BdGハミルトニアン

金沢彰太郎

平成30年6月22日

目次

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。

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

ここで

$$\int dr = \int dxdy \tag{2}$$

である。

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

ハミルトン演算子は次のようである。

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

ただし

$$\hat{H} \in \mathbb{C}^{4\times 4} \tag{5}$$

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

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

$\hat{\sigma}_0$: 単位行列

$$\nabla^2 = \partial x^2 + \partial y^2 \tag{8}$$

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

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

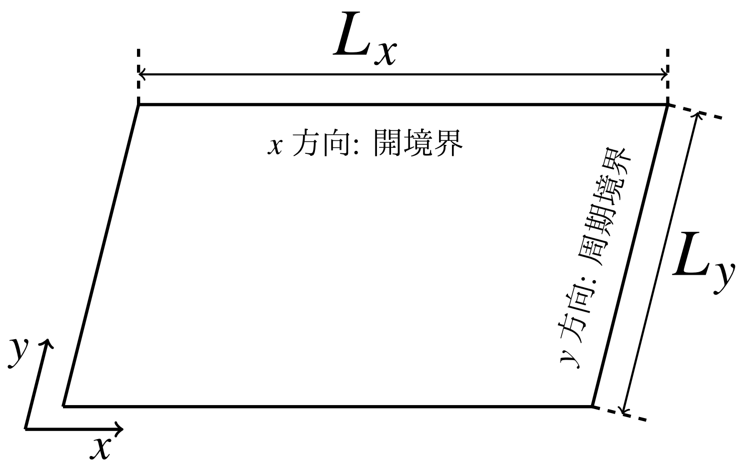

図 1: 考える系

図 1 の系を考える。y 方向には境界条件が課されている。

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

1.(i) の $\hat{\Delta}$ を使う
①H 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

$$\mathcal{H} \to \tilde{\mathcal{H}} \tag{11}$$

$$\tilde{\mathcal{H}} = \vec{\Psi} \hat{H} \vec{\Psi} \tag{12}$$

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

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{H} & & & \\ & \hat{H} & & \\ & & \hat{H} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{14}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} = t \tag{15}$$

とする。
③ 差分近似しましょう

$$\partial_x \psi_i \to ? \tag{16}$$
$$\partial_x^2 \psi_i \to ? \tag{17}$$
$$\tag{18}$$

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

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

に

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

を代入していく。ここで

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

であるから

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

$$= \frac{1}{L_y} \underline{\int \sum_{k_y'} \vec{\Psi}^\dagger_{k_y'}(x) e^{-ik_y' y} \hat{H} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}(x) e^{ik_y y}(x, y) dr} \tag{23}$$

$$\tag{24}$$

となる。下線部について計算していく。

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

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

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

$$\hat{\sigma_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{\sigma_2} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{27}$$

である。

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

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

ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \tag{30}$$

とした。式 24 の下線部は

$$\int \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow^\dagger e^{-ik'_y y} & \psi_\downarrow^\dagger e^{-ik'_y y} & \psi_\uparrow e^{-ik'_y y} & \psi_\downarrow e^{-ik'_y y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & \xi & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\xi & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \psi_\uparrow e^{ik_y y} \\ \psi_\downarrow e^{ik_y y} \\ \psi_\uparrow^\dagger e^{ik_y y} \\ \psi_\downarrow^\dagger e^{ik_y y} \end{bmatrix} dxdy$$

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

第一項について

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

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

$$\tag{34}$$

∇^2 の計算を行う。

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi_\uparrow e^{ik_y y} &= (\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi_\uparrow e^{ik_y y} && (35) \\ &= \partial_x^2 \psi_\uparrow e^{ik_y y} + \partial_y^2 \psi_\uparrow e^{ik_y y} && (36) \\ &= e^{ik_y y}\partial_x^2 \psi_\uparrow - k_y^2 e^{ik_y y}\psi_\uparrow && (37) \end{aligned}$$

であるから

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

ここで

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

を用いて

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

従って $\mathcal{H}$ は

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

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

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

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

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

$$\int dx \to \sum_{i=1}^{L_y+1} \Delta x = \sum_{i=1}^{L_y+1} \tag{45}$$

となる。また波動関数を

$$\psi(x) \to \psi_i \tag{46}$$

と離散化する。すると $\mathcal{H}$ は

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

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

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。

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

刻み幅 1 で x を i で書けば

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

これより $\mathcal{H}$ は

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

ここで

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{52}$$

とおいた。

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

とすると全体の $\mathcal{H}$ は行列で書けて三つ分書くと

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

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。$N = 1000$、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。

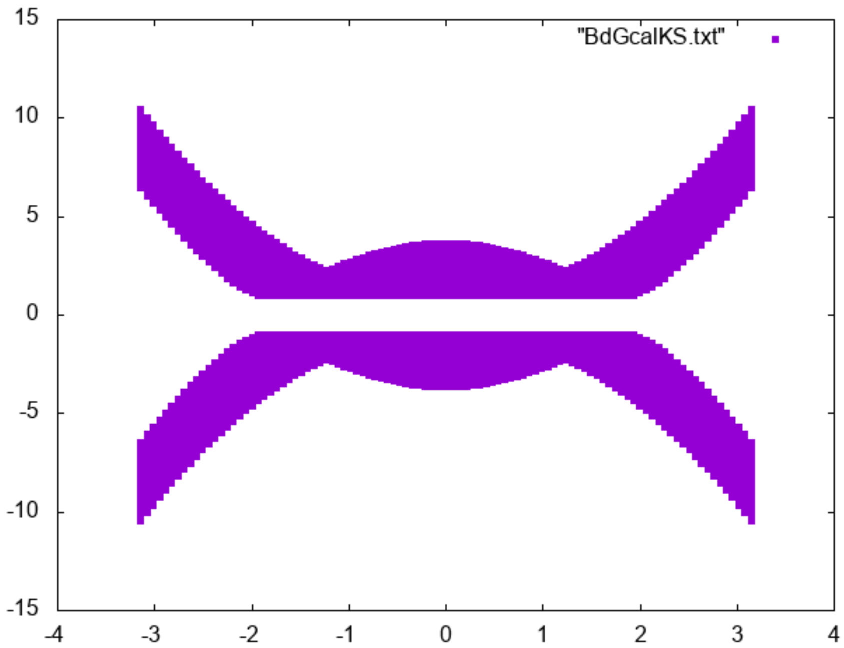

図 2: 分散関係

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

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

であり、表面の状態密度は

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

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

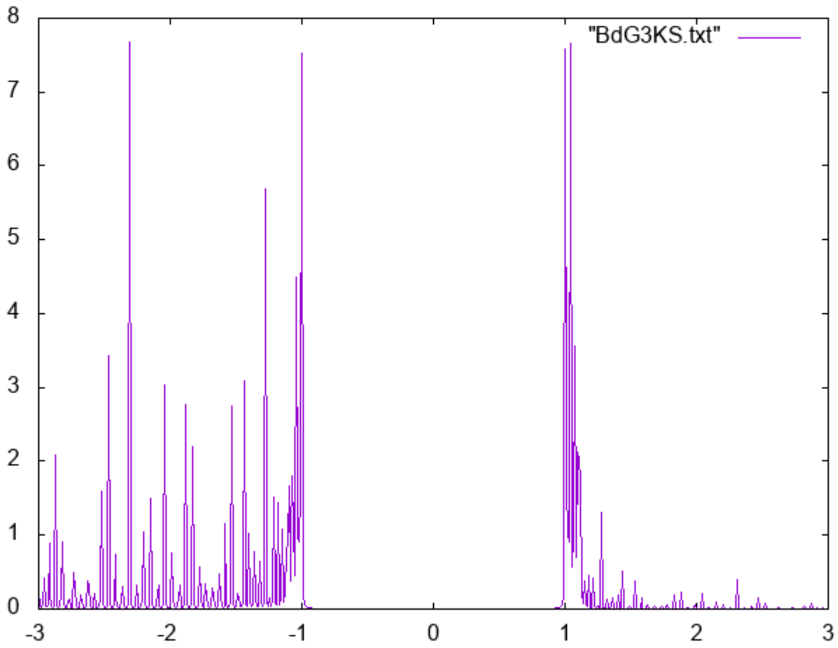

図 3: 状態密度

ここからエネルギーが -1〜1 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。

$$\hat{\Delta}(r) = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \hat{\sigma}_1 \tag{57}$$

このとき

$$\hat{\sigma_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{58}$$

である。従って

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

$$
= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \eta \\ 0 & \xi & \eta & 0 \\ 0 & \eta^{'} & -\xi & 0 \\ \eta^{'} & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \tag{60}
$$

となる。ここで

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F = \xi \tag{61}
$$

$$
\frac{\Delta_0}{k_F} i\partial x = \eta \tag{62}
$$

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

とおいた。前回との違いは η 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

$$
\psi_{\downarrow} e^{-ik_y^{'} y} \eta \psi_{\uparrow} e^{ik_y^{'} y} \tag{64}
$$

は

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

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

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

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

刻み幅 1 で x を i で書けば

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

であるからこれより $\mathcal{H}$ は

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

ここで

$$
\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{70}
$$

とおいた。

$$
\begin{align}
\varepsilon_{k_y} &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_y^2+2)-\mu \tag{71}\\
\frac{\Delta_0}{2k_F}i &= \zeta \tag{72}\\
\left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^* i &= \zeta^{'} \tag{73}
\end{align}
$$

とすると全体の $\mathcal{H}$ は行列で書けて三つ分書くと

$$
\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \psi^\dagger_{1\uparrow} \\ \psi^\dagger_{1\downarrow} \\ \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi^\dagger_{2\uparrow} \\ \psi^\dagger_{2\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi^\dagger_{3\uparrow} \\ \psi^\dagger_{3\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T
\begin{bmatrix}
\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\Lambda & 0 & 0 & \zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\zeta \\
0 & -\Lambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 \\
0 & -\zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \zeta^* & \Lambda & 0 \\
-\zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & \zeta^* & 0 & 0 & \Lambda \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & \zeta & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & \zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta^* & \Lambda & 0 & 0 & -0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta^* & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \psi_{1\uparrow} \\ \psi_{1\downarrow} \\ \psi^\dagger_{1\uparrow} \\ \psi^\dagger_{1\downarrow} \\ \psi_{2\uparrow} \\ \psi_{2\downarrow} \\ \psi^\dagger_{2\uparrow} \\ \psi^\dagger_{2\downarrow} \\ \psi_{3\uparrow} \\ \psi_{3\downarrow} \\ \psi^\dagger_{3\uparrow} \\ \psi^\dagger_{3\downarrow} \end{bmatrix} \tag{74}
$$

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

$$
\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{75}
$$

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。$N = 1000$、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。

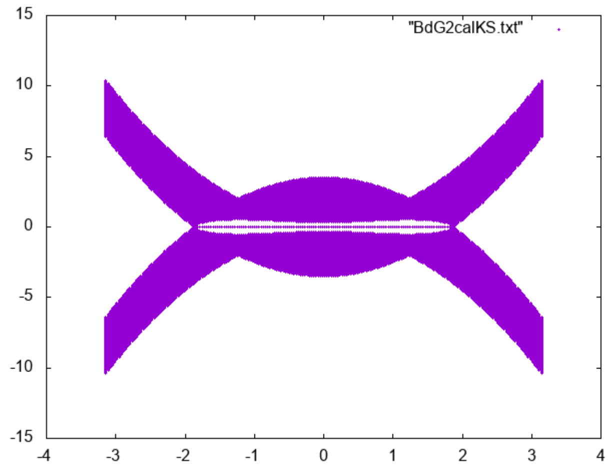

図 4: 分散関係

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

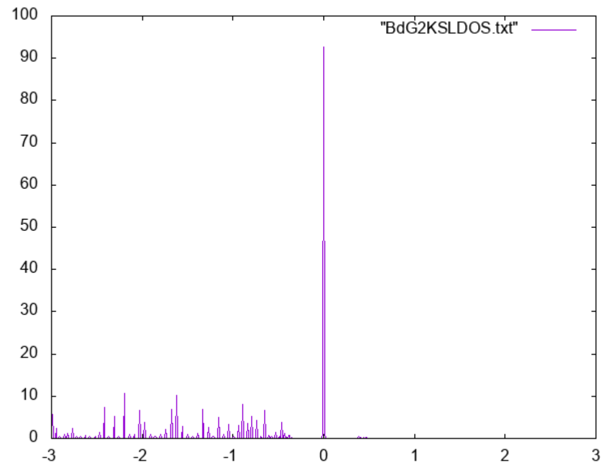

図 5: 表面の状態密度

ここからエネルギーが -1〜1 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

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

で求めると

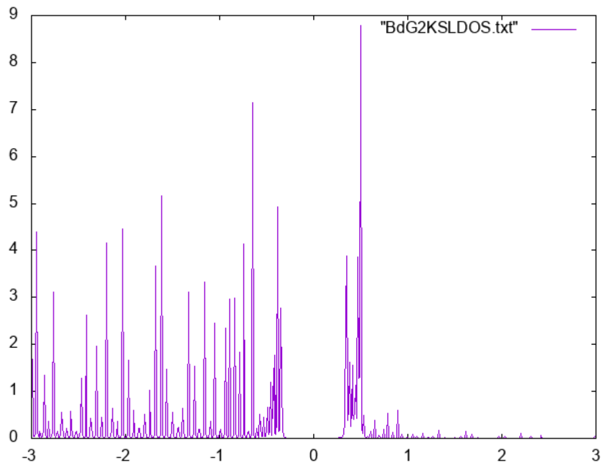

図 6: 内部の状態密度

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。

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

このとき

$$\hat{\sigma_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{78}$$

である。従って

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

$$= \begin{pmatrix} \xi & 0 & 0 & \eta \\ 0 & \xi & \eta & 0 \\ 0 & \eta^{'} & -\xi & 0 \\ \eta^{'} & 0 & 0 & -\xi \end{pmatrix} \tag{80}$$

となる。ここで

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\mu_F=\xi \tag{81}$$

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

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

とおいた。前回との違いは η 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

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

は

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

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

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

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

刻み幅 1 で x を i で書けば

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

であるからこれより $\mathcal{H}$ の前回からの変更点は例えば

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

ここで

$$\Lambda=\frac{\hbar^2}{2m} \tag{90}$$

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

$$\frac{\Delta_0}{2k_F}=C \tag{92}$$

$$\tag{93}$$

とすると全体の $\mathcal{H}$ は行列で書けて三つ分書くと

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

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

$$\mu=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m} \tag{95}$$

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。$N=1000$、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。

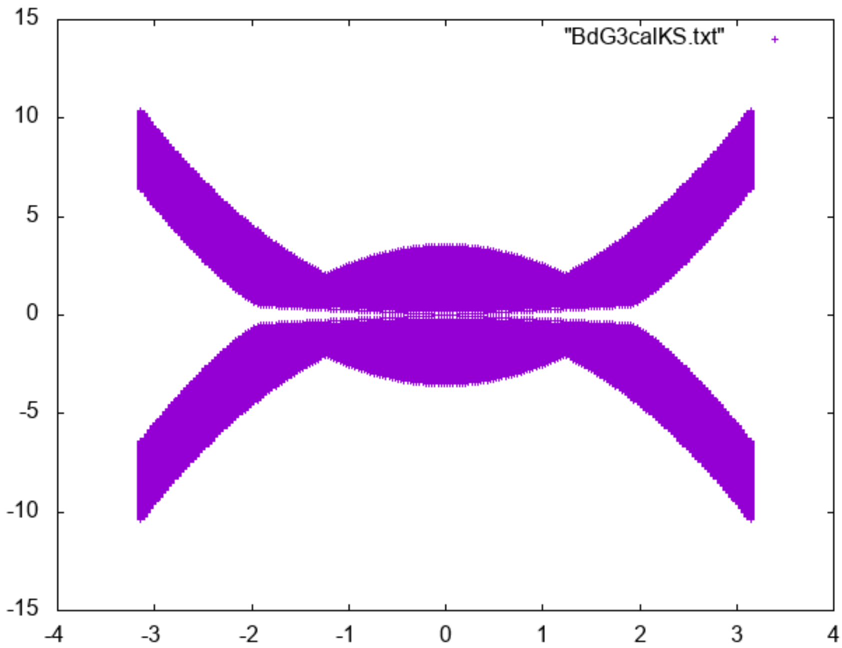

図 7: 分散関係

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 ρ をプロットした。この時 $\delta = 10^{-3}$、$k_y = \dfrac{\pi}{4}$ とした。以下に結果を示す。内部について

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

で求めると

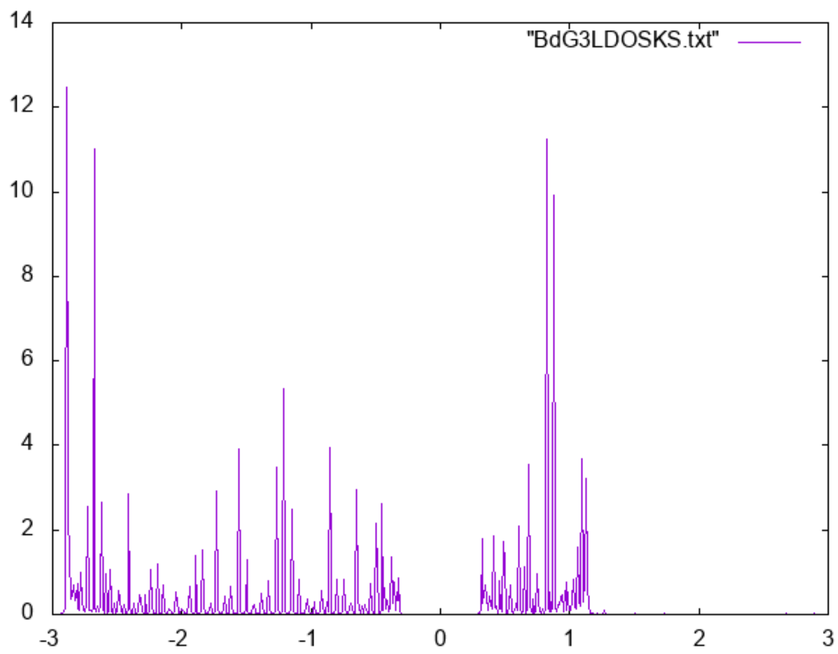

図 8: 内部の状態密度

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。

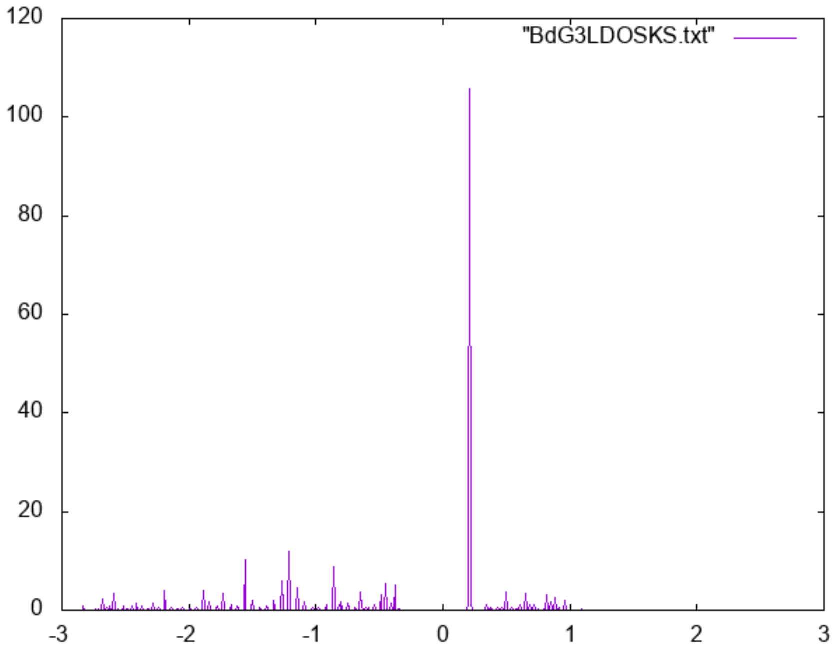

図 9: 表面の状態密度：左端

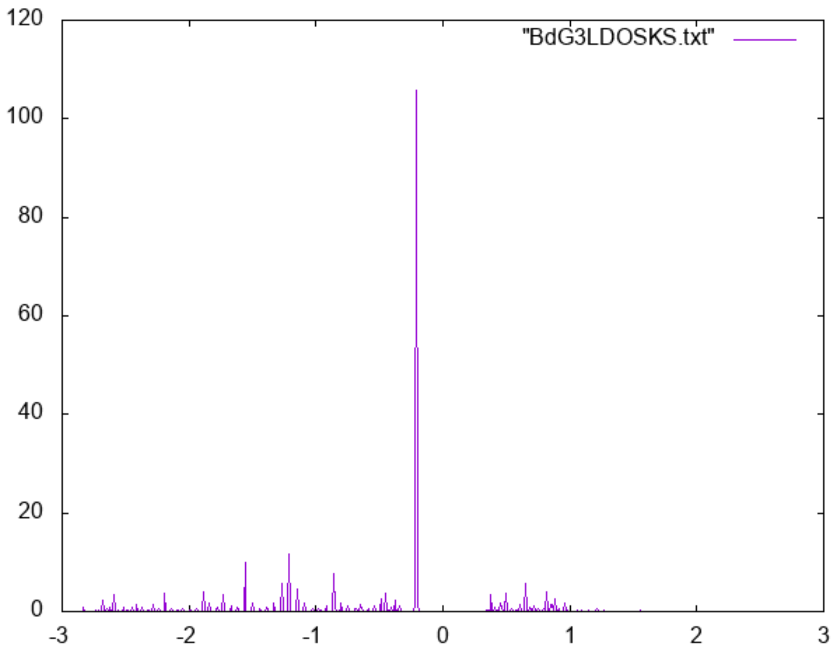

図 10: 表面の状態密度：右端

ここからエネルギーが -1〜1 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のようになった。

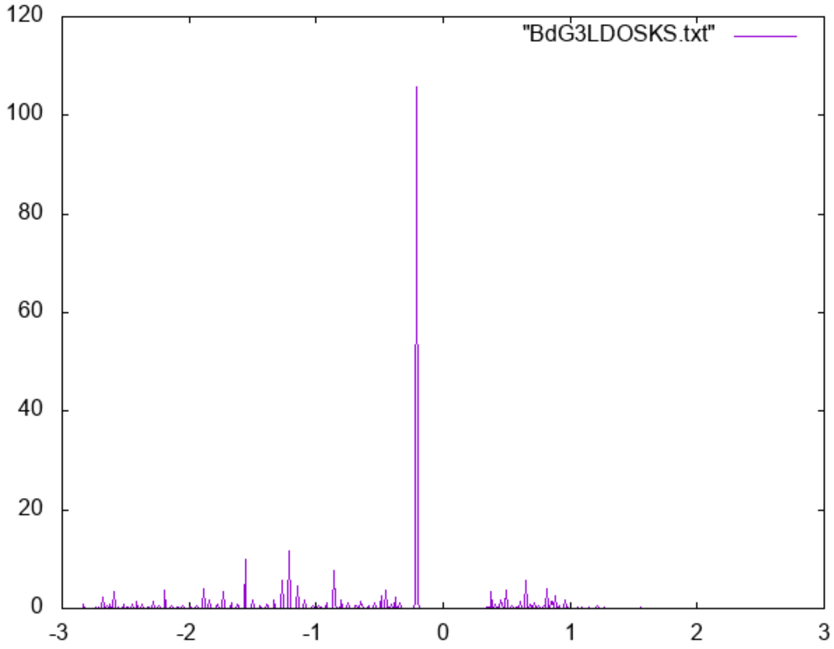

図 11: 表面の状態密度：左端

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。