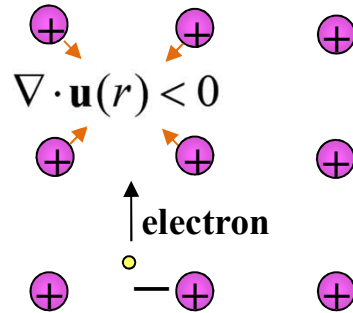


電子-格子相互作用

原子の変位ベクトル $u(r)$



電子格子相互作用

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

C : 結合定数

電子密度 $n(\mathbf{r})$

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

変位ベクトル $u(r)$ $\longrightarrow$ 原子密度 $-\nabla \cdot \mathbf{u}(r)$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(r) < 0$$

引力ポテンシャル

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(r) > 0$$

斥力ポテンシャル

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

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

電子-格子相互作用

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

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{k}\sigma} i\alpha_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad \alpha_{\mathbf{q}} = C|\mathbf{q}| \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}}}}$$

量子化された格子振動

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

フォノンの生成消滅演算子

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

量子化された変位ベクトル

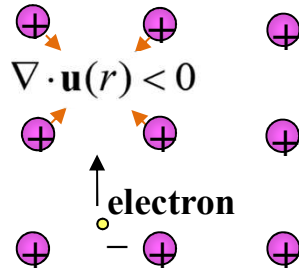
$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

縦波

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

電子-格子相互作用の効果

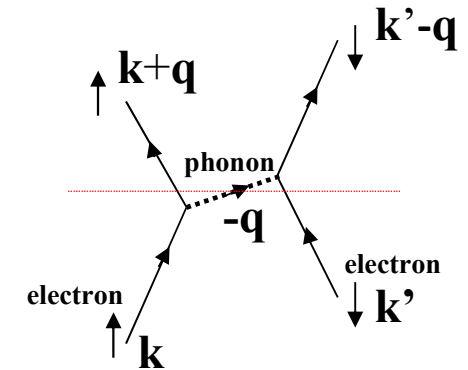
格子の変形 $u(r)$



電子格子相互作用

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

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
$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$	$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$
$\varepsilon_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{\mathbf{q}}$	$\varepsilon_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}$

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

2次の散乱過程

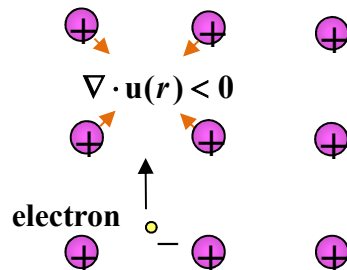
$$\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'}^+ c_{\mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma}$$

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

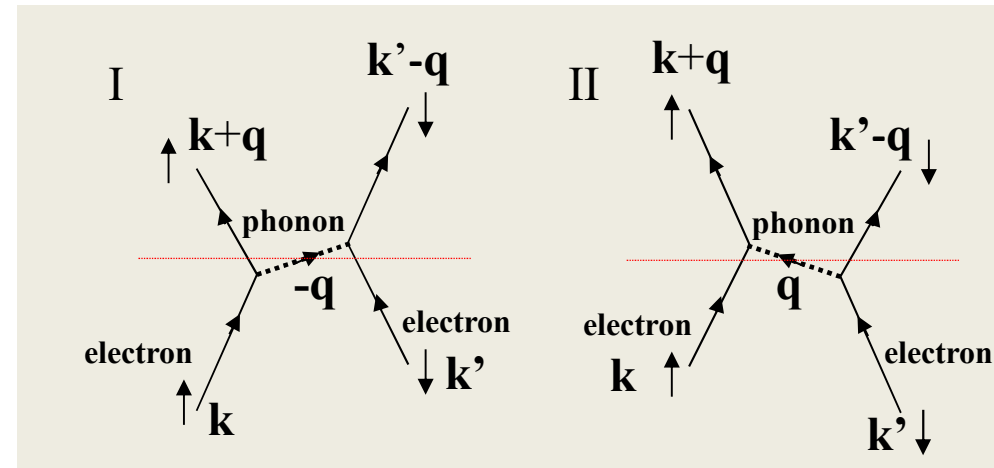
$$H_{eff} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\sigma\sigma'} \left(\frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} + \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}}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

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

$$H_{eff} = \frac{1}{2} \sum_{kk'q\sigma\sigma'} \left(\frac{\alpha_q^2}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - \hbar\omega_q} + \frac{\alpha_q^2}{\epsilon_{k'} - \epsilon_{k'-q} - \hbar\omega_q} \right) c_{k+q\sigma}^+ c_{k'-q\sigma'}^+ c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$



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

フェルミ面付近の散乱

$$\epsilon_k - \epsilon_{k+q} \approx 0$$

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

$$\omega_q \sim \text{Debye frequency}$$

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

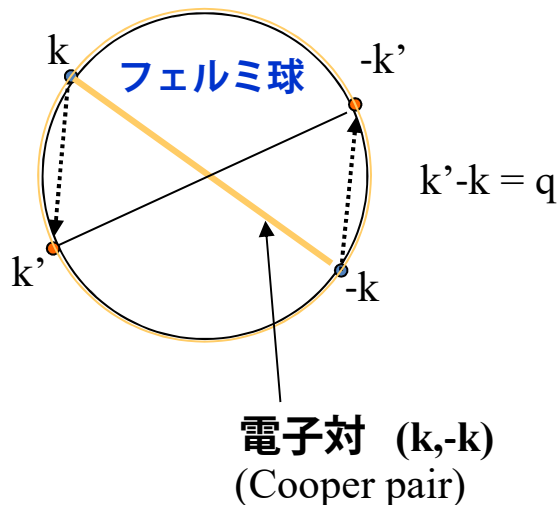
(^3He , heavy fermion, high Tc SC)

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

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



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

電子対のスピン状態

Singlet pair : singlet superconductor

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

Triplet pair : triplet superconductor

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