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。

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

$$\int dr = \int dx dy \tag{2}$$

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

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

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

$$(\hat{\sigma}_0: 単位行列) \tag{6}$$

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

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

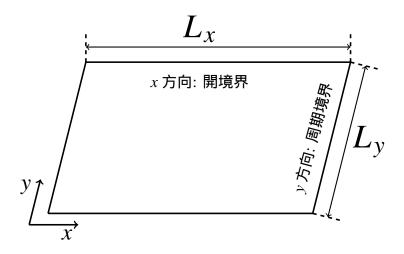


図1 考える系

2 問題

2.1 ハミルトニアン 升 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。 ここで

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \hat{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$
(9)

とする。

2.1.1 s-wave のとき

このとき、 $\hat{\Delta}(r) = \Delta_0(i\hat{\sigma}_2)$ となるため、

$$\mathcal{H} = \int \int \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y} \vec{\Psi}_{k_y}^{\dagger}(x) e^{-ik_y y} \right) \tilde{H} \left(\frac{1}{\sqrt{L_y}} \sum_{k_y'} \vec{\Psi}_{k_y'}(x) e^{ik_y' y} \right) dx dy \tag{10}$$

よって、ハミルトニアン Hは、

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

これを、式 (10) に代入して計算していく。 このとき、

$$\vec{\Psi}_{k_{y}}^{\dagger}(x)e^{-ik_{y}y}\tilde{H}\vec{\Psi}_{k_{y}'}(x)e^{ik_{y}'y} = e^{-ik_{y}y}\left[\Psi_{\uparrow}^{\dagger}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} - \mu_{F}\right) + \Psi_{\downarrow}^{\dagger}\Delta_{0}^{*}\right]\Psi_{\uparrow}e^{ik_{y}'y}$$

$$+e^{-ik_{y}y}\left[\Psi_{\downarrow}^{\dagger}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} - \mu_{F}\right) - \Psi_{\uparrow}^{\dagger}\Delta_{0}^{*}\right]\Psi_{\downarrow}e^{ik_{y}'y}$$

$$+e^{-ik_{y}y}\left[-\Psi_{\downarrow}\Delta_{0} + \Psi_{\uparrow}\left(\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} + \mu_{F}\right)\right]\Psi_{\uparrow}^{\dagger}e^{ik_{y}'y}$$

$$+e^{-ik_{y}y}\left[\Psi_{\uparrow}\Delta_{0} + \Psi_{\downarrow}\left(\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} + \mu_{F}\right)\right]\Psi_{\downarrow}^{\dagger}e^{ik_{y}'y}$$

$$(12)$$

また、

$$\int \left(\sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^{\dagger}(k) e^{-ik_y y} \Psi(k') e^{ik'_y y} \right) dy$$

$$= L_y \sum_{k_y} \sum_{k'_y} \Psi^{\dagger}(k) \Psi(k') \delta(k - k')$$

$$= L_y \sum_{k_y} \Psi^{\dagger}(k) \Psi(k) \qquad (13)$$

$$\nabla^2 \left[\Psi_{\uparrow} e^{i k_y' y} \right] = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-k_y^2 \Psi e^{i k_y' y} + e^{i k_y' y} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi \right) \tag{14}$$

から、式(10)は、

$$\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} \left[\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \Delta_0^* \Psi_{\uparrow} \right.$$

$$\left. + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} - \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \Delta_0^* \Psi_{\downarrow} \cdots \right]$$

$$(15)$$

2.1.2 P_x -wave のとき

今度は、 $\hat{\Delta}(r)=\Delta_0\frac{1}{k_f}\left(\partial x+i\partial y\right)\hat{\sigma}_1$ のときを考える。 ハミルトニアンの式は、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} - \mu_{F} & 0 & 0 & \Delta_{0} \frac{i\partial x}{k_{F}} \\ 0 & -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} - \mu_{F} & \Delta_{0} \frac{i\partial x}{k_{F}} & 0 \\ 0 & \Delta_{0}^{*} \frac{i\partial x}{k_{F}} & \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \mu_{F} & 0 \\ \Delta_{0}^{*} \frac{i\partial x}{k_{F}} & 0 & 0 & \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \mu_{F} \end{bmatrix}$$
(16)

これを、式(10)に代入して計算していく。

以下

$$\eta = \Delta_0 \frac{i\partial x}{k_F} \tag{17}$$

$$\eta' = \Delta_0^* \frac{i\partial x}{k_E} \tag{18}$$

とする。

最初のものと同様に計算し、

$$\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} \left[\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \eta \Psi_{\uparrow} \right.$$

$$\left. + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} - \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \eta \Psi_{\downarrow} \cdots \right]$$

$$(19)$$

2.1.3 $P_x + iP_y$ のとき

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。 ハミルトニアンの式は、

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} - \mu_{F} & 0 & 0 & \Delta_{0} \frac{1}{k_{f}} (\partial x + i \partial y) \\ 0 & -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} - \mu_{F} & \Delta_{0} \frac{1}{k_{f}} (\partial x + i \partial y) & 0 \\ 0 & -\Delta_{0}^{*} \frac{1}{k_{f}} (\partial x - i \partial y) & \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \mu_{F} & 0 \\ -\Delta_{0}^{*} \frac{1}{k_{f}} (\partial x - i \partial y) & 0 & 0 & \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + \mu_{F} \end{bmatrix}$$
 (20)

以下

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

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

とする

最初のものと同様に計算し、

$$\mathcal{H} = \int dx \sum_{k_y} \left[\Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\uparrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \xi \left(\partial x - k_y \right) \Psi_{\uparrow} \right. \\ \left. + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu_F \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi_{\downarrow} + \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \xi \left(\partial x - k_y \right) \Psi_{\downarrow} \cdots \right]$$
(23)

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、

$$\Psi(x+h) = \Psi(x) + h\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x)$$
(24)

$$\Psi(x-h) = \Psi(x) - h\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x) + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x)$$
(25)

よって、差分近似は式 (24), 式 (25) の方程式で求めることができ、刻み幅 h=1 とすると、

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x\right) = \frac{\Psi\left(x+1\right) - \Psi\left(x-1\right)}{2}\tag{26}$$

$$\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}\Psi\left(x\right) = \Psi\left(x+1\right) - 2\Psi\left(x\right) + \Psi\left(x-1\right) \tag{27}$$

2.3 × を離散化せよ

式 (27) を式 (15)、(19)、(23) 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。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \vdots \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow} (x \pm 1)$$
(28)

2.3.1 s-wave のとき

代入した式は、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k_{y}} \left[\Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^{2} k_{y}^{2}}{2m} - \mu_{F} \right) \Psi_{i\uparrow} + \Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\Psi_{i+1\uparrow} \left(x \right) - 2\Psi_{i\uparrow} \left(x \right) + \Psi_{i-1\uparrow} \left(x \right) \right) + \Psi_{i\downarrow}^{\dagger} \Delta_{0}^{*} \Psi_{i\uparrow} \cdots \right]$$
(29)

N=3と置くとき、ハミルトニアンを 2 次形式で表すと、

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu_F \tag{31}$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{32}$$

とおく

2.3.2 P_x -wave のとき

代入した式は、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k_{y}} \left[\Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\frac{\hbar^{2} k_{y}^{2}}{2m} - \mu_{F} \right) \Psi_{i\uparrow} + \Psi_{i\uparrow}^{\dagger} \left(\Psi_{i+1\uparrow} \left(x \right) - 2\Psi_{i\uparrow} \left(x \right) + \Psi_{i-1\uparrow} \left(x \right) \right) + \Psi_{i\downarrow}^{\dagger} \Delta_{0}^{*} \Psi_{i\uparrow} \cdots \right]$$
(33)

このとき、 η のなかの微分を考慮する。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_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{3\downarrow}^{\dagger} \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 & \zeta & 0 \\ 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_{y}} & 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 & -\varepsilon_{k_{y}} & \zeta' & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & \zeta' & 0 & 0 & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Lambda & -\zeta & 0 & 0 & \varepsilon_{k_{y}} & 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 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_{k_{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 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 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 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 & 0 & 0 & -\zeta' & \Lambda & 0 & 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 & 0 & 0 & -\zeta' &$$

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu_F \tag{35}$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{36}$$

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

$$\zeta = \frac{\Delta_0}{2k_F} i$$
(36)

$$\zeta' = \frac{\Delta_0^*}{2k_F} i \tag{38}$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{39}$$

とおく

2.3.3 $P_x + iP_y$ 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、

ここで

$$\varepsilon_{k_y} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_y^2 + 2) - \mu_F \tag{41}$$

$$\Lambda = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{42}$$

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

$$\zeta = \frac{\Delta_0}{2k_F}$$
(42)

$$\zeta^{'} = \frac{\Delta_0^*}{2k_F} \tag{44}$$

$$\mu = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \tag{45}$$

$$\xi = \Delta_0 \frac{1}{k_f} \tag{46}$$

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

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

$$\xi = \Delta_0 \frac{1}{k_f}$$

$$\xi' = \Delta_0^* \frac{1}{k_f}$$
(45)
$$\xi' = \Delta_0^* \frac{1}{k_f}$$
(47)

とおく

結果 3

H を数値計算で対角化し、次に、グリーン関数を用いて状態密度を求めた。 グリーン関数は、以下の通りである。

$$G = (E + i\delta - H)^{(-1)}$$
(48)

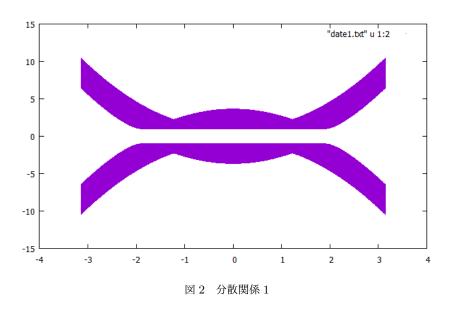
式 (48) を用いると、表面の状態密度は

$$\rho = -\frac{1}{\pi} Im(G_{11} + G_{22}) \tag{49}$$

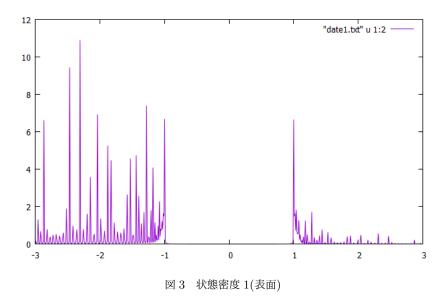
で表される。

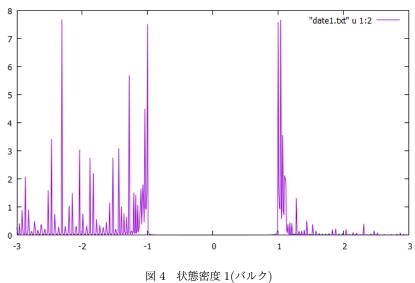
3.0.1 s-wave のとき

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。



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。

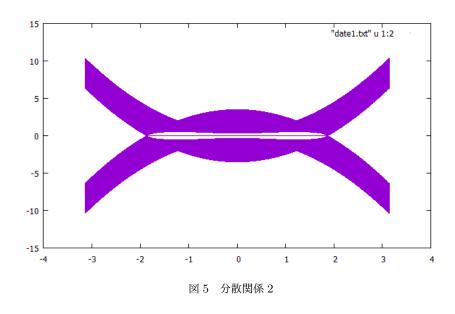




図(3)から、エネルギーが-1から1の範囲では状態がないことが分かる。

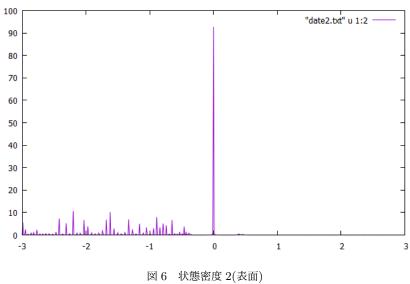
3.0.2 P_x -wave のとき

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。



次に、グリーン関数を用いて状態密度を求める。

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。



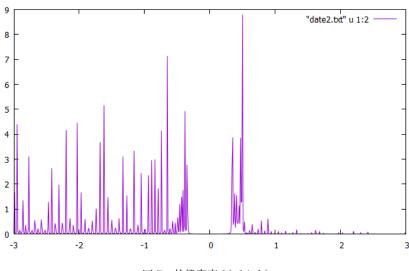
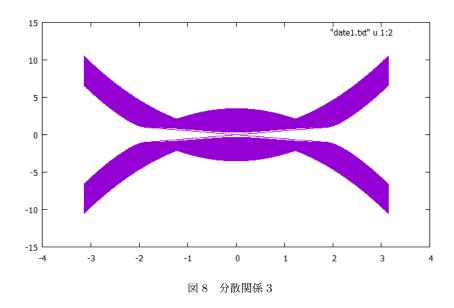


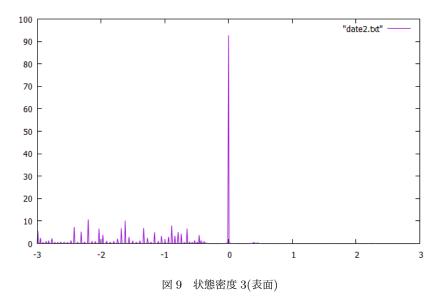
図 7 状態密度 2(バルク)

3.0.3 $P_x + iP_y$ のとき

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。



次に、グリーン関数を用いて状態密度を求める。 $E\ e^{-3}\ ho\ 3\ o$ 範囲で動かし、 $\rho\ e^{2}$ ロットした。このとき $\delta=10^{-3}$ とした。結果を以下に示す。



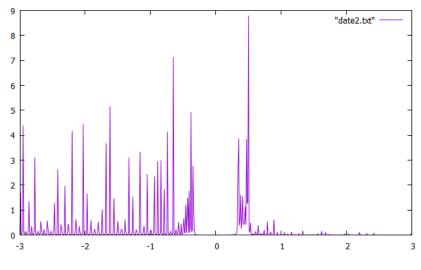


図 10 状態密度 3(バルク)