第 I 部

BdG モデルハミルトニアンについて test

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、$\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{1}{k_f} (\partial x + i\partial y) \hat{\sigma}_1$ 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、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \frac{1}{k_f}(\partial x + i\partial y) \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F & \Delta_0 \frac{1}{k_f}(\partial x + i\partial y) & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* \frac{1}{k_f}(\partial x - i\partial y) & \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F & 0 \\ -\Delta_0^* \frac{1}{k_f}(\partial x - i\partial y) & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \tag{3}$$

これを、式 (1) に代入して計算していく。

(ここまで 6/21)
以下

$$\eta = \Delta_0 \frac{1}{k_f} \tag{4}$$

$$\eta' = \Delta_0^* \frac{1}{k_f} \tag{5}$$

とする

このとき、

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

また、

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

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

から、式 (1) は、

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

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。

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

このとき、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、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Psi^{\dagger}_{1\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi^{\dagger}_{2\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{2\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi^{\dagger}_{3\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{3\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -k_y\eta & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -k_y\eta & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & \zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -k_y\eta^{'} & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -\zeta^{'} & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -k_y\eta^{'} & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & -\zeta^{'} & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -k_y\eta & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & \zeta \\ 0 & -\mathit{\Lambda} & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -k_y\eta & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & \zeta & 0 \\ 0 & \zeta^{'} & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -k_y\eta^{'} & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -\zeta^{'} & \mathit{\Lambda} & 0 \\ \zeta^{'} & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & -k_y\eta^{'} & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & -\zeta^{'} & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -\zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & -k_y\eta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\mathit{\Lambda} & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -k_y\eta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta^{'} & \mathit{\Lambda} & 0 & 0 & -k_y\eta^{'} & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \zeta^{'} & 0 & 0 & \mathit{\Lambda} & -k_y\eta^{'} & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi^{\dagger}_{1\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{1\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi^{\dagger}_{2\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{2\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \\ \Psi^{\dagger}_{3\uparrow} \\ \Psi^{\dagger}_{3\downarrow} \end{bmatrix} \tag{15}$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2 + 2) - \mu_F \tag{16}$$

$$\mathit{\Lambda} = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{17}$$

$$\zeta = \frac{\Delta_0}{2k_F} \tag{18}$$

$$\zeta^{'} = \frac{\Delta_0^*}{2k_F} \tag{19}$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{20}$$

$$\eta = \Delta_0 \frac{1}{k_f} \tag{21}$$

$$\eta^{'} = \Delta_0^* \frac{1}{k_f} \tag{22}$$

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。