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。

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

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

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

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

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

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

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

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

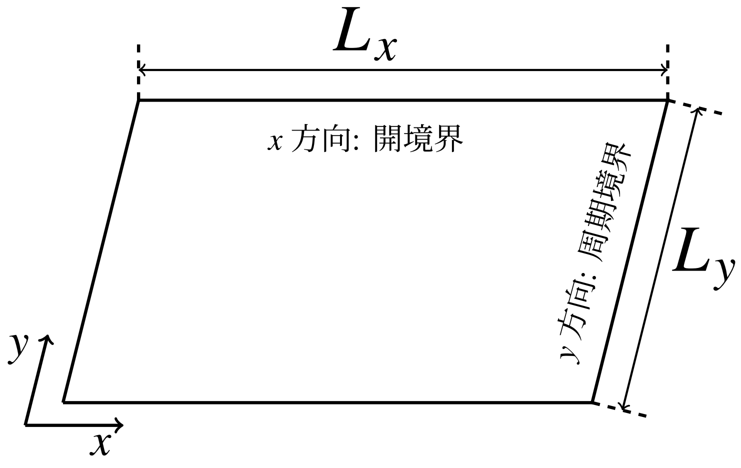

図 1　考える系

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

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

より、ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は、

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

これを、式 (9) に代入して計算していく。
このとき、

$$
\begin{aligned}
\vec{\Psi}^{\dagger}_{k_y}(x)e^{-ik_y y}\tilde{H}\vec{\Psi}_{k'_y}(x)e^{ik'_y y} = e^{-ik_y y}&\left[\Psi^*_{\uparrow}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\mu_F\right)+\Psi^*_{\downarrow}\Delta^*_0\right]\Psi_{\uparrow}e^{ik'_y y} \\
+e^{-ik_y y}&\left[\Psi^*_{\downarrow}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\mu_F\right)-\Psi^*_{\uparrow}\Delta^*_0\right]\Psi_{\downarrow}e^{ik'_y y} \\
+e^{-ik_y y}&\left[-\Psi^*_{\downarrow}\Delta_0+\Psi^*_{\uparrow}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\mu_F\right)\right]\Psi_{\uparrow}e^{ik'_y y} \\
+e^{-ik_y y}&\left[\Psi^*_{\uparrow}\Delta_0+\Psi^*_{\downarrow}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\mu_F\right)\right]\Psi_{\downarrow}e^{ik'_y y}
\end{aligned} \tag{12}
$$

よって、式 (9) は、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} = \frac{1}{L_y}\int dx\sum_{k_y}\Bigg[&\Psi^*_{\uparrow}\left(-\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}-\mu_F\right)\Psi_{\uparrow}+\Psi^*_{\uparrow}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi_{\uparrow}+\Psi^*_{\downarrow}\Delta^*_0\Psi_{\uparrow} \\
&+\Psi^*_{\downarrow}\left(-\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}-\mu_F\right)\Psi_{\downarrow}+\Psi^*_{\downarrow}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\Psi_{\downarrow}-\Psi^*_{\uparrow}\Delta^*_0\Psi_{\downarrow}\cdots\Bigg]
\end{aligned} \tag{13}
$$

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、

$$
\Psi\left(x+h\right)=\Psi\left(x\right)+h\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x\right)+\frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\left(x\right) \tag{14}
$$

$$
\Psi\left(x-h\right)=\Psi\left(x\right)-h\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x\right)+\frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\left(x\right) \tag{15}
$$

よって、差分近似は式 (14), 式 (15) の方程式で求めることができ、刻み幅 $h=1$ とすると、

$$
\frac{\partial}{\partial x}\Psi\left(x\right)=\frac{\Psi\left(x+1\right)-\Psi\left(x-1\right)}{2} \tag{16}
$$

$$
\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi\left(x\right)=\Psi\left(x+1\right)-2\Psi\left(x\right)+\Psi\left(x-1\right) \tag{17}
$$

2.3 x を離散化せよ

式 (17) を式 (13) 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。

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \Psi_{1\uparrow} \\ \Psi_{1\downarrow} \\ \Psi_{1\uparrow}^{\dagger} \\ \Psi_{1\downarrow}^{\dagger} \\ \Psi_{2\uparrow} \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}, \Psi_{n\pm1\uparrow} = \Psi_{n\uparrow}\left(x \pm 1\right) \tag{18}$$