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

に

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

を代入していく。ここで

$$\vec{\Psi}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L_y}}\sum_{k_y'}\vec{\Psi}^\dagger_{k_y'}(x)e^{-ik_y' y} \tag{3}$$

であるから

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

$$= \frac{1}{L_y}\underline{\int \sum_{k_y'}\vec{\Psi}^\dagger_{k_y}(x)e^{-ik_y y}\hat{H}\sum_{k_y}\vec{\Psi}_{k_y}(x)e^{ik_y y}(x,y)dr} \tag{5}$$

$$\tag{6}$$

となる。下線部について計算していく。

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

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

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

$$\hat{\sigma_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{\sigma_2} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

である。

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

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

ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \tag{12}$$

とした。式 6 の下線部は

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

第一項について

$$\int \sum_{k_y}\sum_{k_y'} \psi_\uparrow^\dagger e^{-ik_y' y}(\xi\psi_\uparrow e^{ik_y y} + \Delta_0^*\psi_\downarrow^\dagger e^{ik_y y})dxdy \tag{14}$$

$$= \int \sum_{k_y}\sum_{k_y'} \psi_\uparrow^\dagger e^{-ik_y' y}[(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F)\psi_\uparrow e^{ik_y y} + \Delta_0^*\psi_\downarrow^\dagger e^{ik_y y}]dxdy \tag{15}$$

$$\tag{16}$$

∇^2 の計算を行う。

$$\begin{aligned}
\nabla^2\psi_\uparrow e^{ik_y y} &= (\partial x^2 + \partial y^2)\psi_\uparrow e^{ik_y y} &(17)\\
&= \partial x^2\psi_\uparrow e^{ik_y y} + \partial y^2\psi_\uparrow e^{ik_y y} &(18)\\
&= e^{ik_y y}\partial x^2\psi_\uparrow - k_y^2 e^{ik_y y}\psi_\uparrow &(19)
\end{aligned}$$

であるから

$$\int \sum_{k_y}\sum_{k_y'} \psi_\uparrow^\dagger e^{-ik_y' y}\Big[\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - k_y^2) - \mu_F\}\psi_\uparrow e^{ik_y y} + \Delta_0^*\psi_\downarrow^\dagger e^{ik_y y}\Big]dxdy \tag{20}$$

ここで

$$\int \sum_{k_y}\sum_{k_y'} \psi^\dagger e^{-ik_y' y} e^{ik_y y}\psi dy = L_y \sum_{k_y} \psi^\dagger\psi \tag{21}$$

を用いて

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

従って $\mathcal{H}$ は

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

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

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

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

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

$$\int dx \to \sum_{i=1}^{L_y+1} \Delta x = \sum_{i=1}^{L_y+1} \tag{27}$$

となる。また波動関数を

$$\psi(x) \to \psi_i \tag{28}$$

と離散化する。すると $\mathcal{H}$ は

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

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

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

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

刻み幅 1 で x を i で書けば

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

これより $\mathcal{H}$ は

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

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{34}$$

とおいた。

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

とすると全体の $\mathcal{H}$ は行列で書けて

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix}
\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 \\
0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\
0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & \varepsilon_{k_y} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y}
\end{bmatrix} \tag{36}$$