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

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

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

第一項について

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

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

$$\tag{16}$$

∇^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

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

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

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

従って $\mathcal{H}$ は

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

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

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

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

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

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

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

ここで $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_{i\uparrow}$ 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

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