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。

$$\mathcal{H} = \int \vec{\Psi}^{\dagger} \tilde{H} \vec{\Psi} dr \tag{1}$$

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

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

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

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

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

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

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

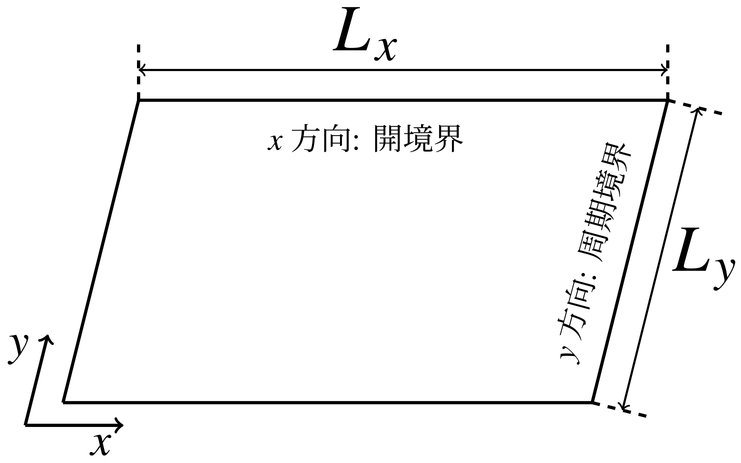

図 1　考える系

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。

$$\mathcal{H} = \int\int \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}^{\dagger}_{k_y}(x) e^{-ik_y y} \right) \tilde{H} \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k'_y} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} \right) dxdy \tag{9}$$

ここで

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{10}$$

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{11}$$

$$\hat{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \tag{12}$$

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

より、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は、

$$
\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \end{bmatrix} \tag{14}
$$

これを、式 (9) に代入して計算していく。
このとき、

$$
\begin{aligned}
\vec{\Psi}^\dagger_{k_y}(x) e^{-ik_y y} \tilde{H} \vec{\Psi}_{k'_y}(x) e^{ik'_y y} = e^{-ik_y y} & \left[\Psi^*_\uparrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F \right) + \Psi^*_\downarrow \Delta_0^* \right] \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \\
& + e^{-ik_y y} \left[\Psi^*_\downarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu_F \right) - \Psi^*_\uparrow \Delta_0^* \right] \Psi_\downarrow e^{ik'_y y} \\
& + e^{-ik_y y} \left[-\Psi^*_\downarrow \Delta_0 + \Psi^*_\uparrow \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\uparrow e^{ik'_y y} \\
& + e^{-ik_y y} \left[\Psi^*_\uparrow \Delta_0 + \Psi^*_\downarrow \left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \mu_F \right) \right] \Psi_\downarrow e^{ik'_y y}
\end{aligned} \tag{15}
$$

よって、式 (1) は、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} = \frac{1}{L_y} \int dx \sum_{k_y} & \left[\Psi^*_\uparrow \left(-\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\uparrow + \Psi^*_\uparrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\uparrow + \Psi^*_\downarrow \Delta_0^* \Psi_\uparrow \right. \\
& \left. + \Psi^*_\downarrow \left(-\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_\downarrow + \Psi^*_\downarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_\downarrow - \Psi^*_\uparrow \Delta_0^* \Psi_\downarrow \cdots \right]
\end{aligned} \tag{16}
$$

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、

$$
\Psi(x+h) = \Psi(x) + h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \tag{17}
$$

$$
\Psi(x-h) = \Psi(x) - h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \tag{18}
$$

よって、差分近似は式 (17), 式 (18) の方程式で求めることができ、刻み幅 $h = 1$ とすると、

$$
\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \frac{\Psi(x+1) - \Psi(x-1)}{2} \tag{19}
$$

$$
\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = \Psi(x+1) - 2\Psi(x) + \Psi(x-1) \tag{20}
$$

2.3 x を離散化せよ