講義予定　2014年度
担当 高木英典 (内 24233)

4/10	0.	電子構造 (復習)	
4/17	1.	格子振動とフォノン I	古典論　音響フォノンと光学フォノン
4/24	1.	格子振動とフォノン II	格子比熱
5/1		火曜授業のため本講義休講	
5/8		休講	
5/15	1.	格子振動とフォノン III	非調和性、熱伝導
5/22	2.	電子相関と磁性 I	電子相関、フェルミ液体
5/29	2.	電子相関と磁性 II	磁気モーメント
6/5	2.	電子相関と磁性 III	強磁性と反強磁性、分子場近似
6/12	2.	電子相関と磁性 IV	スピン波
6/19	3.	超伝導 I	現象概観
6/26	3.	超伝導 II	電子格子相互作用と電子間引力、クーパー対
7/3		休講	
7/10	3.	超伝導 III	BCS 状態、磁束量子化
7/17	4.	トピックス	(高温超伝導)
7/24		試験	

0 電子構造 (復習)

0.1 金属中の電子の古典論

$$\mathrm{Na} \rightarrow \mathrm{Na}^{+} + e^{-}$$

電子は気体のように振る舞う。(ドルーデ)

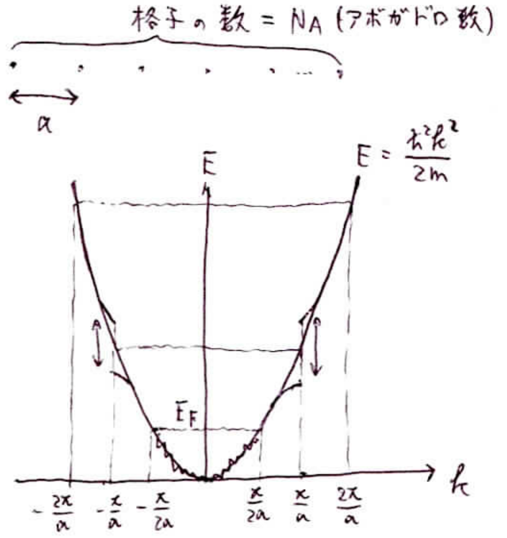
比熱

$$\begin{array}{rl} \text{気体} & 3\mathrm{R}{\sim}24\mathrm{Jmol^{-1}K^{-1}} \\ \text{電子比熱} & \mathrm{C} = \gamma T,\ \ \gamma = 1\mathrm{mJmol^{-1}K^{-1}} \\ & 10\mathrm{K}\ \ 0.01\mathrm{Jmol^{-1}K^{-1}} \\ & 300\mathrm{K}\ \ 0.3\mathrm{Jmol^{-1}K^{-1}} \end{array}$$

自由度が失われている。

金属/半導体?

0.2 量子論-フェルミ気体



"フェルミ縮退"

1次元格子を考える。

$V \sim 0 \rightarrow \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx}$, $V = N_A a$

境界条件;

$\psi_k(x + N_A a) = \psi_k(x) \rightarrow k = \frac{2\pi}{a}\frac{n}{N_A}$, n 整数

(Born - von Karman)

スピン (↑,↓) を考慮して、

$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$ (電子数 $N = N_A$ のとき)

$a \sim 2\text{Å}$ とすると、$E_F \sim 3\mathrm{eV} \sim 30000\,\mathrm{K} \gg 300\,\mathrm{K}$

$U = D(\varepsilon_F) k_B T \cdot k_B T$

$C = 2 D(\varepsilon_F) k_B^2 T$

$= \dfrac{N_A k_B}{\varepsilon_F} k_B T$

$= R \dfrac{k_B T}{\varepsilon_F}$; $k_B T$ 以外は自由度を失う

状態密度 $g(\varepsilon) = \dfrac{n}{2} \dfrac{1}{\sqrt{\varepsilon \varepsilon_F}}$, $n = \dfrac{N}{N_A a}$

$D(\varepsilon) = V g(\varepsilon)$

$D(\varepsilon_F) = \dfrac{N_A}{2} \dfrac{1}{\varepsilon_F}$ $(N = N_A)$

ブラッグ反射

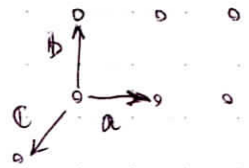
$2a = \lambda = \dfrac{2\pi}{k}$

$\boxed{k = \dfrac{\pi}{a}}$

$N/N_A = 1$ / atom $\rightarrow k_F = \dfrac{\pi}{2a}$

$N/N_A = 2$ / atom $\rightarrow k_F = \dfrac{\pi}{a}$

0-3 格子ポテンシャルとブロッホの定理



[並進対称性]

$\mathbf{R} = n_a \mathbf{a} + n_b \mathbf{b} + n_c \mathbf{c}$

$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$; 周期ポテンシャル

逆格子ベクトル

$\mathbf{k}_a = 2\pi \dfrac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{k}_b = 2\pi \dfrac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$, $\mathbf{k}_c = 2\pi \dfrac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}$

$\mathbf{K} = l \mathbf{k}_a + m \mathbf{k}_b + n \mathbf{k}_c$

$\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$, n : 整数

$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} V_{\mathbf{K}} e^{i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$ とかける。

逆格子ベクトルの波の重ね合わせ。X線回折と同じ理由。

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbb{r})$$

$V=0 \rightarrow \psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}} \equiv |\mathbb{k}\rangle$

$V \neq 0$ のとき

$$\langle \mathbb{k}' | V | \mathbb{k} \rangle = \sum_{\mathbb{K}} V_{\mathbb{K}} \int d\mathbb{r} \frac{1}{V} e^{i(-\mathbb{k}'+\mathbb{K}+\mathbb{k})\cdot\mathbb{r}}$$

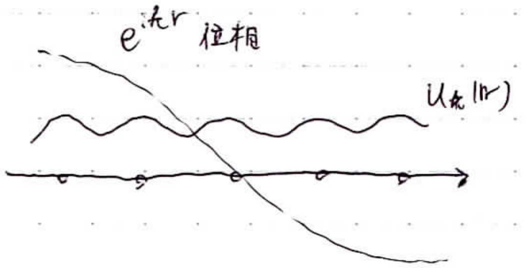
$$= \begin{cases} 0 & \text{if } \mathbb{k}' \neq \mathbb{k}+\mathbb{K} \\ V_{\mathbb{K}} & \text{if } \mathbb{k}' = \mathbb{k}+\mathbb{K} \end{cases}$$

よって、$\mathbb{k} \neq \mathbb{k}'$ ($\mathbb{k}, \mathbb{k}'$ は 1st BZ 内の Born-von Karman の条件を満たす) のとき、$\mathbb{k}+\mathbb{K}$ の波と $\mathbb{k}'+\mathbb{K}'$ ($\mathbb{K}, \mathbb{K}'$ は逆格子ベクトル) は混ざらない；

$$\psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) = \sum_{\mathbb{K}} a_{\mathbb{k}+\mathbb{K}} e^{i(\mathbb{k}+\mathbb{K})\cdot\mathbb{r}}$$

$$= e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}} u_{\mathbb{k}}(\mathbb{r})$$

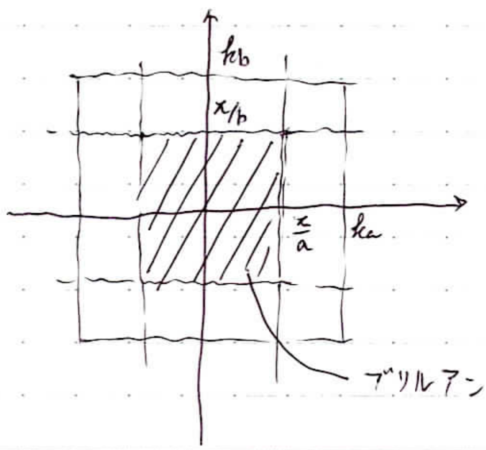
$$\begin{cases} u_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}+\mathbb{a}) = u_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) \\ \psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}+\mathbb{R}) = e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{R}} \psi(\mathbb{r}) \end{cases}$$



ブロッホの定理

$$\psi_{\mathbb{k}+\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = \psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r})$$

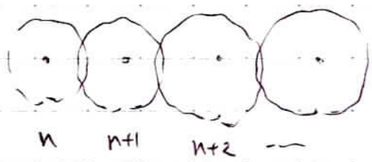
$\rightarrow$ 周期性があるので全ては必要ない。
$\mathbb{k}$ と $\mathbb{k}+\mathbb{K}$ は等価。



ブリルアン・ゾーンを $\mathbb{K}$ ずらすと、すべての領域がカバーされる。

ブリルアン・ゾーン = "$|\mathbb{k}|^2 = |\mathbb{k}-\mathbb{K}|^2$; ブラッグ条件"

0-4　強く束縛された近似



ブロッホ関数を
原子軌道の重ね合わせとして考える。

原子軌道 $\phi(\mathbb{r}-n\mathbb{a}) = |\phi_n\rangle$, $\langle\phi_n|\phi_{n+j}\rangle = 0 \quad j\neq 0$

$$\psi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{ikna}\phi_n$$

$$= e^{ikr}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_n e^{-i(r-na)}\phi_n}_{\text{周期}a\text{の周期関数}}$$

$$E = \langle\psi_k|H|\psi_k\rangle$$

$$= \frac{1}{N}\sum_n\sum_m e^{-ik(n-m)a}\langle\phi_n|H|\phi_m\rangle$$

$g = n-m$ とおいて、積分変数を $r \to r' = r - ma$ に変換

$$= \sum_{g=-\infty}^{+\infty} e^{-ikga}\langle\phi_g|H|\phi_0\rangle$$

$$= \varepsilon_0 - \beta - t(e^{ika} + e^{-ika})$$

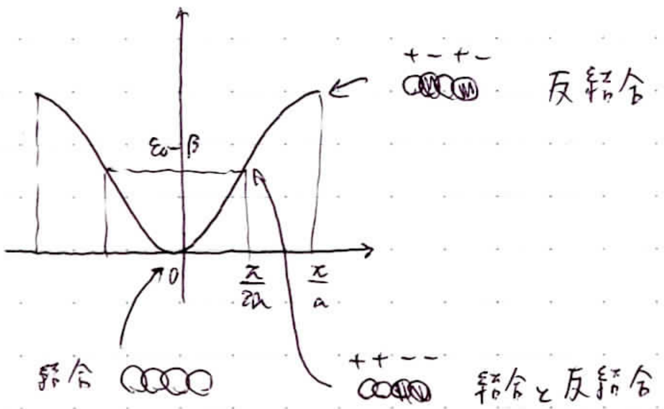
$$= \varepsilon_0 - \beta - 2t\cos ka$$

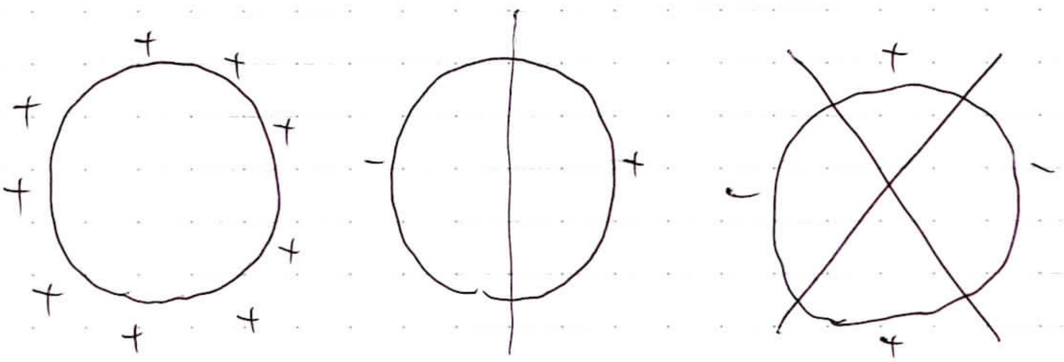
ここで、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_a(\mathbb{r}-\mathbb{R}_n)\right]|\phi_n\rangle = \varepsilon_0|\phi_n\rangle$$

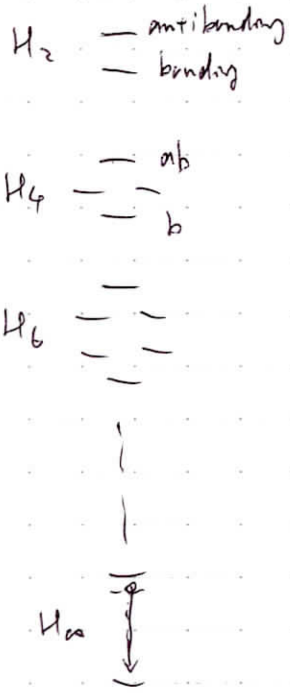
$$-\beta \equiv \int dr\,(V(r) - V_a(r))\,|\phi(r)|^2$$

$$-t \equiv \langle\phi_1|H|\phi_0\rangle,\ \langle\phi_{-1}|H|\phi_0\rangle$$





$\lambda = L\ (k=\frac{2}{Na}\frac{\pi}{a})$ $\lambda = \frac{L}{2}$



バンドは巨大分子の分子軌道に他ならない。

第2量子化

$$H = \varepsilon_0 \sum_i c_i^\dagger c_i - t\sum_i (c_{i+1}^\dagger c_i + c_{i-1}^\dagger c_i)$$
$$= \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k$$
$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 - 2t\cos ka$$