}\\ \Psi_{3\uparrow}\\ \Psi_{3\downarrow}\\ \Psi^{\dagger}_{3\uparrow}\\ \Psi^{\dagger}_{3\downarrow}\end{bmatrix} \tag{16}
$$

ここで

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

$$
\varLambda=\frac{\hbar^2}{2m} \tag{18}
$$

$$
\zeta=\frac{\Delta_0}{2k_F}i \tag{19}
$$

$$
\zeta^{'}=\frac{\Delta_0^*}{2k_F}i \tag{20}
$$

$$
\mu=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m} \tag{21}
$$

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。