

## 第I部

# BdG モデルハミルトニアンについて

## 1 定義

BdG モデルハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は以下のように表される。

$$\mathcal{H} = \int \vec{\Psi}^\dagger \tilde{H} \vec{\Psi} dr \quad (1)$$

$$\int dr = \int dxdy \quad (2)$$

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

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

$$\hat{h} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right] \hat{\sigma}_0 \quad (5)$$

$$(\hat{\sigma}_0 : \text{単位行列}) \quad (6)$$

$$\hat{\Delta}(r) = \begin{cases} \Delta_0 (i\hat{\sigma}_2) & \text{s-wave} \\ \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \hat{\sigma}_1 & p_x\text{-wave} \\ \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2) & p_x + ip_y \end{cases} \quad (7)$$

$$\vec{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y} \quad (8)$$

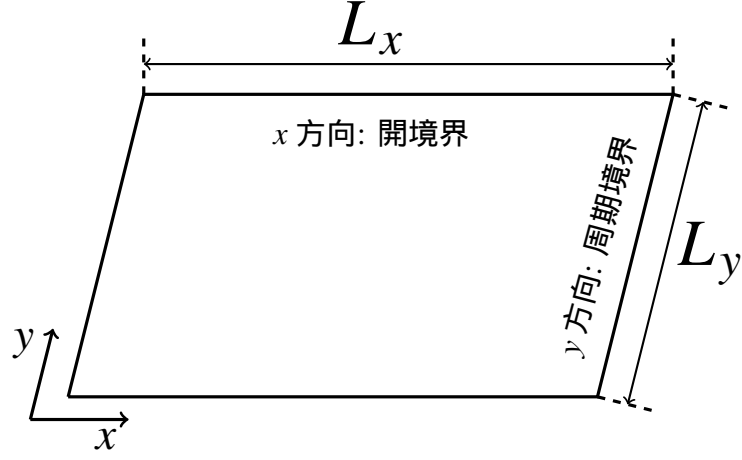


図1 考える系

## 2 問題

### 2.1 ハミルトニアン $\mathcal{H}$ をフーリエ変換せよ

式 (1) に式 (8) を代入して計算していく。

ここで

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (9)$$

とする。

#### 2.1.1 s-wave のとき

このとき、 $\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 (i\hat{\sigma}_2)$  となるため、

$$\mathcal{H} = \int \int \left( \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \right) \tilde{H} \left( \frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} \right) dx dy \quad (10)$$

よって、ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  は、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \quad (11)$$

これを、式 (10) に代入して計算していく。

このとき、

$$\begin{aligned}
\vec{\Psi}_{k_y}^\dagger(x) e^{-ik_y y} \tilde{H} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} &= e^{-ik_y y} \left[ \Psi_\uparrow^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right) + \Psi_\downarrow^\dagger \Delta_0^* \right] \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \\
&+ e^{-ik_y y} \left[ \Psi_\downarrow^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F \right) - \Psi_\uparrow^\dagger \Delta_0^* \right] \Psi_\downarrow e^{ik'_y y} \\
&+ e^{-ik_y y} \left[ -\Psi_\downarrow \Delta_0 + \Psi_\uparrow \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\uparrow^\dagger e^{ik'_y y} \\
&+ e^{-ik_y y} \left[ \Psi_\uparrow \Delta_0 + \Psi_\downarrow \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\downarrow^\dagger e^{ik'_y y}
\end{aligned} \tag{12}$$

また、

$$\begin{aligned}
&\int \left( \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^\dagger(k) e^{-ik_y y} \Psi(k') e^{ik'_y y} \right) dy \\
&= L_y \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^\dagger(k) \Psi(k') \delta(k - k') \\
&= L_y \sum_{k_y} \Psi^\dagger(k) \Psi(k)
\end{aligned} \tag{13}$$

$$\nabla^2 \left[ \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left( -k_y^2 \Psi e^{ik'_y y} + e^{ik'_y y} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) \tag{14}$$

から、式 (10) は、

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} &\left[ \Psi_\uparrow^\dagger \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\uparrow + \Psi_\uparrow^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\uparrow + \Psi_\downarrow^\dagger \Delta_0^* \Psi_\uparrow \right. \\
&\left. + \Psi_\downarrow^\dagger \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\downarrow + \Psi_\downarrow^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\downarrow - \Psi_\uparrow^\dagger \Delta_0^* \Psi_\downarrow \dots \right]
\end{aligned} \tag{15}$$

### 2.1.2 $P_x$ -wave のとき

今度は、 $\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\partial x + i \partial y) \hat{\sigma}_1$  のときを考える。

ハミルトニアンの式は、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \frac{i \partial x}{k_F} \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & \Delta_0 \frac{i \partial x}{k_F} & 0 \\ 0 & \Delta_0^* \frac{i \partial x}{k_F} & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F & 0 \\ \Delta_0^* \frac{i \partial x}{k_F} & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \tag{16}$$

これを、式 (10) に代入して計算していく。

以下

$$\eta = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \quad (17)$$

$$\eta' = \Delta_0^* \frac{i\partial x}{k_F} \quad (18)$$

とする。

最初のものと同様に計算し、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} & \left[ \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \eta \Psi_{\uparrow} \right. \\ & \left. + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} - \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \eta \Psi_{\downarrow} \dots \right] \end{aligned} \quad (19)$$

### 2.1.3 $P_x + iP_y$ のとき

今度は、 $\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\partial x + i\partial y) \hat{\sigma}_1$  のときを考える。

ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\partial x + i\partial y) \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \mu_F & \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\partial x + i\partial y) & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* \frac{1}{k_f} (\partial x - i\partial y) & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F & 0 \\ -\Delta_0^* \frac{1}{k_f} (\partial x - i\partial y) & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \quad (20)$$

以下

$$\xi = \Delta_0 \frac{1}{k_f} \quad (21)$$

$$\xi' = \Delta_0^* \frac{1}{k_f} \quad (22)$$

とする

最初のものと同様に計算し、

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} & \left[ \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \xi (\partial x - k_y) \Psi_{\uparrow} \right. \\ & \left. + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left( \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \xi (\partial x - k_y) \Psi_{\downarrow} \dots \right] \end{aligned} \quad (23)$$

## 2.2 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、

$$\Psi(x+h) = \Psi(x) + h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \quad (24)$$

$$\Psi(x-h) = \Psi(x) - h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \quad (25)$$

よって、差分近似は式 (24), 式 (25) の方程式で求めることができ、刻み幅  $h = 1$  とすると、

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \frac{\Psi(x+1) - \Psi(x-1)}{2} \quad (26)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = \Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1) \quad (27)$$

### 2.3 x を離散化せよ

式 (27) を式 (19) 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。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \vdots \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm 1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow}(x \pm 1) \quad (28)$$

#### 2.3.1 s-wave のとき

代入した式は、

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

$N = 3$  と置くとき、ハミルトニアンを 2 次形式で表すと、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & -\Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (30)$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu_F \quad (31)$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (32)$$

とおく

### 3 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。

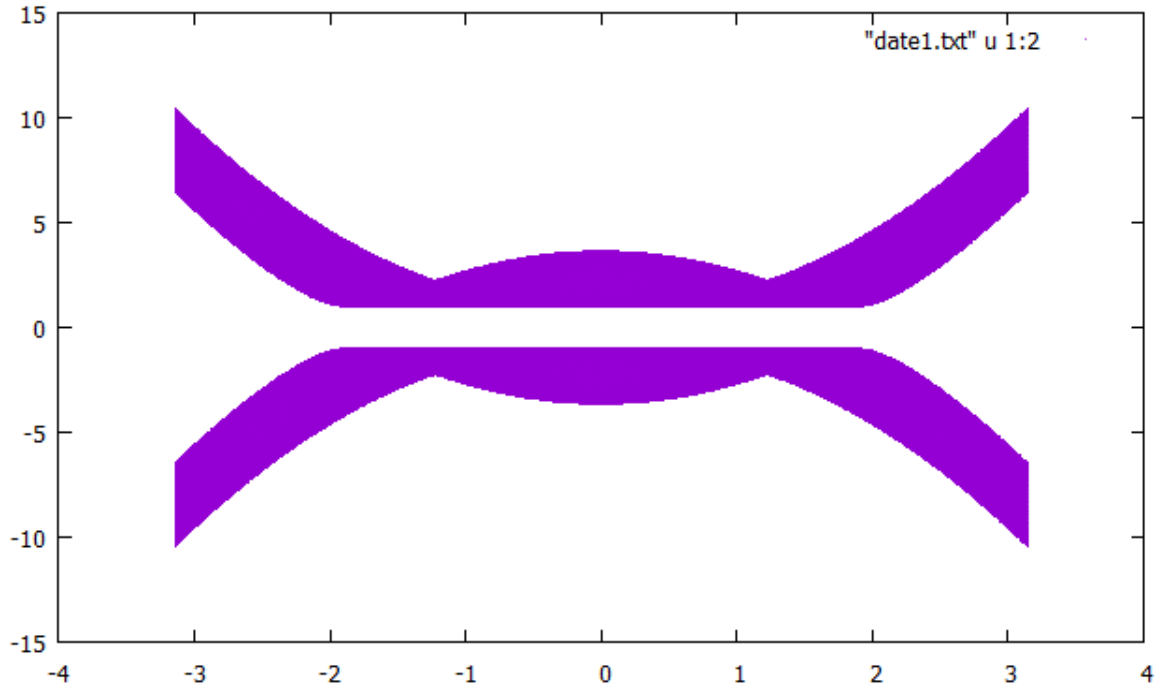


図2 分散関係

次に、グリーン関数を用いて状態密度を求める。グリーン関数

$$G = (E + i\delta - H)^{-1} \quad (33)$$

式 (33) を用いると、表面の状態密度は

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{11} + G_{22}) \quad (34)$$

で表される。 $E$  を  $-3$  から  $3$  の範囲で動かし、 $\rho$  をプロットした。このとき  $\delta = 10^{-3}$  とした。結果を以下に示す。

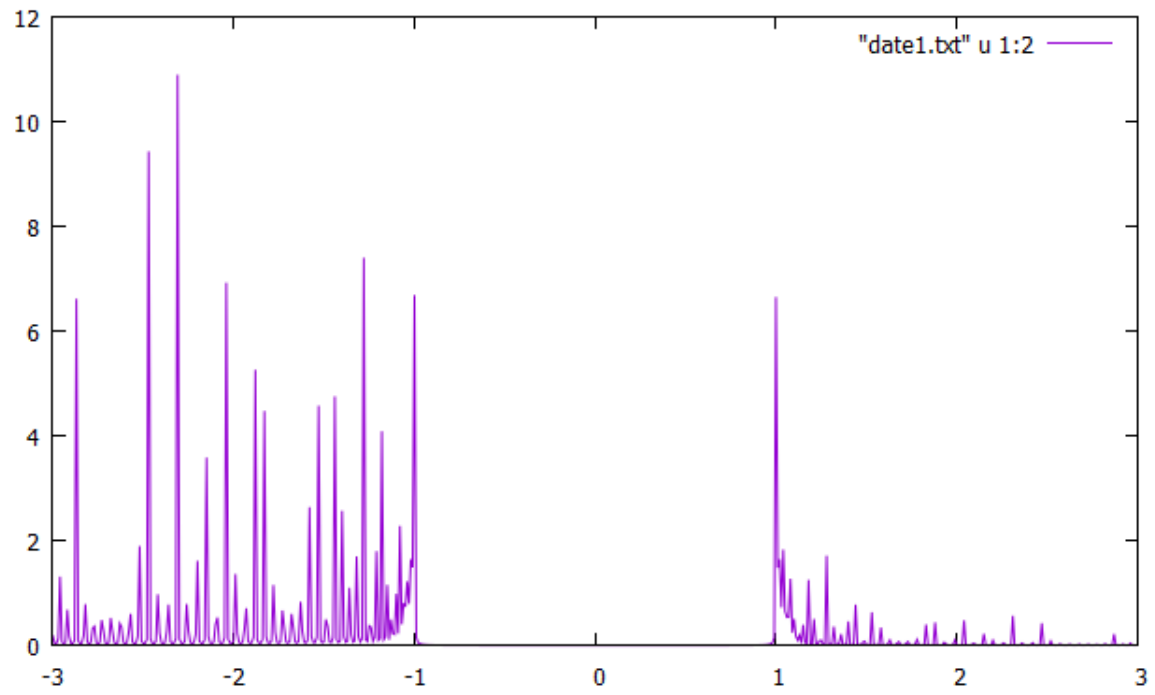


図 3 状態密度

図 (3) から、エネルギーが  $-1$  から  $1$  の範囲では状態がないことが分かる。