

# BdG ハミルトニアン

金沢彰太郎

平成 30 年 6 月 27 日

## 目 次

1	導入	2
2	計算・結果	4
2.1	1 の場合 . . . . .	4
2.2	2 の場合 . . . . .	9
2.3	3 の場合 . . . . .	13

# 1 導入

BdG における分散関係と状態密度を求めることを目標にする。BdG ハミルトニアンは以下の式で表される。

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

ここで

$$\int dr = \int dx dy \quad (2)$$

である。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \\ \psi_\uparrow^\dagger \\ \psi_\downarrow^\dagger \end{bmatrix} \quad (3)$$

ハミルトン演算子は次のようである。

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{h}(r) & \hat{\Delta}(r) \\ -\hat{\Delta}^*(r) & -\hat{h}^*(r) \end{pmatrix} \quad (4)$$

ただし

$$\hat{H} \in \mathbb{C}^{4 \times 4} \quad (5)$$

$$\hat{\Delta}(r), \hat{h}(r) \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \quad (6)$$

$$\hat{h} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right] \hat{\sigma}_0 \quad (7)$$

$\hat{\sigma}_0$ : 単位行列

$$\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 \quad (8)$$

である。 $\hat{\Delta}(r)$  の中身を次の三通りで考えていく。

$$\hat{\Delta}(r) = \begin{cases} \text{(i)} & \Delta_0(i\sigma_2) & s\text{-wave} \\ \text{(ii)} & \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \hat{\sigma}_1 & p_x\text{-wave} \\ \text{(iii)} & \Delta_0 \frac{1}{k_F} (\partial x + i\partial y) \hat{\sigma}_1 & p_x + ip_y\text{-wave} \end{cases} \quad (9)$$

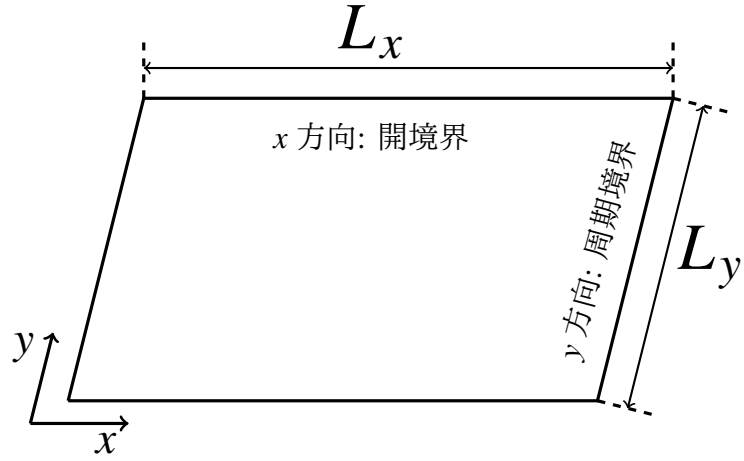


図 1: 考える系

図 1 の系を考える。  $y$  方向には境界条件が課されている。

$$\vec{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y} \quad (10)$$

1.(i) の  $\hat{\Delta}$  を使う

①  $H$  をフーリエ変換しましょう！  $y$  を波数に変換して一旦固定して  $x$  の関数として考えます。  
 ヒント: (1) に (2) を代入しましょう。

② 離散化しましょう

$$\mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}} \quad (11)$$

$$\tilde{\mathcal{H}} = \vec{\Psi}^\dagger \hat{H} \vec{\Psi} \quad (12)$$

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{H} & & & \\ & \hat{H} & & \\ & & \hat{H} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} = t \quad (15)$$

とする。

③ 差分近似しましょう

$$\partial_x \psi_i \rightarrow ? \quad (16)$$

$$\partial_x^2 \psi_i \rightarrow ? \quad (17)$$

$$(18)$$

刻み幅は 1

④  $\tilde{H}$  を対角化しましょう。数値計算

2 (ii) の  $\hat{\Delta}$  を使う

3(iii) の  $\hat{\Delta}$  を使う

## 2 計算・結果

### 2.1 1 の場合

$$\mathcal{H} = \int \vec{\Psi}^\dagger(x, y) \hat{H} \vec{\Psi}(x, y) dr \quad (19)$$

に

$$\vec{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y} \quad (20)$$

を代入していく。ここで

$$\vec{\Psi}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \quad (21)$$

であるから

$$\mathcal{H} = \int \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \hat{H} \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y}(x, y) dr \quad (22)$$

$$= \frac{1}{L_y} \int \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}^\dagger(x) e^{-ik'_y y} \hat{H} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y}(x, y) dr \quad (23)$$

---


$$(24)$$

となる。下線部について計算していく。

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{h}(r) & \hat{\Delta}(r) \\ -\hat{\Delta}^*(r) & -\hat{h}^*(r) \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$= \begin{pmatrix} (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F) \hat{\sigma}_0 & \Delta_0(i\sigma_2) \\ -\Delta_0^*(i\sigma_2^*) & (\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F) \hat{\sigma}_0^* \end{pmatrix} \quad (26)$$

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

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

である。

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} (-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \Delta_0 i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ -\Delta_0^* \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & (\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (28)$$

$$= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & \xi & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\xi & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \quad (29)$$

ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F = \xi \quad (30)$$

とした。式 (24) の下線部は

$$\begin{aligned}
& \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} & \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} & \psi_{\uparrow} e^{-ik'_y y} & \psi_{\downarrow} e^{-ik'_y y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & \xi & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\xi & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \\ \psi_{\downarrow} e^{ik_y y} \\ \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \end{bmatrix} dx dy \\
&= \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) \\
&\quad + \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\downarrow} e^{ik_y y} - \Delta_0^* \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) \\
&\quad + \psi_{\uparrow} e^{-ik'_y y} (-\Delta_0 \psi_{\downarrow}^* e^{ik_y y} - \nabla' \psi_{\uparrow}^* e^{ik_y y}) \\
&\quad + \psi_{\downarrow} e^{-ik'_y y} (\Delta_0 \psi_{\uparrow}^* e^{ik_y y} - \nabla' \psi_{\downarrow}^* e^{ik_y y})
\end{aligned} \tag{31}$$

第一項について

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} (\xi \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y}) dx dy \tag{32}$$

$$= \int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right] \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} dx dy \tag{33}$$

$$\tag{34}$$

$\nabla^2$  の計算を行う。

$$\nabla^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} = (\partial_x^2 + \partial_y^2) \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \tag{35}$$

$$= \partial_x^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \partial_y^2 \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \tag{36}$$

$$= e^{ik_y y} \partial_x^2 \psi_{\uparrow} - k_y^2 e^{ik_y y} \psi_{\uparrow} \tag{37}$$

であるから

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} \left[ \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} + \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y y} \right] dx dy \tag{38}$$

ここで

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik'_y y} e^{ik_y y} \psi dy = L_y \sum_{k_y} \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi \tag{39}$$

を用いて

$$\int \sum_{k_y} L_y \left[ \psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} + \psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right] dx \tag{40}$$

従って  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \int \sum_{k_y} \left[ \psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow} + \psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right. \quad (41)$$

$$\left. + \psi_{\downarrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\downarrow} - \psi_{\downarrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{\uparrow}^{\dagger} \right. \quad (42)$$

$$\left. - \psi_{\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\uparrow}^{\dagger} - \psi_{\uparrow} \Delta_0 \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right. \quad (43)$$

$$\left. - \psi_{\downarrow} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{\downarrow}^{\dagger} + \psi_{\downarrow} \Delta_0 \psi_{\uparrow} \right] dx \quad (44)$$

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

$$\int dx \rightarrow \sum_{i=1}^{L_y+1} \Delta x = \sum_{i=1}^{L_y+1} \quad (45)$$

となる。また波動関数を

$$\psi(x_i) \rightarrow \psi_i \quad (46)$$

と離散化する。すると  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[ \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2 \right) - \mu_F \right\} \psi_{i\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (47)$$

$$= \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_{i\uparrow}^{\dagger} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{i\uparrow}) + \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (48)$$

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。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (49)$$

刻み幅 1 で  $x$  を  $i$  で書けば

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(i) = f(i+1) - 2f(i) + f(i-1) \quad (50)$$

これより  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu \right\} \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i+1\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i-1\uparrow} + \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \cdots \right] dx \quad (51)$$

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (52)$$

とおいた。

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu \quad (53)$$

とすると全体の  $\mathcal{H}$  は行列で書けて三つ分書くと

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & \varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (54)$$

となる。ここから  $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。 $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。この時  $\mu = 3.5, \Lambda = 1.0, \Delta = 1.0$  とした。 $N = 100$ 、 $k_y$  を横軸として変化させて縦軸に固有値をプロットし分散関係を描いた。結果は以下のようになった。

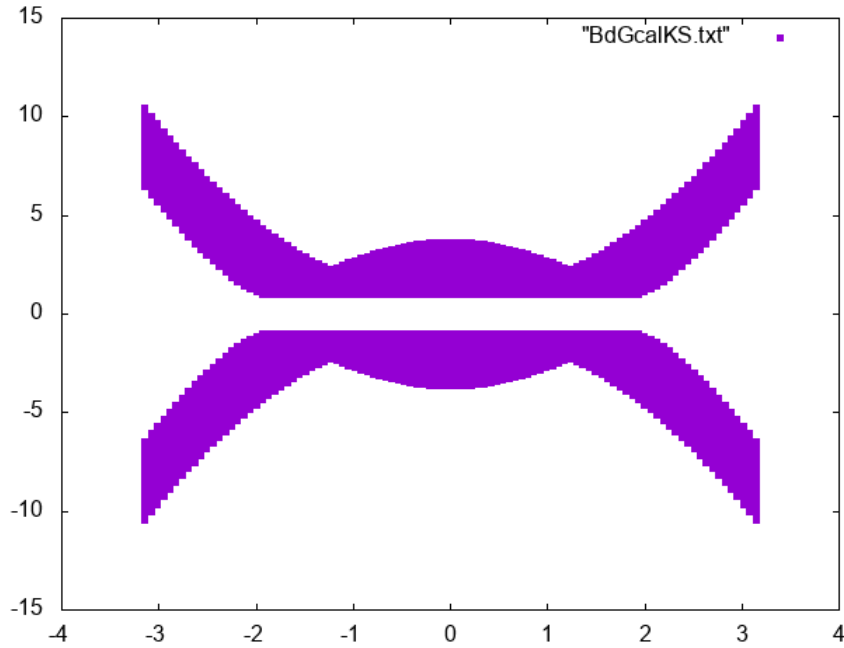


図 2: 分散関係



次にグリーン関数を用いて状態密度を求める。まずグリーン関数は

$$G = (E + i\delta - H)^{-1} \quad (55)$$

であり、表面の状態密度は

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{11} + G_{22}) \quad (56)$$

で求められる。 $E$  を  $-3 \sim 3$  で動かして  $\rho$  をプロットした。この時  $\delta = 10^{-3}$  とした。以下に結果を示す。

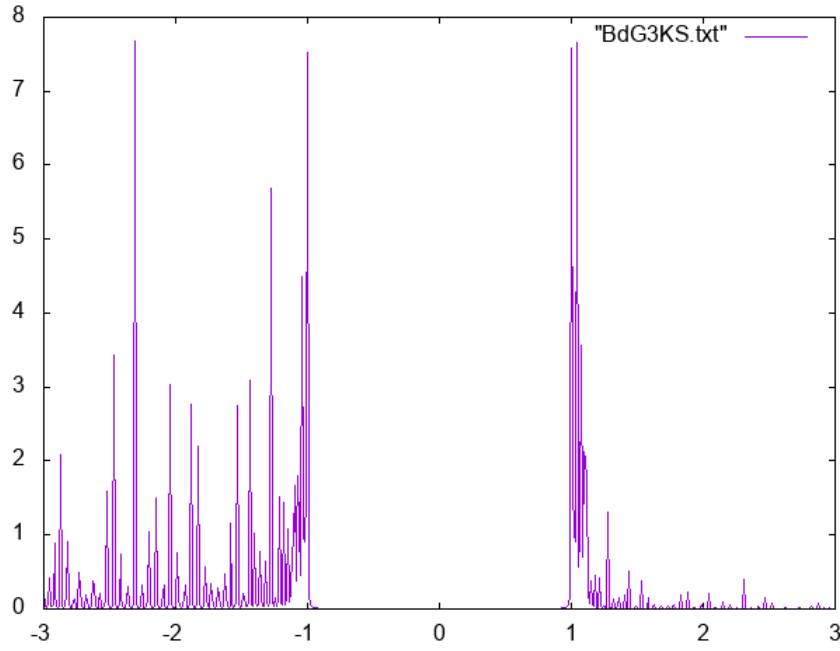


図 3: 状態密度

ここからエネルギーが  $-1 \sim 1$  では状態がないことが分かる。

## 2.2 2 の場合

(2) 前回までに行った計算を  $p_x - wave$  に対して行う。すなわち  $\hat{\Delta}(r)$  を以下のようにする。

$$\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{i\partial_x}{k_F} \hat{\sigma}_1 \quad (57)$$

このとき

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (58)$$

である。従って

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \frac{\Delta_0}{k_F} \begin{pmatrix} 0 & i\partial x \\ i\partial x & 0 \end{pmatrix} \\ -\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* \begin{pmatrix} 0 & -i\partial x \\ -i\partial x & 0 \end{pmatrix} & (\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (59)$$

$$= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \eta \\ 0 & \xi & \eta & 0 \\ 0 & \eta' & -\xi & 0 \\ \eta' & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \quad (60)$$

となる。ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \quad (61)$$

$$\frac{\Delta_0}{k_F} i\partial x = \eta \quad (62)$$

$$\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* i\partial x = \eta' \quad (63)$$

とおいた。前回との違いは  $\eta$  とその中に  $x$  の微分が入っていることなので、この項を検討していく。例えば

$$\psi_{\downarrow} e^{-ik_y y} \eta \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \quad (64)$$

は

$$\psi_{\downarrow} e^{-ik_y y} \eta \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} = \psi_{\downarrow} e^{-ik_y y} \frac{\Delta_0}{k_F} i\partial x \psi_{\uparrow} e^{ik_y y} \quad (65)$$

$$= \psi_{\downarrow} e^{-ik_y y} \frac{\Delta_0}{k_F} i e^{ik_y y} \partial x \psi_{\uparrow} \quad (66)$$

となる。 $\partial x \psi_{\uparrow}$  を中心差分を用いて離散化していく。

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (67)$$

刻み幅 1 で  $x$  を  $i$  で書けば

$$\frac{\partial}{\partial x} f(i) = \frac{f(x+i) - f(x-i)}{2} \quad (68)$$

であるからこれより  $\mathcal{H}$  は

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \left[ \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu \right\} \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i+1\uparrow} - \Lambda \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i-1\uparrow} + \frac{\Delta_0}{2k_F} i \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i+1\uparrow}^\dagger - \frac{\Delta_0}{2k_F} i \psi_{i\uparrow}^\dagger \psi_{i-1\uparrow}^\dagger \cdots \right] dx \quad (69)$$

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (70)$$

とおいた。

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu \quad (71)$$

$$\frac{\Delta_0}{2k_F}i = \zeta \quad (72)$$

$$\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* i = \zeta' \quad (73)$$

とすると全体の  $\mathcal{H}$  は行列で書けて三つ分書くと

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & \zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta \\ 0 & -\Lambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 \\ 0 & -\zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta^* & \Lambda & 0 \\ -\zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^* & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & \zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & -0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (74)$$

となる。ここから  $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。また  $k_F$  は

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (75)$$

から求める。先と同様に  $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。この時  $\mu = 3.5, \Lambda = 1.0, \Delta = 1.0$  とした。  $N = 100$ 、  $k_y$  を横軸として変化させて縦軸に固有値をプロットし分散関係を描いた。結果は以下ようになった。

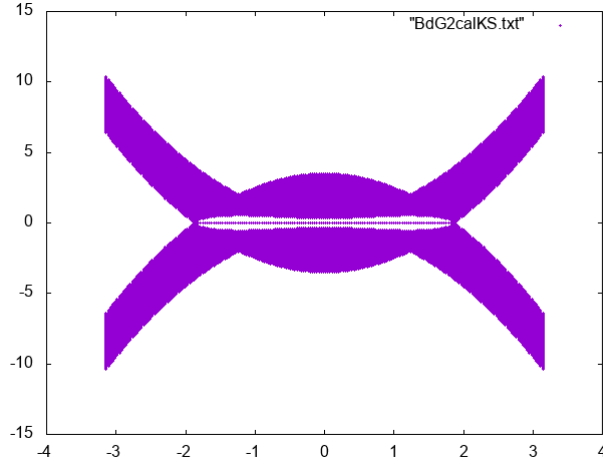


図 4: 分散関係

次にグリーン関数を用いて状態密度を求めた。端には電子が存在しており、その間にエネルギー状態があるが、周りにはないことが分かる。

次に  $E$  を  $-3 \sim 3$  で動かして  $\rho$  をプロットした。この時  $\delta = 10^{-3}$  とした。以下に結果を示す。

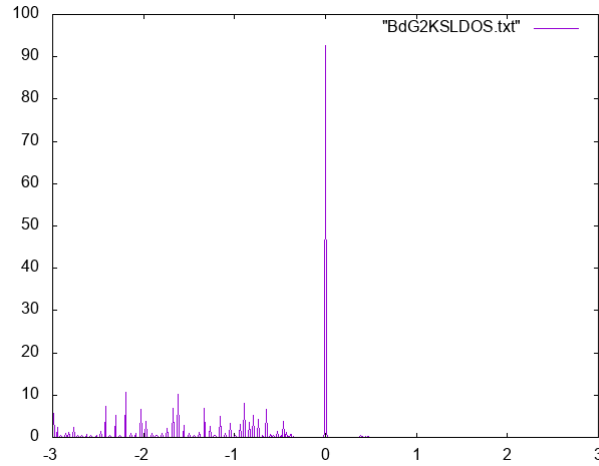


図 5: 表面の状態密度

ここからエネルギーが  $-1 \sim 1$  では状態があることが分かる。これは (1) の結果とは異なる点である。また内部を

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{201,202} + G_{202,202}) \quad (76)$$

で求めると

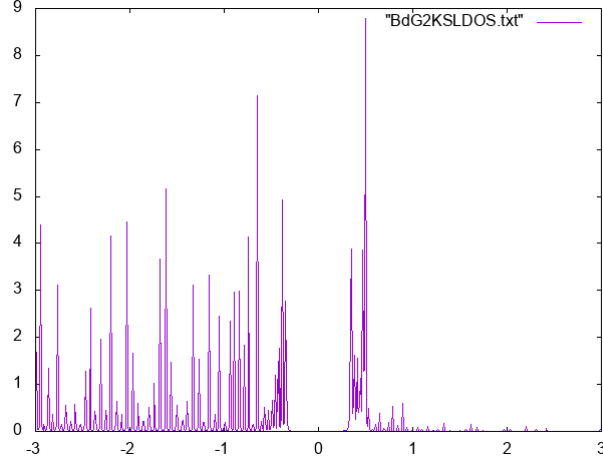


図 6: 内部の状態密度

のようになり、0 付近では (1) と同じように状態がない。

### 2.3 3 の場合

(2) 前回までに行った計算を  $p_x - ip_y$  wave に対して行う。すなわち  $\hat{\Delta}(r)$  を以下のようにする。

$$\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{\partial x + i\partial y}{k_F} \hat{\sigma}_1 \quad (77)$$

このとき

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (78)$$

である。従って

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \frac{\Delta_0}{k_F} \begin{pmatrix} 0 & \partial x + i\partial y \\ \partial x + i\partial y & 0 \end{pmatrix} \\ -\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* \begin{pmatrix} 0 & \partial x - i\partial y \\ \partial x - i\partial y & 0 \end{pmatrix} & \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (79)$$

$$= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \eta \\ 0 & \xi & \eta & 0 \\ 0 & \eta' & -\xi & 0 \\ \eta' & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \quad (80)$$

となる。ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \quad (81)$$

$$\frac{\Delta_0}{k_F}(\partial x + i\partial y) = \eta \quad (82)$$

$$\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* (-\partial x + i\partial y) = \eta' \quad (83)$$

とおいた。前回との違いは  $\eta$  とその中に  $x$  の微分が入っていることなので、この項を検討していく。例えば

$$\psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik_y' y} \eta \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y' y} \quad (84)$$

は

$$\psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik_y' y} \eta \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y' y} = \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik_y' y} \frac{\Delta_0}{k_F} (\partial x + i\partial y) \psi_{\downarrow}^{\dagger} e^{ik_y' y} \quad (85)$$

$$= \left( \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik_y' y} e^{ik_y' y} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\downarrow}^{\dagger} - k_y \psi_{\uparrow}^{\dagger} e^{-ik_y' y} e^{ik_y' y} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \right) \frac{\Delta_0}{k_F} \quad (86)$$

となる。 $\partial x \psi_{\uparrow}$  を中心差分を用いて離散化していく。

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (87)$$

刻み幅 1 で  $x$  を  $i$  で書けば

$$\frac{\partial}{\partial x} f(i) = \frac{f(x+i) - f(x-i)}{2} \quad (88)$$

であるからこれより  $\mathcal{H}$  の前回からの変更点は例えば

$$\mathcal{H} = \int \sum_{i=1}^{L_y+1} \sum_{k_y} \frac{\Delta_0}{k_F} \left\{ \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \frac{1}{2} (\psi_{i+1\downarrow}^{\dagger} - \psi_{i-1\downarrow}^{\dagger}) - k_y \psi_{i\uparrow}^{\dagger} \psi_{i\downarrow}^{\dagger} \right\} \quad (89)$$

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (90)$$

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu \quad (91)$$

$$\frac{\Delta_0}{2k_F} = C \quad (92)$$

$$(93)$$

とすると全体の  $\mathcal{H}$  は行列で書いて三つ分書くと

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -2Ck_y & -\Lambda & 0 & 0 & C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -2Ck_y & 0 & 0 & -\Lambda & C & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2C^*k_y & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -C^* & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2C^*k_y & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & -C^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & -C & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -2Ck_y & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Lambda & -C & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -2Ck_y & 0 & 0 & -\Lambda & C & 0 \\ 0 & C^* & \Lambda & 0 & 0 & -2C^*k_y & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -C^* & \Lambda & 0 \\ C^* & 0 & 0 & \Lambda & -2C^*k_y & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & -C^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -C & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -C & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -2Ck_y & -\varepsilon_{k_y} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C^* & \Lambda & 0 & 0 & -2C^*k_y & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C^* & 0 & 0 & \Lambda & -2C^*k_y & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (94)$$

となる。ここから  $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。また  $k_F$  は

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad (95)$$

から求める。先と同様に  $\mathcal{H}$  を数値計算で対角化していく。この時  $\mu = 3.5, \lambda = 1.0, \Delta = 1.0$  とした。  $N = 100$ 、  $k_y$  を横軸として変化させて縦軸に固有値をプロットし分散関係を描いた。結果は以下ようになった。

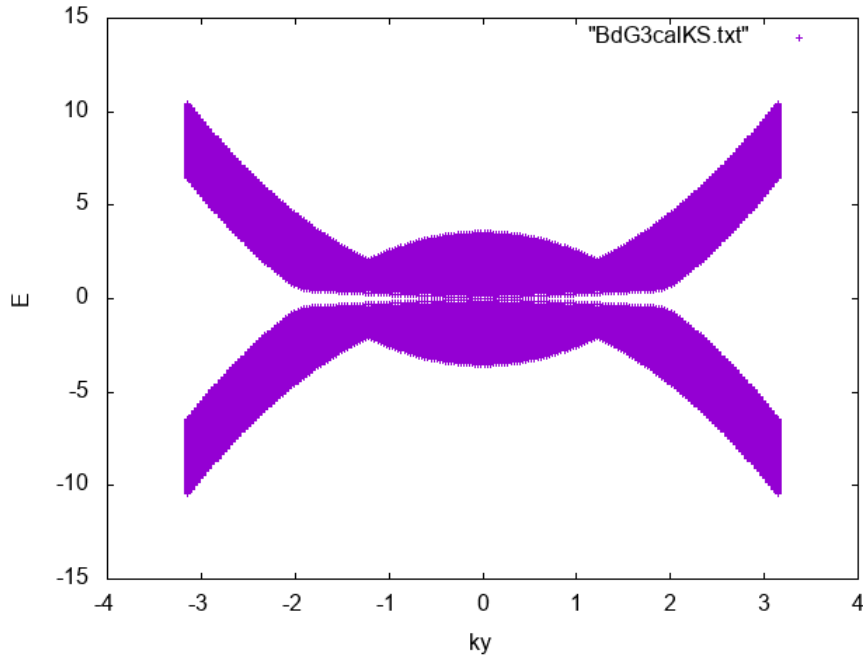


図 7: 分散関係

拡大すると分かるように上と下から一本ずつ線が出て交わり、反対側に行っていることが分かる。  
次にグリーン関数を用いて状態密度を求めた。

次に  $E$  を  $-3 \sim 3$  で動かして  $\rho$  をプロットした。この時  $\delta = 10^{-3}$ 、 $k_y = \frac{\pi}{4}$  とした。以下に結果を示す。内部について

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{201,202} + G_{202,202}) \quad (96)$$

で求めると

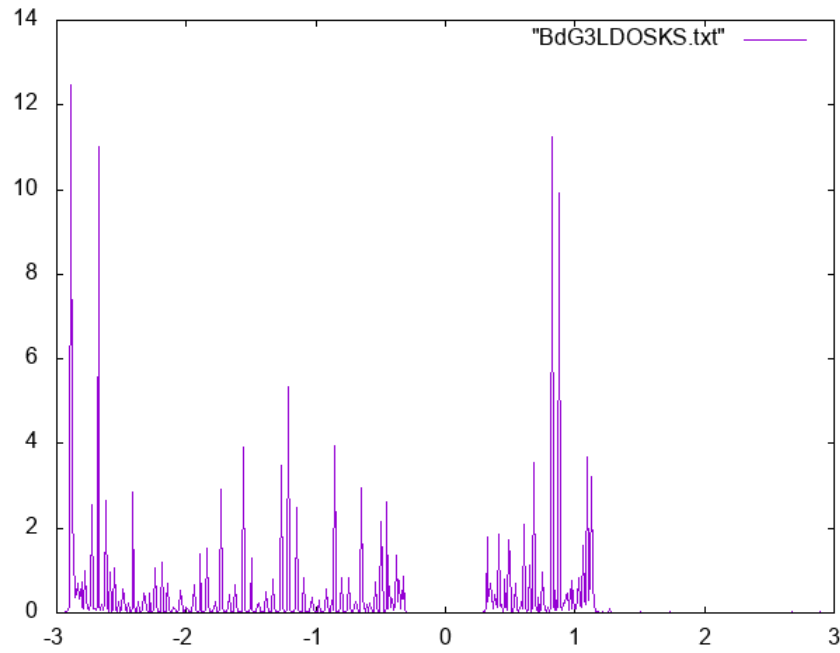


図 8: 内部の状態密度

のようになり、0 付近では (1) と同じように状態がない。また表面は以下のような結果となった。



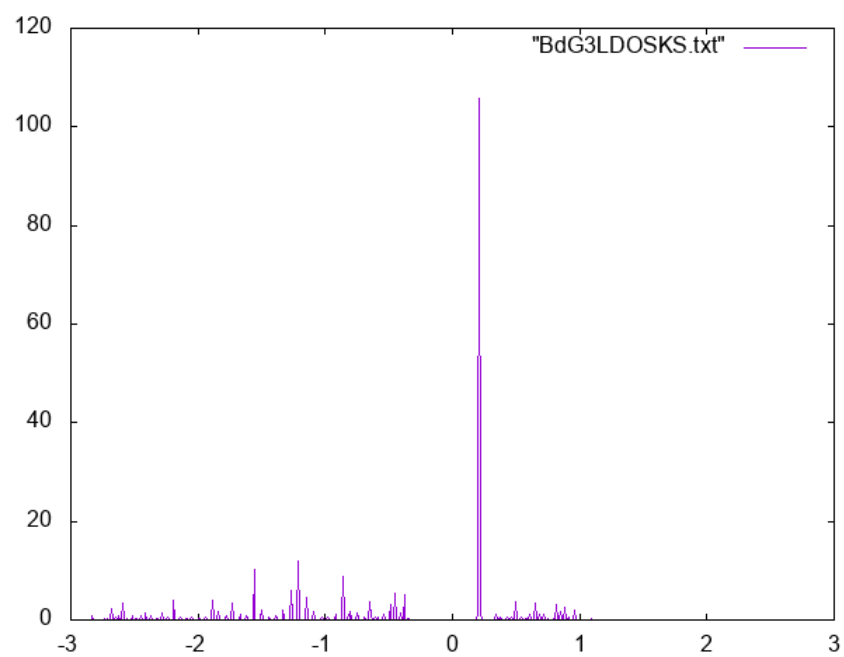


図 9: 表面の状態密度：左端

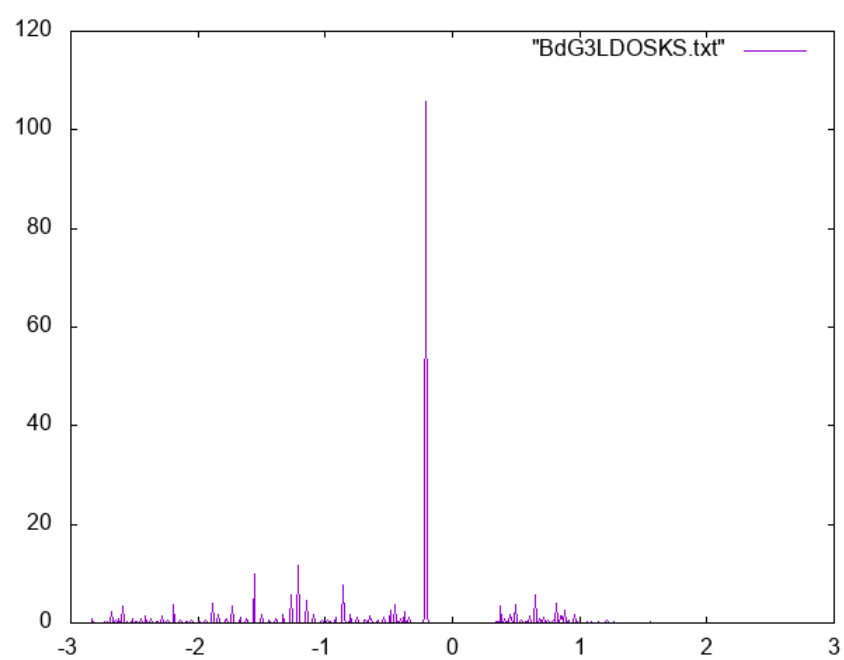


図 10: 表面の状態密度：右端

ここからエネルギーが  $-1 \sim 1$  では状態があることが分かる。これは（１）の結果とは異なる点である。  
 また図 7 を見ると各波数に対して二本の状態密度が出てもいいように思える。しかし実際には一本しか観測されないのは左側と右側それぞれに対して一本ずつあり、図 7 ではそれが合わさって見えるためだと考えられる。それぞれがどのような一本かを見るため  $k_y = -\frac{\pi}{4}$  としてプロットした。すると左側では以下ようになった。

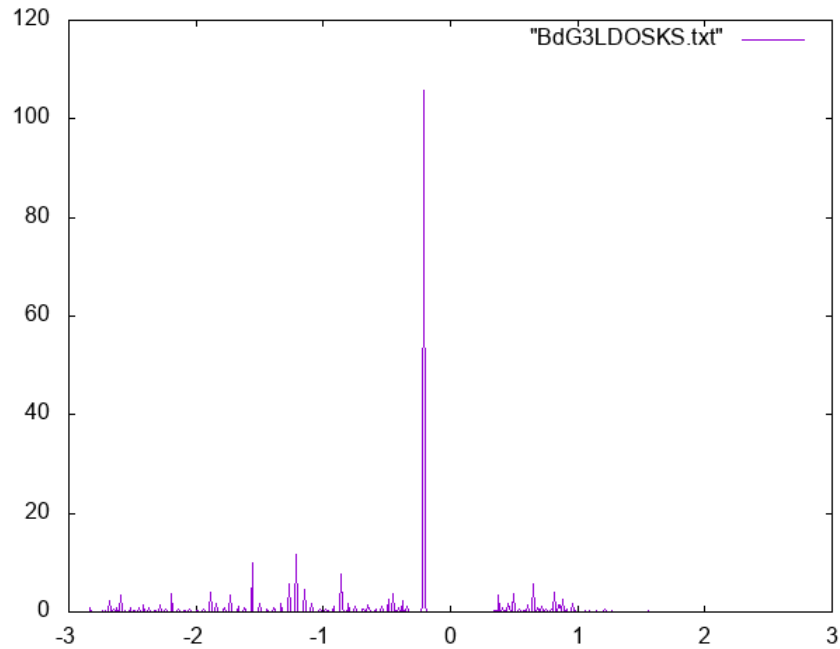


図 11: 表面の状態密度：左端

すなわち、左側の状態では左下から右上に直線的に伸びていることが分かった。