

# BdG 方程求解代码编写

李玉轩

2019 年 2 月 20 日

# 1 文档说明

本手册用来记录在重复论文中遇到的问题，以及计算程序编写过程中，物理公式与程序语言之间的转换关系。本文档所有的代码均已上传至[GitHub](#)，在使用代码之前，请先阅读 **ReadMe** 文件，其中亦有作者的邮箱，欢迎讨论。

# 2 模型建立

代码是用来重复 **Vortex pinning by the point potential in topological superconductors: A scheme for braiding Majorana bound states** 中的数值结果，其中主要的模型内容如下所示：

$$H = H_t + H_{SO} + H_{SC} \quad (2.1)$$

$$H_t = - \sum_{\langle ij \rangle} t_0 \Phi_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_{i\sigma} (\sigma h - \mu) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\sigma} V_i c_{i_0\sigma}^\dagger c_{i_0\sigma} \quad (2.2)$$

$$H_{SO} = \sum_i (i\lambda \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+\hat{x}\downarrow} + i\lambda \Phi_{ij} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+\hat{x}\uparrow} + H.c. + \lambda \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+\hat{y}\downarrow} - \lambda \Phi_{ij} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+\hat{y}\uparrow} + H.c.) \quad (2.3)$$

$$H_{SC} = \sum_i (\Delta_{ii} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + H.c.) \quad (2.4)$$

$$\sum_j \begin{bmatrix} H_{ij\uparrow\uparrow} & H_{ij\uparrow\downarrow} & \Delta_{jj} & 0 \\ H_{ij\downarrow\uparrow} & H_{ij\downarrow\downarrow} & 0 & -\Delta \\ \Delta_{jj}^* & 0 & -H_{ij\downarrow\downarrow}^* & -H_{ij\downarrow\uparrow}^* \\ 0 & -\Delta_{jj}^* & -H_{ij\uparrow\downarrow}^* & -H_{ij\uparrow\uparrow}^* \end{bmatrix} \Psi_j^\eta = E_\eta \Psi_j^\eta \quad (2.5)$$

where  $\Psi_j^\eta = (u_{j\uparrow}^\eta, u_{j\downarrow}^\eta, v_{j\downarrow}^\eta, v_{j\uparrow}^\eta)^T$  and  $\Delta_{jj} = \frac{V}{2} \sum_\eta u_{j\uparrow}^\eta v_{j\downarrow}^\eta \tanh(\frac{E_\eta}{2K_B T})$   $\sigma$  代表自旋取向，向上为 1 向下为 -1， $t_0$  代表电子在相邻格点跳跃 (hopping) 时的能量， $\lambda$  代表相邻格点之间的自旋轨道耦合 (SOC) 强度， $\Delta$  是每个格点上不同自旋取向电子的配对能， $\mu$  是体系的化学势，求和中的  $i$  是格点位置索引，公式中的  $i$  代表虚数单位。

通过模型建立，可以得到关于哈密顿量的矩阵形式，模型求解的关键点在于如何通过一系列的公式，正确的写出哈密顿量的矩阵形式，即就是方程 (2.5) 中的矩阵。

## 2.1 分析

$$H = \sum_i (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger, c_{i\downarrow}, c_{i\uparrow}) \begin{bmatrix} H_{ij\uparrow\uparrow} & H_{ij\uparrow\downarrow} & \Delta_{jj} & 0 \\ H_{ij\downarrow\uparrow} & H_{ij\downarrow\downarrow} & 0 & -\Delta \\ \Delta_{jj}^* & 0 & -H_{ij\downarrow\downarrow}^* & -H_{ij\downarrow\uparrow}^* \\ 0 & -\Delta_{jj}^* & -H_{ij\uparrow\downarrow}^* & -H_{ij\uparrow\uparrow}^* \end{bmatrix} (c_{i\uparrow}, c_{i\downarrow}, c_{i\downarrow}^\dagger, c_{i\uparrow}^\dagger)^T \quad (2.6)$$

### 2.1.1 hopping 项

在模型求解过程中，主要是通过建立 BdG 方程，通过该方法可以实现矩阵的对角化，同时可以得到相应的本征值和本征矢量。从模型的建立来看，主要是通过紧束缚近似的离散晶格模型来构造哈密顿量，在紧束缚近似中，仅仅考虑了每个格点和相邻位置的跳跃和耦合，则可以明白公式中的  $i$  和  $j$  仅仅代表的是最近邻格点位置，即就是  $H_{i,j}$  可能的形式为  $H_{x,x\pm 1}$  和  $H_{i,x\pm y}$ ，在将哈密顿量写成矩阵形式的过程中，可以清楚的看到 hopping 项是处于非对角线上的位置，同时可以看到，最近邻位置之间跳跃时，自旋取向是相同的。

### 2.1.2 couple 项

couple 项的分析与 hopping 项分析过程类似，唯一不同的一点是，相邻格点之间的耦合，涉及到的是不同自旋取向之间的耦合，它的每一项仍然都处于矩阵的非对角线上。

### 2.1.3 pair 项

从超导配对项的表达式中可以看到，它涉及到时同一个点不同自旋取向之间的配对，所以通过对矩阵的分析可以得知，它的每一项也都处于矩阵的非对角线上。

### 2.1.4 others

在 hopping 项中，第二项比较特殊 ( $\sum_{i\sigma}(\sigma h - \mu)c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ )，从下角标可以知道，这一项同样是处于矩阵的对角线上，只不过不同的自旋取向对应着不同的值。自旋向上  $\sigma = 1$ ，自旋向下  $\sigma = -1$ ， $h$  代表的是 Zeeman 场的大小。

## 2.2 矩阵构建

假设我们考虑的晶格大小是  $xn*yn$ ，通过分析过程可以得知对于 hopping 项 ( $H_{ij\sigma\sigma}$ )，每个自旋取向  $\sigma$  对应的  $H_{ij}$  都是一个  $xn*yn$  的方阵，根据方程 (2.5) 中的矩阵形式，可以知道整个矩阵是一个行列都是  $xn*yn*4$  的矩阵。即通过模型，我们可以得到模型对应的矩阵是  $H_{xn*yn*4,xn*yn*4}$ 。通过上面的分析，我们将整个矩阵分解为 16 个小矩阵，每个小矩阵的大小都是  $xn*yn$ ，不过该矩阵的大多数元素都是 0，属于稀疏矩阵。在方程 (2.5) 中，波函数  $\Psi$  的形式已经得知 (即格点位置与自旋之间的联系)，且注意到，索引指标  $j$  代表了晶格点阵的大小， $j=xn*yn$ ，前面已经将矩阵分解成了 16 个小矩阵，且其中又有 4 个都是零，则需要考虑填充的只有 12 个分块矩阵。

## 2.3 hopping 项矩阵填充

hopping 项中，不再对角线上的项是  $c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ ，紧束缚近似仅考虑最近邻的格点之间的行为，所以对于  $i$  格点上的电子，跳跃行为仅仅限于  $x+1$ (向右),  $x-1$ (向左),  $x+y$ (向上),  $x-y$ (向下)，假定  $i$  格点在二维表示中为  $(a,b)$ ，且晶格大小为  $xn*yn$ ，转换成矩阵元的时候它在矩阵元中的

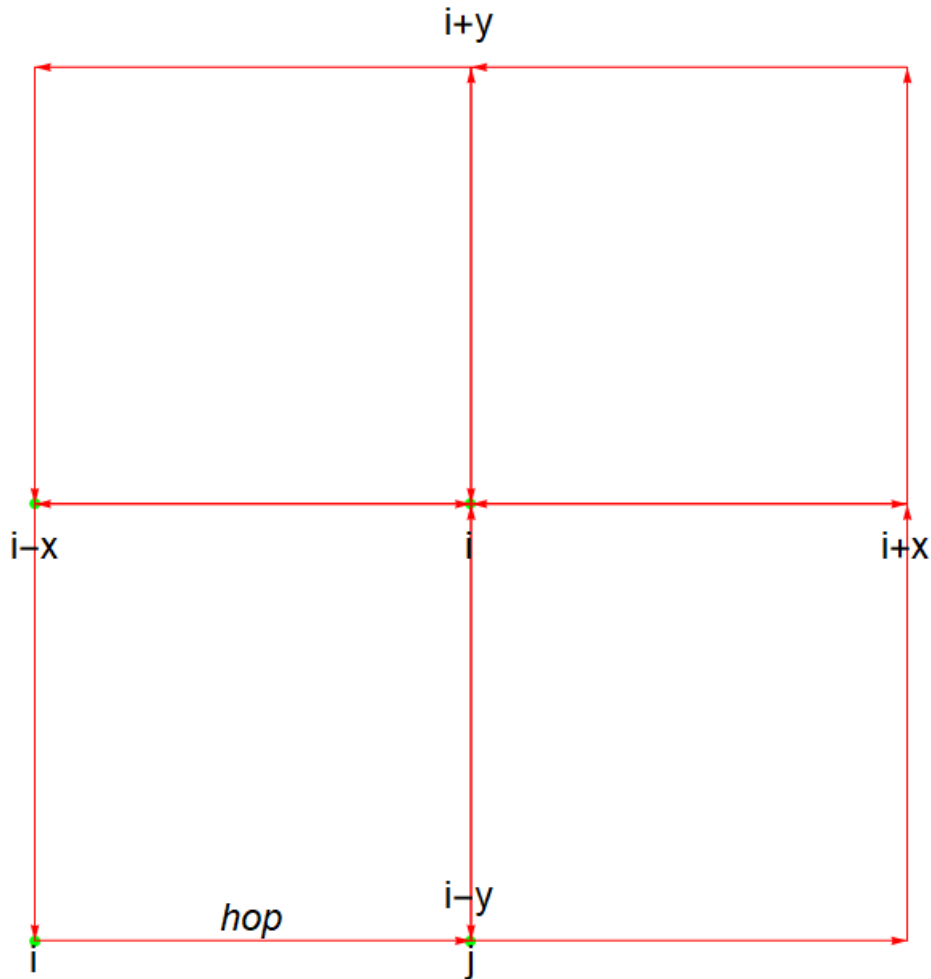
位置应该为  $(b-1)*y_n+a*x_n$ ，令其等于  $m(m=(b-1)*y_n+a*x_n)$ ，它在矩阵中对角线上的位置为  $H(m,m)$ ，向右边的 hopping 在矩阵中的位置是  $H(m,m+1)$ ，向左边 hopping 即就是  $H(m,m-1)$ ，向上  $H(m,m+x_n)$ ，向下  $H(m,m-x_n)$ 。以上的分析都只是对于 (1,1)block 进行的填充 (方程2.5中的大矩阵在第一行第一列的小分块矩阵)。(2,2)block 与 (1,1)block 之间的差别仅限于自旋取向的问题，不过在对 (1,1)block 和 (2,2)block 中的非对角线元素填充时，自旋的取向并不会影响元素的值，仅仅会影响 hopping 中对角线上元素的填充，在上一章节已经分析过，在此不做赘述。通过方程 (2.5) 中矩阵的形式可以看到，(3,3)block 和 (4,4)block 只不过是之前两个小分块矩阵的共轭，没有什么本质上的差别，其实将整个矩阵分解为 16 个小分块矩阵之后，对于相同物理效应，比如自旋轨道耦合，hopping，pari 每个都对应 4 个分块矩阵，在矩阵填充的过程中，只需填充好一个，其余的三个就可以通过矩阵的平移变化得到。在跳跃过程中同时还会设计到波函数的位相问题，将在最后进行详细的讨论与说明。

下面将上述内容具体化:

(1,1)block:  $\text{ham}(m,m+1)$   $\text{ham}(m,m-1)$   $\text{ham}(m,m+x_n)$   $\text{ham}(m,m-x_n)$

(2,2)block:  $\text{ham}(x_n*y_n+m, x_n*y_n+m+1)$   $\text{ham}(x_n*y_n+m, x_n*y_n+m-1)$   $\text{ham}(x_n*y_n+m, x_n*y_n+m+x_n)$   
 $\text{ham}(x_n*y_n+m, x_n*y_n+m-x_n)$

(3,3)block 和 (4,4)block 的操作与上面的平移类似



## 2.4 couple 项矩阵填充

couple 项中，每一项都处于矩阵的非对角线上，填充的具体过程与 hopping 项方式一样，不过不同的一点在于，couple 项在  $x$  和  $y$  方向上的填充值的形式是不同的，而 hopping 项中，不管是向那个方向进行跳跃，他的值的形式都是相同的，所以在对 couple 进行矩阵值填充是，需要格外注意这一点。

(2,1)block:  $\text{ham}(m, x_n * y_n + m + 1)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n + m - 1)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n + m + x_n)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n + m - x_n)$

## 2.5 pari 项矩阵填充

(3,1)block:  $\text{ham}(m, x_n * y_n^2 + m + 1)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n^2 + m - 1)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n^2 + m + x_n)$   $\text{ham}(m, x_n * y_n^2 - x_n)$

# 3 矩阵填值分析

## 4 周期性边界问题

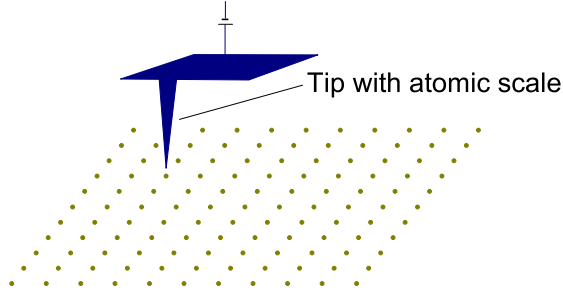


FIG. 1. Schematic diagram of a method for generating a controllable point potential.

## II. MODEL AND HAMILTONIAN

Following Refs. [4–7], an effective theoretical model that describes a topological superconductor includes a hopping term, spin-orbital coupling, a Zeeman field, and an  $s$ -wave superconducting pairing term. Considering the terms listed above, our starting model is expressed as

$$H = H_t + H_{SO} + H_{SC}. \quad (1)$$

Here,  $H_t$  includes the hopping term, the chemical potential term, the Zeeman field, and an additional point potential term; it is expressed as

$$H_t = - \sum_{\langle ij \rangle} t_0 \Phi_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i\sigma} (\sigma h - \mu) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\sigma} V_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (2)$$

Here,  $\langle ij \rangle$  represents the nearest-neighbor sites, and  $t_0$  is the nearest-neighbor hopping constant. In the presence of a magnetic field, we have  $\Phi_{ij} = \exp[i\pi/\phi_0] \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} \mathbf{A}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ , where  $\phi_0$  is the superconducting flux quantum and  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  is the vector potential in the Landau gauge.  $h$  is the Zeeman field. The sign of  $\sigma$  is a plus for the spin-up state and a minus for the spin-down state.  $\mu$  is the chemical potential. We consider a point potential at site  $\mathbf{i}_0$  with a strength of  $V_i$ .

$H_{SO}$  is the spin-orbital interaction, expressed as

$$H_{SO} = \sum_{\mathbf{i}} (i\lambda \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+\hat{x}\downarrow} + i\lambda \Phi_{ij} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+\hat{x}\uparrow} + \text{H.c.} + \lambda \Phi_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+\hat{y}\downarrow} - \lambda \Phi_{ij} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+\hat{y}\uparrow} + \text{H.c.}), \quad (3)$$

where  $\lambda$  is the spin-orbital coupling strength.

$H_{SC}$  is the superconducting pairing term, expressed as

$$H_{SC} = \sum_{\mathbf{i}} (\Delta_{ii} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}). \quad (4)$$

Here,  $\Delta_{ii}$  is the on-site pairing order parameter, which originates from an on-site attractive interaction.

The above Hamiltonian can be diagonalized by solving the BdG equations self-consistently:

$$\sum_{\mathbf{j}} \begin{pmatrix} H_{ij\uparrow\uparrow} & H_{ij\uparrow\downarrow} & \Delta_{ij} & 0 \\ H_{ij\downarrow\uparrow} & H_{ij\downarrow\downarrow} & 0 & -\Delta_{ij} \\ \Delta_{ij}^* & 0 & -H_{ij\downarrow\downarrow} & -H_{ij\downarrow\uparrow}^* \\ 0 & -\Delta_{ij}^* & -H_{ij\uparrow\downarrow}^* & -H_{ij\uparrow\uparrow} \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{j}}^\eta = E_\eta \Psi_{\mathbf{j}}^\eta, \quad (5)$$

where  $\Psi_{\mathbf{j}}^\eta = (u_{j\uparrow}^\eta, u_{j\downarrow}^\eta, v_{j\downarrow}^\eta, v_{j\uparrow}^\eta)^T$ .  $H_{ij\sigma\sigma}$  and  $H_{ij\sigma\bar{\sigma}}$  ( $\sigma \neq \bar{\sigma}$ ) are obtained from  $H_t$  and  $H_{SO}$ , respectively.

The order parameters  $\Delta_{ij}$  are calculated as follows:

$$\Delta_{ij} = \frac{V}{2} \sum_{\eta} u_{j\uparrow}^\eta v_{j\downarrow}^{\eta*} \tanh\left(\frac{E_\eta}{2K_B T}\right), \quad (6)$$

where  $V$  is the pairing strength.

The BdG equations are solved self-consistently as follows. First, we input a set of initial order parameters  $\Delta_{ii}$  and diagonalize the Hamiltonian matrix. Second, we use the obtained eigenfunctions and eigenvalues to calculate the new order parameters as expressed in Eq. (6). This procedure is repeated with the updated order parameters until the convergence criterion is satisfied.

In the results reported below, we use the lattice constant  $a$  and the nearest-neighbor hopping constant  $t_0$  as the units of length and energy, respectively. Without loss of generality, the other parameters are set to  $\mu = -4$ ,  $h = 0.6$ , and  $V = 5$ , respectively. Then, the Hamiltonian given in Eq. (1) is an effective model that describes the corresponding topological superconductor. The superconducting gap is calculated self-consistently on the  $N = 48 \times 48$  lattice with periodic boundary conditions. The magnetic field  $B$  is chosen to be  $B = 2\phi_0/(Na^2)$ . Under these conditions, two vortices should exist in the system. We have checked numerically that our main results are not qualitatively different for different input parameters.

## III. RESULTS AND DISCUSSION

We first investigate the pinning effect and the pinning distance. The spatial variations of the superconducting pairing order parameter without an additional point potential and with a single potential at different sites are displayed in Fig. 2. For

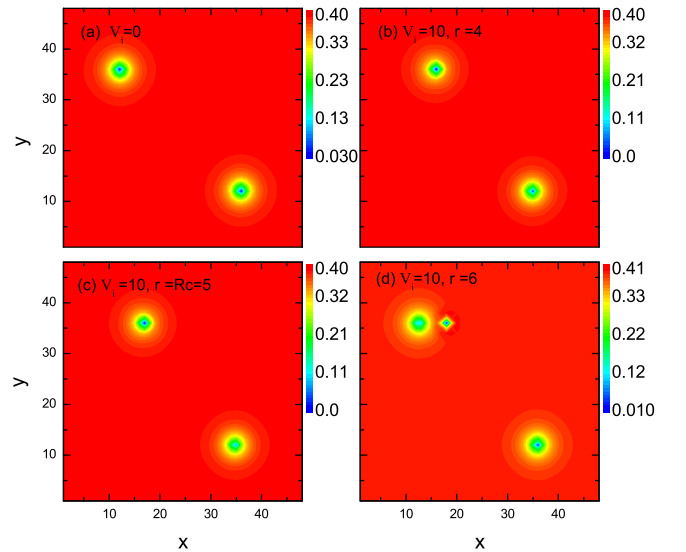


FIG. 2. (a) The intensity plot of the superconducting gap without the point potential. Two vortices are located at sites (12,36) and (36,12). (b)–(d) Spatial variations of the superconducting gap with the existence of a single point potential at sites (16,36), (17,36), and (18,36).