

$$\mathcal{H} = \int \vec{\Psi}^\dagger(x, y) \hat{H} \vec{\Psi}(x, y) dr \quad (1)$$

に

$$\vec{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y} \quad (2)$$

を代入していく。ここで

$$\vec{\Psi}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \quad (3)$$

であるから

$$\mathcal{H} = \int \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \hat{H} \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y}(x, y) dr \quad (4)$$

$$= \frac{1}{L_y} \int \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \hat{H} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y}(x, y) dr \quad (5)$$

$$(6)$$

となる。下線部について計算していく。

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{h}(r) & \hat{\Delta}(r) \\ -\hat{\Delta}^*(r) & -\hat{h}^*(r) \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$= \begin{pmatrix} (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F) \hat{\sigma}_0 & \Delta_0(i\sigma_2) \\ -\Delta_0^*(\sigma_2^*) & (\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F) \hat{\sigma}_0^* \end{pmatrix} \quad (8)$$

ここで $\hat{\sigma}_0$ 、 $\hat{\sigma}_2$ はパウリ行列であり、

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

である。

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \Delta_0 i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ -\Delta_0^* \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & (\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & \xi & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\xi & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \quad (11)$$

ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \quad (12)$$

とした。式 6 の下線部は

$$\begin{aligned} & \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} & \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} & \psi_{\uparrow} e^{-ik'_y y} & \psi_{\downarrow} e^{-ik'_y y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & \xi & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\xi & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \\ \psi_{\downarrow} e^{ik_y y} \\ \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \end{bmatrix} dx dy \\ &= \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) \\ & \quad + \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\downarrow} e^{ik_y y} - \Delta_0^* \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) \\ & \quad + \psi_{\uparrow} e^{-ik'_y y} (-\Delta_0 \psi_{\downarrow}^* e^{ik_y y} - \nabla' \psi_{\uparrow}^* e^{ik_y y}) \\ & \quad + \psi_{\downarrow} e^{-ik'_y y} (\Delta_0 \psi_{\uparrow}^* e^{ik_y y} - \nabla' \psi_{\downarrow}^* e^{ik_y y}) \end{aligned} \quad (13)$$

第一項について

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) dx dy \quad (14)$$

$$= \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right) \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \right] dx dy \quad (15)$$

$$(16)$$

∇^2 の計算を行う。

$$\nabla^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} = (\partial_x^2 + \partial_y^2) \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \quad (17)$$

$$= \partial_x^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \partial_y^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \quad (18)$$

$$= e^{ik_y y} \partial_x^2 \psi_{\uparrow} - k_y^2 e^{ik_y y} \psi_{\uparrow} \quad (19)$$

であるから

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} \left[\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \right] dx dy \quad (20)$$

ここで

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} e^{ik_y y} \psi dy = L_y \sum_{k_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi \quad (21)$$

を用いて

$$\int \sum_{k_y} L_y \left[\psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} + \psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right] dx \quad (22)$$

従って \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \int \sum_{k_y} \left[\psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} + \psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right. \quad (23)$$

$$\left. + \psi_{\downarrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\downarrow} - \psi_{\downarrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\uparrow}^{\dagger} \right. \quad (24)$$

$$\left. - \psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow}^{\dagger} - \psi_{\uparrow} \Delta_0 \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right. \quad (25)$$

$$\left. - \psi_{\downarrow} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\downarrow}^{\dagger} + \psi_{\downarrow} \Delta_0 \psi_{\uparrow}^{\dagger} \right] dx \quad (26)$$

積分 \int を和記号 \sum にして x を離散化していく。刻み幅を 1 とすると

$$\int dx \rightarrow \sum_{i=1}^{L_y+1} \Delta x = \sum_{i=1}^{L_y+1} \quad (27)$$

となる。また波動関数を

$$\psi(x) \rightarrow \psi_i \quad (28)$$

と離散化する。すると \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[\psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{i\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (29)$$

$$= \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_{i\uparrow}^{\dagger} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{i\uparrow}) + \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (30)$$

ここで $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{i\uparrow}$ を差分近似する。関数を次のように近似する。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (31)$$

刻み幅 1 で x を i で書けば

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(i) = f(i+1) - 2f(i) + f(i-1) \quad (32)$$

これより \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu \right\} \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i+1\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i-1\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (33)$$

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (34)$$

とおいた。

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu \quad (35)$$

とすると全体の \mathcal{H} は行列で書けて三つ分書くと

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & \varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (36)$$

となる。ここから \mathcal{H} を数値計算で対角化していく。