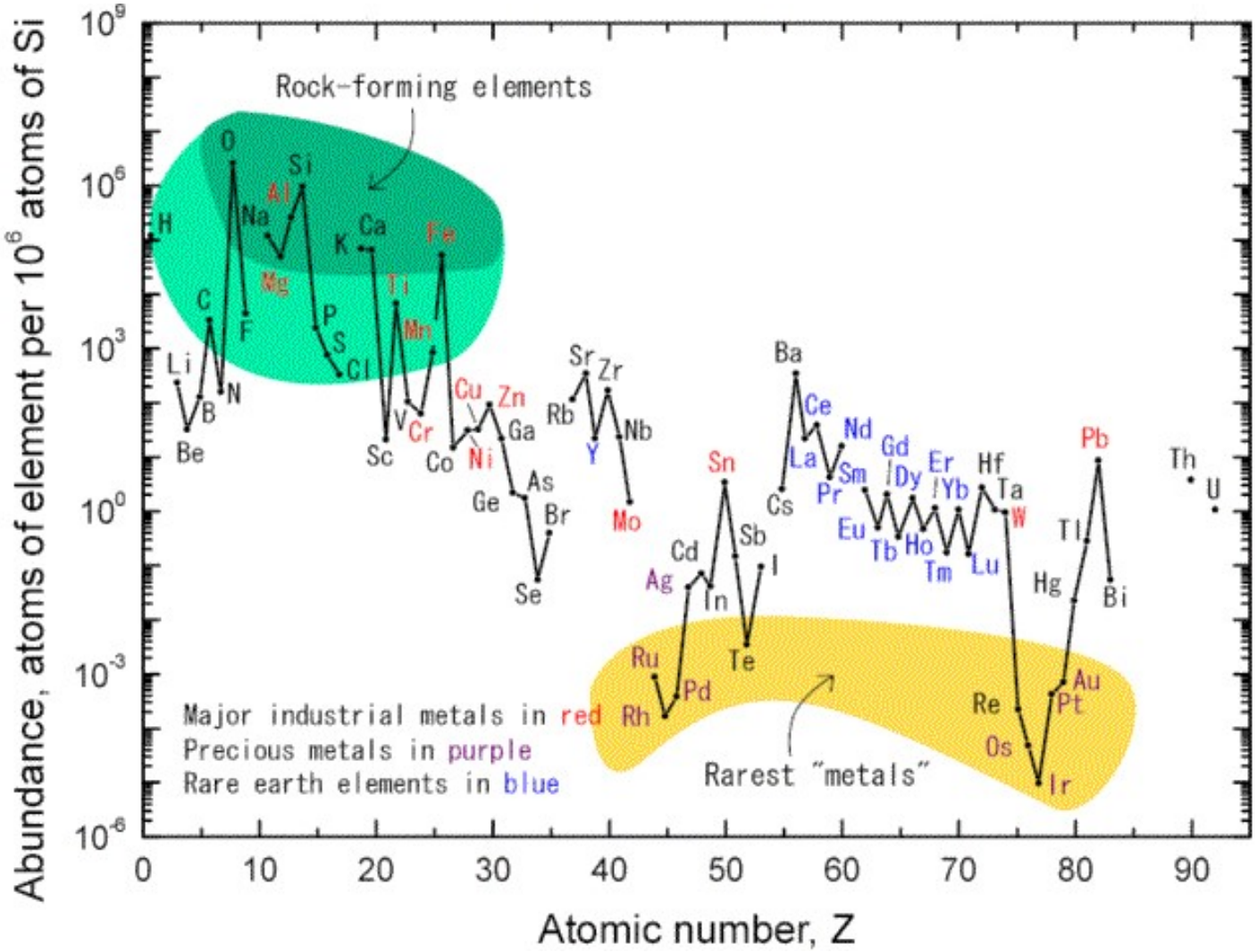
地表付近の元素構成比率

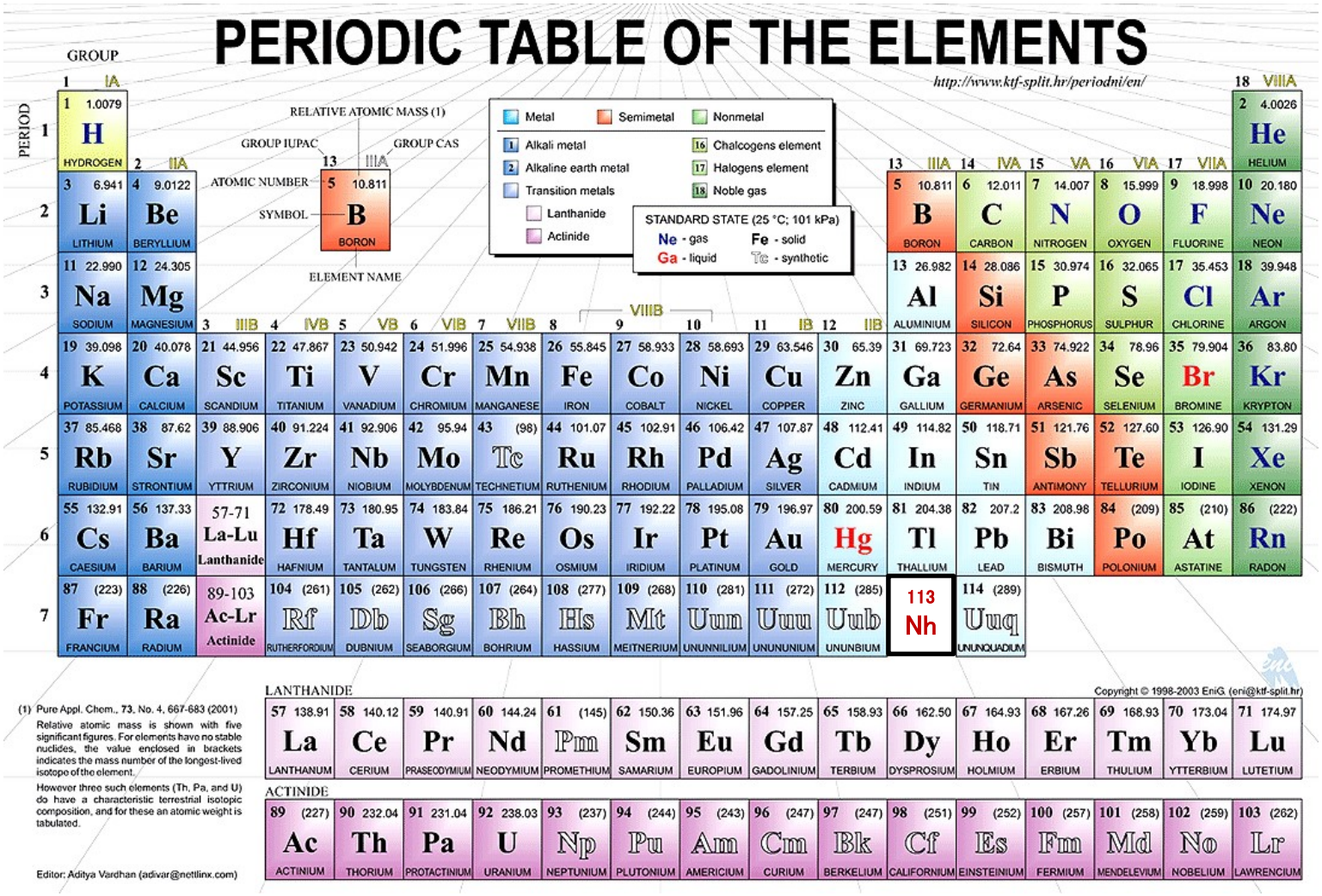


宇宙の構成元素の量

1	Hydrogen	739,000
2	Helium	240,000
8	Oxygen	10,400
6	Carbon	4,600
10	Neon	1,340
26	Iron	1,090
7	Nitrogen	960
14	Silicon	650
12	Magnesium	580
16	Sulfur	440

(mass fraction)

Chemical elements



Body
H : 60%
O : 25.5%
C : 10.5%
N : 2.4%
P : 0.1%
S : 0.1%
(component ratio)

シュレディンガー方程式

波動関数 $\Psi(r,\theta,\varphi)=R(r)Y(\theta,\varphi)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R(r)Y(\theta,\varphi)}\nabla^2 R(r)Y(\theta,\varphi)+V(r)=\lambda$$ ：定数（エネルギー）

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\frac{1}{R(r)}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{1}{r^2}\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}Y(\theta,\varphi)$$

$$-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)=-\frac{2m}{\hbar^2}\lambda$$

変数分離

$$\frac{r^2}{R(r)}\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2m}{\hbar^2}r^2\left(V(r)-\lambda\right)\right)R(r)=l(l+1):\text{定数}$$

$$l(l+1)=-\frac{1}{Y(\theta,\varphi)}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}Y(\theta,\varphi)$$

球面調和関数

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+l(l+1)\right\}Y(\theta,\varphi)=0$$

$$Y(\theta,\varphi)=C_{lm}P_l^m(x)e^{im\varphi}$$

$$x=\cos\theta \qquad dx=d(\cos\theta)=-\sin\theta d\theta=-\sqrt{1-x^2}\,d\theta$$

$$\frac{d}{dx}\left\{\left(1-x^2\right)\frac{dP_l^m(x)}{dx}\right\}+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}P_l^m(x)=0$$

$$P_l^m(x)=\frac{1}{(2l)!!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l$$

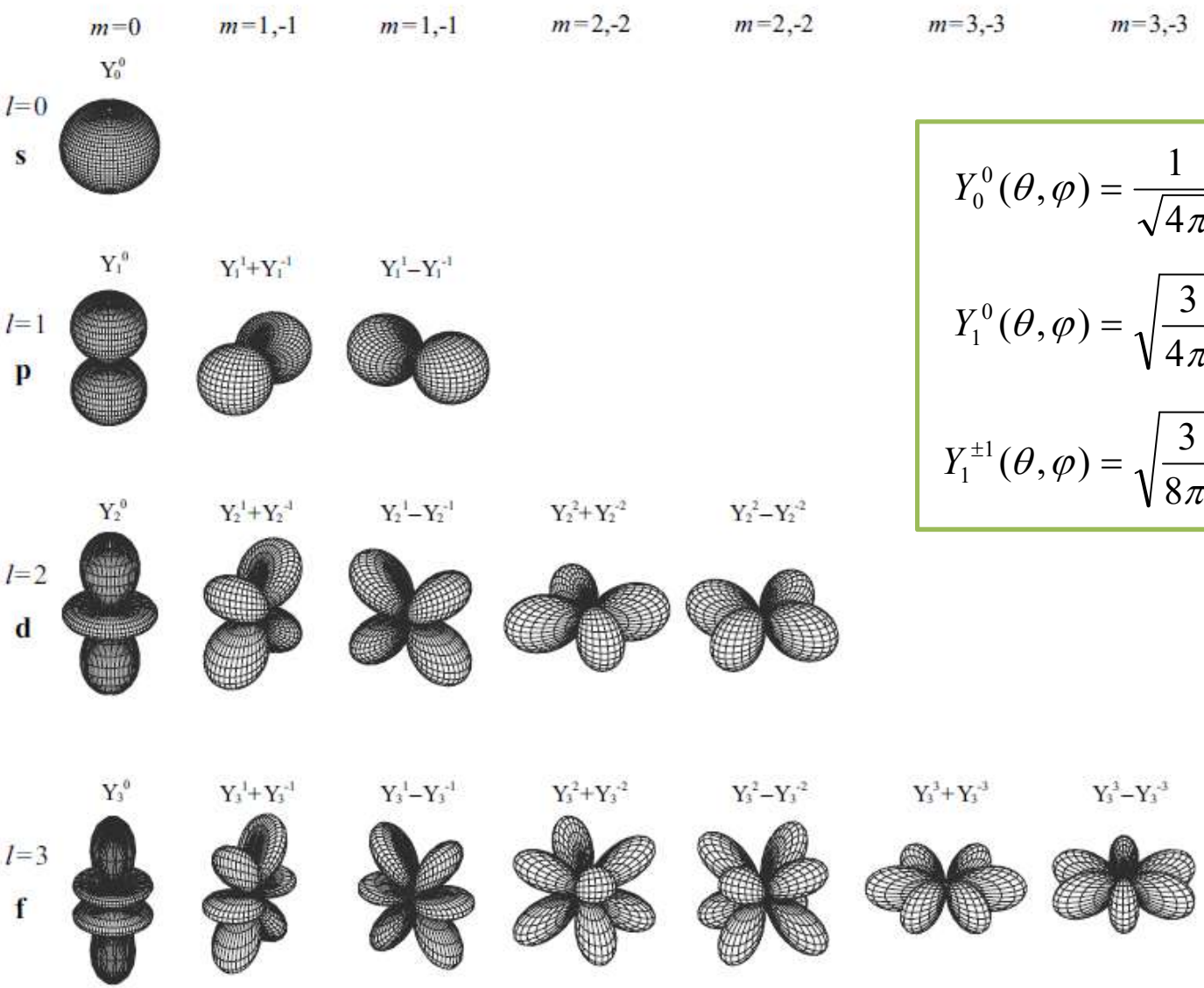
Legendre 陪多項式

$$P_0^0(x)=1$$

$$P_1^0(x)=x=\cos\theta$$

$$P_1^1(x)=\sqrt{1-x^2}=\sin\theta$$

球面調和関数の角度依存性

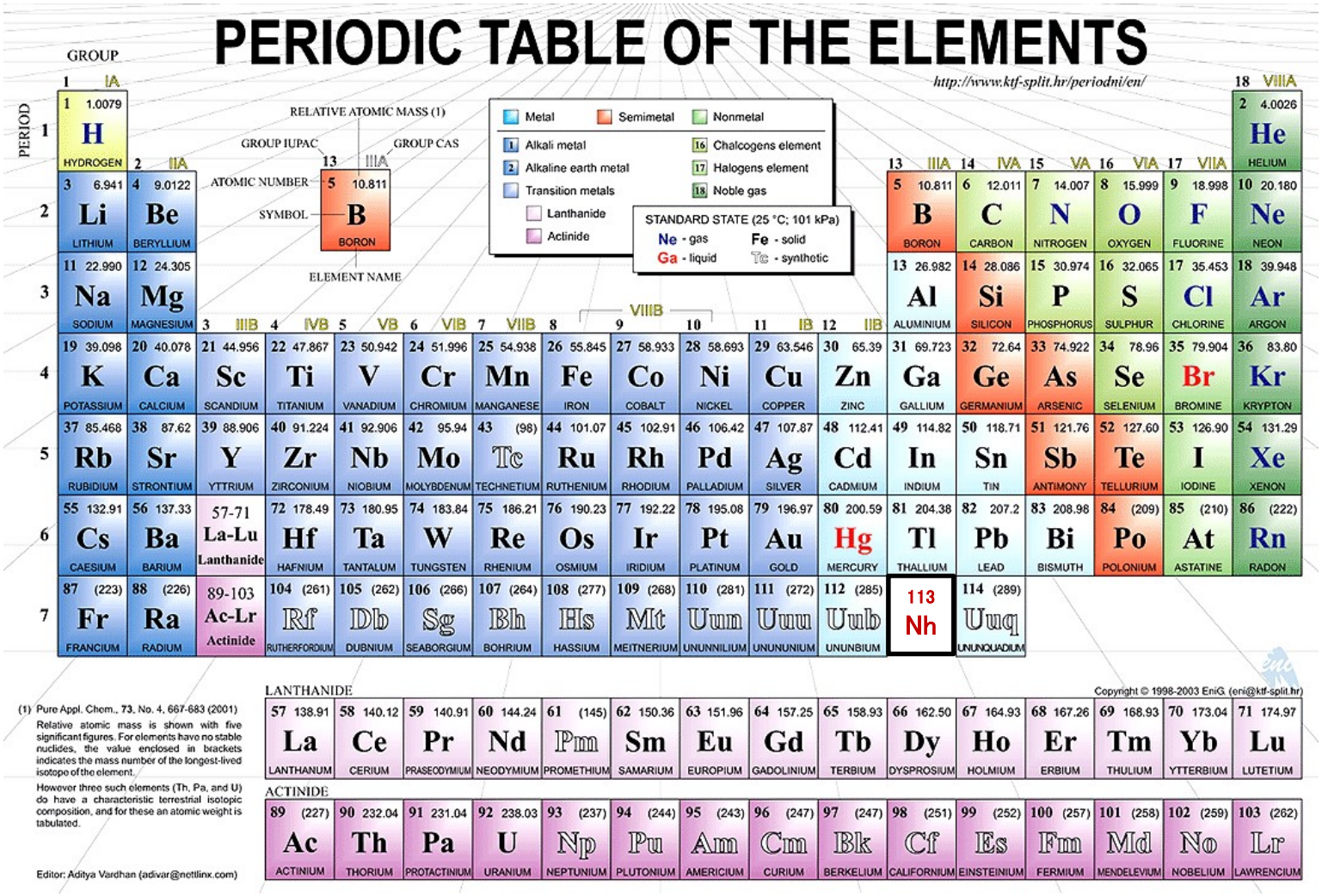


$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

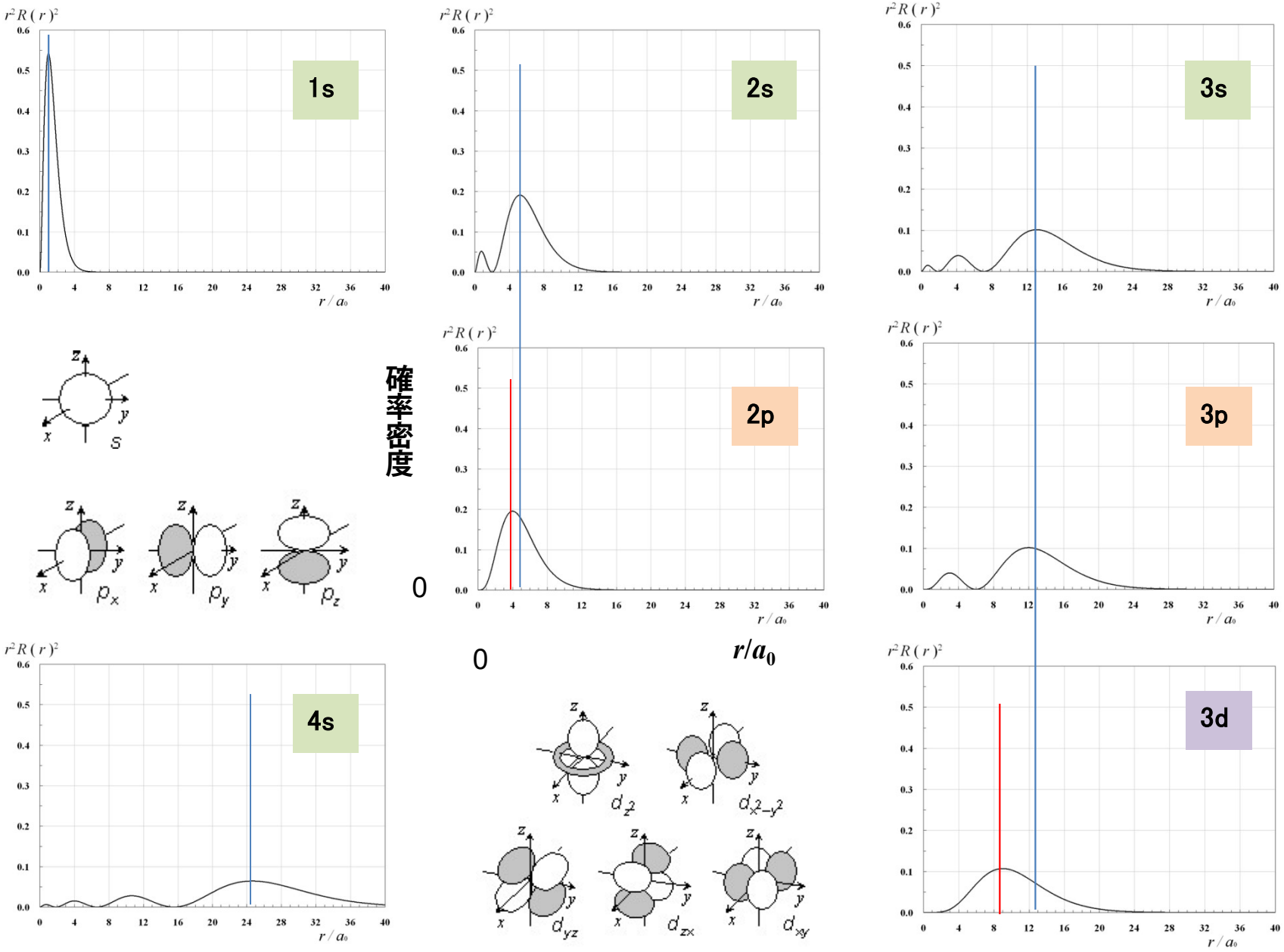
$$Y_1^{\pm 1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}$$

Chemical elements



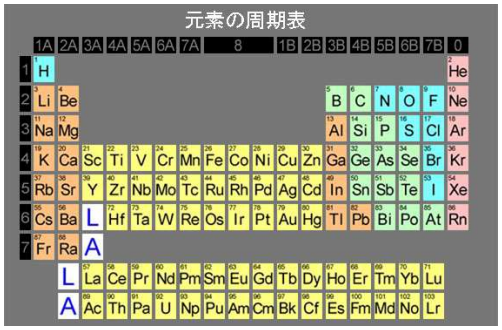
Body
H : 60%
O : 25.5%
C : 10.5%
N : 2.4%
P : 0.1%
S : 0.1%
(component ratio)

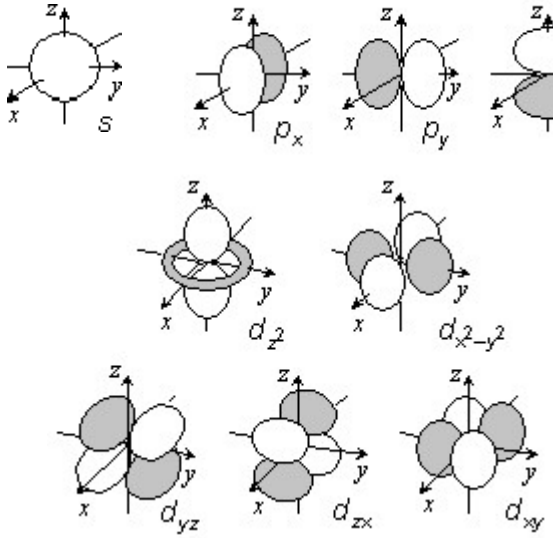
各電子軌道の動径分布関数



原子の凝集機構

化学結合の起源



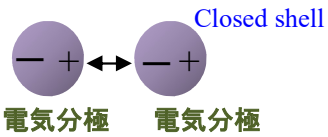


閉殻 (18族)

希ガス He, Ne, etc.

融点
Ne −249 ℃
Ar −189 ℃

ファンデルワールス結合

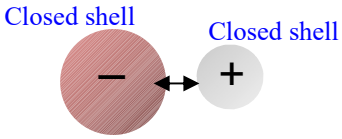


ほぼ閉殻（16, 17族）、（1, 2族）

分極、イオン化が容易

イオン結合

電子は原子に局在



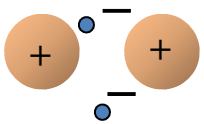
絶縁体

融点
NaCl 800 ℃
CaCl2 772 ℃

D軌道を部分占有 （遷移金属）

内殻電子による静電遮蔽

金属結合



電子は遍歴

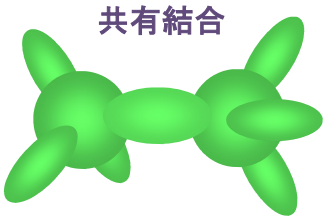
金属

融点
Zn 420 ℃
Fe 1535 ℃
Cu 1085 ℃
Au 1064 ℃
W 3387 ℃

P軌道を部分占有 （14,15,16族）

共有結合

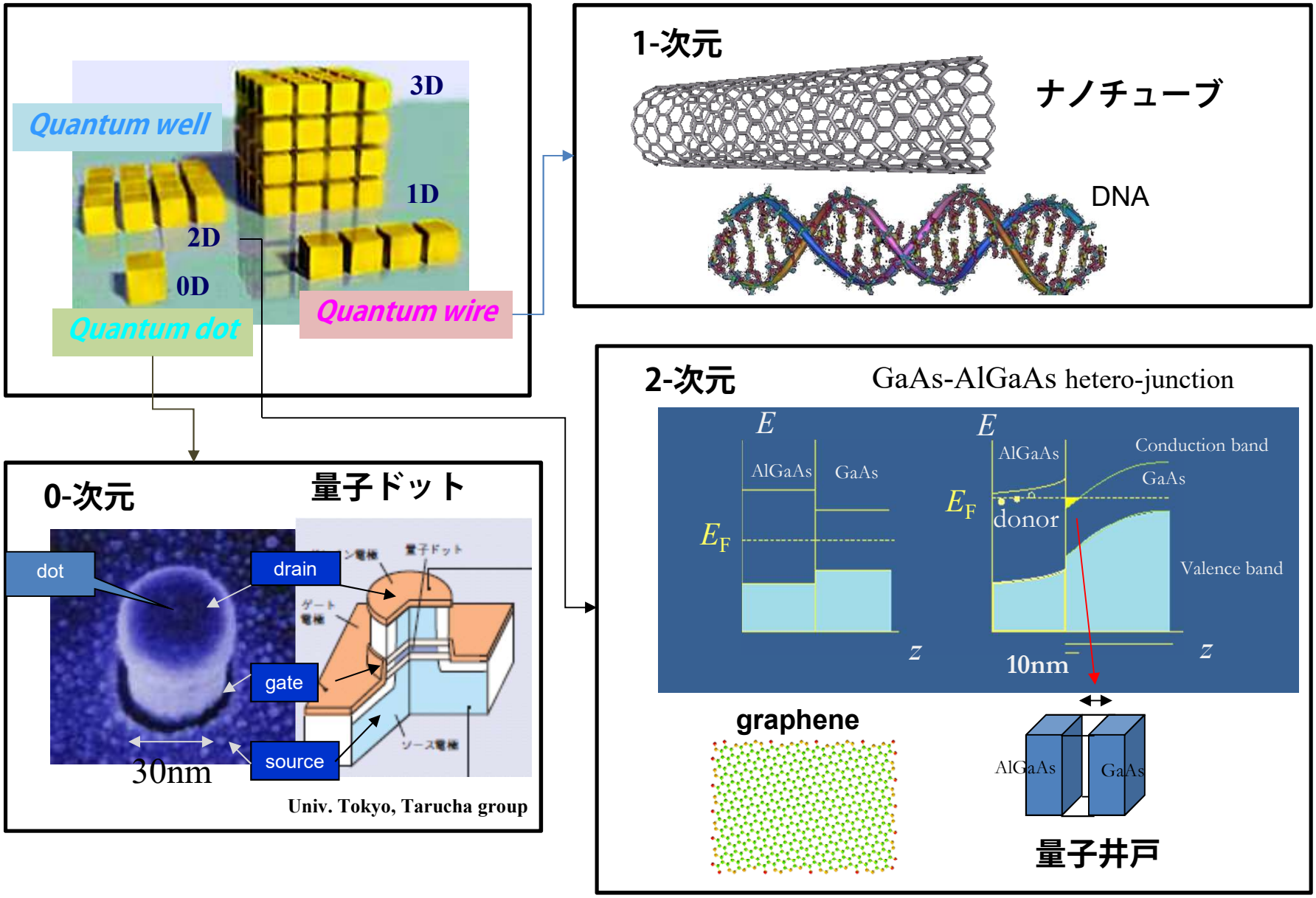
立体構造



融点
C >3500 ℃
Si 1414 ℃

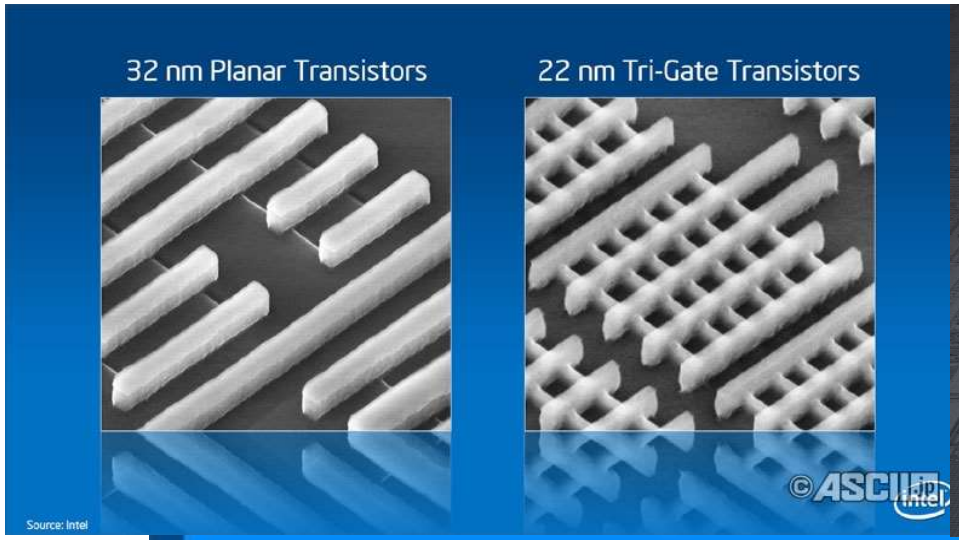
電子は2つの原子の中間領域に局在 → 絶縁体

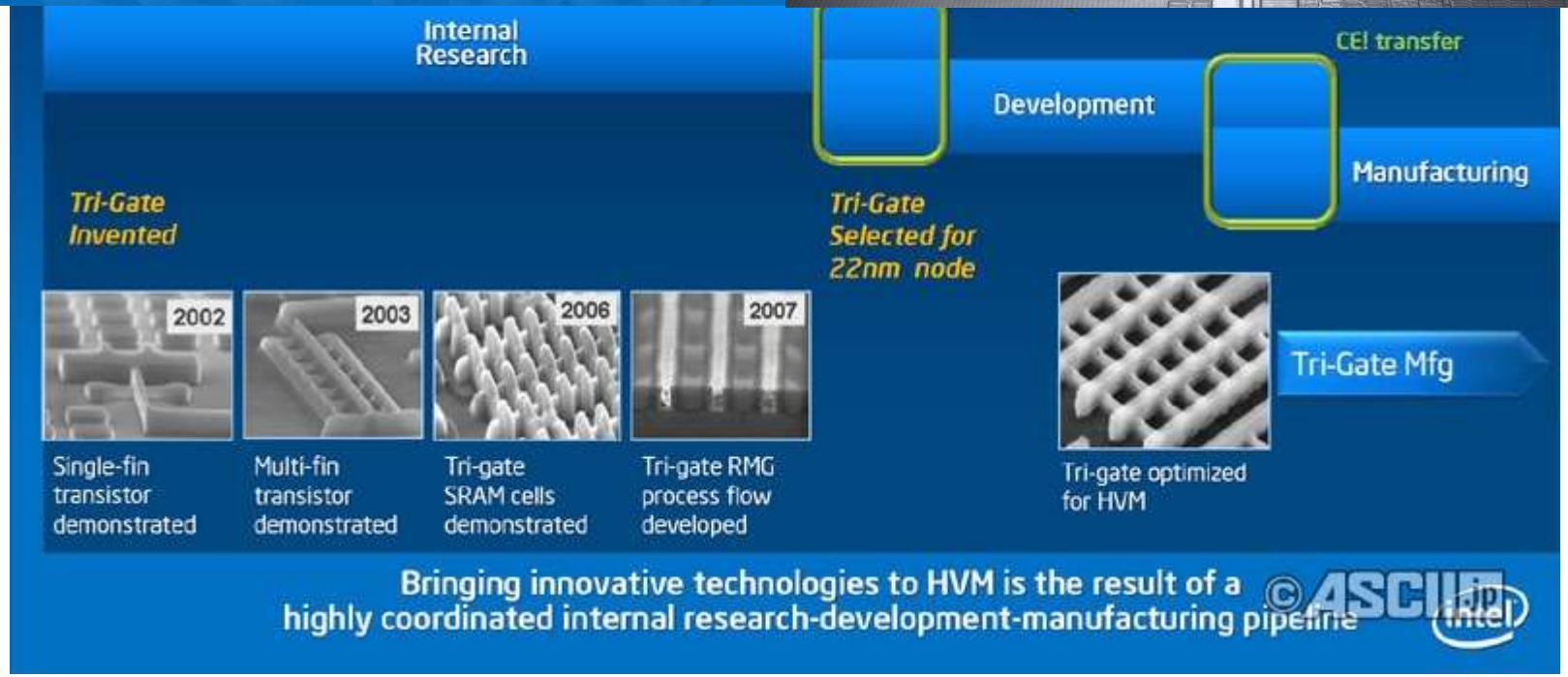
多様な凝集構造


Quantum well
3D
1D
2D
0D
Quantum dot
Quantum wire
1-次元
ナノチューブ
DNA
0-次元
量子ドット
dot
drain
gate
source
30nm
Univ. Tokyo, Tarucha group
2-次元
GaAs-AlGaAs hetero-junction
E
AlGaAs
GaAs
E_F
z
Conduction band
donor
Valence band
10nm
graphene
量子井戸

工業製品への応用

Intel 2012年の設備投資 約125億米ドル





自由電子模型

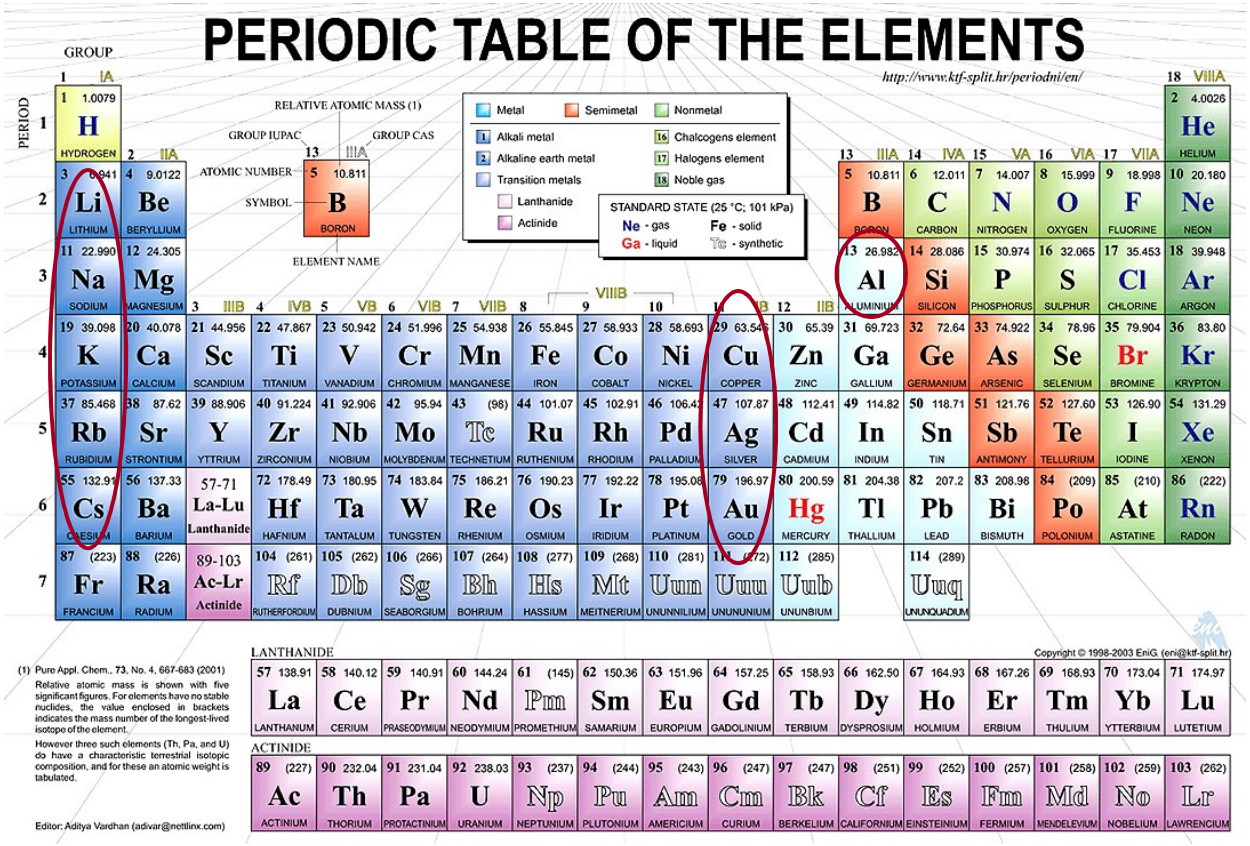
相互作用を無視する金属の模型

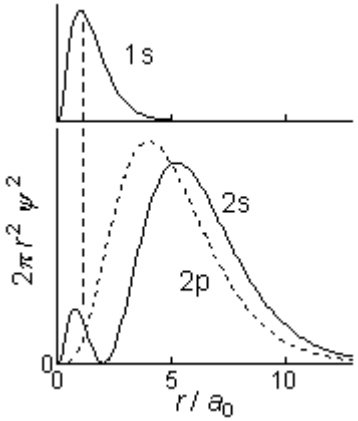
アルカリ金属 (Li,Na,K)、 貴金属 (Cu,Ag,Au)

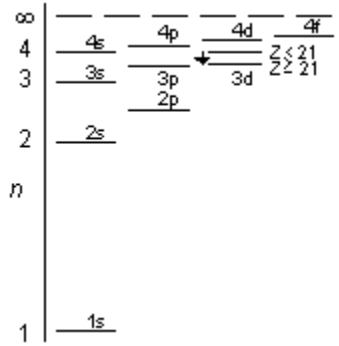
Na: $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^1$

Cu: $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^{10}\,(4s)^1$

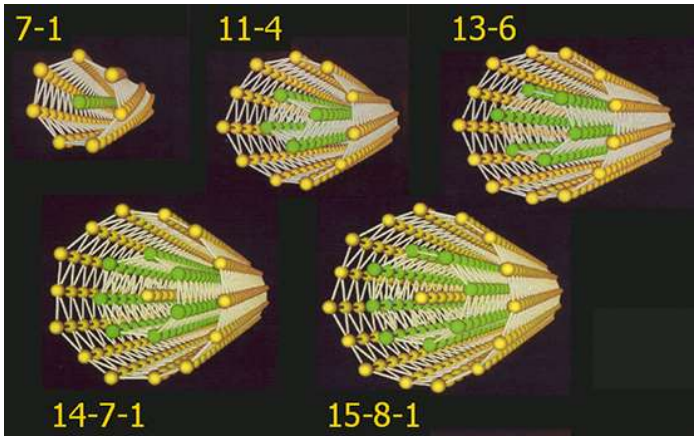
s 電子1個が最外殻に存在



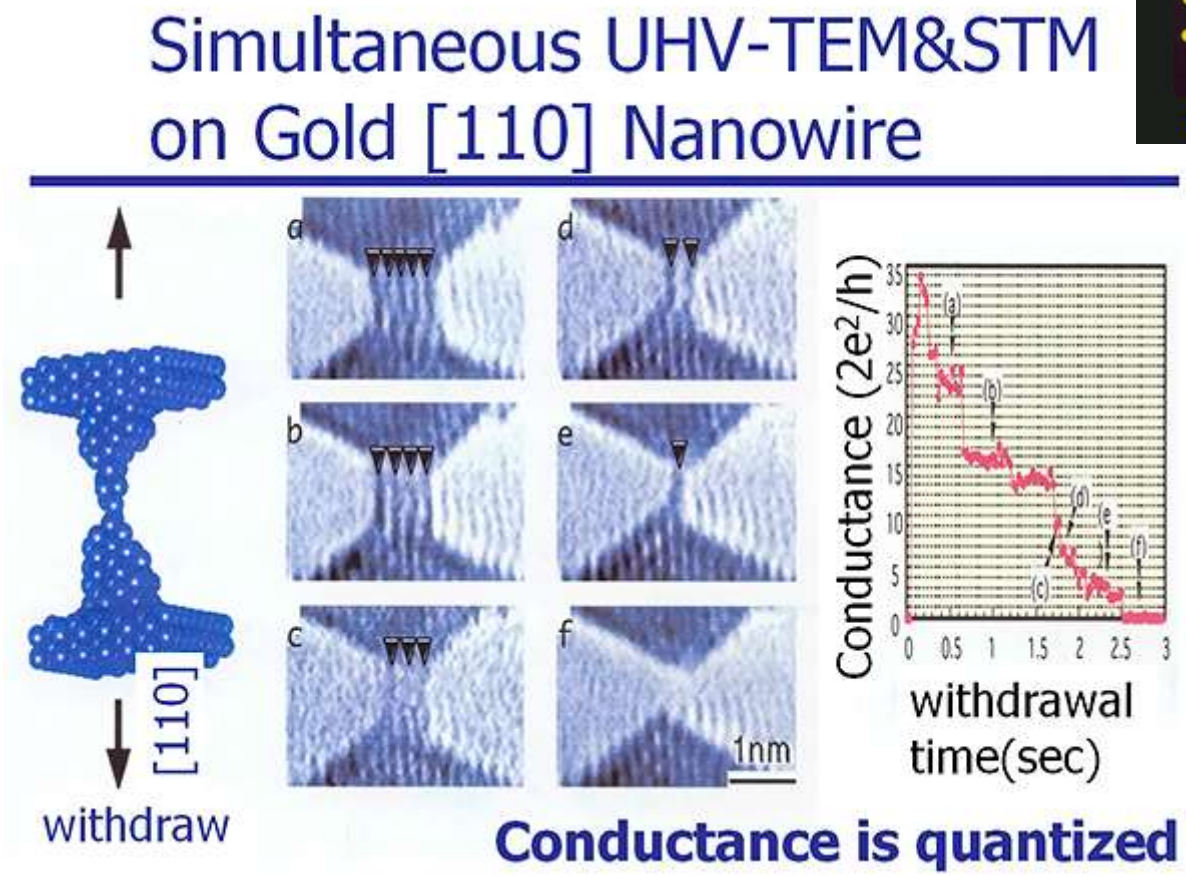




Auナノワイヤ



Auナノワイヤの構造モデル



TEMとSTMの同時観察　　東京工業大 高柳 研究室

自由電子とフェルミ面

Schrödinger equation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\,\Psi(\mathbf{r})$$

運動エネルギーだけ

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

固有波動関数 $\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\exp(i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$

固有値 $\varepsilon = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m}$

境界条件による量子化

$$\begin{aligned}\Psi(x,y,z) &= \Psi(x+L,y,z)\\ &= \Psi(x,y+L,z)\\ &= \Psi(x,y,z+L)\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad k_i = \frac{2\pi}{L}n_i$$

$\varepsilon_0 = 0$	$(0,0,0)$	(n_x, n_y, n_z)
$\varepsilon_1 = \frac{h^2}{2mL^2}$	$(\pm1,0,0),(0,\pm1,0),(0,0,\pm1)$	
$\varepsilon_2 = \frac{2h^2}{2mL^2}$	$(\pm1,\pm1,0),(\pm1,0,\pm1),(0,\pm1,\pm1)$	
$\varepsilon_3 = \frac{3h^2}{2mL^2}$	$(\pm1,\pm1,\pm1)$	
$\varepsilon_4 = \frac{4h^2}{2mL^2}$	$(\pm2,0,0),(0,\pm2,0),(0,0,\pm2)$	
$\vdots$		

フェルミ エネルギー

T=0 で電子が占有する最大のエネルギー準位

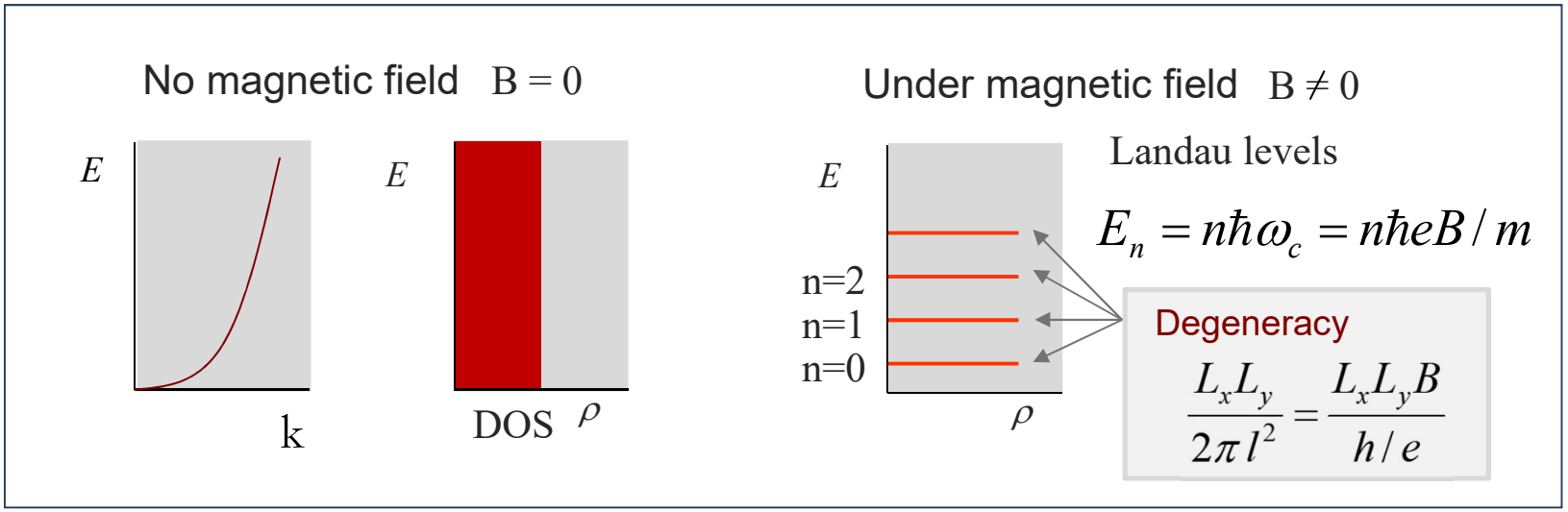
フェルミ 面

T=0 で占有、非占有状態を分ける波数空間における境界面

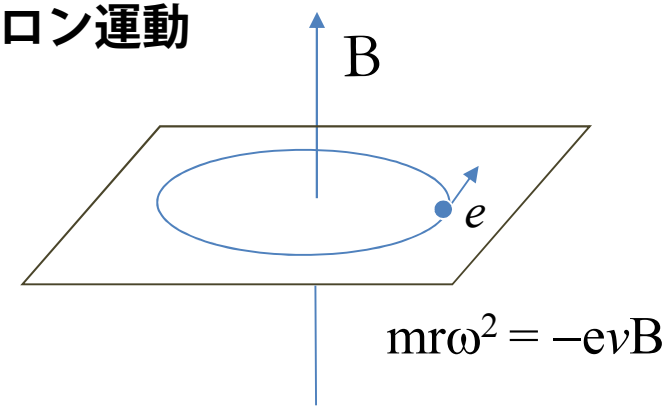
フェルミ面の内側の状態数は電子数に等しい

$$2\cdot\frac{4\pi}{3}k_F^3\frac{L^3}{(2\pi)^3} = N$$

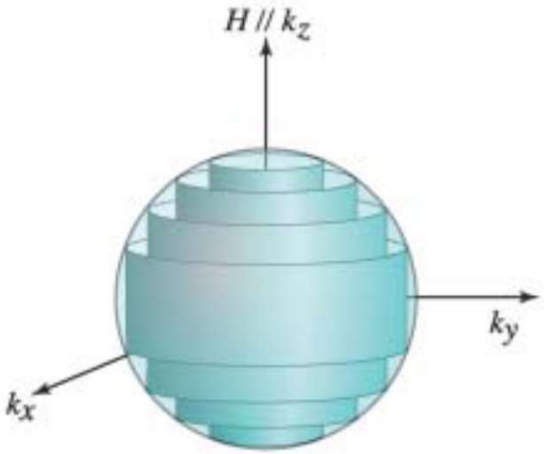
ランダウ準位



サイクロトロン運動



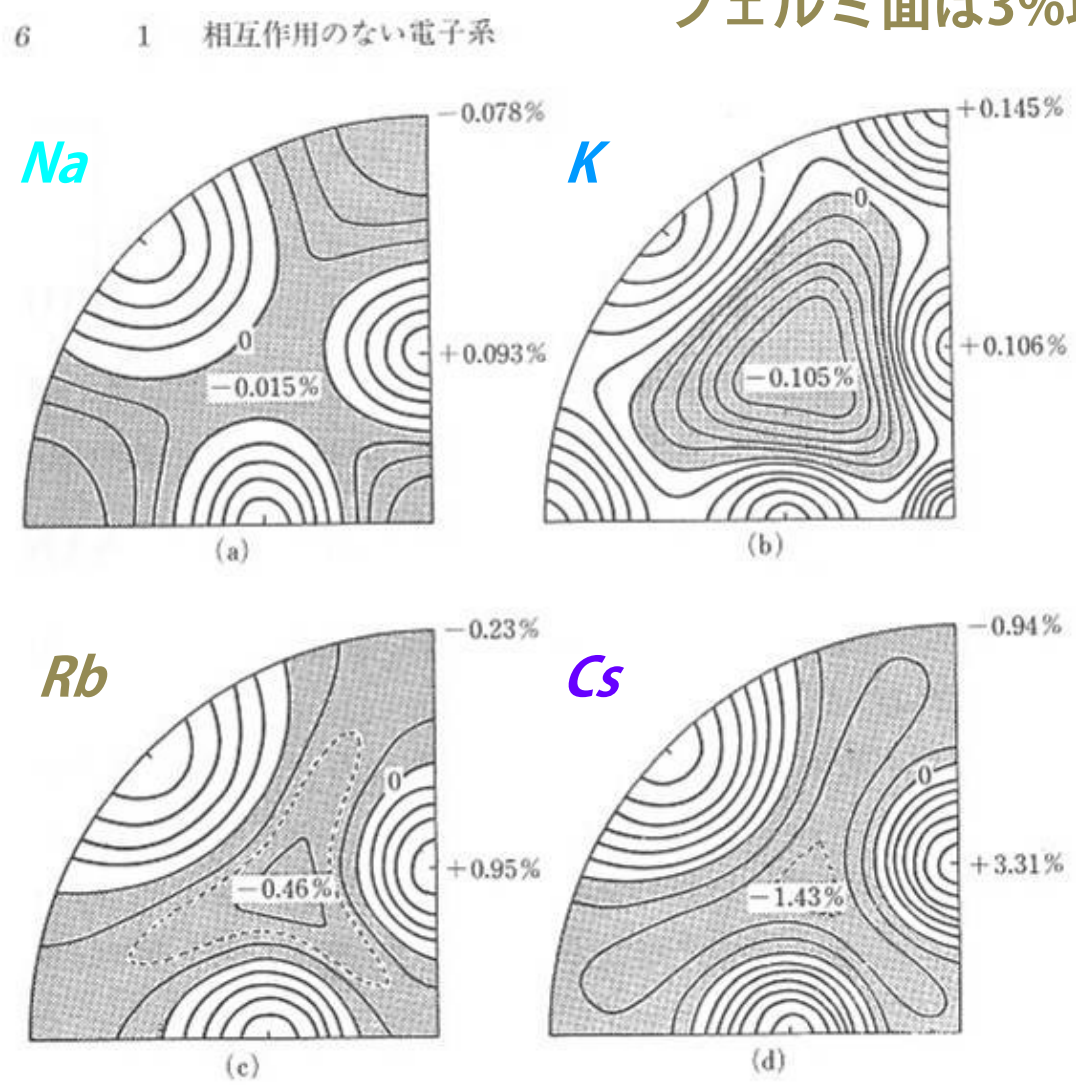
$mr\omega^2 = -evB$



$\omega_c = eB/m$ ：**サイクロトロン振動数**

アルカリ金属のフェルミ面

フェルミ面は3%以内の精度で球形



ドハース・ファン
アルフェン (dHvA) 効果

磁化が磁場の増加に対して振動

振動の周期はフェルミ面の極値断面積の逆数に比例

フェルミ面の形状を観測できる

D.Shoenberg (1969)

金属の低温物性

内部エネルギー

$$U = 2L^3 \int d\varepsilon\, N(\varepsilon)\, \varepsilon\, f(\varepsilon - \mu)$$

$$U = U(T=0, \mu = \varepsilon_F) + 2L^3 N(\varepsilon_F) \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 + \cdots$$

比熱

$$\frac{C(T)}{L^3} = \frac{1}{L^3}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{2\pi^2}{3} N(\varepsilon_F) k_B^2 T \equiv \gamma T$$

フェルミ分布関数　$\beta = 1/k_B T$

$$f(\varepsilon - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}$$

$$N_e = 2L^3 \int d\varepsilon\, N(\varepsilon)\, f(\varepsilon - \mu)$$

μ ：化学ポテンシャル

N_e ：電子数

磁化

$$M = -\mu_B L^3 \int d\varepsilon\, [N(\varepsilon - \mu_B H) - N(\varepsilon + \mu_B H)]\, f(\varepsilon - \mu)$$

$$= 2\mu_B^2 H L^3 \int d\varepsilon\, N(\varepsilon) \left[-\frac{\partial f(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \right]$$

δ-function at low T

磁化率

$$\chi = M / HL^3 = 2\mu_B^2 N(\varepsilon_F)$$

状態密度　at T= 0

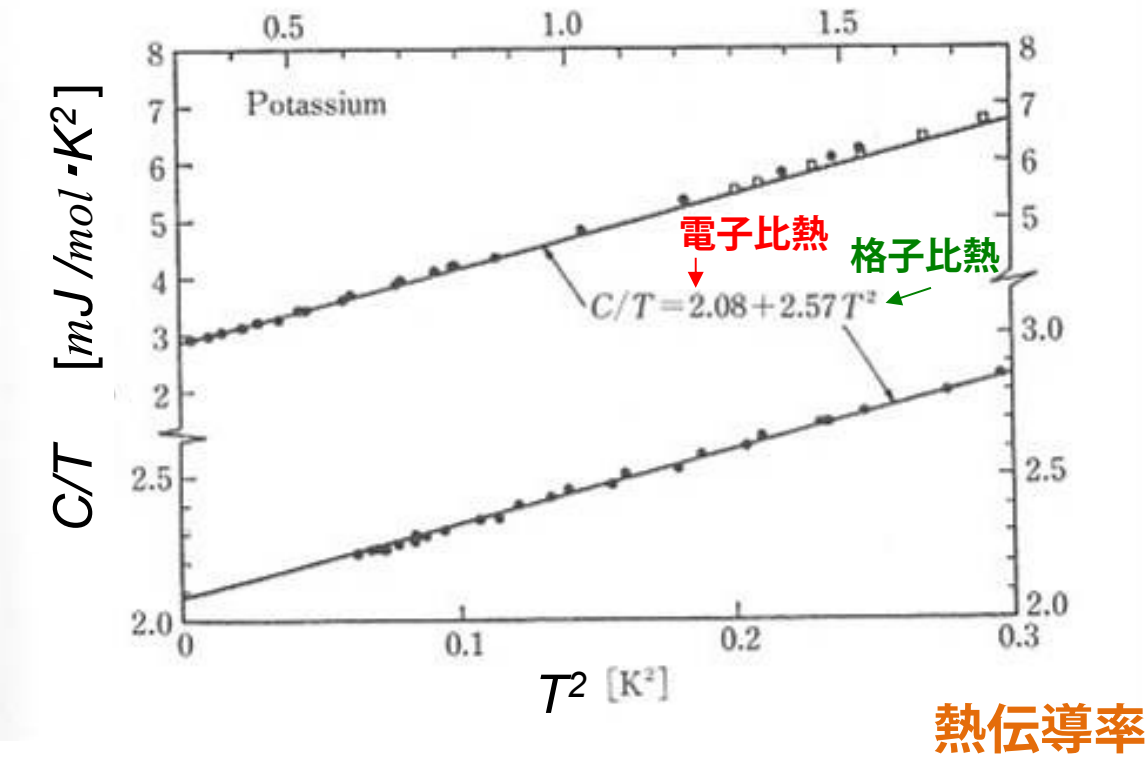
$$N(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m^3 \varepsilon}}{2\pi^2 \hbar^3}$$

（3次元系）

金属の物性

金属カリウムの比熱

W.H.Lien /N.E.Phillips (1964)



電子比熱係数 γ

通常の金属：$\gamma \sim 1$ mJ/mol K²

重い電子系：$\gamma \sim 1000$ mJ/mol K²

電気抵抗

$10^{-8}\ \Omega\cdot m$　0℃

Au	2.05
Ag	1.47
Cu	1.55
Fe	10 ～20
Ni	6.2
Pd	19.2

熱伝導率

$W\cdot m^{-1}K^{-1}$　0℃

SiO_2	1.4
木材	0.15
ブロック	0.5

熱伝導率

$W\cdot m^{-1}K^{-1}$　0℃

Au	319
Ag	428
Cu	403
Fe	33
Ni	94
Pd	36

周期ポテンシャル

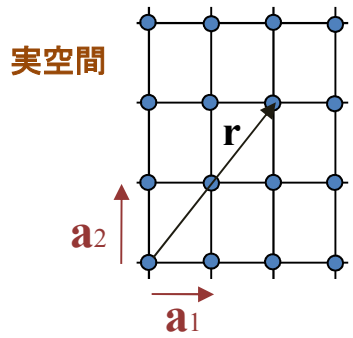
Schrödinger equation

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right\}\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\,\Psi(\mathbf{r})$$

周期ポテンシャル

$$V(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i) = V(\mathbf{r})$$

$\mathbf{a}_i$: 単位格子ベクトル



$V(\mathbf{r})$ **のフーリエ変換**

$$V_k = \frac{1}{L^3}\int d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{L^3}\int_{unit\ cell} d\mathbf{r}\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, V(\mathbf{r})\cdot \sum_{l_1,l_2,l_3} e^{-i\mathbf{k}\cdot(l_1\mathbf{a}_1+l_2\mathbf{a}_2+l_1\mathbf{a}_3)}$$

$$\sum_{l_1,l_2,l_3} e^{-i\mathbf{k}\cdot(l_1\mathbf{a}_1+l_2\mathbf{a}_2+l_1\mathbf{a}_3)} \neq 0 \Rightarrow \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = 2\pi n_i \qquad (i=1,2,3) \quad n_i : \text{integer}$$

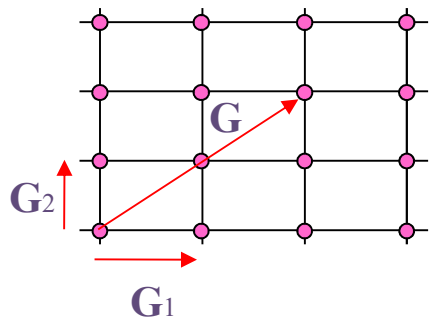
$$\mathbf{G}_i\cdot\mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$\mathbf{G}_i$: 基本逆格子ベクトル

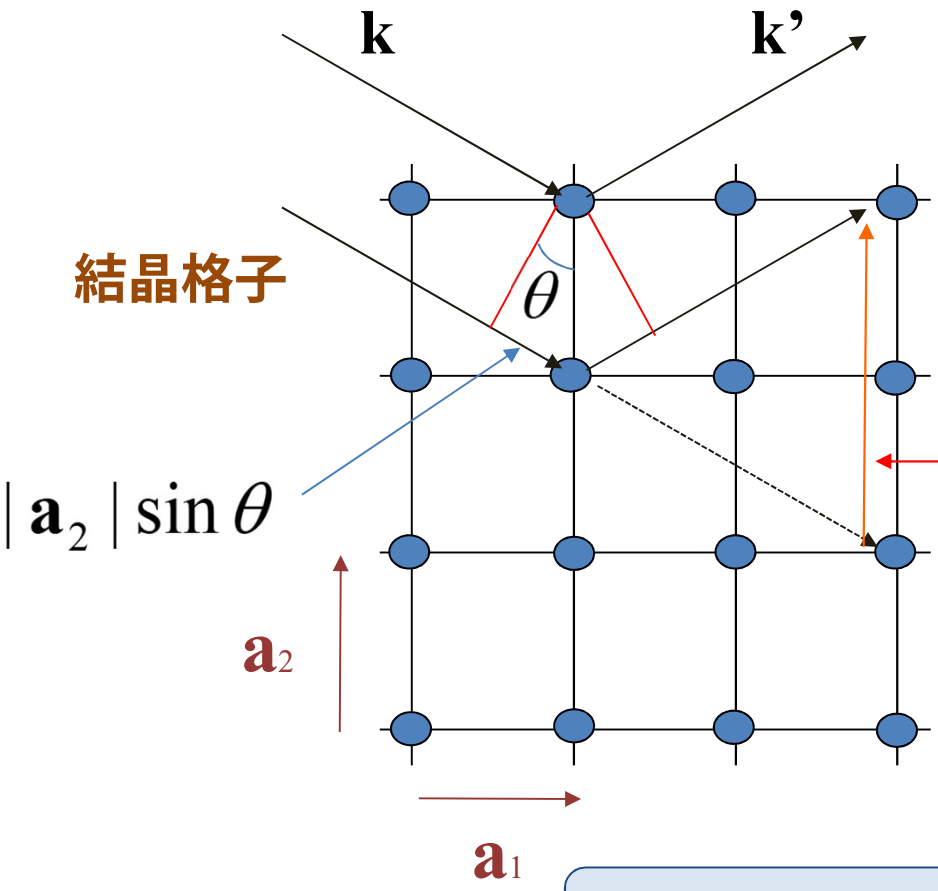
逆格子ベクトル $\mathbf{G} = n_1\mathbf{G}_1 + n_2\mathbf{G}_2 + n_3\mathbf{G}_3$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

逆格子空間



ブラッグ反射



ブラッグの反射条件

$$2|\mathbf{a}_2|\sin\theta = n\lambda = n\frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$$

$$2|\mathbf{k}|\sin\theta = n\frac{2\pi}{|\mathbf{a}_2|}$$

$$|\mathbf{k}-\mathbf{k}'| = 2|\mathbf{k}|\sin\theta$$

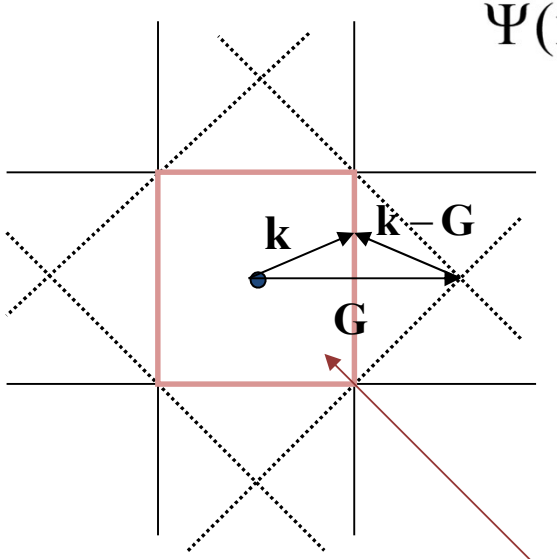
$$= n\frac{2\pi}{|\mathbf{a}_2|}$$

$$= n|\mathbf{G}_2|$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{G}$$

ブリルアンゾーン

$$\mathbf{k}^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2$$



周期境界条件

$$\Psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \Psi(\mathbf{r})$$

N_i : i 方向の単位格子の数

$$e^{iN_i \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i} = 1$$

$$N_i \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = 2\pi m_i$$

$$\mathbf{G}_i \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi$$

$$N_i \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i = \mathbf{G}_i \cdot \mathbf{a}_i m_i$$

波数ベクトル $\mathbf{k} = \frac{m_1}{N_1}\mathbf{G}_1 + \frac{m_2}{N_2}\mathbf{G}_2 + \frac{m_3}{N_3}\mathbf{G}_3$

ブリルアンゾーンの中の k 点の数：$N_1 \times N_2 \times N_3$

$$-\frac{N_i}{2} < m_i \le \frac{N_i}{2} \qquad m_i : \text{integer}$$

周期ポテンシャル中の波動関数

Schrödinger equation

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\sum_G V_G e^{iG\cdot\mathbf{r}}\right\}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}=\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+\sum_G V_G e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right\}\Psi(\mathbf{r})=E\Psi(\mathbf{r})\qquad V(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{G}}V_{\mathbf{G}}e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}+\sum_{\mathbf{G}}V_{\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}-\mathbf{G}}=Ea_{\mathbf{k}}\qquad \varepsilon_{\mathbf{k}}=\hbar^2\mathbf{k}^2/2m$$

$$\Downarrow$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}+\sum_{\mathbf{G}'}V_{\mathbf{G}'}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{G}'}=Ea_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}+V_{\mathbf{G}}\approx Ea_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}\qquad a_{\mathbf{k}}\approx 1,\quad a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}<<1,\quad V_{\mathbf{G}}<<1$$

$$\downarrow$$

2次の微小量を無視 $\quad V_{\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$

$$a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}\approx\frac{V_{\mathbf{G}}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}}\qquad E=\varepsilon_{\mathbf{k}}+\sum_{\mathbf{G}}\frac{V_{\mathbf{G}}V_{-\mathbf{G}}}{E-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}}\approx\varepsilon_{\mathbf{k}}+\sum_{\mathbf{G}}\frac{V_{\mathbf{G}}V_{-\mathbf{G}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}}$$

ブロッホ状態

$$\Psi(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}\phi_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}(\mathbf{r})$$
$$=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\sum_{\mathbf{G}}a_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$
$$=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u(\mathbf{r})$$

$$u(\mathbf{r})=u(\mathbf{R}+\mathbf{r})$$
$$\mathbf{R}=l_1\mathbf{a}_1+l_2\mathbf{a}_2+l_3\mathbf{a}_3$$

$V(\mathbf{r})=0$ における固有状態

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

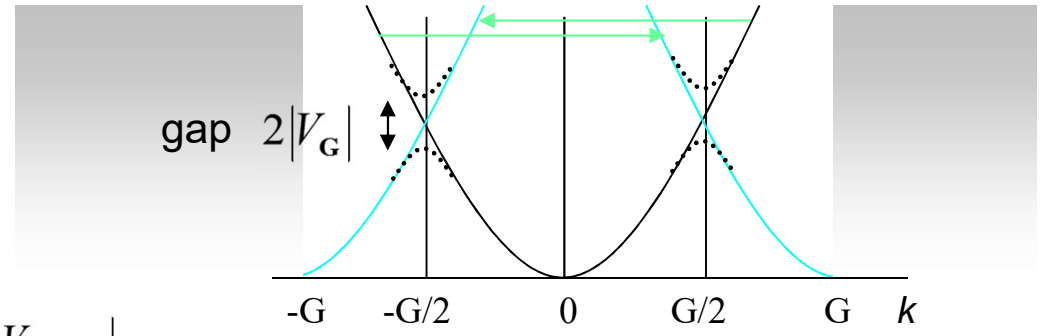
バンドギャップの生成

$\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mathbf{k+G}}$

$a_{\mathbf{k}}$ と $a_{\mathbf{k+G}}$ だけが重要

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{k-G}} = E a_{\mathbf{k}}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k+G}} a_{\mathbf{k+G}} + \sum_{\mathbf{G'}} V_{\mathbf{G'}} a_{\mathbf{k+G-G'}} = E a_{\mathbf{k+G}}$$



$$\varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{-G}} a_{\mathbf{k+G}} = E a_{\mathbf{k}}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k+G}} a_{\mathbf{k+G}} + V_{\mathbf{G}} a_{\mathbf{k}} = E a_{\mathbf{k+G}}$$

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E & V_{\mathbf{-G}} \\ V_{\mathbf{G}} & \varepsilon_{\mathbf{k+G}} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$E = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k+G}}}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k+G}})^2 + V_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{-G}}} \Rightarrow 2|V_{\mathbf{G}}| \text{ splitting}$$

単位格子あたり偶数の電子 → フェルミ準位以下のバンドを完全に占有

↓

バンドギャップの存在 → バンド絶縁体

Example : NaCl

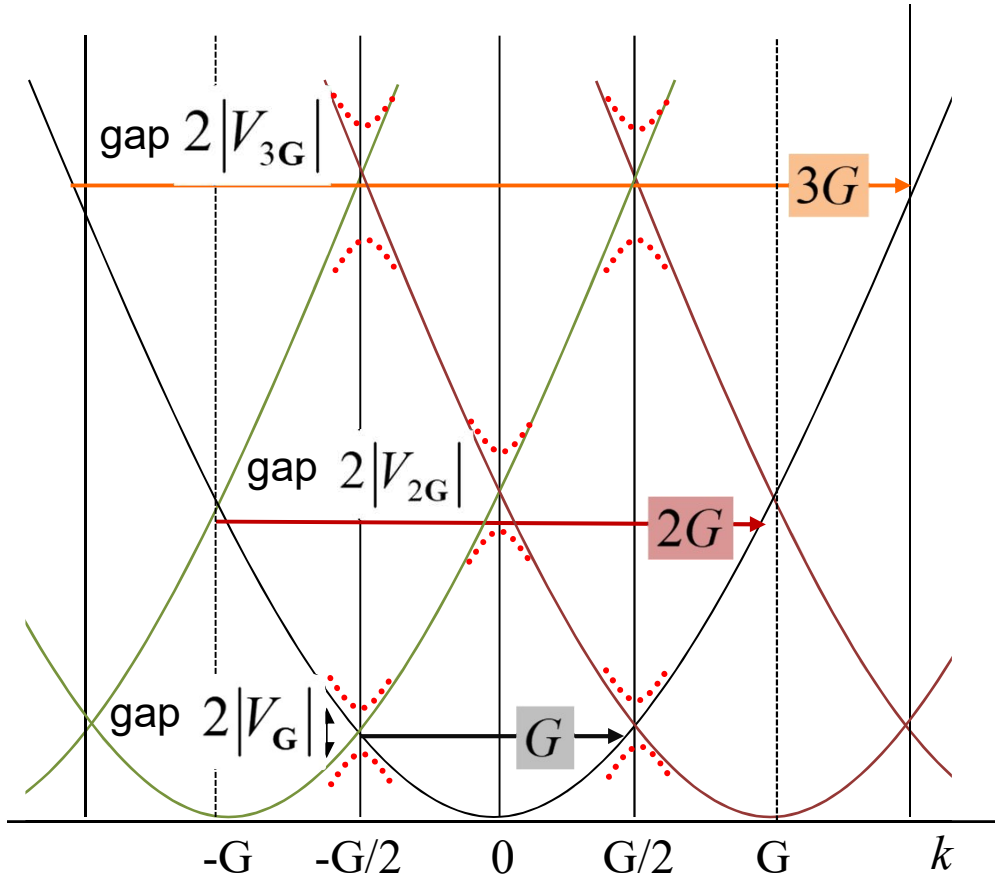
Na: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^1$

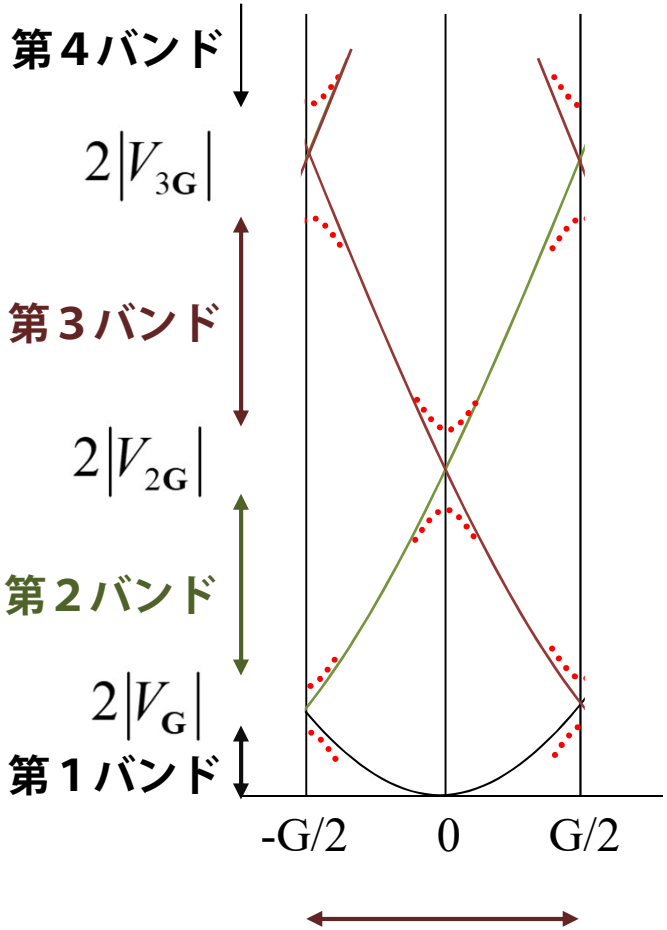
Cl : $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^6 (3s)^2 (3p)^5$

電子数は偶数で14番目と15番目のバンド間にギャップが存在

→ NaCl は絶縁体

バンドギャップの生成

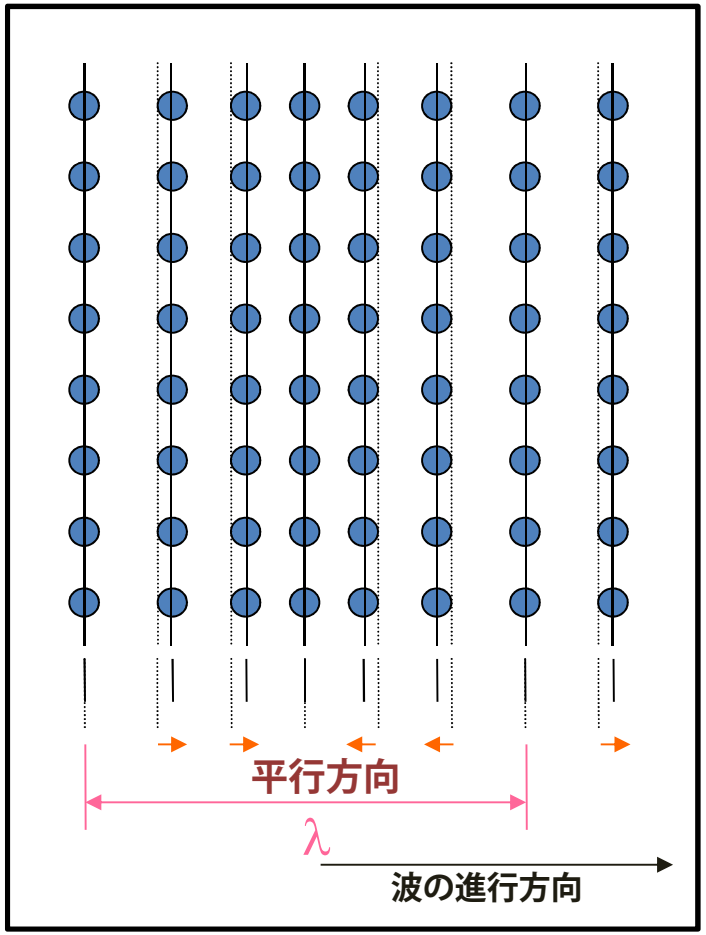




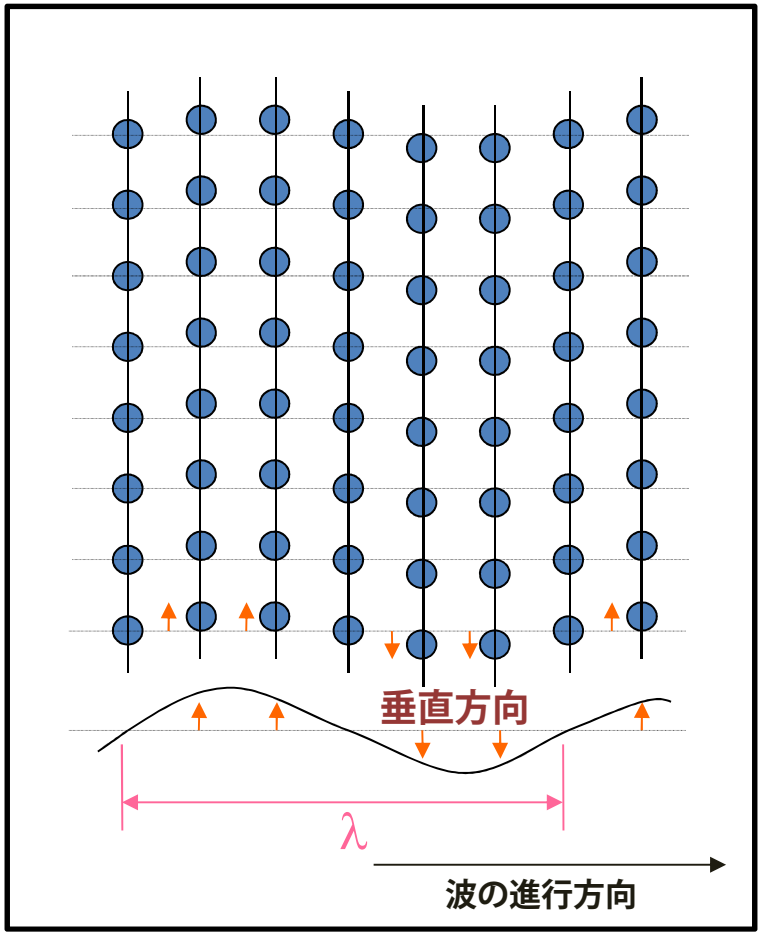
ブリルアンゾーンの中のｋ点の数は
単位胞の数に等しい

格子振動

縦波



横波



n番目の原子面に働く力

$$F_n = C(u_{n+1} - u_n) - C(u_n - u_{n-1})$$

u_n : **n番目の原子面の平衡点からのずれ**

運動方程式

$$M\frac{d^2}{dt^2}u_n = C(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n)$$

C

↓

縦波 $C_{/\!/}$ **ヤング率**

横波 $C_{\perp}$ **剛性率**

格子振動

K and $K+2\pi/a$ are equivalent

$$M\frac{d^2}{dt^2}u_n = C(u_{n+1}+u_{n-1}-2u_n)$$
$$-M\omega^2 u_n = 2C\left(\cos(Ka)-1\right)u_n$$

$$u_n = u\exp(iKna - i\omega t)$$
$$= u\exp(iKna + i2\pi n - i\omega t)$$
$$= u\exp(i\,(K+2\pi/a)na - i\omega t)$$

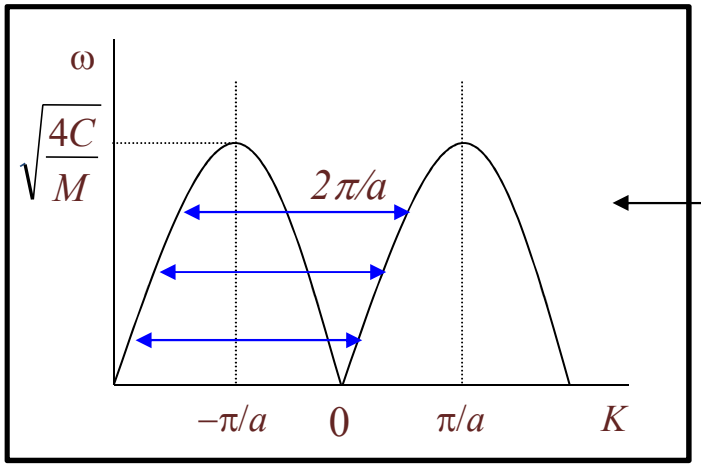
$$-\omega^2 = \frac{2C}{M}\left(\cos(Ka)-1\right)$$

$$\cos x = \cos^2\frac{x}{2} - \sin^2\frac{x}{2} = 1 - 2\sin^2\frac{x}{2}$$

$$\omega^2 = \frac{4C}{M}\sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right)$$

分散関係

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}Ka\right|$$



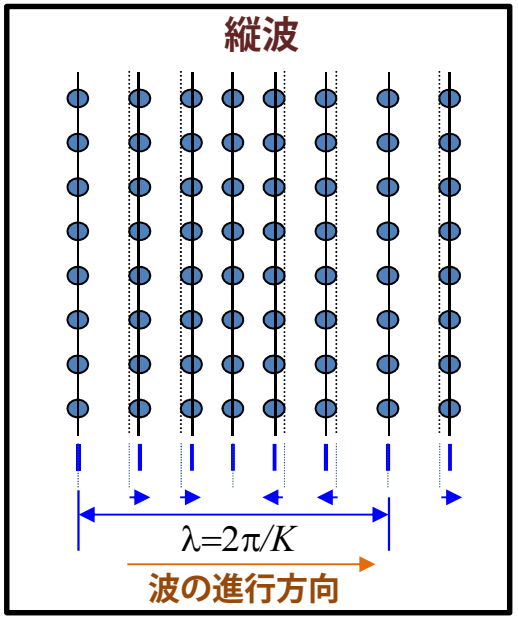
C

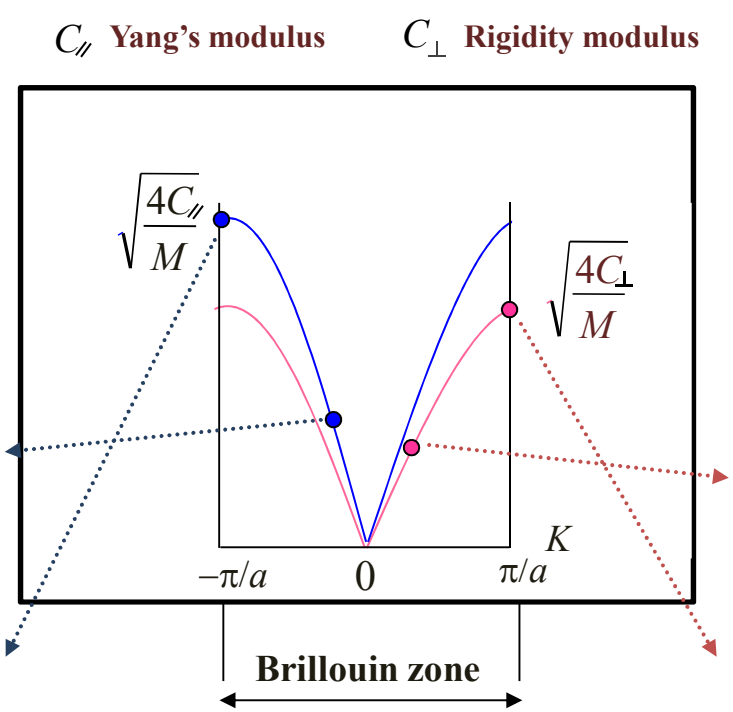
↓

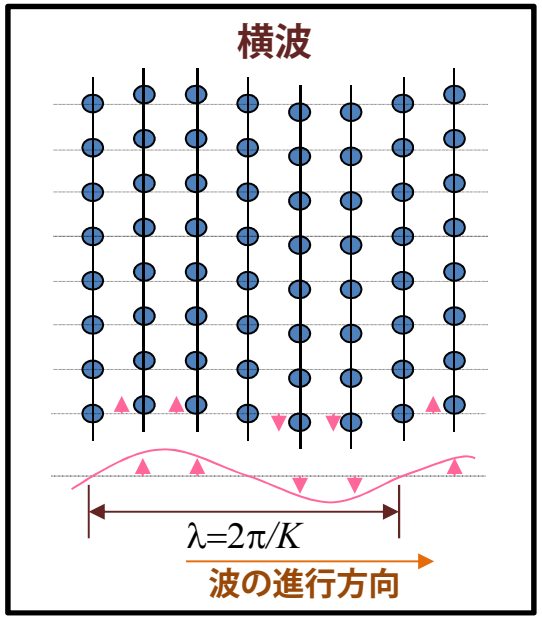
縦波 $C_{/\!/}$ **ヤング率**

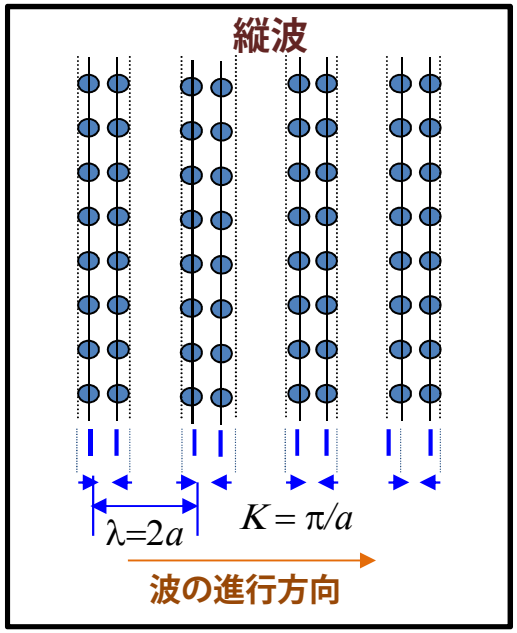
横波 $C_{\perp}$ **剛性率**

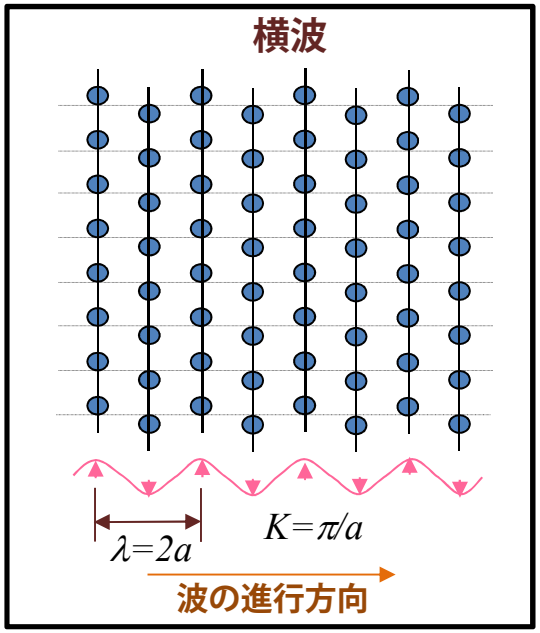
格子振動











原子面の数：N ⟶ N 個の独立な K

$$-\frac{\pi}{a} < K \leq \frac{\pi}{a}$$

ゾーン境界　$K = p/a$

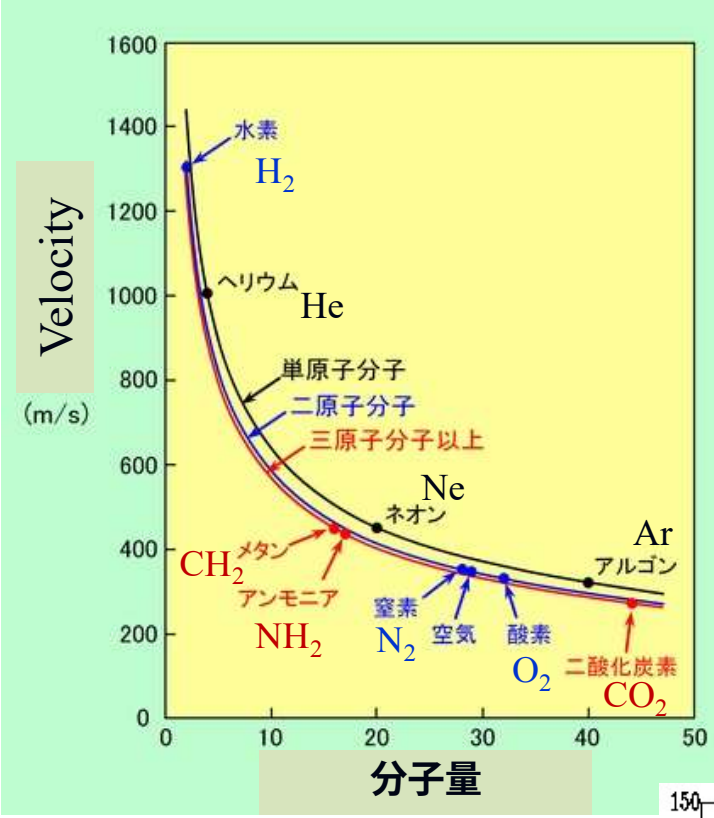
$$u_{n+1} = -u_n$$

波の速度

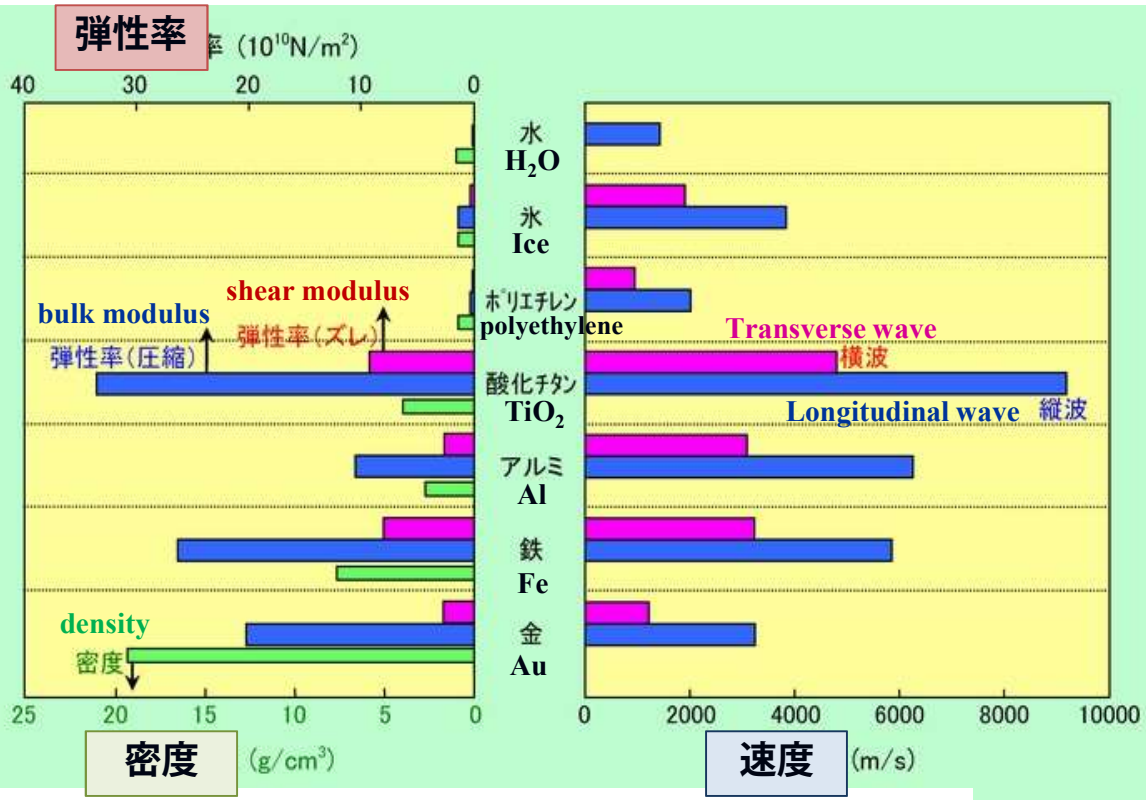
分散関係

$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}Ka\right|$$

気体

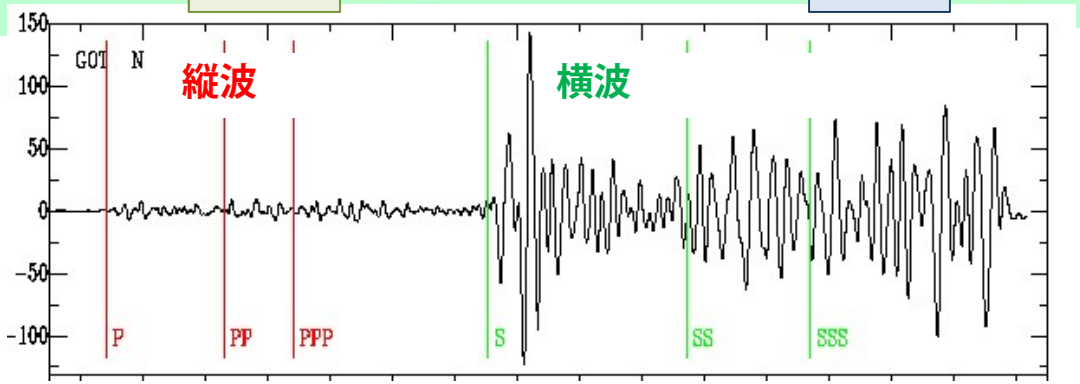


液体、固体



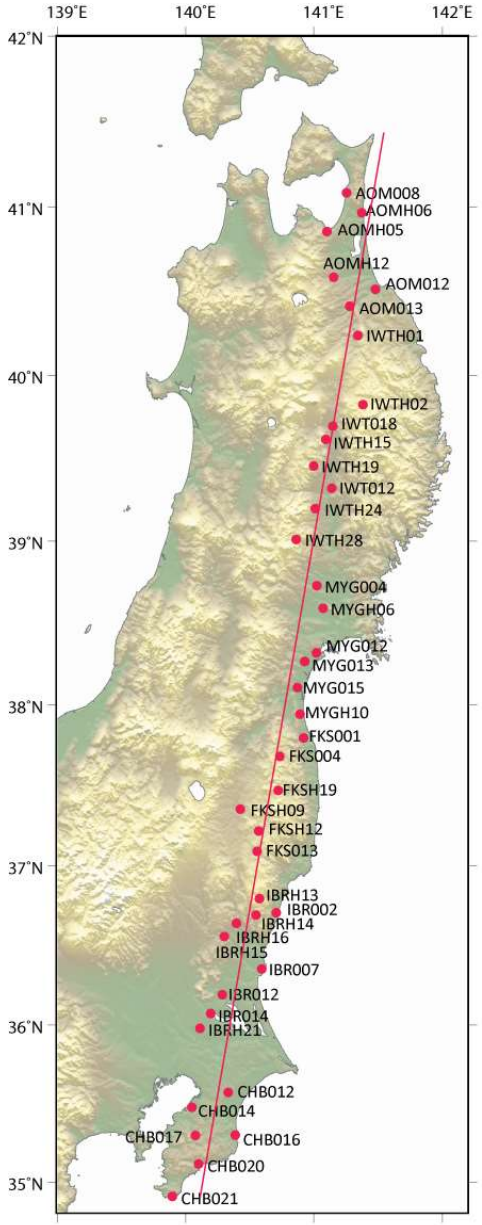
地震波

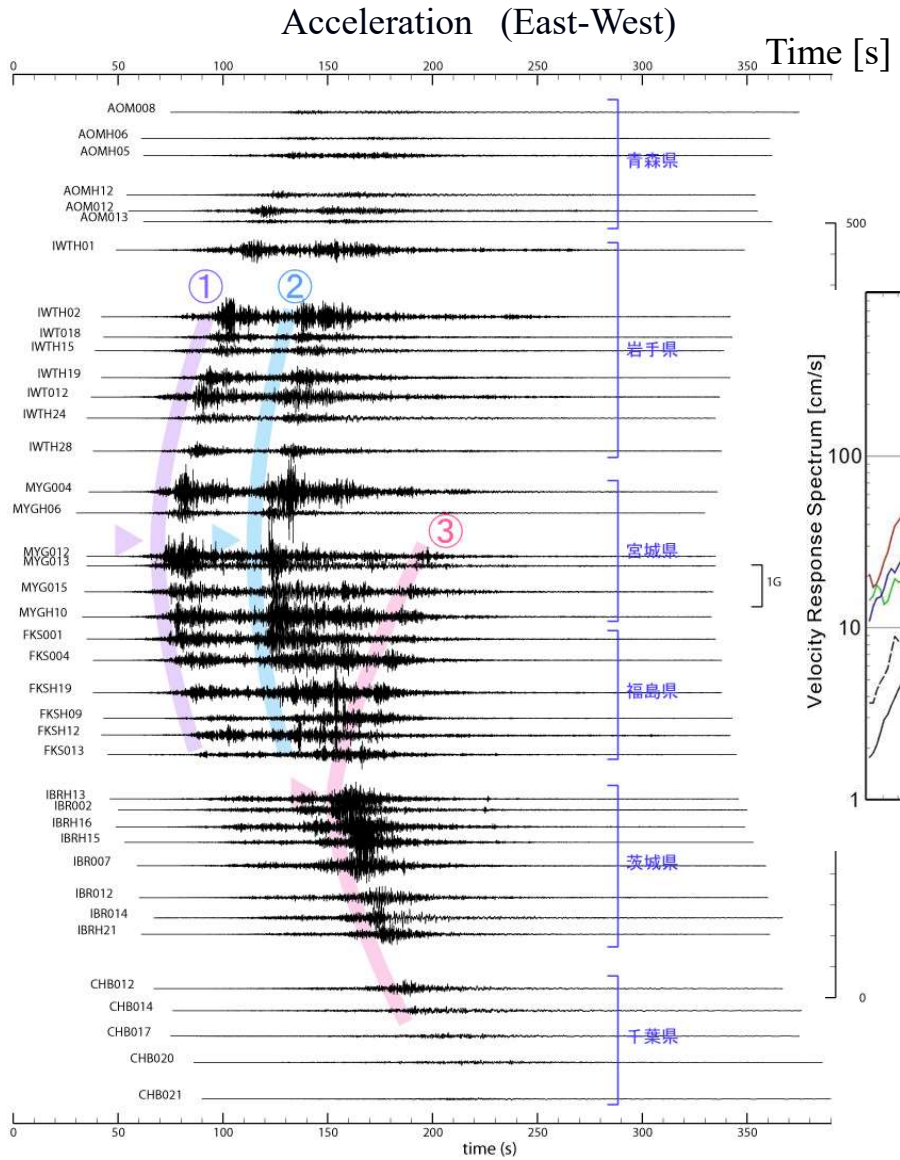
(1906)　サンフランシスコ地震

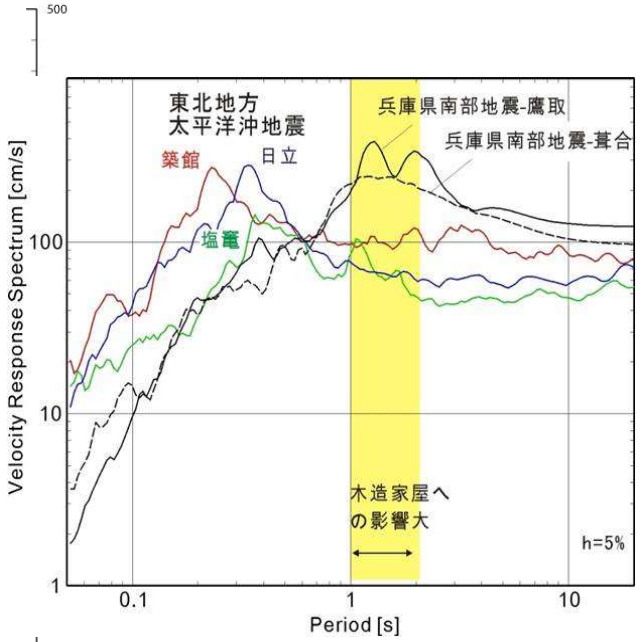


地震波

2011.3.11


139°E
140°E
141°E
142°E
42°N
41°N
40°N
39°N
38°N
37°N
36°N
35°N
AOM008
AOMH06
AOMH05
AOMH12
AOM012
AOM013
IWTH01
IWTH02
IWT018
IWTH15
IWTH19
IWT012
IWTH24
IWTH28
MYG004
MYGH06
MYG012
MYG013
MYG015
MYGH10
FKS001
FKS004
FKSH19
FKSH09
FKSH12
FKS013
IBRH13
IBR002
IBRH14
IBRH16
IBRH15
IBR007
IBR012
IBR014
IBRH21
CHB012
CHB014
CHB017
CHB016
CHB020
CHB021


Acceleration (East-West)
Time [s]
0
50
100
150
200
250
300
350
AOM008
AOMH06
AOMH05
AOMH12
AOM012
AOM013
IWTH01
IWTH02
IWT018
IWTH15
IWTH19
IWT012
IWTH24
IWTH28
MYG004
MYGH06
MYG012
MYG013
MYG015
MYGH10
FKS001
FKS004
FKSH19
FKSH09
FKSH12
FKS013
IBRH13
IBR002
IBRH16
IBRH15
IBR007
IBR012
IBR014
IBRH21
CHB012
CHB014
CHB017
CHB020
CHB021
青森県
岩手県
宮城県
福島県
茨城県
千葉県
①
②
③
1G
time (s)


東北地方
太平洋沖地震
兵庫県南部地震-鷹取
兵庫県南部地震-葺合
築館
日立
塩竈
木造家屋への影響大
h=5%
Velocity Response Spectrum [cm/s]
500
100
10
1
0
0.1
1
10
Period [s]

２原子結晶のフォノン

M_1の原子面の変位

$$M_1 \frac{d^2}{dt^2} u_n = C(v_n + v_{n-1} - 2u_n)$$

M_2の原子面の変位

$$M_2 \frac{d^2}{dt^2} v_n = C(u_{n+1} + u_n - 2v_n)$$

$$u_n = u \exp(iKna - i\omega t)$$
$$v_n = v \exp(iKna - i\omega t)$$

$$-M_1\omega^2 u_n = -2C\,u_n + C(1+\exp(-Ka))v_n$$
$$-M_2\omega^2 v_n = C(\exp(Ka)+1)u_n - 2C\,v_n$$

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C(1+\exp(-Ka)) \\ -C(\exp(Ka)+1) & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1-\cos(Ka)) = 0$$

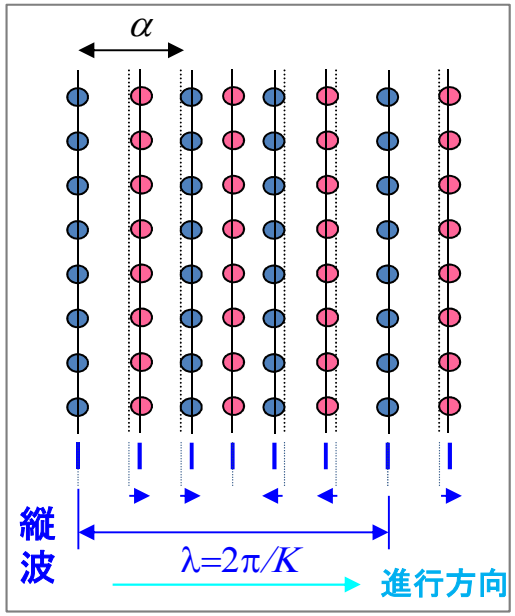
$Ka << 1$

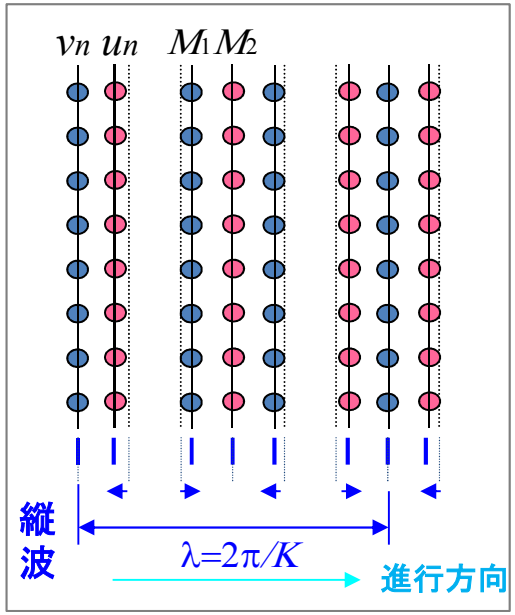
$$\omega^2 \cong 2C\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \qquad -\frac{M_1}{M_2}u - v = 0$$

$$\omega^2 \cong \frac{1}{2}\frac{C}{M_1 + M_2}K^2 a^2 \qquad u - v = 0$$

$(K=0)$

$$K = \pm\frac{\pi}{a} \qquad \omega^2 = \frac{2C}{M_1} \qquad \omega^2 = \frac{2C}{M_2}$$

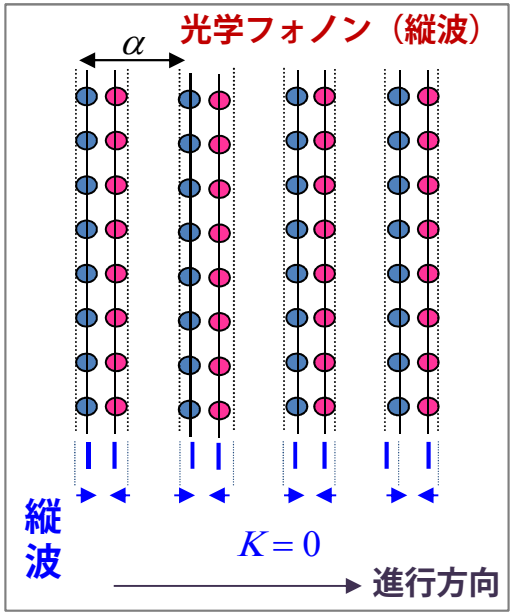


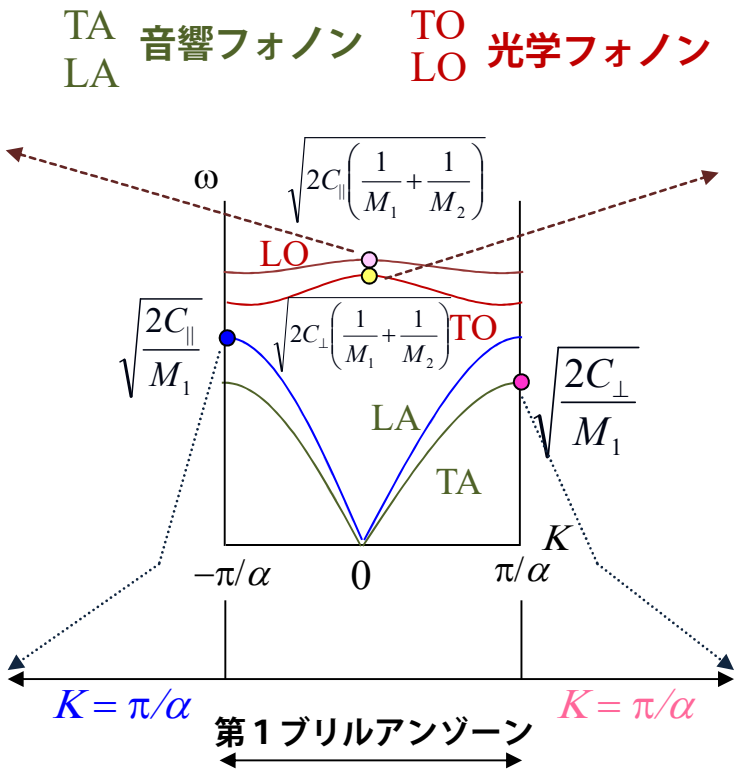


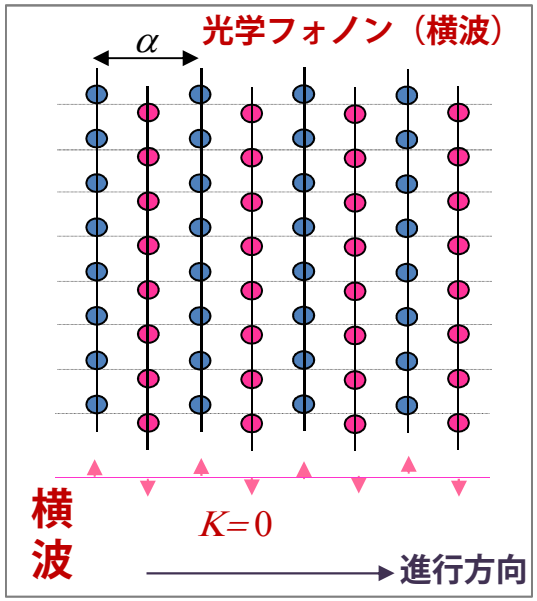
２原子結晶のフォノン

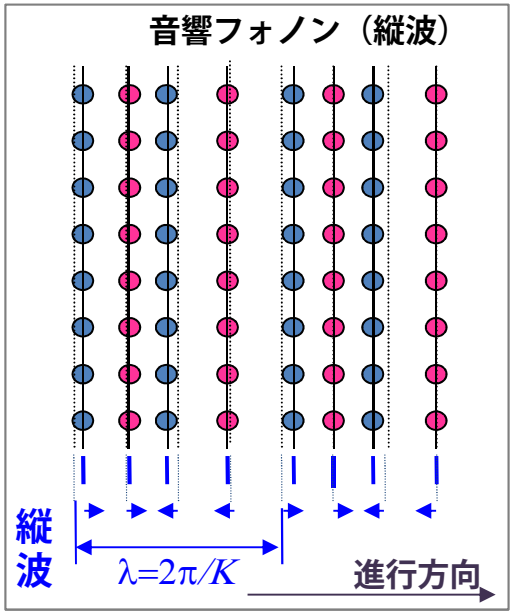
電磁波との共鳴は約波長30μm、10THz付近
（同じ波数と振動数）
（遠赤外）

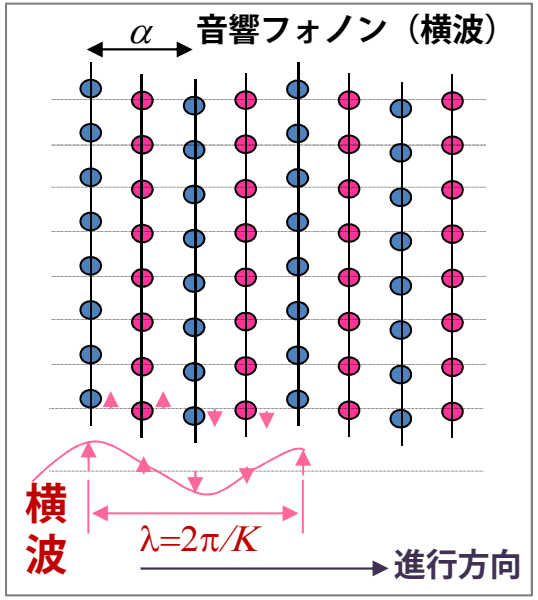
イオン結晶の場合波数 K の光で励起











N個の等価な原子面 ⟶ N 個の独立なK点

$$-\frac{\pi}{a} < K \leq \frac{\pi}{a}$$

ゾーン境界　$K = \pi/a$

$$u_{n+1} = -u_n$$

$$v_{n+1} = -v_n$$

フォノン

基準座標 q_k への変換

$$[q_k, P_{k'}] = i\hbar\delta_{k,k'}$$

$$q_k = N^{-1/2}\sum_n u_n \exp(-ikna) \qquad u_n : n \text{ 番目の原子面の変位}$$

$$P_k = N^{-1/2}\sum_n p_n \exp(ikna) \qquad p_n : n \text{ 番目の原子面の運動量}$$

$2M$×運動エネルギー →

$$\sum_n p_n^2 = N^{-1}\sum_n\sum_k\sum_{k'} P_k P_{k'} \exp[-i(k+k')na] = \sum_k\sum_{k'} P_k P_{k'} \delta_{-k,k'}$$

$$= \sum_k P_k P_{-k}$$

2/C ×
ポテンシャルエネルギー

$$\sum_n (u_{n+1} - u_n)^2 = N^{-1}\sum_n\sum_k\sum_{k'} q_k q_{k'} \exp(ikna)[\exp(ika) - 1] \times \exp(ik'na)[\exp(ik'a) - 1]$$

$$= \sum_k q_k q_{-k} 2(1 - \cos ka)$$

調和振動子

$$H = \sum_k \left\{ \frac{1}{2M} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} M\omega_k^2 q_k q_{-k} \right\}$$

$$\omega_k^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos ka)$$

$$i\hbar\dot{q}_k = [q_k, H] = i\hbar P_{-k} / M$$

$$i\hbar\ddot{q}_k = [\dot{q}_k, H] = M^{-1}[P_{-k}, H] = -i\hbar\omega_k^2 q_k$$

$$\ddot{q}_k + \omega_k^2 q_k = 0$$

調和振動子の運動方程式

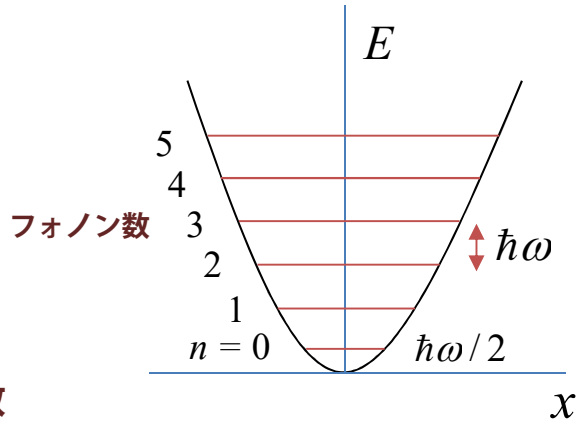
独立な調和振動子の集合

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right)$$

フォノンの生成演算子

消滅演算子

格子比熱



格子振動のエネルギー

$$U=\sum_{\mathbf{K}}\sum_{p}U_{\mathbf{K},p}=\sum_{\mathbf{K}}\sum_{p}\langle n_{\mathbf{K},p}\rangle\hbar\omega_{\mathbf{K},p}$$

p : モードの種類（縦波LA, 横波TA） $\langle n_{\mathbf{K},p}\rangle$: フォノンの数

$$\langle n_{\mathbf{K},p}\rangle=\frac{\sum_{n}n\exp(-n\hbar\omega_{\mathbf{K},p}/k_BT)}{\sum_{n'}\exp(-n'\hbar\omega_{\mathbf{K},p}/k_BT)}=\frac{x}{1-x}=\frac{1}{\exp(\hbar\omega_{\mathbf{K},p}/k_BT)-1}$$

$$\sum_{n}\exp(-na)=\sum_{n}x^n=\frac{1}{1-x}=\frac{1}{1-\exp(-a)}$$

$$\sum_{n}n\exp(-na)=\sum_{n}nx^n=x\frac{d}{dx}\sum_{n}x^n=x\frac{d}{dx}\frac{1}{1-x}=\frac{\exp(-a)}{(1-\exp(-a))^2}$$

$$U=\sum_{\mathbf{K}}\sum_{p}\frac{\hbar\omega_{\mathbf{K},p}}{\exp(\hbar\omega_{\mathbf{K},p}/k_BT)-1}=\sum_{p}\int d\omega D_p(\omega)\frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_BT)-1}$$

デバイ模型 $\omega=vK$ 音響フォノン

$$D(\omega)=\frac{V\omega^2}{2\pi^2v^3}\qquad C_{phonon}\propto T^3$$

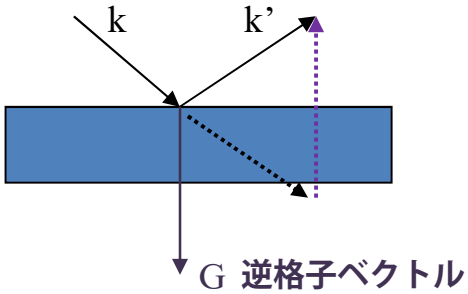
Lattice specific heat

$$C_{phonon}=k_B\sum_{p}\int d\omega D_p(\omega)\frac{(\hbar\omega/k_BT)^2\exp(\hbar\omega/k_BT)}{(\exp(\hbar\omega/k_BT)-1)^2}$$

フォノンによる光の散乱

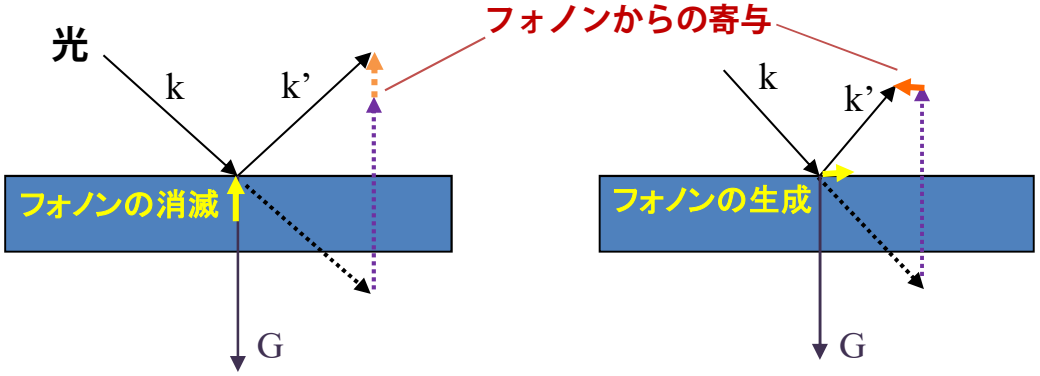
格子振動による光の散乱、吸収は結晶構造の特徴を反映する

格子振動がない場合の光の散乱



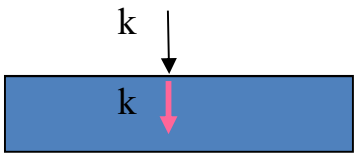
格子振動がある場合の光の散乱

k'がフォノンの影響を受ける



格子振動による光の共鳴吸収

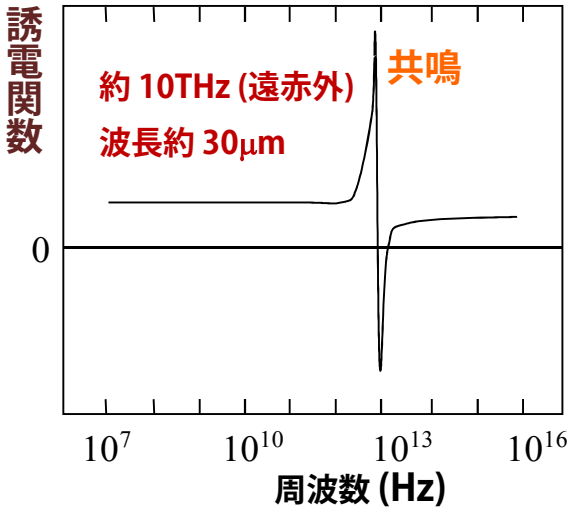
光とフォノンの波数とエネルギーが一致　（赤外領域）



共鳴により電磁波のエネルギーが
光学活性な格子振動に移り変わる。
（誘電率の発散）

フォトンから横光学(TO)フォノンに変化

赤外吸収スペクトルで観測



ラマン散乱

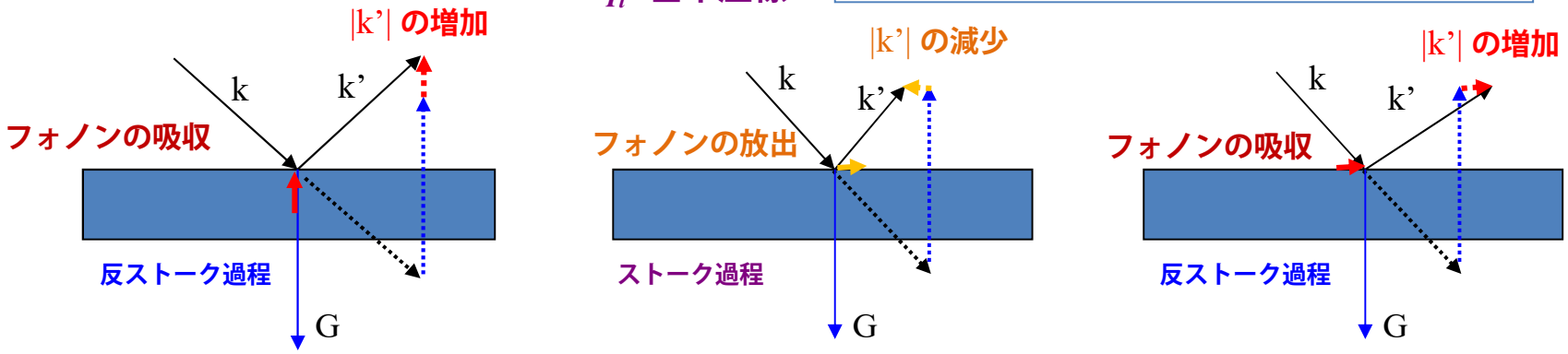
格子振動に伴う結晶内の分極率 α の変化によって、光の散乱が変化する

$$\alpha_{ij} = \alpha_{0ij} + \sum_l \left(\frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial q_l} \right) \Delta q_l$$

q_l：基準座標

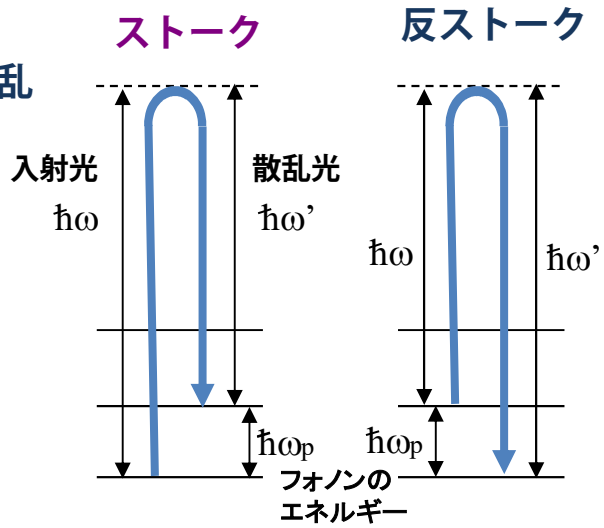
分極 $P_i = \alpha_{ij} E_j = \alpha_{0ij} E_j + \sum_l \left(\frac{\partial \alpha_{ij}}{\partial q_l} \right) \Delta q_l E_j$

P の振動により電磁波が放射される



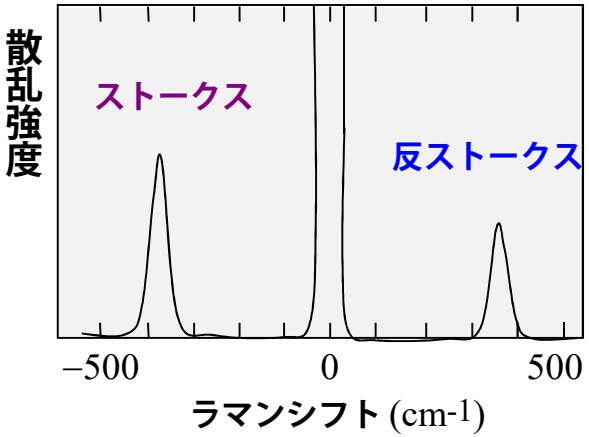
フォノンの放出によって散乱波の振動数が減少　ストークスラマン散乱

フォノンの吸収によって散乱波の振動数が増加　反ストークスラマン散乱



フォノンの振動数だけ
散乱波の振動数が変化

ラマンシフト

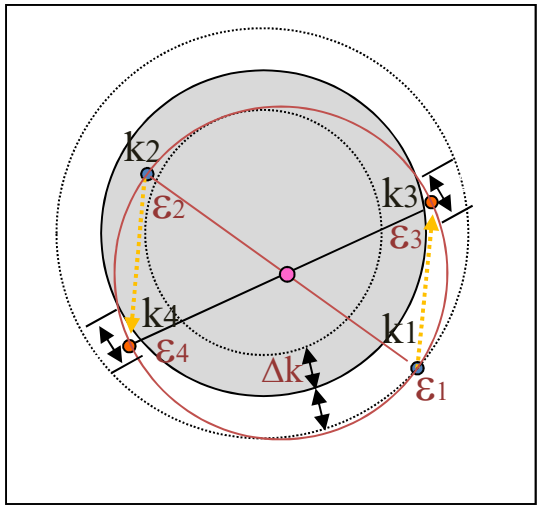


電子間相互作用

金属中の電子の平均距離 2Å　　**室温での平均自由行程 は 10000Å，1K で 10cm**

クーロン相互作用が存在しているにもかかわらず自由電子のように振る舞うのはなぜか?

フェルミ球の外側の k_1 の電子がフェルミ球内の k_2 (energy ε_2) の電子に散乱される過程を考える



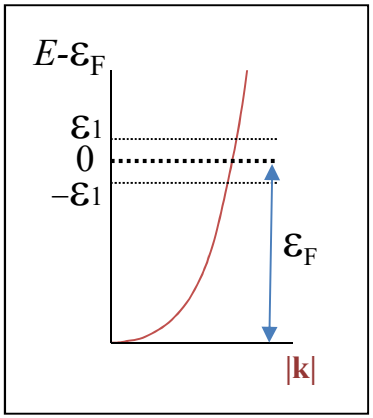
k_2 の電子がフェルミ球の内側の限られた範囲にないと散乱が生じない

エネルギーと運動量の保存則

$$k_1 \to k_3$$
$$k_2 \to k_4$$

散乱前　　散乱後

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4$$
$$k_1 + k_2 = k_3 + k_4$$



確率 ①

$$\sim \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_F}$$

k_3 と k_4 の電子は同じ円周上にあり、ともにフェルミ球の外側でなければならない

円周上の Δk の限られた範囲しか許されない

確率 ②

$$\sim \frac{\Delta k}{k_F} \sim \frac{v_F \Delta k}{v_F k_F} \sim \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_F}$$

散乱確率 ＝ 確率 ① ×確率 ②　$\approx \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_F}\right)^2 \approx \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2$

低温の極限で散乱が禁止される

フェルミ液体論

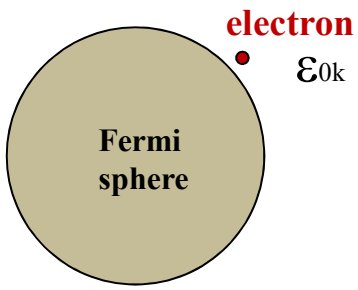
散乱確率 $\approx \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_F}\right)^2 \approx \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2$ ➡ 十分低温で散乱確率が抑制される

フェルミ球＋電子 の状態は初期状態を長時間維持する

長い寿命：準粒子

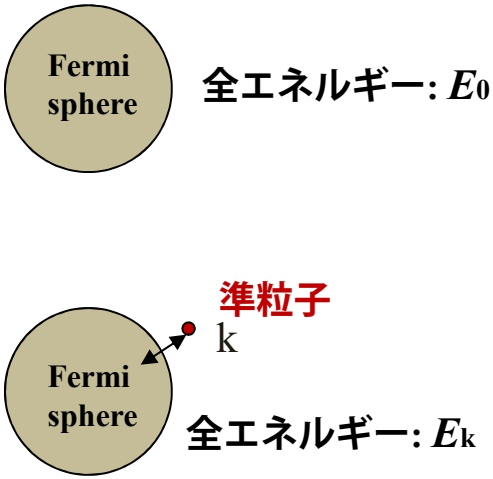
自由電子

フェルミ球 ＋電子



電子のエネルギー: ε_{0k}

相互作用系



準粒子のエネルギー：$\varepsilon_k = E_k - E_0$

自由電子のエネルギー ε_{0k}

一対一対応 ⇕

準粒子のエネルギー ε_k

相互作用の結果, ε_{0k} はε_k に変化し、
有限の寿命を持つことで準粒子に移行

フェルミ液体論

フェルミ球外に存在する電子の数 ： 準粒子の数 $\sum_{k\sigma} n_\sigma(k) = N$

スピン σ の電子の分布関数

$n_\sigma(k)$

全エネルギー $E = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k n_\sigma(k)$

（準粒子間の相互作用は無視）

$$f(\varepsilon - \mu) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} = n_\sigma(k)$$

ε_{0k} を ε_k に替える

準粒子状態密度によって定まる熱力学量

エネルギー

$$U = 2L^3 \int d\varepsilon\, N(\varepsilon)\, \varepsilon\, f(\varepsilon - \mu)$$

比熱

$$\frac{1}{L^3}\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{2\pi^2}{3} N(\varepsilon_F) k_B^2 T \equiv \frac{m^* k_F}{2\pi^2 \hbar} k_B^2 T$$

k_F 付近の準粒子のエネルギー

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_F} + \left.\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}\right|_{k_F} \left(|k| - k_F\right) + \cdots$$

有効質量 m^* の定義

$$\frac{\hbar k_F}{m^*} = \left.\frac{\partial \varepsilon_k}{\hbar \partial k}\right|_{k_F} = v_F$$

準粒子状態密度

$$N(\varepsilon_F) = \frac{4\pi k_F^2}{(2\pi)^3} \left(\left.\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k}\right|_{k_F} \right)^{-1} = \frac{m^* k_F}{2\pi^2 \hbar}$$

バンド理論の破綻

単位胞あたり奇数の電子 → バンドの部分的占有

→ バンド理論の帰結から絶縁体には決してならない

遷移金属酸化物　(絶縁体)

MnO, FeO, CoO, Mn_3O_4, Fe_2O_3, NiO, CuO

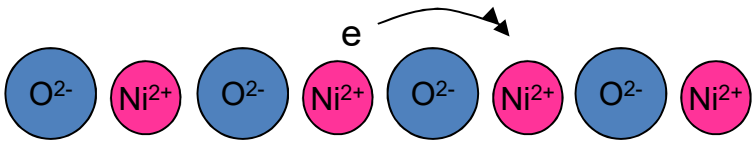
O　: $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^4$
Co : $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^7\,(4s)^2$
Mn : $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^5\,(4s)^2$

MnO, CoO : 単位胞あたり奇数の電子数

→ 絶縁体を説明できない

モット絶縁体

NiO



$$(Ni^{2+}O^{2-})_2 \longrightarrow Ni^{3+}O^{2-} + Ni^{1+}O^{2-}$$

$E_{gap} = U - w$

w : 原子間遷移によるエネルギーの低下 ~ $2zt$

z : 最隣接原子数

U : Ni 原子内の電子間斥力のエネルギー

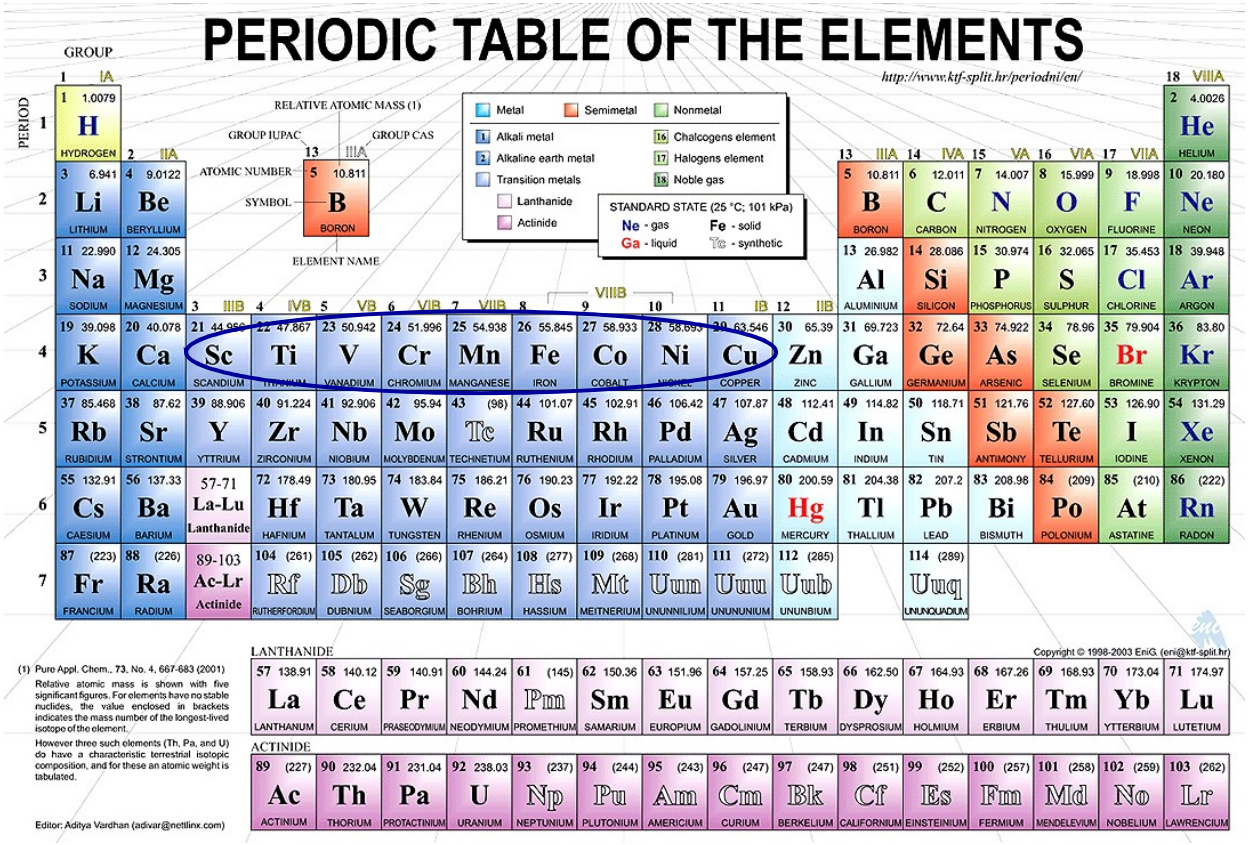
十分大きい U のとき絶縁体になる　　*Mott (1949)*

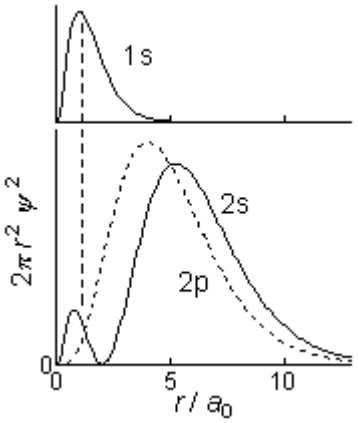
電子間相互作用による金属絶縁体転移 ⟶ モット転移

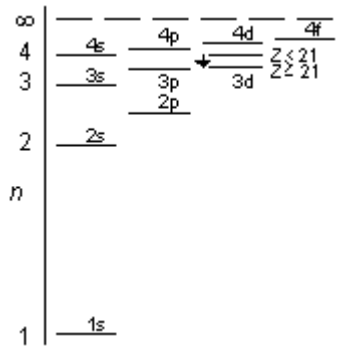
遷移金属

O: $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^4$

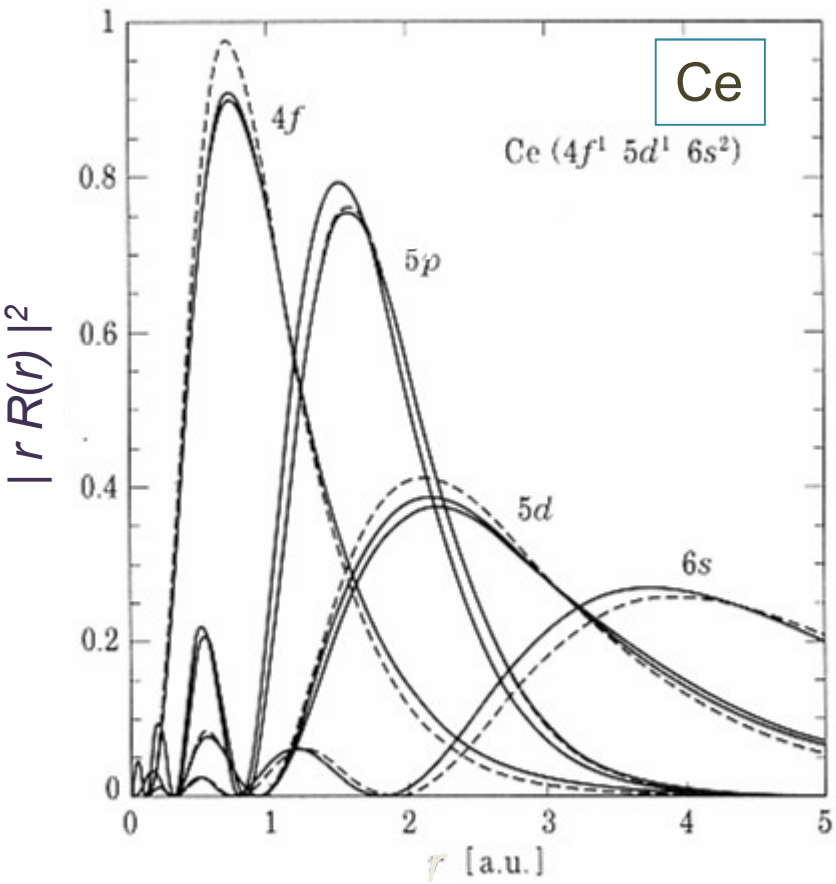
Mn: $(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s)^2\,(3p)^6\,(3d)^5\,(4s)^2$







電子密度分布



Ce　*4f*-電子

4f - 局在性が強い
cf. 5d ,6s

4f-電子間のクーロン斥力が重要

Fe　*3d*-電子

3d - 局在性が強い
cf. 4s

3d-電子間のクーロン斥力が重要

第二量子化の概念

フェルミ粒子の生成消滅演算子 c^*, c

真空状態 $|0>$ **にスピン** σ **の電子を座標** R_i **に生成** $\longrightarrow$ $c^*_{i\sigma}|0> : \Psi(\mathbf{r}_1) = \varphi(\mathbf{r}_1 - R_i)$

真空状態 $|0>$ **にスピン** σ **の電子を** R_i **と** R_j **に生成**

$$\longrightarrow c^*_{j\sigma}c^*_{i\sigma}|0> : \Psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(\mathbf{r}_1 - R_i)\varphi(\mathbf{r}_2 - R_j) - \varphi(\mathbf{r}_2 - R_i)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_j)\right]$$

i と j を交換　　i と j を交換

$$c^*_{i\sigma}c^*_{j\sigma}|0> : \Psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(\mathbf{r}_1 - R_j)\varphi(\mathbf{r}_2 - R_i) - \varphi(\mathbf{r}_2 - R_j)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_i)\right]$$

$$\Psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = -\Psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \quad \rightarrow \quad c^*_{i\sigma}c^*_{j\sigma}|0> = -c^*_{j\sigma}c^*_{i\sigma}|0> \quad \rightarrow \quad c^*_{i\sigma}c^*_{j\sigma} = -c^*_{j\sigma}c^*_{i\sigma}$$

$$c^*_{j\sigma}c_{i\sigma}c^*_{i\sigma}|0> = c^*_{j\sigma}(1-n_{i\sigma})|0> = (1-n_{i\sigma})c^*_{j\sigma}|0> = c_{i\sigma}c^*_{i\sigma}c^*_{j\sigma}|0> = -c_{i\sigma}c^*_{j\sigma}c^*_{i\sigma}|0>$$

$i \neq j$

$$c_{i\sigma}c^*_{j\sigma} = -c^*_{j\sigma}c_{i\sigma} \quad i \neq j$$

数演算子

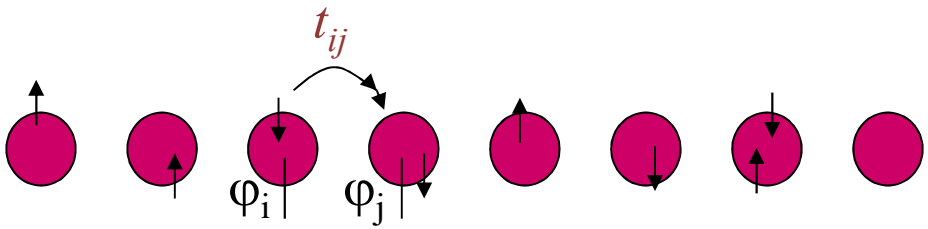
$$c^*_{i\sigma}c_{i\sigma} = n_{i\sigma}$$
$$c_{i\sigma}c^*_{i\sigma} = 1 - n_{i\sigma}$$

生成消滅演算子の反交換関係

$$\{c^*_{j\sigma}, c_{i\sigma'}\} = c^*_{j\sigma}c_{i\sigma'} + c_{i\sigma'}c^*_{j\sigma} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$$
$$\{c^*_{j\sigma}, c^*_{i\sigma'}\} = c^*_{j\sigma}c^*_{i\sigma'} + c^*_{i\sigma'}c^*_{j\sigma} = 0$$
$$\{c_{j\sigma}, c_{i\sigma'}\} = c_{j\sigma}c_{i\sigma'} + c_{i\sigma'}c_{j\sigma} = 0$$

ハバード模型

直交基底関数 φ



$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ji} c^*_{j\sigma} c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

i, j : サイト座標

σ : スピン状態 (↑or↓)

c^*, c : 電子の生成消滅演算子

$$\left\{c^*_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\right\} = c^*_{i\sigma} c_{j\sigma'} + c_{j\sigma'} c^*_{i\sigma} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\left\{c^*_{i\sigma}, c^*_{j\sigma'}\right\} = 0$$

$$\left\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\right\} = 0$$

$n_{i\sigma} = c^*_{i\sigma} c_{i\sigma}$: 数演算子

遷移積分

$$t_{ji} = \int d\mathbf{r}\, \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{d}_{ji})\, H\, \varphi(\mathbf{r})$$

$\mathbf{d}_{ji} = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$

H : 1体のハミルトニアン
（運動エネルギー＋ポテンシャルエネルギー）

クーロンエネルギー

$$U = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\, \varphi^*(\mathbf{r}_1)\varphi^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_1)$$

ワニエ関数

周期ポテンシャル中の固有関数

ブロッホ関数

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} \phi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r})$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u(\mathbf{r})$$

$$u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{R}+\mathbf{r})$$

$$\mathbf{R} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$$

$V(\mathbf{r}) = 0$ のときの解

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

ブロッホ関数の逆フーリエ変換

ワニエ関数

$$\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n)\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$\int d\mathbf{r}\, \varphi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_m)\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)$$

$$= \frac{1}{N}\int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}\Phi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n}\Phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$$

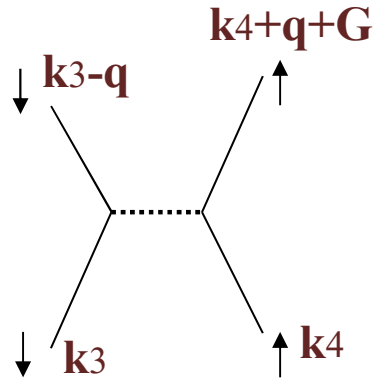
$$= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_n + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \int d\mathbf{r}\, \Phi^*_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\Phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_n-\mathbf{R}_m)}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{R}_n\mathbf{R}_m}$$

ハバード模型

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c^*_{j\sigma} c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}\sigma}$$



並進対称性

（t_{ij} は相対距離だけに依存 $|i\text{-}j|$）

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c^*_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k1},\mathbf{k2},\mathbf{k3},\mathbf{k4}} c^*_{\mathbf{k1}\uparrow} c^*_{\mathbf{k2}\downarrow} c_{\mathbf{k3}\downarrow} c_{\mathbf{k4}\uparrow} \, \delta_{\mathbf{k1}+\mathbf{k2},\mathbf{k3}+\mathbf{k4}+\mathbf{G}}$$

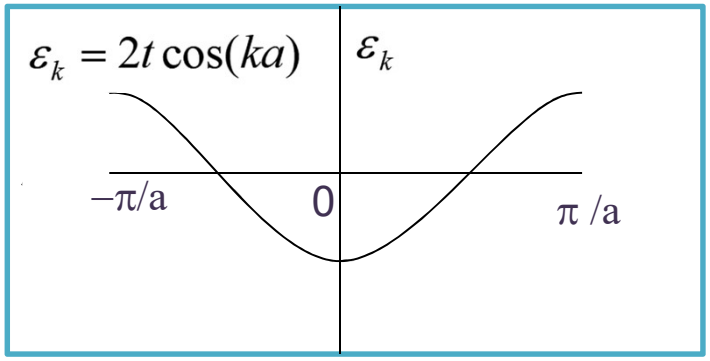
$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_i)} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)} \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_i)} \delta_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{<ij>} (t_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}i-\mathbf{R}j)} + c.c.)$$

1D 最近接遷移だけを考慮

$$\varepsilon_k = 2t\cos(ka) \qquad G = \frac{2\pi}{a} n$$

1D 最近接遷移模型のバンド分散



U/t クーロン相互作用

N_e/N 電子密度　　N_e：電子数

ハーフフィリングにおける有効模型

$N_e/N=1$ （1サイトあたり1電子）

t についての2次の摂動計算

$$H = H_0 + H'$$

- two-electron problem -

$$= t\sum_\sigma (c^*_{1\sigma}c_{2\sigma} + c^*_{2\sigma}c_{1\sigma}) + U(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow}n_{2\downarrow})$$

$$H_0 \frac{1}{E_0 - H'} H_0 c^*_{1\uparrow}c^*_{2\downarrow}|0\rangle$$

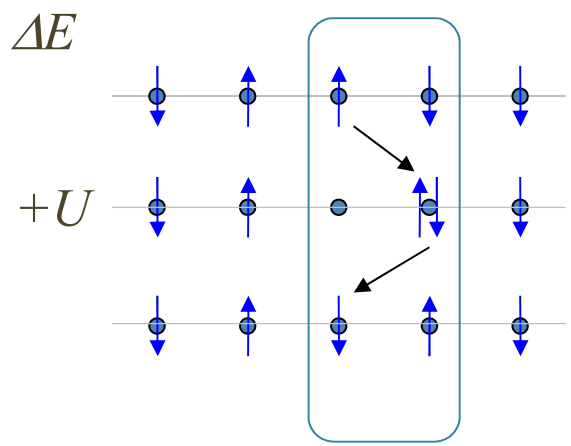
$$= -\frac{t^2}{U}(\sum_\sigma c^*_{1\sigma}c_{2\sigma} + c^*_{2\sigma}c_{1\sigma})(c^*_{2\uparrow}c^*_{2\downarrow} + c^*_{1\uparrow}c^*_{1\downarrow})|0\rangle$$

$$= -\frac{t^2}{U}(c^*_{1\uparrow}c^*_{2\downarrow} - c^*_{1\downarrow}c^*_{2\uparrow} + c^*_{2\uparrow}c^*_{1\downarrow} - c^*_{2\downarrow}c^*_{1\uparrow})|0\rangle$$

$$= \frac{2t^2}{U}(2\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 - \frac{1}{2})c^*_{1\uparrow}c^*_{2\downarrow}|0\rangle$$

$$\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2 = S^z_1 S^z_2 + \frac{1}{2}(S^+_1 S^-_2 + S^-_1 S^+_2)$$

スピン交換の過程



$t=0$ 各サイトに電子1つずつ

2^N – スピン縮退

$$S^z_i = \frac{1}{2}(c^*_{i\uparrow}c_{i\uparrow} - c^*_{i\downarrow}c_{i\downarrow})$$

$$S^+_i = c^*_{i\uparrow}c_{i\downarrow}$$

$$S^-_i = c^*_{i\downarrow}c_{i\uparrow}$$

反強磁性ハイゼンベルグ模型

$N_e/N=1$　ハバード模型

$$H = t\sum_{<ij>\sigma} c^*_{j\sigma} c_{i\sigma} + U\sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

$U/t >> 1$; t についての２次摂動

反強磁性ハイゼンベルグ模型

$$H_{eff} = 2J\sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \qquad J = \frac{2t^2}{U} > 0$$

J : 超交換相互作用

U = 0　電子系　(金属)
U >> t　反強磁性スピン系　(絶縁体)

金属絶縁体転移の存在

ハバード模型の基底状態

1D system　**厳密解あり**

$N_e/N \neq 1$　　***TL* 液体（常磁性金属）**

$$\langle n_i \cdot n_j \rangle = \frac{K_\rho}{\pi^2 (i-j)^2} + \frac{A_1}{|i-j|^{(K_\rho+1)}} \cos[2k_F(i-j)] + \frac{A_2}{|i-j|^{4K_\rho}} \cos[4k_F(i-j)]$$

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = \frac{1}{\pi^2 (i-j)^2} + \frac{B_1}{|i-j|^{(K_\rho+1)}} \cos[2k_F(i-j)]$$

$K_\rho = 1 \;\; for \;\; U = 0$

$K_\rho = 1/2 \;\; for \;\; U = \infty$

電荷励起ギャップなし $\Delta_c = 0$

スピン励起ギャップなし $\Delta_s = 0$

$N_e/N = 1$　　**任意の U で絶縁体　（Mott 絶縁体）**

電荷励起ギャップあり

$$\Delta_c = \begin{cases} \sqrt{Ut}\exp(-1/\rho U) & for \;\; U << t \\ U - 4t & for \;\; U >> t \end{cases}$$

スピン励起ギャップなし $\Delta_s = 0$

2D, 3D systems　**厳密解なし**

$N_e/N = 1$　　**反強磁性秩序**

$N_e/N \neq 1$　　**強磁性, 超伝導？**

強磁性交換相互作用

電子間クーロン相互作用のエネルギー

$$K = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \; \varphi^*(\mathbf{r}_1 - R_m)\varphi^*(\mathbf{r}_2 - R_n)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\varphi(\mathbf{r}_2 - R_n)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_m)$$

J_d: 直接交換積分

$$J_d = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \; \varphi^*(\mathbf{r}_1 - R_m)\varphi^*(\mathbf{r}_2 - R_n)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\varphi(\mathbf{r}_2 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_n)$$

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(\mathbf{r}_1 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_2 - R_n) + \varphi(\mathbf{r}_2 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_n)\right]$$

Spin singlet $\quad \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -\frac{3}{4}$

$$\Psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi(\mathbf{r}_1 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_2 - R_n) - \varphi(\mathbf{r}_2 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_n)\right]$$

Spin triplet $\quad \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = +\frac{1}{4}$

$$\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \; \Psi^{*(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\Psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = K + J_d$$

$$\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \; \Psi^{*(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\Psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = K - J_d$$

$$H_{Coulomb} = K - 2J_d(S_1 \cdot S_2 + \frac{1}{4})$$

$J_d > 0$ 強磁性交換相互作用

強磁性交換相互作用

J_d: 直接交換積分

$$J_d = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2\, \varphi^*(\mathbf{r}_1 - R_m)\varphi^*(\mathbf{r}_2 - R_n)\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\varphi(\mathbf{r}_2 - R_m)\varphi(\mathbf{r}_1 - R_n)$$

$$\varphi^*(\mathbf{r} - R_m)\varphi(\mathbf{r} - R_n) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_1^z S_2^z + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)$$

	↑↑
↑↑	1/4

	↑↓	↓↑
↑↓	−1/4	1/2
↓↑	1/2	−1/4

$$J_d = \frac{1}{L^3}\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} \sum_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}'}^* e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_2} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

$$= \frac{1}{L^3}\iint d\Delta\mathbf{r} d\mathbf{r}_2 \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_2 + \Delta\mathbf{r})} \sum_{\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}'}^* e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_2} \frac{e^2}{|\Delta\mathbf{r}|}$$

$$= \frac{1}{L^3}\sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}'}^* \iint d\Delta\mathbf{r} d\mathbf{r}_2 e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\Delta\mathbf{r}} \frac{e^2}{|\Delta\mathbf{r}|}$$

$$= \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^* \underbrace{\int d\Delta\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\Delta\mathbf{r}} \frac{e^2}{|\Delta\mathbf{r}|}}_{\frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2}} = \sum_{\mathbf{q}} |a_{\mathbf{q}}|^2 \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} > 0$$

J_d：常に正

$$\begin{vmatrix} -1/4 - E & 1/2 \\ 1/2 & -1/4 - E \end{vmatrix} = 0 \qquad (1/4 + E)^2 - 1/4 = 0 \rightarrow E = -3/4, +1/4$$

シングレット

トリプレット

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ シングレット

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ トリプレット

遷移金属のフント則

3d　遷移金属

イオン	配　位	基底状態	p(計算)= $g[J(J+1)]^{1/2}$		p(計算)= $2[S(S+1)]^{1/2}$	p(実験)[a]
Ti^{3+}, V^{4+}	$3d^1$	$^2D_{3/2}$	1.55	$S=1/2$	1.73	1.8
V^{3+}	$3d^2$	$^3F_2$	1.63	$S=1$	2.83	2.8
Cr^{3+}, V^{2+}	$3d^3$	$^4F_{3/2}$	0.77	$S=3/2$	3.87	3.8
Mn^{3+}, Cr^{2+}	$3d^4$	$^5D_0$	0	$S=2$	4.90	4.9
Fe^{3+}, Mn^{2+}	$3d^5$	$^6S_{5/2}$	5.92	$S=5/2$	5.92	5.9
Fe^{2+}	$3d^6$	$^5D_4$	6.70	$S=2$	4.90	5.4
Co^{2+}	$3d^7$	$^4F_{9/2}$	6.63	$S=3/2$	3.87	4.8
Ni^{2+}	$3d^8$	$^3F_4$	5.59	$S=1$	2.83	3.2
Cu^{2+}	$3d^9$	$^2D_{5/2}$	3.55	$S=1/2$	1.73	1.9

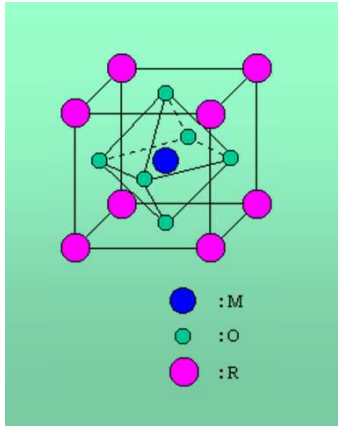
a　代表的な値.

$2[S(S+1)]^{1/2}$　実験値

よい一致

3d電子間の強磁性交換相互作用の存在

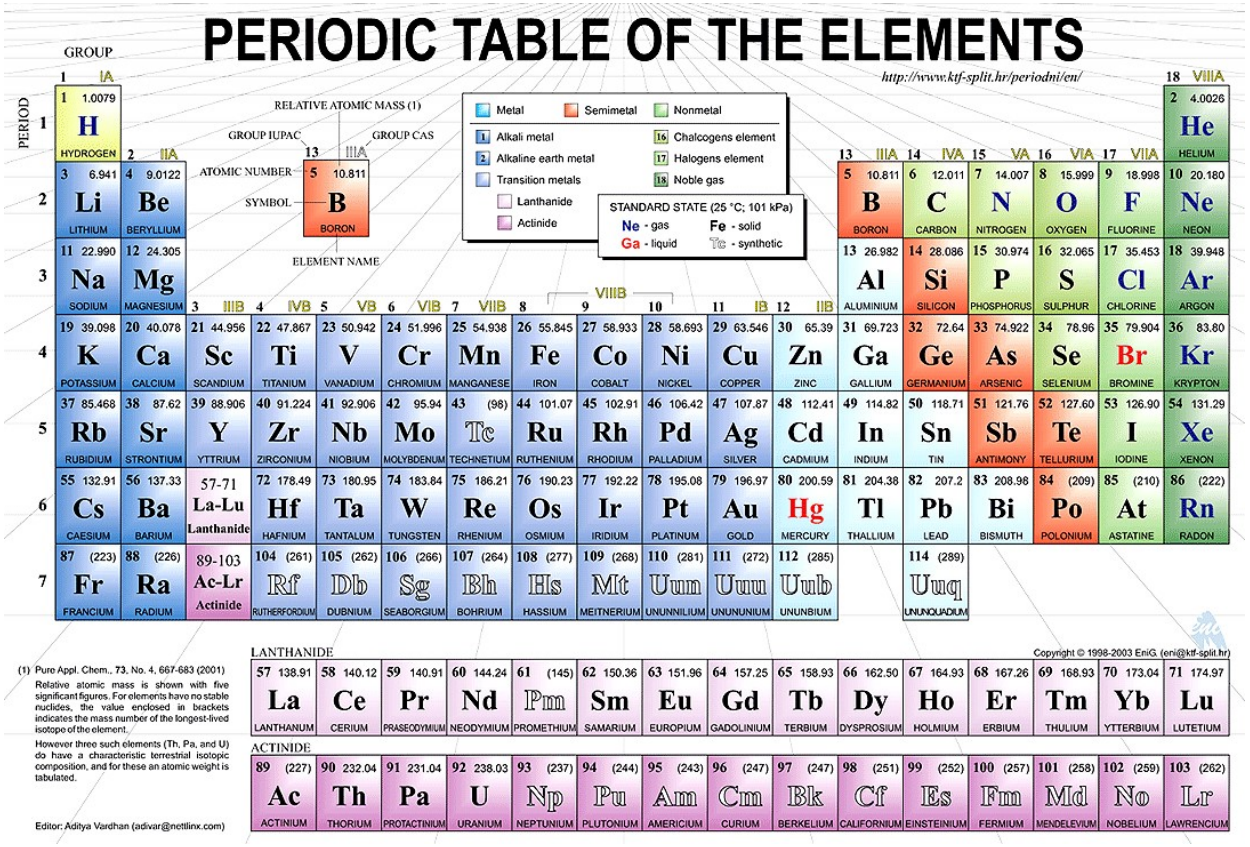
高温超伝導体



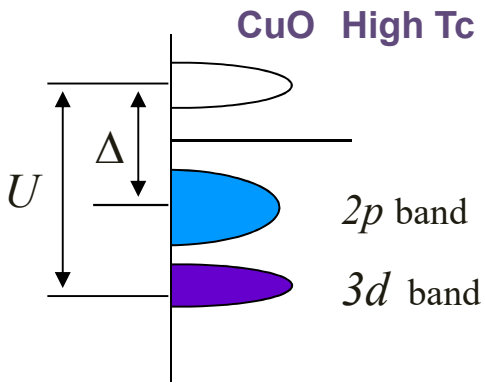
高温超伝導体： $La_{2-x}Sr_xCuO_4$

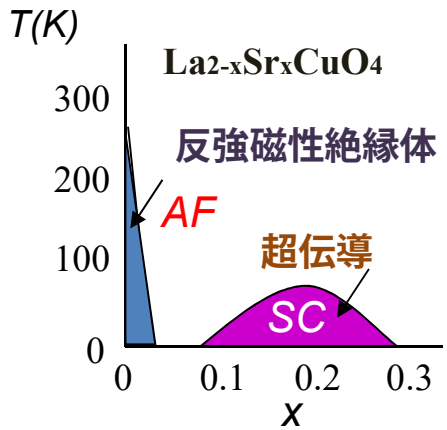
CuO_2-layer が重要

x=0 (La_2CuO_4) 絶縁体 ➡ **遷移金属酸化物 : CuO**



Ti_2O_3,VO_2,FeO (CoO,NiO,MnO Δ～*U*)





超伝導

基本性質

電気抵抗の消失, 永久電流の存在

$T=T_c$ における電気抵抗の消失

T_c における比熱の異常

秩序相への二次相転移

マイスナー効果

完全反磁性

臨界磁場

強磁場で超伝導の消失

同位体効果

T_c に原子核の質量依存性

$$T_c \propto M^{-\beta}$$

格子振動との関連

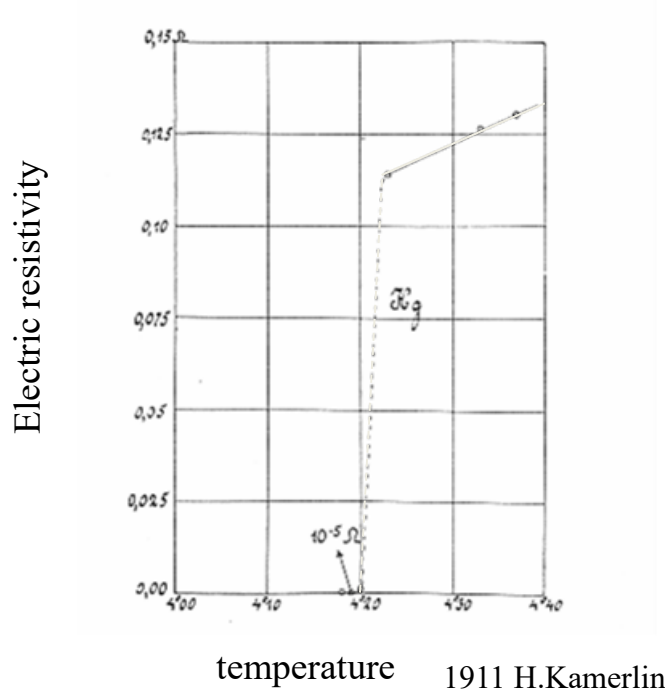
$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}Ka\right|$$

1911 H.Kamerlingh-Onnes Hg T_c=4.2K discovery of SC

1957 J.Bardeen, L.Cooper, J.R.Schrieffer BCS theory

1986 discovery of high Tc superconductor

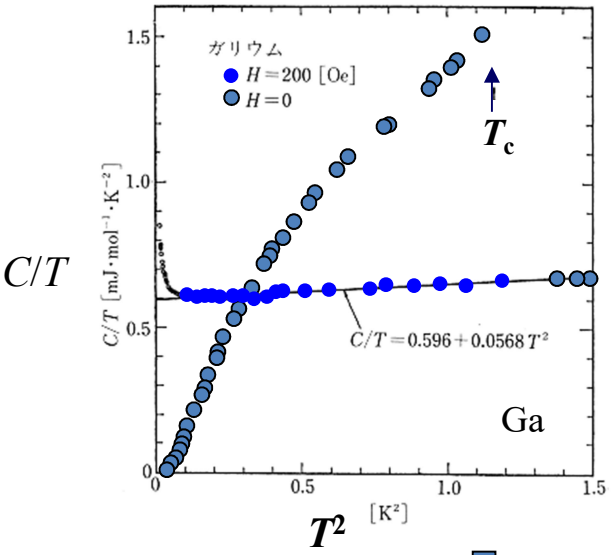
抵抗の消失 Hg T_c=4.2K



1911 H.Kamerlingh-Onnes

超伝導

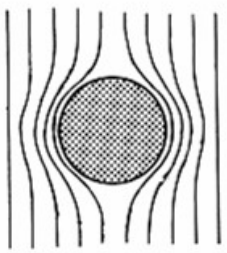
比熱の異常



秩序相への二次相転移

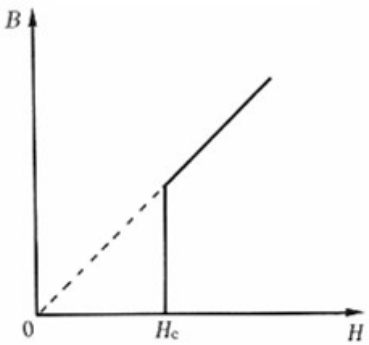
マイスナー効果

完全反磁性

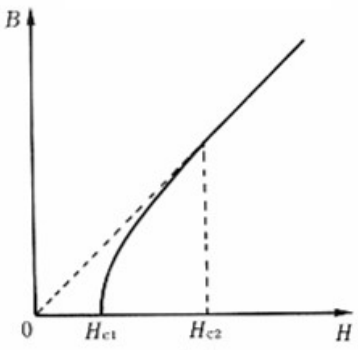


Magnetic fluxes

(a)



(b)



(c)

臨界磁場

正常相へ転移

下部臨界磁場

磁場が内部に侵入

上部臨界磁場

正常相へ転移

磁場は超伝導体の表面に僅かに侵入する

λ:磁場侵入長

λ＝100～1000Å

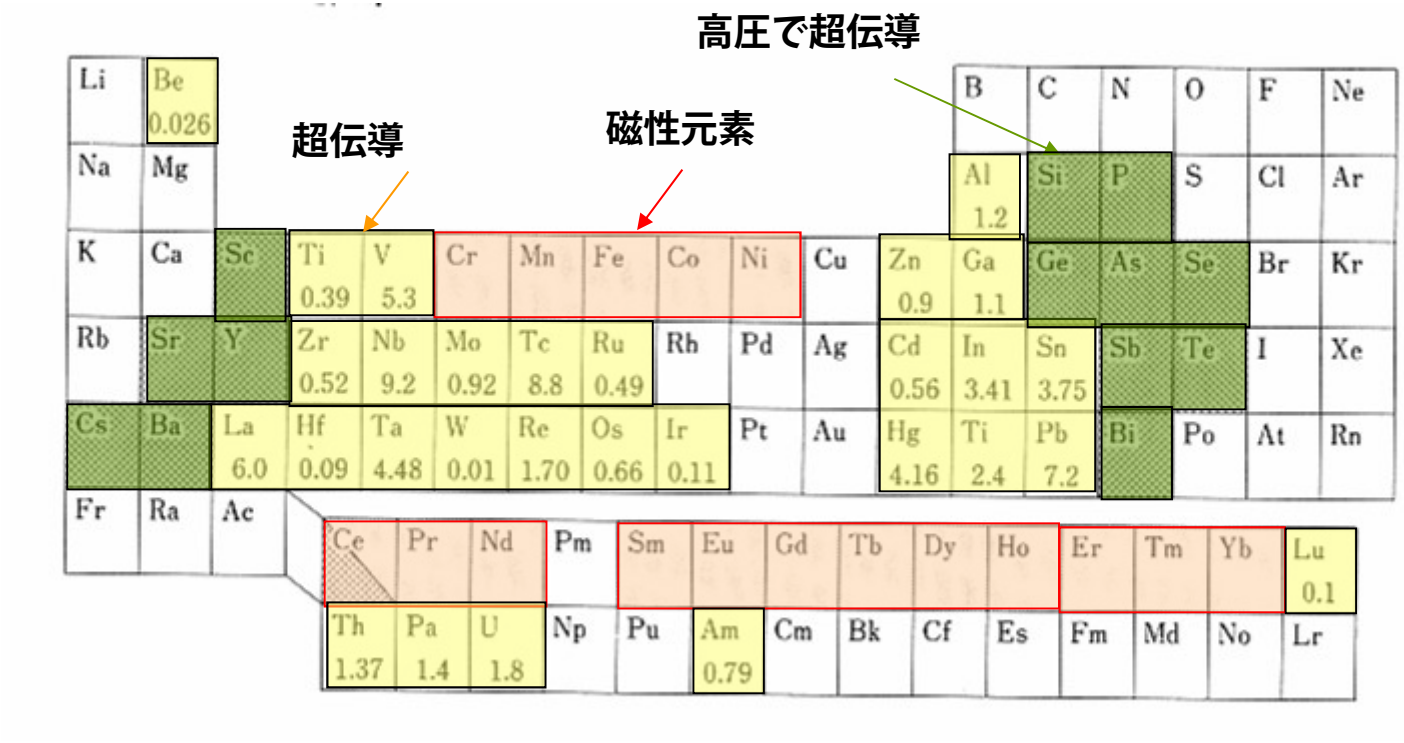
同位体効果

転移温度の原子核質量依存性 ➡ 格子振動が超伝導に関与している

$$T_c \propto M^{-\beta} \quad (\beta \sim 0.5)$$

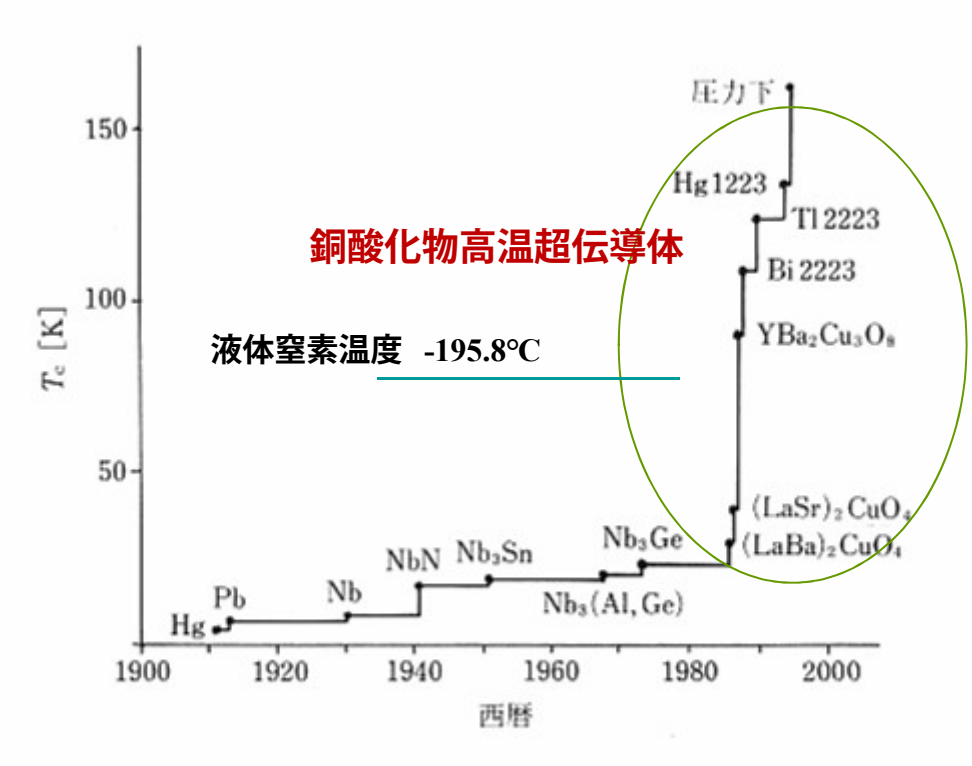
$$\omega = \sqrt{\frac{4C}{M}}\left|\sin\frac{1}{2}Ka\right|$$

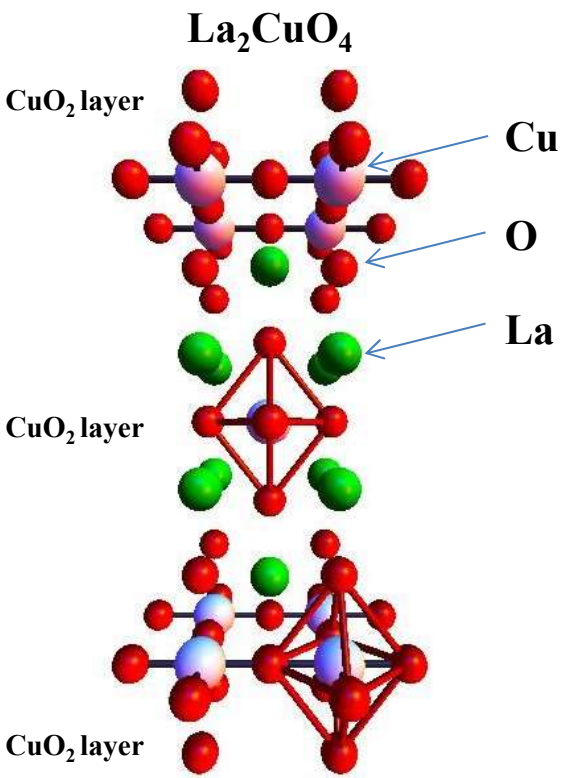
超伝導体



大抵の単体の金属や半導体は低温1～9Kで超伝導状態に転移する

高温超伝導体





銅酸化物高温超伝導体

Discovered by Karl Müller and Johannes Bednorz in 1986

超伝導の現象論的理解

磁場中のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m}(p - eA)^2$$

($e < 0$: electron)

速度 $v = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{m}(p - eA)$

電流密度 $j = env = \frac{en}{m}(p - eA)$

$$\langle j \rangle = \frac{en}{m}(\langle p \rangle - eA) = -\frac{e^2 n}{m} A$$ London equation

現象論的仮定 $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$

$$\nabla \times B = \mu_0 j$$

$$\nabla \times B = -\frac{\mu_0 e^2 n}{m} A$$

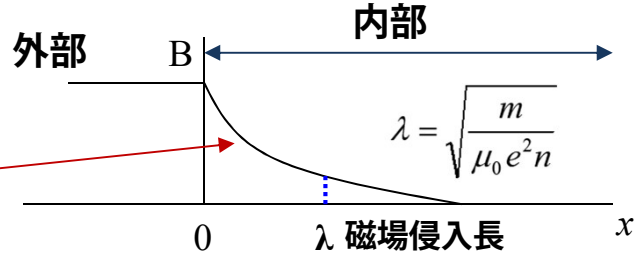
$$\nabla \times (\nabla \times B) = \nabla(\nabla \cdot B) - \nabla^2 B = -\frac{\mu_0 e^2 n}{m} \nabla \times A = -\frac{\mu_0 e^2 n}{m} B$$

$$\nabla^2 B = \frac{\mu_0 e^2 n}{m} B$$

$$\nabla \cdot B = 0$$
$$\nabla \times A = B$$

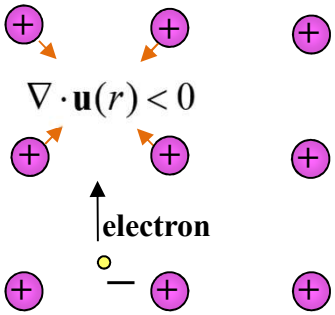
マイスナー効果

$$B = B_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)$$



電子-格子相互作用

格子点の変位ベクトル $u(r)$



電子格子相互作用

$$H_{e-p}=\frac{1}{V}\int d\mathbf{r}\, C\left[\nabla\cdot\mathbf{u}(r)\right]n(r)$$

C : 結合定数

電子密度 $n(r)$

$$n(r)=\sum_{\sigma}\psi_{\sigma}^{+}(r)\psi_{\sigma}(r)$$

変位ベクトル $\boldsymbol{u}(r)$ ⟶ 局所密度 $\nabla\cdot\mathbf{u}(r)$

$\nabla\cdot\mathbf{u}(r)<0$ 引力

$\nabla\cdot\mathbf{u}(r)>0$ 斥力

$$\mathbf{u}(r)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\mathbf{u}_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\psi_{\sigma}(r)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\sigma}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

電子-格子相互作用

$$H_{e-p}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\sigma}iC\mathbf{q}\cdot\mathbf{u}_{\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+}c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\sigma}i\alpha_{\mathbf{q}}\left(b_{\mathbf{q}}+b_{-\mathbf{q}}^{+}\right)c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+}c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$\alpha_{\mathbf{q}}=C|\mathbf{q}|\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}}}}$$

量子化された格子振動

$$H_{phonon}=\sum_{k}\hbar\omega_{k}\left(b_{k}^{+}b_{k}+\frac{1}{2}\right)$$

フォノンの生成消滅演算子

$$b_{\mathbf{k}}=\sqrt{\frac{M\omega_{\mathbf{k}}}{2\hbar}}u_{\mathbf{k}}+i\sqrt{\frac{1}{2\hbar M\omega_{\mathbf{k}}}}p_{-\mathbf{k}}$$

$$u_{\mathbf{k}}=u_{-\mathbf{k}}^{+}$$

量子化された変位ベクトル

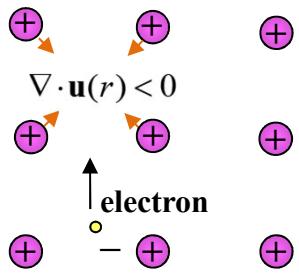
$$\mathbf{u}(r)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{q}}\mathbf{e}_{\mathbf{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}}}}\left(b_{\mathbf{q}}+b_{-\mathbf{q}}^{+}\right)e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

縦波

$$\mathbf{e}_{\mathbf{q}}=\mathbf{q}/|\mathbf{q}|$$

電子-格子相互作用の効果

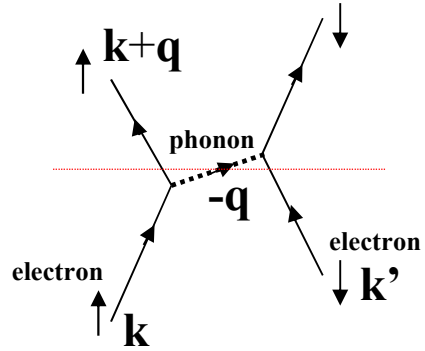
格子の変形 $u(r)$



電子格子相互作用

$$H_{e-p} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\sigma} i\alpha_{\mathbf{q}} \left(b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{+} \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

2次の散乱過程



電子格子相互作用の効果

1. 散乱

フォノン吸収	フォノン放出
$k' = k + q$	$k' = k - q$
$\varepsilon_k' = \varepsilon_k + \hbar\omega_q$	$\varepsilon_k' = \varepsilon_k - \hbar\omega_q$

2. 有効質量の増大

$$m \longrightarrow m^*$$

3. 格子振動の振動数の変化

$$\omega \longrightarrow \omega'$$

4. 電子間有効相互作用

Second order process

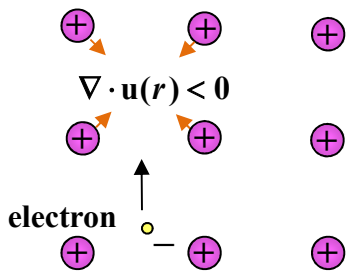
$$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{+} c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{+} c_{\mathbf{k}'\sigma'}$$

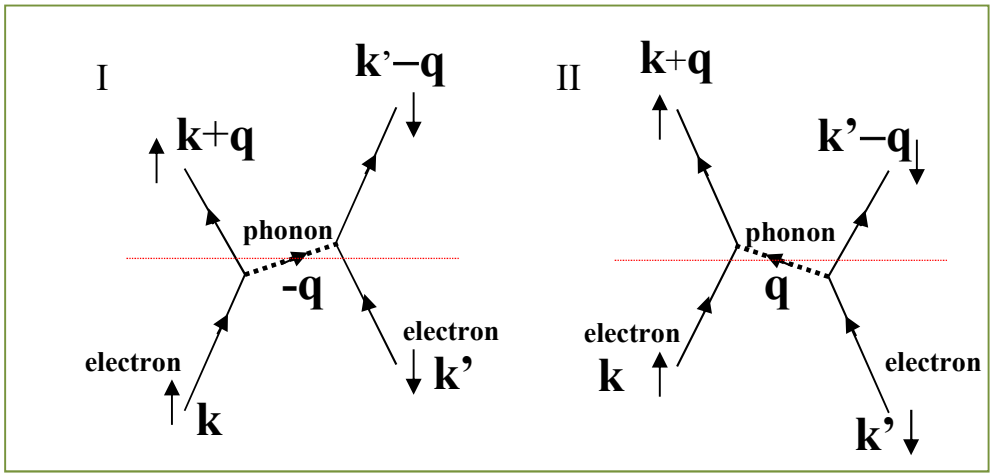
$$H_{eff} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \left(\frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{+} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^{+} c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

電子-格子相互作用

格子の変位ベクトル $u(r)$



2次の散乱過程



フォノンが媒介する電子間相互作用

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{kk'q\sigma\sigma'}\left(\underbrace{\frac{\alpha_q^2}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} - \hbar\omega_q}}_{\mathrm{I}} + \underbrace{\frac{\alpha_q^2}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'-q} - \hbar\omega_q}}_{\mathrm{II}}\right) c^+_{k+q\sigma} c^+_{k'-q\sigma'} c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$

$$H_{eff} = -\sum_{kk'q\sigma\sigma'} \frac{\alpha_q^2}{\hbar\omega_q} c^+_{k+q\sigma} c^+_{k'-q\sigma'} c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$

フェルミ面付近の散乱

$$\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q} \approx 0$$

$$\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'-q} \approx 0$$

ω_q ～ Debye frequency

電気双極子 (polaron) やスピン (magnon) の揺らぎを媒介にした引力機構も存在する

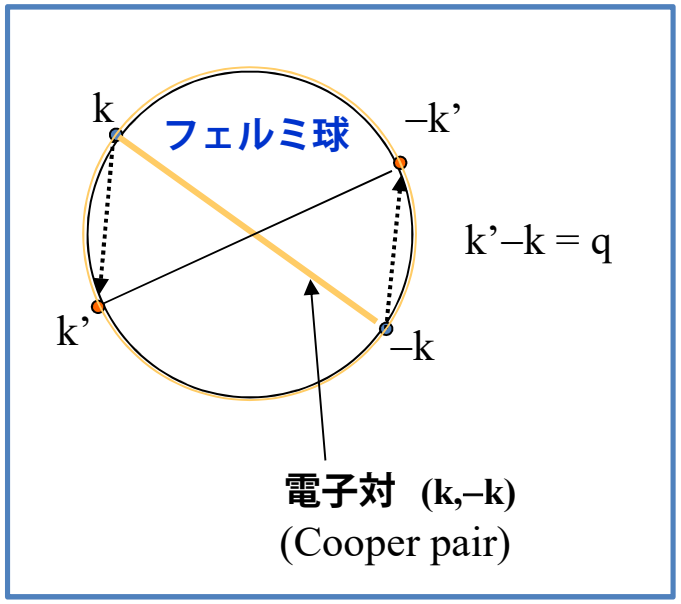
(^{3}He、heavy fermion、high Tc)

BCS 理論

1957 J.Bardeen, L.Cooper, J.R.Schrieffer

BCS 理論の基本概念

1. 電子対の形成によって引力エネルギーを効率的に確保
2. 電子対の重心をフェルミ球の中心に合わせることで散乱確率を最大化



有効相互作用

$$H_{eff} = -\sum_{\mathbf{kk'q}\sigma\sigma'} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\hbar\omega_{\mathbf{q}}} c^+_{\mathbf{k+q}\sigma} c^+_{\mathbf{k'-q}\sigma'} c_{\mathbf{k'}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{kk'}\sigma\sigma'} V(\mathbf{k'},\mathbf{k}) c^+_{\mathbf{k'}\sigma} c^+_{\mathbf{-k'}\sigma'} c_{\mathbf{-k}\sigma'} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

電子対のスピン状態

Singlet pair　singlet superconductor

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\left(c^+_{\mathbf{k'}\downarrow} c^+_{\mathbf{-k'}\uparrow} c_{\mathbf{-k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\downarrow} + c^+_{\mathbf{k'}\uparrow} c^+_{\mathbf{-k'}\downarrow} c_{\mathbf{-k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right)$$

Triplet pair　triplet superconductor

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\left(c^+_{\mathbf{k'}\uparrow} c^+_{\mathbf{-k'}\uparrow} c_{\mathbf{-k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^+_{\mathbf{k'}\downarrow} c^+_{\mathbf{-k'}\downarrow} c_{\mathbf{-k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}\right)$$

BCS 理論

シングレット超伝導体 $$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\left(c^{+}_{\mathbf{k'}\downarrow}c^{+}_{-\mathbf{k'}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\uparrow}c_{\mathbf{k}\downarrow} + c^{+}_{\mathbf{k'}\uparrow}c^{+}_{-\mathbf{k'}\downarrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow}\right)$$

等方的一重項対を仮定 $$V(\mathbf{k'},\mathbf{k}) = V(-\mathbf{k'},\mathbf{k}) = V(\mathbf{k'},-\mathbf{k}) = V(-\mathbf{k'},-\mathbf{k}) = V^{*}(\mathbf{k},\mathbf{k'})$$

対状態の擬スピン表示

$$|0> \rightarrow |+_{\mathbf{k}}> = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}\rangle$$ 対なし

擬スピン状態

$$c^{+}_{-\mathbf{k}\downarrow}c^{+}_{\mathbf{k}\uparrow}|0> = s^{-}_{\mathbf{k}}|+_{\mathbf{k}}> \rightarrow |-_{\mathbf{k}}> = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}\rangle$$ 対あり

擬スピン演算子

$$s^{+}_{\mathbf{k}}|-_{\mathbf{k}}> \rightarrow |+_{\mathbf{k}}> = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}\rangle$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow} = s^{+}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(\sigma^{x}_{\mathbf{k}} + i\sigma^{y}_{\mathbf{k}}\right)$$

$$c^{+}_{-\mathbf{k}\downarrow}c^{+}_{\mathbf{k}\uparrow} = s^{-}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\left(\sigma^{x}_{\mathbf{k}} - i\sigma^{y}_{\mathbf{k}}\right)$$

$$\left(-c^{+}_{\mathbf{k}\uparrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} - c^{+}_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow} + 1\right) = \sigma^{z}_{\mathbf{k}}$$

対あり : -1,　　対なし: 1

$$s^{x} = \frac{1}{2}\sigma^{x} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad s^{y} = \frac{1}{2}\sigma^{y} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad s^{z} = \frac{1}{2}\sigma^{z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$s^{+} = s^{x} + is^{y} \quad s^{-} = s^{x} - is^{y}$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma}\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{F}\right)c^{+}_{\mathbf{k}\sigma}c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\, c^{+}_{-\mathbf{k'}\downarrow}c^{+}_{\mathbf{k'}\uparrow}c_{\mathbf{k}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow}$$

$$H = -\sum_{\mathbf{k}}\left(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{F}\right)\sigma^{z}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\underline{\frac{1}{4}\left(\sigma^{x}_{\mathbf{k'}}\sigma^{x}_{\mathbf{k}} + \sigma^{y}_{\mathbf{k'}}\sigma^{y}_{\mathbf{k}}\right)}$$

$$s^{+}_{k'}s^{-}_{k} = \frac{1}{2}\left(s^{+}_{k'}s^{-}_{k} + s^{-}_{k}s^{+}_{k'}\right)$$

k’≠k

$$\frac{1}{2}\left(s^{+}_{k'}s^{-}_{k} + s^{-}_{k'}s^{+}_{k}\right) = s^{x}_{k'}s^{x}_{k} + s^{y}_{k'}s^{y}_{k}$$

BCS 理論

$$H = -\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F)\sigma_{\mathbf{k}}^z + \sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\frac{1}{4}\left(\sigma_{\mathbf{k'}}^x\sigma_{\mathbf{k}}^x + \sigma_{\mathbf{k'}}^y\sigma_{\mathbf{k}}^y\right)$$

Zeeman 項 z-方向　　XY 相互作用 xy-面内

磁場中 XY 模型

平均場近似

$$\begin{aligned}
\sigma_{\mathbf{k'}}^x\sigma_{\mathbf{k}}^x &= \left\{\left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle + \left(\sigma_{\mathbf{k'}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\right)\right\}\left\{\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle + \left(\sigma_{\mathbf{k}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle\right)\right\} \\
&= \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle + \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\left(\sigma_{\mathbf{k}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle\right) + \left(\sigma_{\mathbf{k'}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\right)\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle + \left(\sigma_{\mathbf{k'}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\right)\left(\sigma_{\mathbf{k}}^x - \left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle\right) \\
&\approx \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\sigma_{\mathbf{k}}^x + \sigma_{\mathbf{k'}}^x\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle
\end{aligned}$$

2 次の揺らぎを無視

$$H = -\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F)\sigma_{\mathbf{k}}^z + \sum_{\mathbf{kk'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\frac{1}{4}\left[2\left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\sigma_{\mathbf{k}}^x + 2\left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^y\right\rangle\sigma_{\mathbf{k}}^y - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^x\right\rangle\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^x\right\rangle - \left\langle\sigma_{\mathbf{k'}}^y\right\rangle\left\langle\sigma_{\mathbf{k}}^y\right\rangle\right]$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k'}} V(\mathbf{k'},\mathbf{k})\left\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}c_{-\mathbf{k}\downarrow}\right\rangle \qquad \xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}}\, c_{\mathbf{k}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}}\left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}\right) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}\left\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}\uparrow}^+\right\rangle$$

BCS 理論

基底状態 $|G\rangle = \prod_k \alpha_{-k\downarrow}\alpha_{k\uparrow}|0\rangle$

$$= \prod_k \left(u_k c_{-k\downarrow} + v_k c^+_{k\uparrow}\right)\left(u_k c_{k\uparrow} - v_k c^+_{-k\downarrow}\right)|0\rangle$$

$$= \prod_k -v_k\left(u_k + v_k c^+_{k\uparrow} c^+_{-k\downarrow}\right)|0\rangle$$

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} - \sum_k \left(\Delta_k c^+_{-k\downarrow} c^+_{k\uparrow} + \Delta^*_k c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow}\right) + \sum_k \Delta_k \left\langle c^+_{-k\downarrow} c^+_{k\uparrow}\right\rangle$$

Bogoliubov 変換

$$\alpha_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c^+_{-k\downarrow}$$

$$\alpha^+_{-k\downarrow} = u_k c^+_{-k\downarrow} + v^*_k c_{k\uparrow}$$

u_k：実数

$$\left[\alpha_{k\uparrow}, \alpha^+_{k\uparrow}\right]_+ = \alpha_{k\uparrow}\alpha^+_{k\uparrow} + \alpha^+_{k\uparrow}\alpha_{k\uparrow} = 1$$

Bogoliubov 粒子 α^+_k はフェルミオンとして振る舞う

↓

$$u_k^2 + |v_k|^2 = 1$$

⇩

逆変換

$$c_{k\uparrow} = u_k \alpha_{k\uparrow} + v_k \alpha^+_{-k\downarrow}$$

$$c^+_{-k\downarrow} = u_k \alpha^+_{-k\downarrow} - v^*_k \alpha_{k\uparrow}$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right), \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right), \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}, \quad \Delta_k = |\Delta_k| e^{i\phi_k}$$

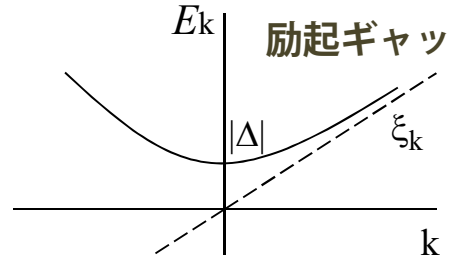
⇧

$\alpha^+_{-k\downarrow}\alpha^+_{k\uparrow}$, $\alpha_{-k\downarrow}\alpha_{k\uparrow}$ を消す条件 → $2\xi_k u_k v^*_k - \Delta_k v^{*2}_k + \Delta^*_k u_k^2 = 0$

$$H = E_g + \sum_k E_k \left(\alpha^+_{k\uparrow}\alpha_{k\uparrow} + \alpha^+_{-k\downarrow}\alpha_{-k\downarrow}\right)$$

$$E_g = \sum_k \left(2\xi_k |v_k|^2 + 2\Delta_k u_k v^*_k + \Delta_k \left\langle c^+_{-k\downarrow} c^+_{k\uparrow}\right\rangle\right)$$

⇨



Case of $\Delta_k = \Delta$