

BdG 方程求解代码编写

李玉轩

2020 年 3 月 17 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 $\Delta_{jj} = \frac{V}{2} \sum_\eta u_{j\uparrow}^\eta v_{j\downarrow}^\eta \tanh(\frac{E_\eta}{2K_B T})$ σ 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， λ 代表相邻格点之间的自旋轨道耦合 (SOC) 强度， Δ 是每个格点上不同自旋取向电子的配对能， μ 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

由方程 (2.1) 的形式可以知道，对于每一个格点 i ，上面都定义了四个算符，假设我们考虑的晶格大小是 $xn*yn$ ，那么在构建哈密顿量矩阵的时候选择的基矢量就应该是一个 $4*xn*yn$ 长度的向量，对应的哈密顿量矩阵形式就是 $(4*xn*yn, 4*xn*yn)$ 大小。通过分析过程可以得知对于 hopping 项 ($H_{ij\sigma\sigma}$)，每个自旋取向 σ 对应的 H_{ij} 都是一个 $xn*yn$ 的小方阵，通过上面的分析，将整个矩阵分解为 16 个小矩阵，每个小矩阵 (方阵) 维度都是 $xn*yn$ ，不过该矩阵的大多数元素都是 0，属于稀疏矩阵。在这里需要强调一点，这 16 个小的分块矩阵是根据将基矢选择为 $C^\dagger = (c_\uparrow^\dagger, c_\downarrow^\dagger, c_\downarrow, c_\uparrow)$ ，在这里省略了每个格点位置的索引，其实这里的每一个算符都应该是有 $xn*yn$ 个的。 C^\dagger 与 C 中的算符进行组合，共有 16 中可能，这就是 16 个小的分块矩阵的来源。这里同样可以不按照上面 C^\dagger 中算符的顺序进行排列，可以选择自己在构建矩阵时能理解或者觉得简单的方式，虽然这样会使得矩阵内相同位置上的值有所改变，但是不会改变最终的结果。在方程 (2.5) 中，波函数 Ψ 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 (在小的分块矩阵中)， $j=xn*yn$ ，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 (有些算符的组合在现在这个问题中本就不会存在, 所以它对应的位置就是 0).

2.3 hopping 项矩阵填充

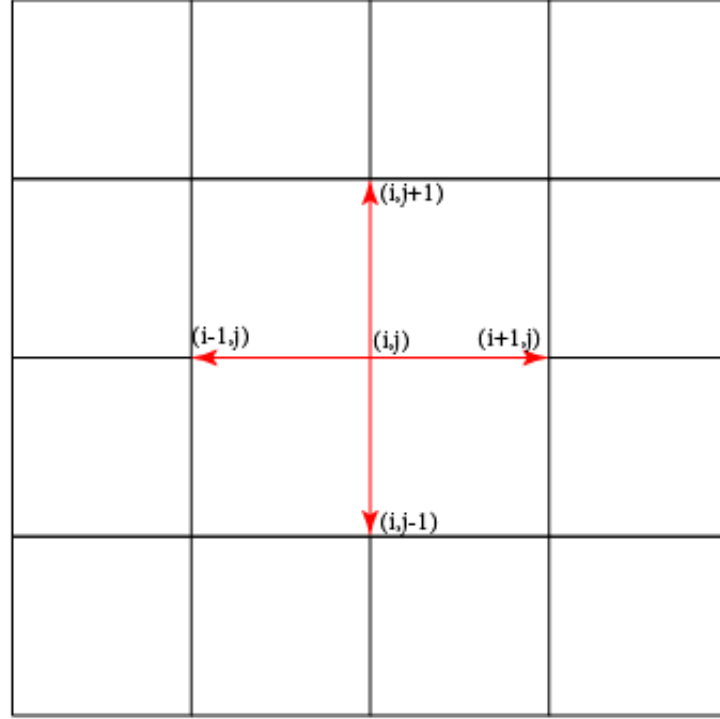


图 2.1: 最近邻 hopping

hopping 项中，不在对角线上的项是 $c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (i \neq j)$ ，紧束缚近似仅考虑最近邻的格点之间的行为，考虑二维正方点阵，对于 (i,j) 格点上的电子，共有四个最近邻，如图2.3所示. 在这里所使用的均是二维点阵的索引，在进行矩阵的构建时，需要将这些二维的索引，转变成基矢中对应的索引. 举例说明：在 (i,j) 这个格点上，它所对应的 C^\dagger 中的产生算符的索引为 $(i-1)*x_n + j$ ，这里 x_n 是正方格点在 x 方向的格点数，同样的 y_n 是在 y 方向上的格点数. 这个索引同样可以表示为 $(j-1)*y_n + i$ ，这就是如果将 2 维点阵上的点，映射成一维基矢上的换算方法，对于其它形式的算符，也是相同的转换技巧. 这里还要说明一点，上面选取的是 C^\dagger 中的一个算符，它转换出来的索引，对应的是哈密顿量矩阵中的行索引，对于 C 中选取的算符，它转换出来的索引则对应的是哈密顿量矩阵中的列索引. 上面就是如何将一对算符 (2 个算符的组合) 写成哈密顿量矩阵中的一个元素的方式，这样就可以初步对矩阵进行填值. 在方程 (2.2) 和 (2.3) 中可以看到，实空间的哈密顿量只是明确的写出了 $c^\dagger c$ 的算符着形式，暂且称它是粒子的算符表示形式，但是由方程 (2.1) 可以看到，哈密顿量中同样还包括了 cc^\dagger 这种组合形式，称它为空穴，由于研究的是关于超导的问题，平均场近似下的哈密顿量是有粒子空穴对称性的，所

以肯定会出现这种空穴型的算符, 而上面所说的填值问题都是关于粒子的, 并没有提及关于空穴该如何构建其哈密顿量对应的值. 可以通过费米子算符的对易关系, 将空穴的填值问题与粒子的填值联系在一起.

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger = 0 \quad (2.7)$$

所以可以得到空穴和粒子的联系是

$$c_j c_i^\dagger = -(c_j^\dagger c_i)^\dagger \quad (2.8)$$

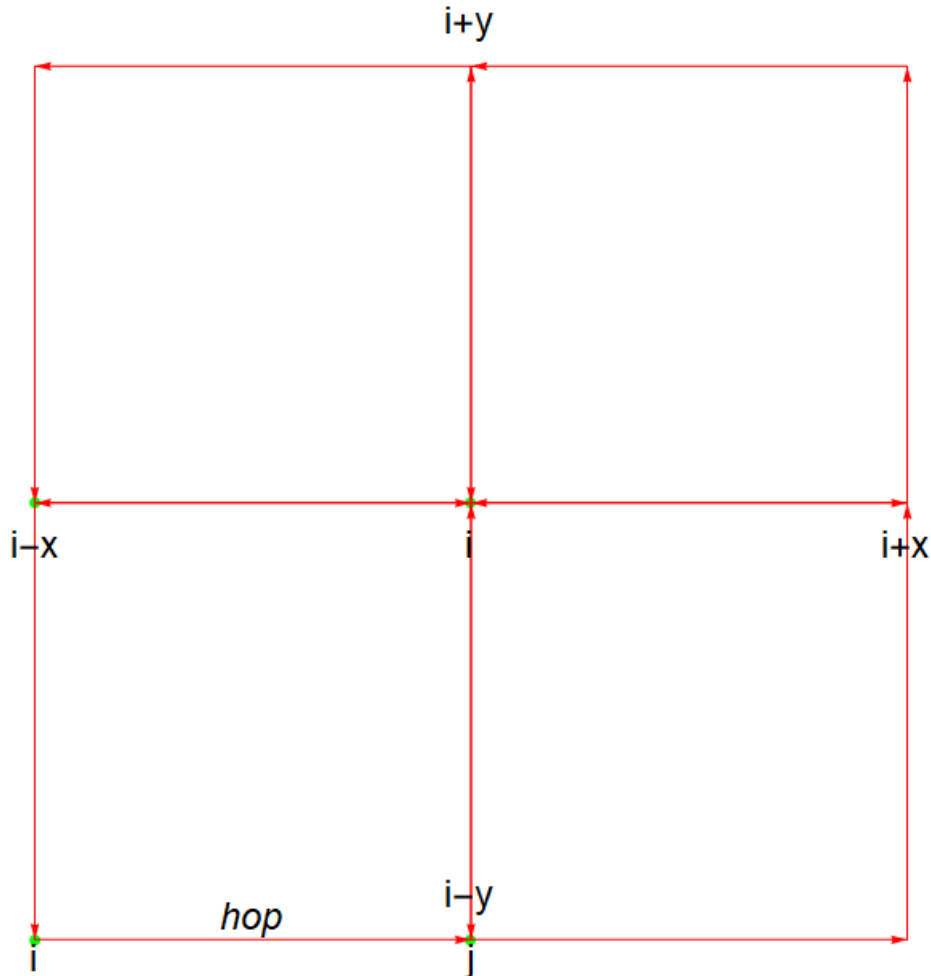
所以只要知道了电子 $c_j^\dagger c_i$ 的填值, 将其共轭之后再添负号就是 $c_j c_i^\dagger$ 的填值. 再次强调, 这里的 ij 是基矢的索引, 而不是二维晶格的直角索引坐标, 是它们的 2 维坐标转换成 1 维的基矢之后的索引. 到这里就将哈密顿量中所有关于最近邻格点之间的项全部介绍完了, 而剩下的不过是不同 spin 以及产生湮灭算符之间的组合, 它们涉及到的是分块矩阵之间的组合, 这个可以和最近邻矩阵元构建的过程相类比, 就可以得到结果.

下面将上述内容具体化:

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

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

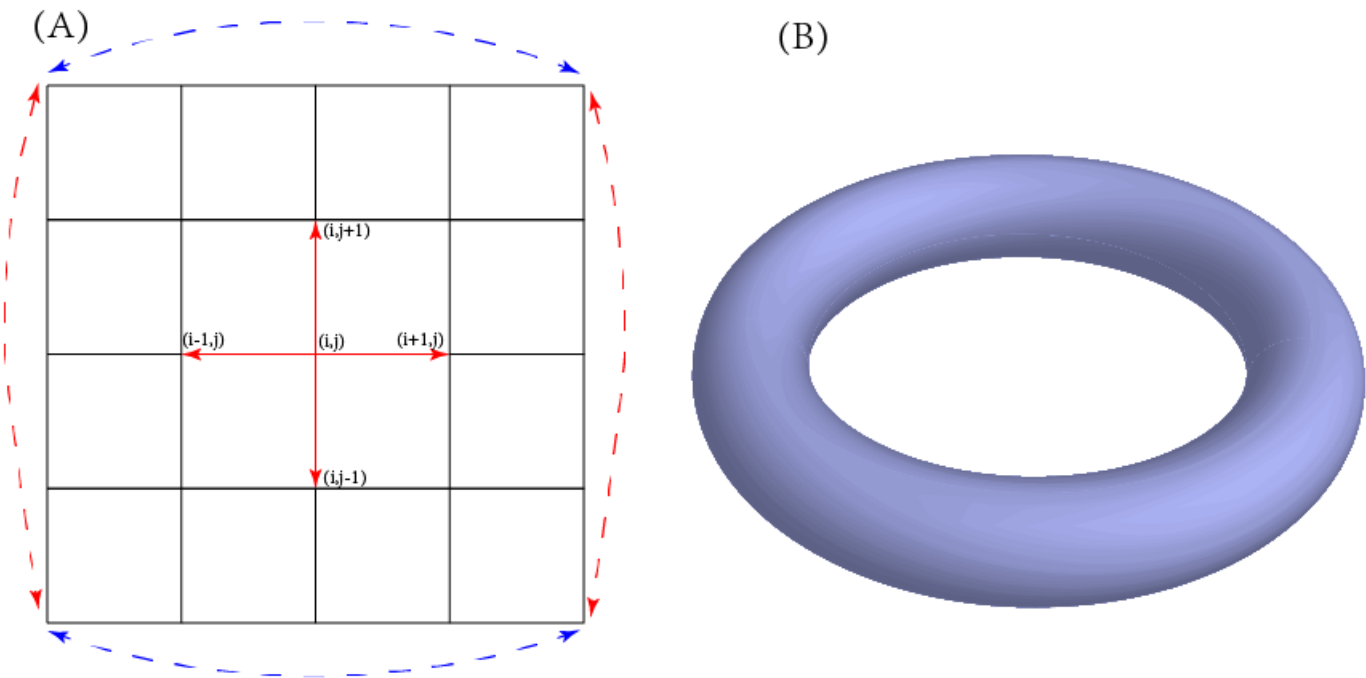
(3,3)block 和 (4,4)block 的操作与上面的平移类似



2.4 pari 项矩阵填充

(3,1)block: ham(m,xn*yn*2+m+1) ham(m,xn*yn*2+m-1) ham(m,xn*yn*2+m+xn) ham(m,xn*yn*2-xn)

3 周期性边界问题



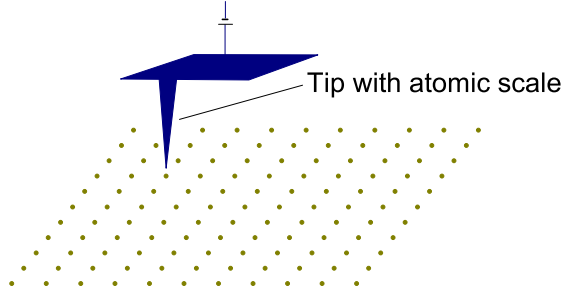


FIG. 1. Schematic diagram of a method for generating a controllable point potential.

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

$$H_t = - \sum_{\langle ij \rangle} t_0 \Phi_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i\sigma} (\sigma h - \mu) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\sigma} V_i c_{i0\sigma}^\dagger c_{i0\sigma}. \quad (2)$$

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 ϕ_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 σ is a plus for the spin-up state and a minus for the spin-down state. μ 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 λ 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, Δ_{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 Δ_{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 Δ_{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

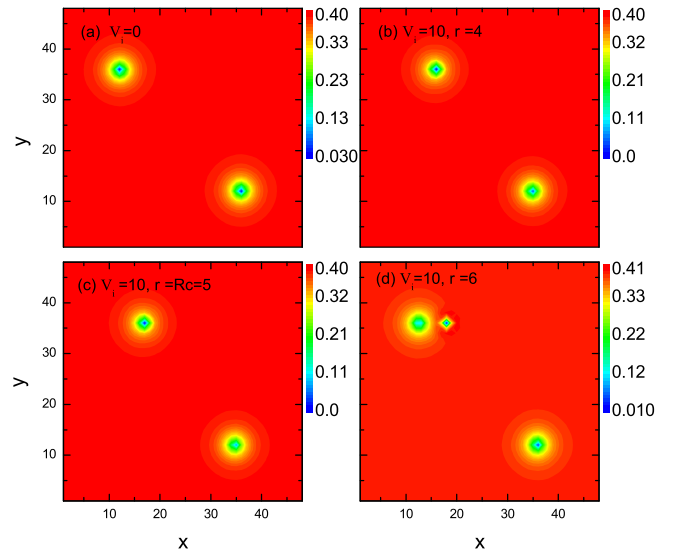


FIG. 2. (a) The intensity plot of the superconducting gap without the point potential. Two vortices are located at sites (12,36) and (36,12). (b)–(d) Spatial variations of the superconducting gap with the existence of a single point potential at sites (16,36), (17,36), and (18,36).