

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。

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

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

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

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

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

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

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

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

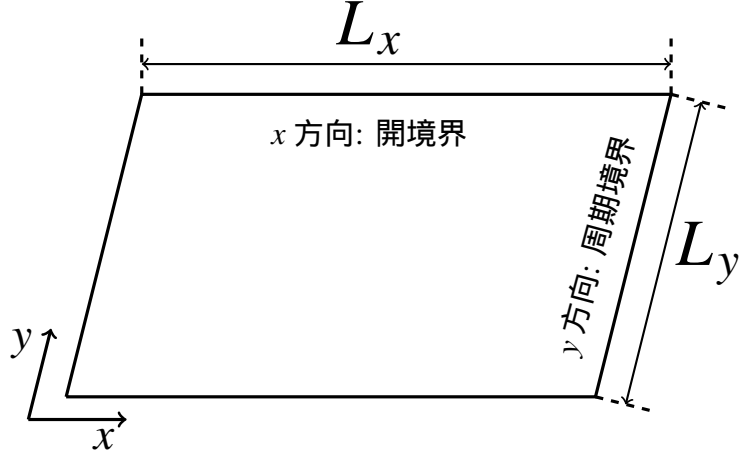


図1 考える系

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。

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

ここで

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

より、ハミルトニアン \mathcal{H} は、

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

これを、式 (9) 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 (9) は、

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

2.2 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、

$$\Psi(x+h) = \Psi(x) + h \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) \tag{16}$$

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

よって、差分近似は式 (16), 式 (17) の方程式で求めることができ、刻み幅 $h = 1$ とすると、

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \frac{\Psi(x+1) - \Psi(x-1)}{2} \tag{18}$$

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

2.3 x を離散化せよ

式 (19) を式 (15) 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。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm 1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow}(x \pm 1) \quad (20)$$

代入した式は、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{k_y} \left[\Psi_{i\uparrow}^\dagger \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{i\uparrow} + \Psi_{i\uparrow}^\dagger (\Psi_{i+1\uparrow}(x) - 2\Psi_{i\uparrow}(x) + \Psi_{i-1\uparrow}(x)) + \Psi_{i\downarrow}^\dagger \Delta_0^* \Psi_{i\uparrow} \cdots \right] \quad (21)$$

$N = 3$ と置くとき、ハミルトニアンを 2 次形式で表すと、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Lambda & \Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & 0 & 0 & \Delta_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{k_y} & -\Delta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & 0 & 0 & -\Delta_0^* & -\varepsilon_{k_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda & -\Delta_0^* & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{1\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \Psi_{2\downarrow} \\ \Psi_{2\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{2\downarrow}^\dagger \\ \Psi_{3\uparrow} \\ \Psi_{3\downarrow} \\ \Psi_{3\uparrow}^\dagger \\ \Psi_{3\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \quad (22)$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu_F \quad (23)$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (24)$$

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。

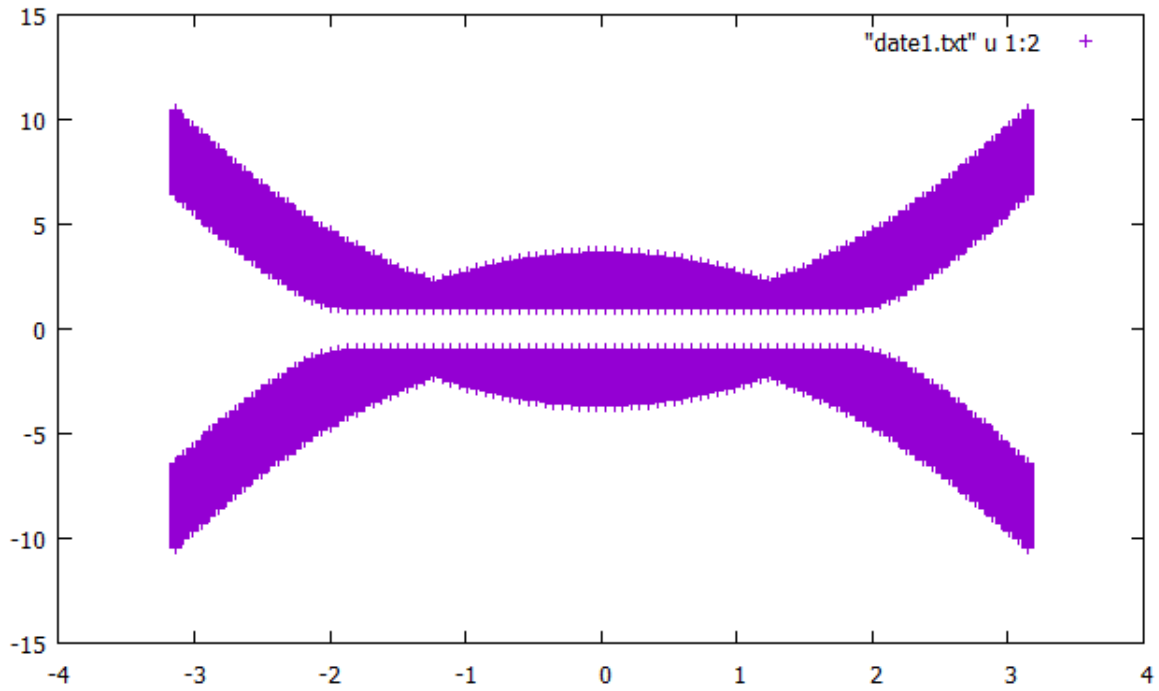


図2 分散関係

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

$$G = (E + i\delta - H)^{-1} \quad (25)$$

式 (25) を用いると、表面の状態密度は

$$\rho = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{11} + G_{22}) \quad (26)$$

で表される。 E を -3 から 3 の範囲で動かし、 ρ 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。

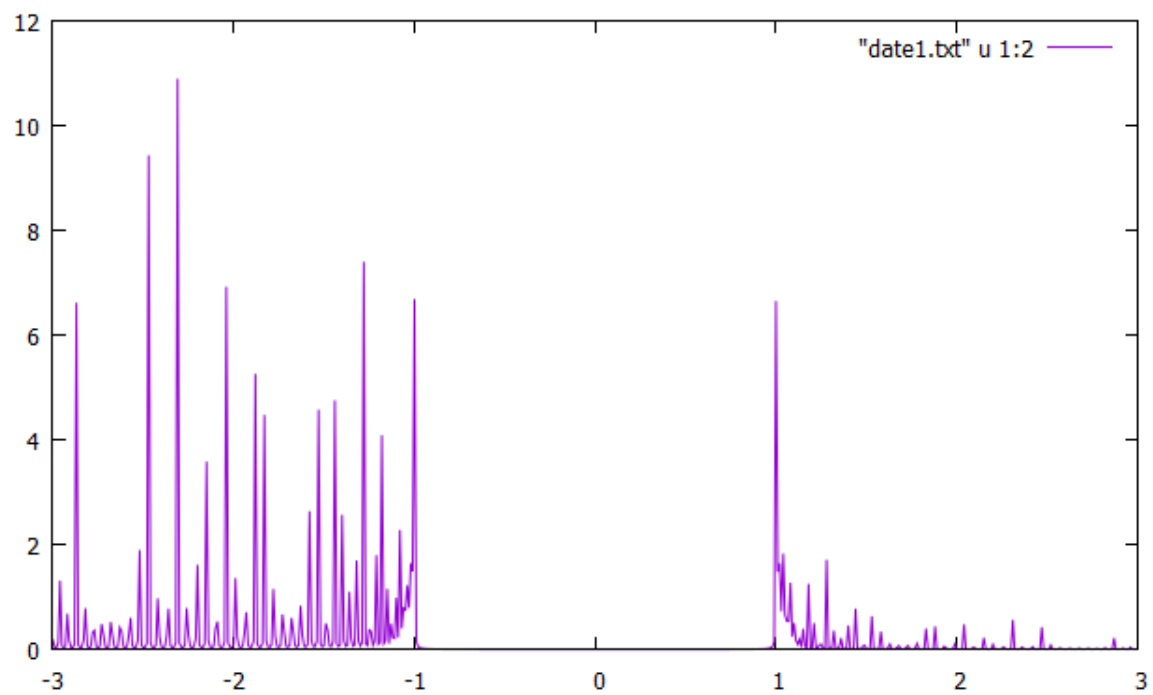


図 3 状態密度

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。