

1 電子構造

1.0 背景

固体中の自由電子



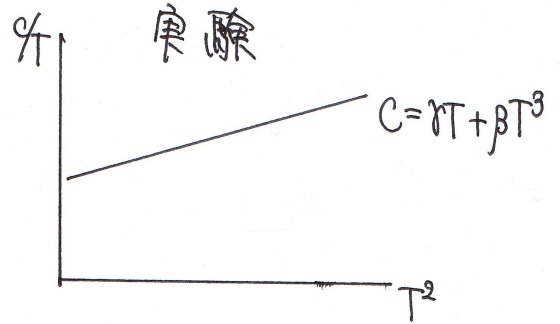
の電子は固体中を自由電子 (自由電子) と見做す。これは自由電子の近似 (自由電子)。

$$\gamma \sim 1 \text{ mJ/mol} \cdot \text{K}^2$$

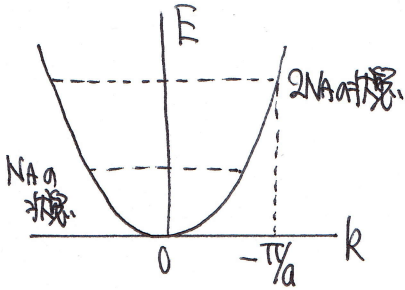
$$T = 100 \text{ K}$$

$$\rightarrow 0.1 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \ll \frac{3}{2} R \sim 12 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

: 固体中の自由電子は少くない。⇒ 量子力学関係する。

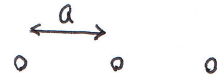


1.1 Fermi 液体と自由電子のモデル



自由電子

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikx}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



$$k = \frac{2\pi}{L} n = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{n}{N_A}, \quad n: \text{integer}$$

Fermi エネルギー

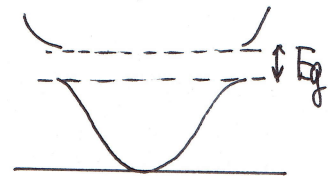
$$E_F = \frac{(1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2 \times (10^{10} / \text{m})^2}{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}} \sim 0.5 \times 10^{-18} \text{ J} \sim 3 \text{ eV} = 36000 \text{ K}$$

自由電子のエネルギーは Fermi 準位の間に存在する。

$$\lambda = 2a$$

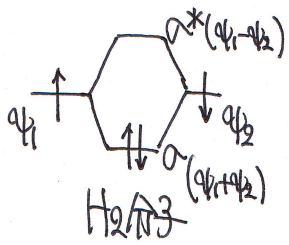
a とするとき、Bragg 反射が起こる (エネルギー準位が)。

自由電子が (1個) a とするとき metal と呼ぶ。
(2個) a とするとき semiconductor と呼ぶ。

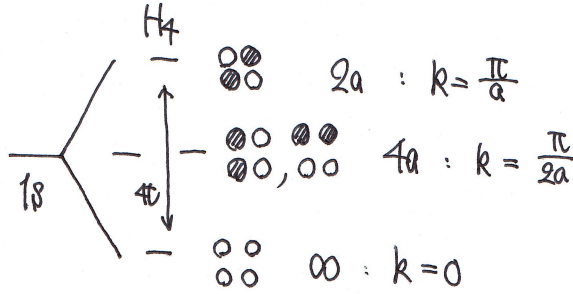


例. Ca²⁺ の場合、metal となる。Fermi 準位はエネルギー帯域内に存在する。

1.2 化学結合とエネルギーバンド

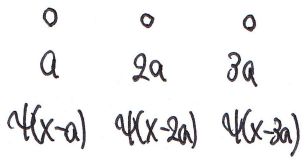


$$-t = \int \psi_1 H \psi_2$$



共有結合の結合エネルギーが増える。

1.3 tight-binding LCAO



基底関数 \psi_n を用いて

$$\Phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{NA}} \sum_n e^{\pm i k n a} \psi(x - n a) = \frac{1}{\sqrt{NA}} e^{\pm i k x} \underbrace{\sum_n e^{\mp i k (x - n a)} \psi(x - n a)}_{= U_k(x)}$$

$U_k(x)$: 周期 a の関数

\(\Rightarrow\) Bloch の定理

エネルギー

$$E_k = \langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle = \frac{1}{N} \sum_j \int e^{-i k (i-j)a} \psi^*(x - i a) H \psi(x - j a) dx$$

ここで

$$i = j \text{ なら } E_{is} \quad i = j \pm 1 \text{ なら } -t$$

を用いる。

すると

$$E_k = -\epsilon_0 - t(e^{i k a} + e^{-i k a}) = -\epsilon_0 - 2t \cos k a$$

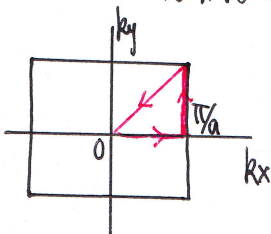
を得る。

2次元の場合

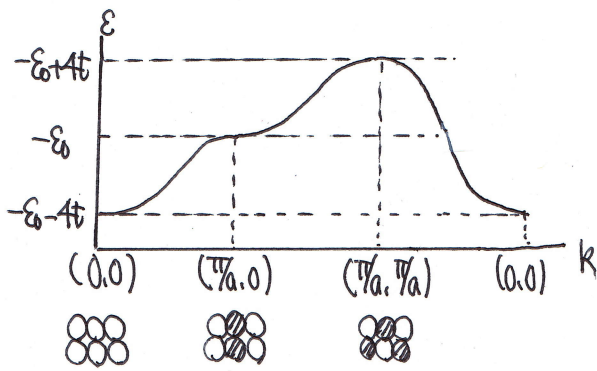
$$E_k = -\epsilon_0 - 2t(\cos k_x a + \cos k_y a)$$

を得る。

1.4 2次元正方形格子の電子構造と Fermi 面



左図の正方形 Fermi 面の断面を見よ。



(自由電子のエネルギー)

$$E_0 \approx -\epsilon_0 - 2t \left[1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 + 1 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 \right]$$

$$= -\epsilon_0 - 4t + \underbrace{t a^2 |k|^2}_{= \frac{\hbar^2 |k|^2}{2m^*}}$$

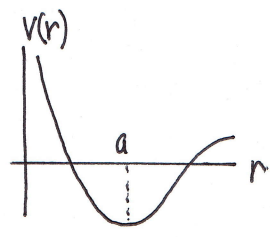
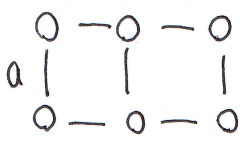
m^* : 有効質量

$\frac{\partial E}{\partial |k|^2} \propto \frac{1}{m^*}$: m^* は各点で異なる。

よって $(\frac{\pi}{a}, 0)$ 等は特異 ($m^* \rightarrow \infty$) とはならず、実際は高次元で考慮が必要。

2. 結晶格子

2.0 背景



$$V(r) = \alpha (R-a)^2 + \dots$$

\Rightarrow 第1近似では調和振動系と考える。

結晶格子

化学結合 \rightarrow バネ . $k_B T \rightarrow$ 振動エネルギーと見做せる。

振動エネルギー量子化

$$H = \hbar \omega (c^\dagger c + \frac{1}{2})$$

にある

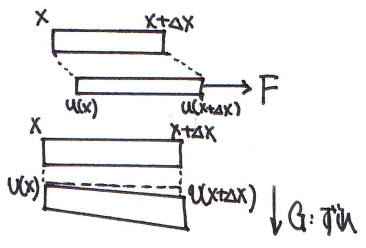
$k_B T \gg \hbar \omega$: 多<a>振動子の近似 \rightarrow 古典

$k_B T \ll \hbar \omega$: 振動子の近似 \rightarrow 量子 (室温程度で量子論が必要)

格子振動は熱伝導に大きく関係する。

2.1 固体の弾性性質

固体は同力定数でつながっている。



歪み

$$\Delta u = u(x+\Delta x) - u(x)$$

圧力

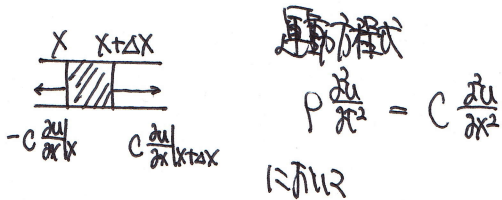
$$f = c_{11} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (フックの法則) \quad c_{11}: \text{弾性係数}$$

問

$$f = C_{44} \frac{\partial u}{\partial x}$$

$T = 300\text{K}$ での Cu の弾性定数。

	$C_{11}(\text{GPa})$	$C_{44}(\text{GPa})$	$\rho(\text{g/cm}^3)$
W	407	66	19
Cu	129	48	9
Pb	16	6	12



解

$$u = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$$

代入

$$\omega = \sqrt{\frac{C}{\rho}} |k|, \quad v_{\text{sound}} = \sqrt{\frac{C}{\rho}} : \text{音速}$$

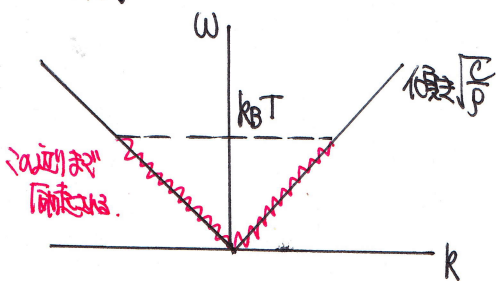
を得る。音速 v は、

$$v = \frac{d\omega}{dk}$$

$$v_p = \frac{\omega}{k}$$

	$C_{11}(\text{GPa})$	$\rho(\text{g/cm}^3)$	$v_{\text{sound}}(\text{m/s})$
Pb	16	11	1.2×10^3
Cu	129	9	3.5×10^3

とる。



300K の熱エネルギーは $k_B T$ 程度で振動子の平均エネルギーは $k_B T$ である。

$$k_B T \sim 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \times 300 \text{ K} \sim 4 \times 10^{-21} \text{ J}$$

$$\omega_T = \frac{4 \times 10^{-21} \text{ J}}{1 \times 10^{-24} \text{ J/s}} \sim 4 \times 10^{13} / \text{sec}$$

音速を考慮

$$k_T = \frac{\omega}{v_{\text{sound}}} \approx \frac{4 \times 10^{13} / \text{sec}}{3 \times 10^3 \text{ m/s}} \sim 10^{10} / \text{m}$$

他の

$$k = \frac{\pi}{a} \sim 10^{10} / \text{m}$$

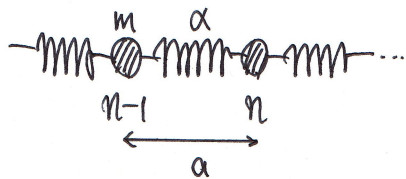
より

$$\lambda_T \sim 2a$$

である。

- ① 一様な格子と連続した原子の間に区別がある。
- ② 空音 ~ 低音では量子論的

1次元格子の原子を考慮する。



運動方程式

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

$$= \alpha(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1})$$

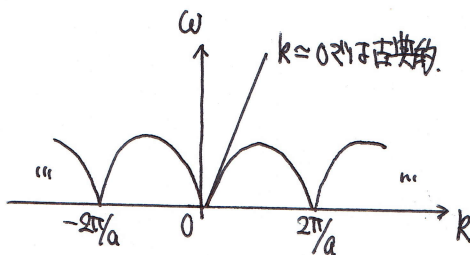
基底関数と仮定

$$u_n = u_0 \exp[i(kan - \omega t)]$$

と仮定して

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \left| \sin \frac{1}{2} ka \right|$$

を得る。



単位面積あたりの原子数

$$N_f = \frac{\alpha a N}{c} \cdot \frac{\Delta u}{a \omega^2}$$

N: 単位面積あたりの原子数

と仮定。

連続した格子を考慮して3N個のモードを得られる。

$$\hbar \omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right) : \text{phonon}$$

全エネルギーは

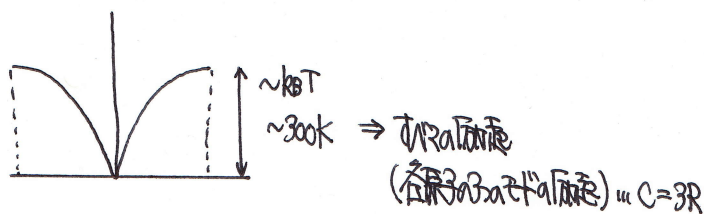
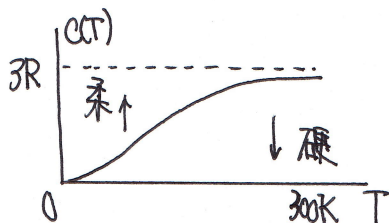
$$E = E_0 + \sum_{k,s} \hbar \omega_{ks} \left(n_{ks} + \frac{1}{2} \right) \quad k=1, 2, \dots, N \quad s=1, 2, 3$$

$$= E_0 + \frac{1}{2} \sum_{k,s} \hbar \omega_{ks} + \sum_{k,s} \hbar \omega_{ks} n_{ks}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{T=0 \text{ のエネルギー}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{零点振動}} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{T \text{ 依存項}}$

と仮定。

2.3 格子熱



Fermi Dirac 統計

$$n_{ks} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right) - 1}, \quad \varepsilon(T) = \sum_{ks} \frac{\hbar\omega_{ks}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right) - 1}$$

格子熱

$$\begin{aligned} C_v(T) &= \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \\ &= \sum_{ks} k_B \left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right) - 1\right)^2} \\ &= \sum_s \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} V_{\text{mol}} \cdot k_B \left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar\omega_{ks}}{k_B T}\right) - 1\right)^2} \\ &= \sum_s \int_0^\infty d\omega D(\omega) [\dots] \quad D(\omega) : \text{格子熱}$$

$T = \infty$ 時

$$C_v(T) = \sum_s k_B N_A = 3R, \quad D(\omega) \rightarrow N_A$$

格子熱

Debye 数

$$N = \frac{4\pi}{3} \cdot \rho_0^3 \cdot \frac{V_{\text{mol}}}{8\pi^3} = \frac{1}{6\pi^2} \rho_0^3 \cdot V_{\text{mol}}$$

格子熱

$$\rho_0 \sim \frac{\pi}{a}$$

格子熱

$$N_A = \frac{1}{6\pi^2} \rho_0^3 \cdot V_{\text{mol}} \quad \rho_0 : \text{Debye 数}$$

$$\Leftrightarrow N = N_A \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^3 = N_A \left(\frac{\omega}{\omega_D}\right)^3$$

$$\omega_D = \omega_D : \text{Debye 数}$$

格子熱

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = 3N_A \frac{\omega^2}{\omega_D^3}$$

格子熱

$$C(T) = k_B \sum_s \int_0^{\omega_D} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} \cdot 3N_A \frac{\omega^2}{\omega_D^3} d\omega$$

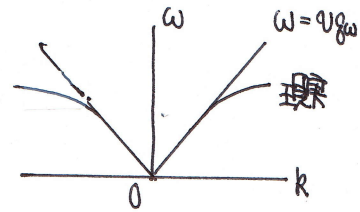
$$= 9R \left(\frac{T}{T_D}\right)^3 \int_0^{T_D} z^4 \frac{e^z}{(e^z - 1)^2} dz$$

$$T_D : \text{Debye 数}$$

$$= \frac{4}{5} \pi^3 R \left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

格子熱

$$T \propto \omega$$



に注意すると

$$N = N_A \left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

と書ける

$$E = R \frac{T^4}{T_D^3}$$

より

$$C(T) = \frac{\partial E}{\partial T} = 4R \left(\frac{T}{T_D}\right)^3$$

である。これは上式と10倍ほど異なる。これは自由度が3である。

2.4 熱伝導

$$\underline{J} = -k \underline{\nabla} T$$

$\left(\frac{J}{m^2}\right)$ $\left(\frac{W}{mK}\right)$ $\left(\frac{K}{m}\right)$

金属の物質は熱伝導率が高い。熱伝導率 k は $1 \sim 1000$ (W/mK) である。

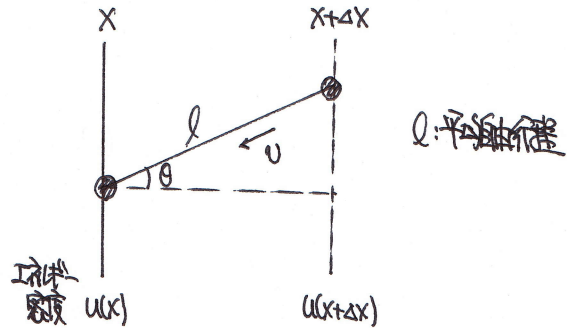
$k = 1 \sim 1000$
(銅) (金) (鉄)

Taylor展開

$$j = \int_0^\pi u(x - l \cos \theta) \cdot v \cos \theta \cdot \frac{2\pi \sin \theta}{4\pi} d\theta$$

$$= -\frac{1}{3} \frac{\partial u}{\partial x} l v$$

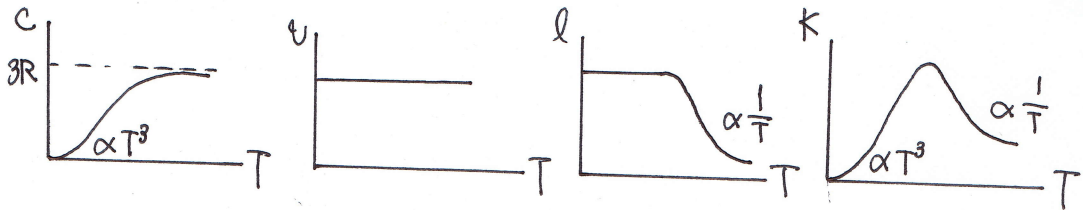
$$= -\frac{1}{3} \frac{\partial u}{\partial T} v l \frac{\partial T}{\partial x}$$



より

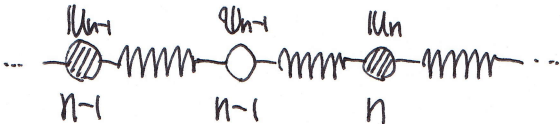
$$k = -\frac{1}{3} c v l$$

である。



2.5 光学 phonon

LXの議論は単原子格子である。LXF. AB原子である。



間隔 a.

(ばね定数 α)

運動方程式

$$m_A \ddot{u}_n = \alpha(u_n - u_n) - \alpha(u_n - u_{n-1})$$

$$= \alpha(u_n + u_{n-1} - 2u_n)$$

$$m_B \ddot{u}_n = \alpha(u_{n+1} - u_n) - \alpha(u_n - u_n)$$

$$= \alpha(u_{n+1} + u_n - 2u_n)$$

解は

$$u_n = u e^{i(kna - \omega t)}, \quad v_n = v e^{i(kna - \omega t)}$$

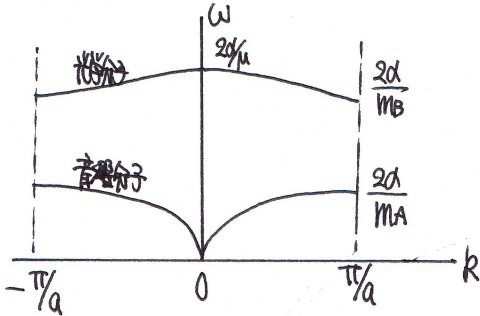
を仮定すると。

$$\begin{pmatrix} m_A \omega^2 - 2\alpha & \alpha(1 + e^{-ika}) \\ \alpha(1 + e^{ika}) & m_B \omega^2 - 2\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0$$

この行列式を解く

$$\det = 0 \Leftrightarrow \omega^2 = \frac{\alpha}{\mu} \pm \sqrt{\left(\frac{\alpha}{\mu}\right)^2 - \frac{4\alpha^2}{m_A m_B} \sin^2 \frac{ka}{2}}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$



光子と音子のphenon
k=0
Mの比に依存する。

3. 磁性

3.0 背景

物性の基礎と対応

自由粒子 - $F(H) \rightarrow M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H}$

磁化率 $\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = -\frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial H^2}$

- 磁気材料
- あり
 - 強磁性
 - 弱磁性
 - 反強磁性
 - スピネル、スピネル
 - ない
 - $\chi > 0$ 常磁性 (metal 対応)
 - $\chi < 0$ 反磁性 (insulator 対応)

微視的起源

電子スピン	S	$S\hbar$	$gS\mu_B$	$g \sim 2$
軌道角運動量	L	$L\hbar$	$L\mu_B$	μ_B : Bohr磁子 $(= \frac{e\hbar}{2mc})$
合計	$(L+S)$	$(L+S)\hbar$	$(L+gS)\mu_B$	

単位

1 T (SI単位系) = 10^4 gauss (CGS単位系)

$B = \mu_0(H+M)$

$B = H + 4\pi M$

SI単位系も χ は無次元である。

實際は原子核の特殊な電荷 g (or g_N) での値を考慮。

$\Rightarrow \mu_B (\text{cm}^3/\text{mol}), \mu_B (\text{emu}/\text{mol}), \mu_B (\text{erg}/\text{e-mol})$ は互に等価。

(例) 普通の磁石 $\sim 1 \text{kgauss} (= 0.1 \text{T})$

超伝導磁石 $\sim 10 \text{T}$

19LZ $\sim 60 \text{T} (1 \text{sec})$

超短 19LZ $\sim 10^3 \text{T} (\sim 1 \mu\text{sec})$: 実験的に ILL を瞬間的に作る。

$$\mu_B = 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T} = 9.27 \times 10^{-21} \text{ emu}$$

$$1 \text{ T} \rightarrow 10^{-23} \text{ J} \sim 1 \text{ K} \sim 0.1 \text{ meV}$$

(1 mol 原子の磁矩 $\sim 5500 \text{ emu} (= \mu_B N_A)$)

(1 mol 原子の体積 $\sim (2 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 \times N_A \sim 5 \text{ cm}^3/\text{mol}$)

$\Rightarrow (\text{cm}^3 \text{ 原子の磁矩}) \sim 10^3 \text{ emu}$

$\therefore B \sim 10^4 \text{ gauss} = 1 \text{ T}$ (μ_B は原子核の磁矩に並べたときの $(\text{cm}^3 \text{ 原子の磁矩})$)

3.1 Larmor 回転性

非磁性物質中の電子を考慮。

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(r)$$

$$= \sum_i \frac{(p_i + \frac{e}{c} A_i(r_i))^2}{2m} + \underbrace{g \mu_B B \cdot H}_{\text{Zeeman 効果}}$$

$$= \sum_i \frac{1}{2m} \left[p_i - \frac{1}{2} \frac{e}{c} (r_i \times H) \right]^2 + \text{Zeeman 項} \quad A = -\frac{1}{2} r \times H, \quad H = \nabla \times A$$

$$= \frac{1}{2m} \sum_i \left(p_i^2 - \frac{e}{c} p_i \cdot (r_i \times H) + \frac{1}{4} \left(\frac{e}{c} \right)^2 (r_i \times H)^2 \right) + \text{Zeeman 項}$$

$$= H \cdot (p_i \times r_i)$$

$$= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{e}{2mc} H \cdot (\hbar l_i) + \frac{e^2}{8mc^2} H^2 (r_{i\perp}^2) \right) + \text{Zeeman 項}$$

$$= \mu_B H \cdot l_i$$

$$= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + \mu_B H \cdot (l_i + g s_i) + \frac{e^2}{8mc^2} H^2 (r_{i\perp}^2) \right)$$

$$= g \mu_B H$$

直接相対作用

磁場と原子核の相互作用。磁場と原子核の相互作用。
 \rightarrow 磁場効果

直接作用

	F ⁻	Cl ⁻	Br ⁻	I ⁻
$\chi_{\text{mol}} (10^5 \text{ cm}^3/\text{mol})$	-9.4	-24.2	-34.5	-50.6
Z	10	18	36	54

$$\sum_i \langle \psi | \mu_i | \psi \rangle = 0 \quad (\text{総平均})$$

原子磁気モーメント

実際は非磁性基底状態に磁性的な擾乱が影響する。

$$-|\mu_B H|^2 \sum_n \frac{\langle 0 | \mu | n \rangle \langle n | \mu | 0 \rangle}{E_n - E_0} : \text{van Vleck 常磁性}$$

2) $\sum_i \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} H^2 \langle r_i^2 \rangle$ により (原子核周囲の電子 cloud を考慮)。

$$N_A \times \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} H^2 \cdot Z \langle r^2 \rangle = N_A Z \cdot \frac{\alpha^2}{12} a_0^3 \langle \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \rangle H^2$$

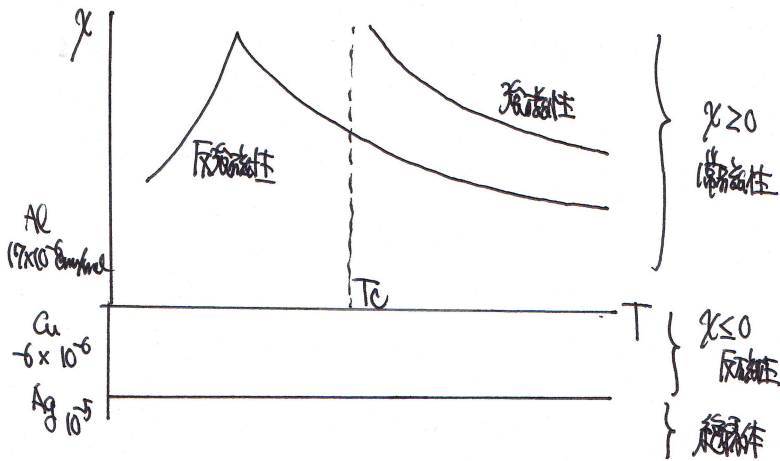
$$= \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} : \text{Bohr 半径}$$

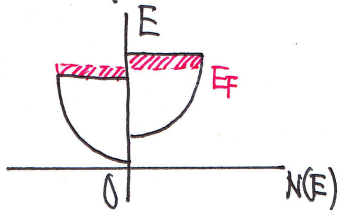
$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} : \text{微細構造定数}$$

$$\chi_{\text{mol}} = -\frac{d^2 F_{\text{mol}}}{dH^2} = -N_A Z \frac{\alpha^2}{6} a_0^3 \langle \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \rangle \sim -Z \times 10^{-6} : \text{Larmor 常磁性}$$

と見。



3.2 Pauli 常磁性 (金属の磁性)



磁気モーメント

$$\Delta E = \pm \frac{g}{2} \mu_B H$$

$$\sim 1 \text{ K} \quad (\mu_B H \sim 1 \text{ T}, g \sim 2)$$

磁化変化

$$\Delta M = \frac{g}{2} \mu_B \cdot \frac{1}{2} N(E_F) \cdot \frac{g}{2} \mu_B H - \left(-\frac{g}{2} \mu_B\right) \frac{1}{2} N(E_F) \frac{g}{2} \mu_B H$$

$$= \frac{1}{4} g^2 \mu_B^2 N(E_F) H$$

$$\sim \mu_B^2 N(E_F) H$$

52.

$$\chi_p = \frac{1}{4} g^2 \mu_B^2 N(E_F) \sim \mu_B^2 N(E_F) \propto N(E_F)$$

例

$$\frac{\chi_p}{\gamma} = \frac{3\mu_B^2}{\pi^2 k_B^2} = \text{const.}$$

とある。

$$\frac{\chi_p/\gamma}{\mu_B^2/k_B^2} \equiv R_w : \text{Wilson Et}$$

	R_w
自由電子	~ 1
強電子相関	~ 2
強電子相互作用	< 1

例

$$\gamma \sim 1 \text{ mJ/mol K}^2 \sim 10^4 \text{ erg/mol K}^2$$

$$\rightarrow \chi_p = \frac{3\mu_B^2}{\pi^2 k_B^2} \gamma = \frac{(10^{-20} \text{ erg/g})^2}{3 \cdot (1.4 \times 10^{-10} \text{ erg/K})^2} \sim 0.5 \times 10^{-4} \text{ emu/mol}$$

とある。

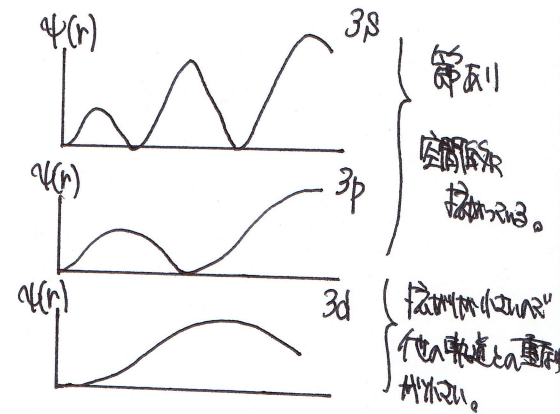
3.3 物質中の局在化

局在化を保持する

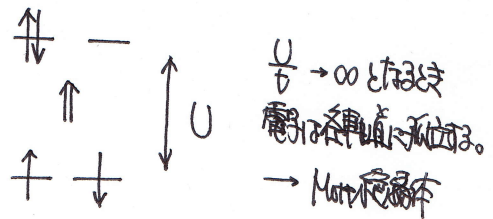
3d 遷移元素 Ti V Cr Mn Fe Co Ni Cu

4f 3dより内(希土類) La Ce Pr ... Yb

半導体の 3d, 4f 殻を保持し局在化する。



$$H = \underbrace{\sum_i t_{i,i+1} a_i^\dagger a_{i+1}}_{\sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k \text{ "kinetic energy"}} + \sum_i \underbrace{U_{ii} n_i^\uparrow n_i^\downarrow}_{\substack{\text{eV} \sim 10 \text{ eV (d軌道)} \\ \text{"同一軌道に2電子を収容"}}}$$



局在化の相互作用

電子: $S_z = \pm \frac{1}{2}, M_s = g\mu_B S$

軌道電子: d: $L=2, l_z = 0, \pm 1, \pm 2, M_L = \mu_B L$

f: $L=3, l_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$

電子配置

Pauli 排他律, Coulomb 相互作用, 交換相互作用, 軌道相互作用

に決まる。

Landé 則

(1) S が最大になる。

(2) (1) の下 L が最大になる。

(3) 占有電子数が以下のとき L と S はそれぞれに、 L のみ S のみ L と S の両方とも同じになる。

J の値と M の値

$$J = L + S, \quad M = (L + 2S) \mu_B$$

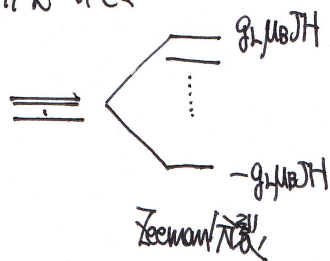
S, L は保分量であるが J は保分量である。 M は J に平行な成分の値であり、垂直な成分は 0 となる。

$$M_J = g_L J \mu_B \quad g_L: \text{Landé } g \text{ 因子}$$

M の量子数は $2J+1$ である。

$$M_J = (L + 2S) \cdot J^2 \mu_B = \frac{L^2 + 2S^2 + 2L \cdot S}{J(J+1)} = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)}$$

$H \parallel \hat{z}$ のとき



$$M_{\text{min}} = \frac{\sum_{M=-J}^J g_L J \mu_B \exp\left(\frac{g_L J \mu_B H}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{g_L J \mu_B H}{k_B T}\right)} = g_L \mu_B J B_J\left(\frac{g_L J \mu_B H}{k_B T}\right)$$

但し

$$B_J(x) \equiv \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J} x\right)$$

: Brillouin 関数

$x \rightarrow \infty$ のとき

$$B_J(x) \rightarrow 1$$

すなわち

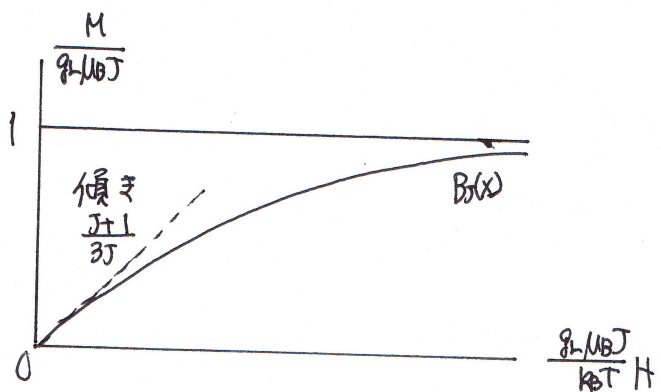
$$M_{\text{min}} \rightarrow g_L \mu_B J$$

$x \rightarrow 0$ のとき

$$B_J(x) \rightarrow \frac{x}{3}$$

すなわち

$$M_{\text{min}} \rightarrow g_L \mu_B J \cdot \frac{g_L \mu_B J H}{3 k_B T} \cdot \frac{J+1}{J} = \frac{g_L^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3 k_B T} H$$



位置

$$M_{\text{ion}} = \chi_{\text{ion}} H$$

NI

$$M_{\text{mol}} = N_A M_{\text{ion}} = \frac{N_A g_L^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T} H$$

$$\chi_{\text{mol}} = \frac{N_A g_L^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T} \propto \frac{1}{T} : \text{Curie 則}$$

$$= \frac{N_A \mu_B^2}{3k_B T} p^2 \quad p^2 \equiv g_L^2 J(J+1)$$

$$\chi_{\text{curie}} = \frac{N_A g_L^2 \mu_B^2}{3k_B T} : \text{磁気的に全粒子が応答}$$

$$\chi_{\text{Pauli}} = g_L^2 \mu_B^2 N(E_F) : \text{磁気的 Fermi 面付近の粒子が応答}$$

4f 軌道: $\text{Nd}^{3+} (4f)^3$

$$L=6, S=\frac{3}{2} \rightarrow J=\frac{9}{2}$$

$$\therefore p = g_L \sqrt{J(J+1)} = 3.5 \quad (\text{実験が正確一致})$$

3d 軌道: 実数値と合致しない。L=0 とする。合致 ⇒ L の喪失

3.5 相互作用

空間的相互作用

Coulomb 相互作用

重なり積分

Magnet dipole 相互作用。相互作用は重要ではない。

$\frac{e^2}{r}$ の相互作用 $\langle \alpha\alpha | \frac{e^2}{r} | \alpha\alpha \rangle$ などは Coulomb 相互作用行列

	$\alpha\alpha$	$\beta\beta$	$\alpha\beta$	$\beta\alpha$
$\alpha\alpha$	$U - J_{\text{ex}}$	0	0	0
$\beta\beta$	0	$U - J_{\text{ex}}$	0	0
$\alpha\beta$	0	0	U	$-J_{\text{ex}}$
$\beta\alpha$	0	0	$-J_{\text{ex}}$	U

$$U = \psi_1^* \psi_2^* \frac{e^2}{r}$$

$$-J_{\text{ex}} = \psi_1^*(1) \psi_2^*(2) \frac{e^2}{r} \psi_1(2) \psi_2(1)$$

対称化

$$\text{diag} (U - J_{\text{ex}}, U - J_{\text{ex}}, U - J_{\text{ex}}, U + J_{\text{ex}})$$

$S=1$, triplet

$S=0$, singlet

と利

$$|S|^2 = S(S+1) = \begin{cases} 2 & \text{triplet} \\ 0 & \text{singlet} \end{cases}$$

と利

$$|S|^2 = |S_1 + S_2|^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2 = \frac{3}{2} + 2S_1 \cdot S_2$$

と利

$$H_{\text{Coulomb}} = U + J_{\text{ex}} - J_{\text{ex}}|S|^2 = U - \frac{1}{2}J_{\text{ex}} - \frac{1}{2}J_{\text{ex}} \underbrace{S_1 \cdot S_2}_{\text{相互作用項}}$$

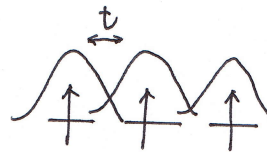
と利

$$H_{\text{ex}} \equiv - \sum_{\langle ij \rangle} 2J_{\text{ex}} S_i \cdot S_j$$

と利

Mott 状態

二重縮退状態を考慮



$$H_{\text{act}} = \sum_{\langle ij \rangle} 2J_{\text{act}} S_i \cdot S_j \quad J_{\text{act}} \equiv -\frac{2t^2}{U}$$

singlet & triplet 状態を考慮して計算。

3.6 磁性

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{\text{ex}} S_i \cdot S_j \quad J_{\text{ex}} > 0$$

平均場近似を考慮

$$H \approx - \sum_j 2J_{\text{ex}} \langle S \rangle \cdot S_j = \sum_j \frac{2J_{\text{ex}}}{(g\mu_B)^2} \langle M \rangle \cdot M_j = \sum_j H_{\text{eff}} \cdot M_j$$

但し

$$H_{\text{eff}} = \frac{2J}{(g\mu_B)^2} \langle M \rangle \Leftrightarrow \frac{\langle M \rangle}{g\mu_B S} = \frac{k_B T}{2J S^2} \frac{g\mu_B S H_{\text{eff}}}{k_B T}$$

$T = T_c$ 付近

$$T \ll T_c \quad M = \chi H \quad : \text{Curie 則}$$

$$T \gtrsim T_c \quad \langle M \rangle_{\text{lim}} = \frac{C}{T} (H + H_{\text{eff}}) = \frac{C}{T} (H + \lambda \langle M \rangle_{\text{lim}}) \quad \lambda \equiv \frac{2J}{(g\mu_B)^2}$$

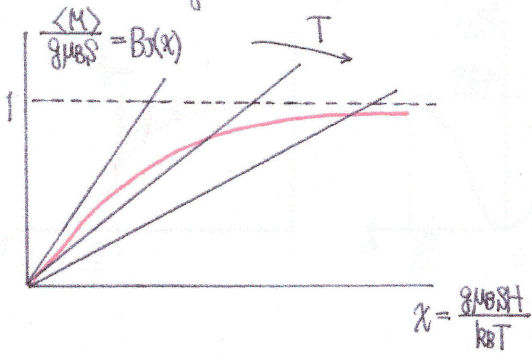
$$\rightarrow \langle M \rangle = \frac{C/T}{1 - C/T \cdot \lambda} H = \frac{C}{T - T_c} H \quad T_c \equiv \lambda C$$

磁性平均场近似

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\langle ij \rangle} -2J S_i \cdot S_j \\
 &= \sum_{\langle ij \rangle} \frac{-2J}{(g\mu_B)^2} M_i \cdot M_j \\
 &= \sum_{\langle ij \rangle} (-H_{\text{eff}} \cdot M_j)
 \end{aligned}$$



$$H_{\text{eff}} = \lambda \langle M \rangle, \quad \lambda = \frac{2zJ}{(g\mu_B)^2} \quad z: \text{配位数}$$



$$\frac{\langle M \rangle}{g\mu_B S} = \frac{H_{\text{eff}}}{\lambda g\mu_B S} = \frac{k_B T}{\lambda (g\mu_B S)^2} \frac{g\mu_B S H_{\text{eff}}}{k_B T}$$

$T = T_c$ における

$$\frac{k_B T_c}{\lambda (g\mu_B S)^2} = \frac{S+1}{3S}$$

$$\therefore T_c = \frac{\lambda (g\mu_B)^2 S(S+1)}{3k_B} = \frac{2zJS(S+1)}{3k_B} = \lambda C$$

$T > T_c$ における磁性

$$\langle M \rangle = \chi H$$

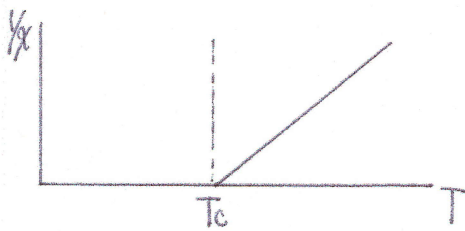
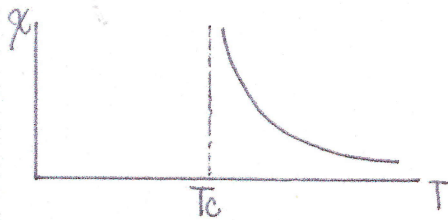
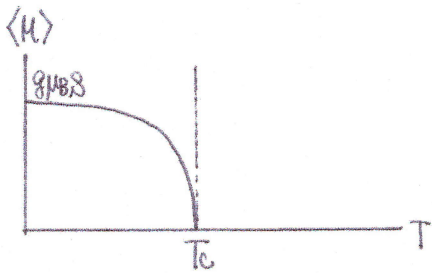
$$= \chi_{\text{ion}} (H + H_{\text{ext}}) \quad \chi_{\text{ion}} = \frac{C}{T} \quad H_{\text{ext}}: \text{外場}$$

$$= \chi_{\text{ion}} (H + \lambda \langle M \rangle)$$

$$\Leftrightarrow (1 - \lambda \chi_{\text{ion}}) \langle M \rangle = \chi_{\text{ion}} H$$

$$\therefore \langle M \rangle = \frac{\chi_{\text{ion}}}{1 - \lambda \chi_{\text{ion}}} H$$

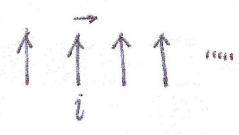
$$\chi = \frac{C/T}{1 - \lambda C/T} = \frac{C}{T - \lambda C} = \frac{C}{T - T_c}$$



強磁性体の素励起、スピン波

$$\hbar \frac{dS_i}{dt} = M_i \cdot H_{\text{eff}} \quad M_i = g\mu_B S_i \quad H_{\text{eff}} = \lambda \sum_{\text{all neighbour}} S_{i+1}$$

$$= \lambda g\mu_B \sum_{\text{all } n} S_{i+n}$$



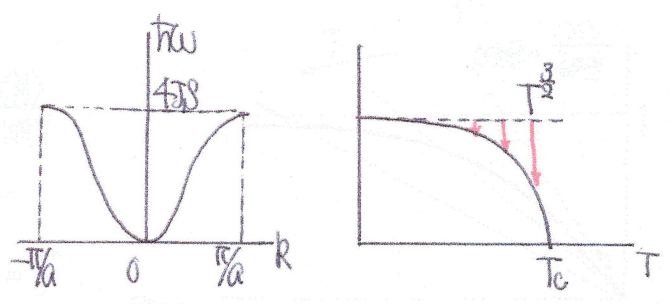
1次元の場合

$$\hbar \frac{dS_i}{dt} = \lambda g\mu_B (S_{i-1} + S_{i+1})$$

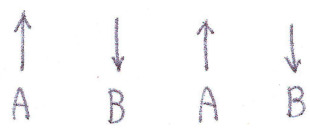
試す

$$S_i = A e^{i(k \cdot r - \omega t)}$$

$$\hbar \omega = 4JS(1 - \cos ka) \quad |k \cdot r| = kna$$



3.7 反強磁性



$$H = \sum_{\langle ij \rangle} 2J S_i \cdot S_j \quad J < 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \text{ singlet} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \text{ triplet} \end{array} \right.$$

$$\langle M_A \rangle = - \langle M_B \rangle$$

$$H = \sum_{\langle AB \rangle} \frac{2J}{g\mu_B^2} (M_A \cdot M_B + M_B \cdot M_A)$$

$$= \sum_B \frac{2J \langle M_A \rangle}{g\mu_B^2} M_B + \sum_A \frac{2J \langle M_B \rangle}{g\mu_B^2} M_A$$

$$= - \sum_B \lambda \langle M_B \rangle M_B - \sum_A \lambda \langle M_B \rangle M_A$$

$$= -H_{\text{eff}} \left(\sum_B M_B + \sum_A M_A \right)$$

$$= -H_{\text{eff}} \sum_i M_i$$

以下強磁性と同様の計算をなす。

Néel 温度

$$T_N = \frac{\lambda (g_{MB})^2 S(S+1)}{3k_B} = \lambda C - \frac{2zJS(S+1)}{3k_B}$$

$$M_B = \chi_{ion} (H + H_{eff})$$

$$= \chi_{ion} (H + \lambda \langle M_A \rangle)$$

$$= \chi_{ion} (H - \lambda \langle M_B \rangle)$$

$$\langle M_B \rangle = \frac{\chi_{ion}}{1 + \chi_{ion} \lambda} H = \frac{C}{1 + C/T} H = \frac{C}{T + C\lambda} H = \frac{C}{T + T_N} H$$

同様

$$M(g = \frac{\pi}{a}) = M_{AF} e^{i\frac{\pi}{a}x}$$

$$H(g = \frac{\pi}{a}) = H_{AF} e^{i\frac{\pi}{a}x}$$

と

$$\chi_{AF} = \frac{M_{AF}}{H_{AF}}$$

と

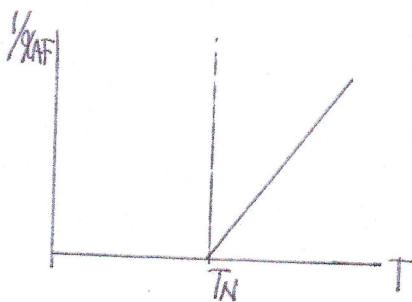
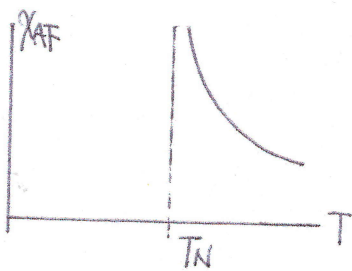
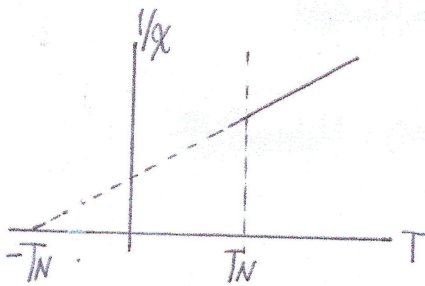
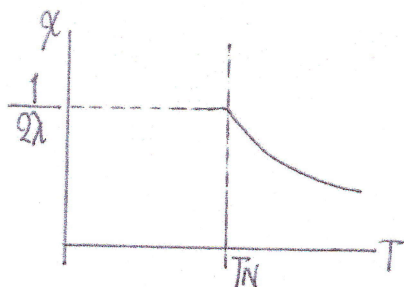
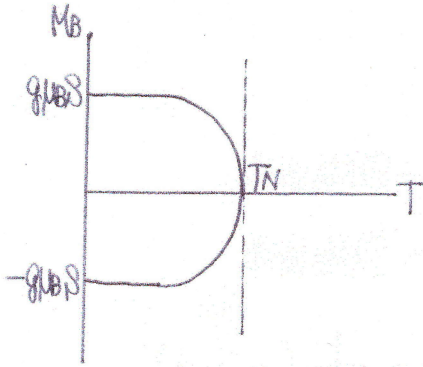
$$M_{AF} = \chi_{ion} (H_{AF} + H_{effAF})$$

$$= \chi_{ion} (H_{AF} + \lambda M_{AF})$$

よって

$$\chi_{AF} = \frac{\chi_{ion}}{1 - \lambda \chi_{ion}} = \frac{C}{T - T_N}$$

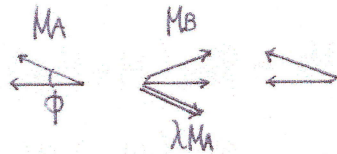
と



$\phi = 0$ 一樣帶磁率

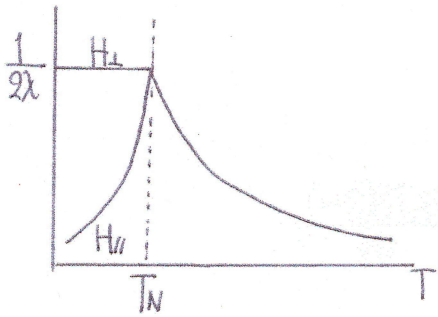


H_h 方向 $\mu_0 \mu_r$



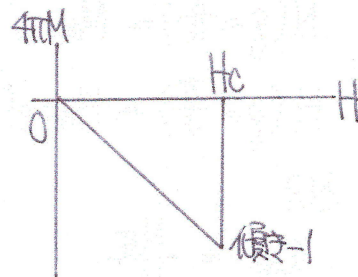
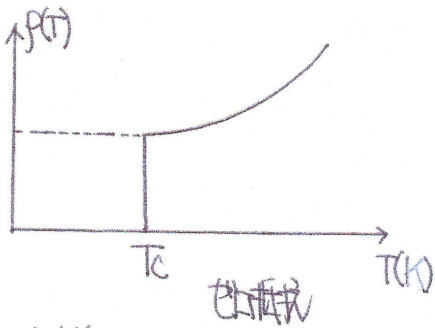
$$H = -2\lambda M_A \sin\phi = 2\lambda M_B \sin\phi$$

$$\chi = \frac{M_B \sin\phi}{H} = -\frac{M_A \sin\phi}{H} = \frac{1}{2\lambda} \text{ (constant)}$$



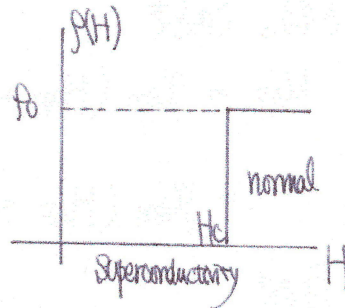
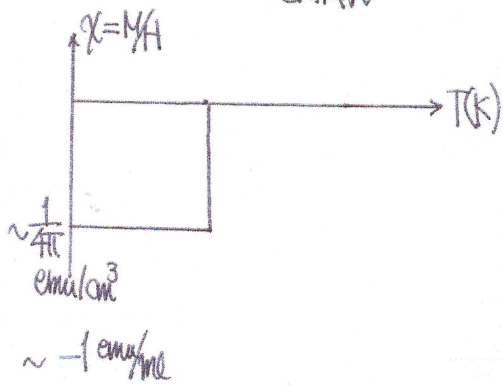
4. 超伝導

4.1 現象概観



$$B = H + 4\pi M$$

$B=0$: Meissner 効果



$H_c: 500\text{G}$ for Pb

$T_c: \text{Hg} \sim 4\text{K}$

$\text{Pb} \sim 7\text{K}$

$\text{Nb}_3\text{Ge} \sim 23\text{K}$

~~金~~ $\sim 160\text{K}$

~~金~~ $\sim 55\text{K}$

$\rho=0$ と $B=0$ はいつでも本質的。

$\rho=0$ かつ $E=0$ (完全導体) の場合は

$$\frac{\partial B}{\partial t} = 0 \Leftrightarrow B = \text{const.}$$

よ、 $B=0$ の方が $\rho=0$ のより強い条件であり、本質と見られる。

London 方程式

$$\mathbf{j} = -ne\psi = -\frac{ne}{m} (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}) \quad \text{磁場中}$$

$\langle \mathbf{p} \rangle \neq 0$ 常伝導電流がある。

いま

$$\langle \mathbf{p} \rangle = 0$$

と仮定。

$$\mathbf{j} = -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{A}$$

$$\therefore -\frac{ne^2}{mc} \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{j}$$

$$= \nabla \times (\nabla \times \frac{c}{4\pi} \mathbf{B})$$

$$= \nabla (\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B}$$

$$= -\nabla^2 \mathbf{B}$$

$$\Leftrightarrow \nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}$$

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{4\pi ne^2}{m} \frac{1}{c^2}$$

$\underbrace{\hspace{2cm}}_{\omega_p^2}$

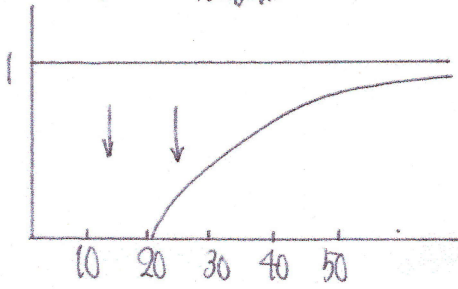
$$B(x) = B_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right)$$

$\therefore x \rightarrow \infty$ かつ $B \rightarrow 0$ である。

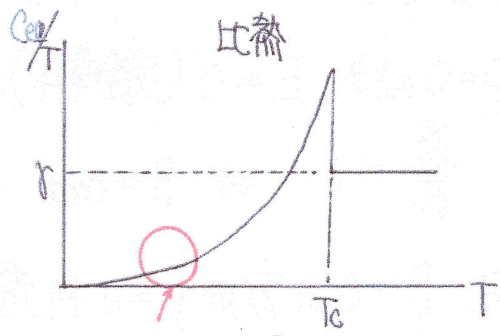
これは $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$ を意味する？ 波動関数ではない。

電子の存在

$\sigma_s(\omega)/\sigma_n(\omega)$ 光伝導



$T_c = 7K$
 $\frac{E_g}{k_B T_c} \sim 5$
 $1eV \sim 8000cm^{-1}$



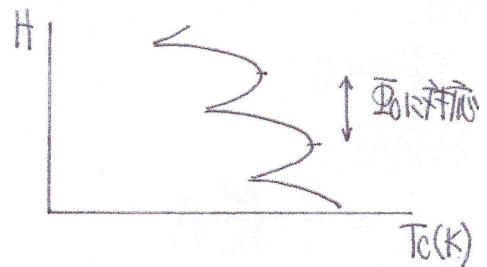
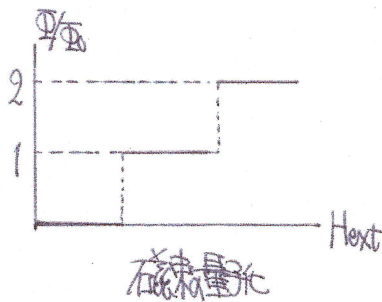
$C_{sp} \propto \exp(-\frac{T_c}{T})$
 $T_0 \sim aT_c$

電子伝導は $k_B T_c$ 未満の電子の存在による。

→ 電気を導くことができる極低温相は存在する?

電子の存在

① 再帰率 $\gamma = 1$
 $\gamma > 1$ は外部磁場による。



$\Phi_0 = \frac{ch}{2e} = 2.07 \times 10^{-7} G/cm^2$

Naive 存在

$\psi = \psi_0 e^{-i\theta(r)}$

$\theta(r)$: 位相

$-i\hbar \nabla \psi = -i\hbar \nabla \theta \psi$

$j_s \propto -i\hbar \nabla \theta + \frac{e}{c} A$

これを一周に積分する。

$\oint \hbar \nabla \theta dl = \oint \frac{e}{c} A dl$

$\hbar \cdot 2\pi n = \frac{e}{c} \Phi$

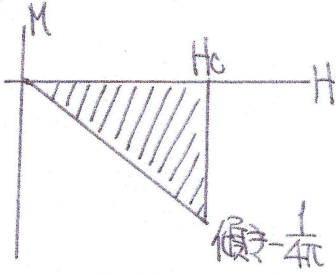
$\Leftrightarrow \Phi = \frac{ch}{e} n$

ただし、 $\frac{ch}{2e}$ と異なる。

→ e が $2e$ に変わる。



超伝導相転移



$$F_S + \frac{H_c^2}{8\pi} = F_N$$

$$\Leftrightarrow F_N - F_S = \frac{H_c^2}{8\pi}$$

Pb: $H_c = 500 \text{ G}$

$$\rightarrow \frac{(500 \text{ G})^2}{8\pi} \sim 10^7 \text{ erg/cm}^3 = 10^{-3} \text{ J/cm}^3$$

1 cm^3 に $n = 5 \times 10^{22}$ 個の電子。

$$5 \times 10^{22} / \text{cm}^3 \times k_B T_C \sim 5 \text{ J/cm}^3 \gg F_N - F_S$$

$k_B \times 1.94 \times 10^{-2} \text{ K} \sim 10^{-22} \text{ J}$ (何故?)

電子が作る電場のエネルギー $F_N - F_S$ の利得を打ち消すには?

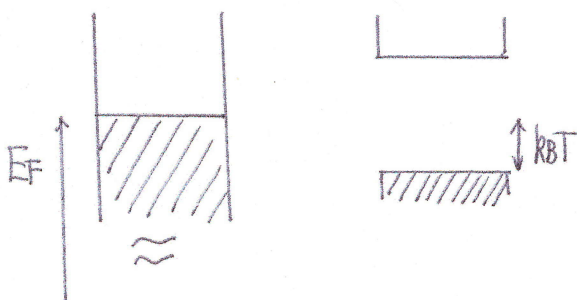
利得を打ち消すには $N(E_F) \cdot k_B T_C$ の

$$N(E_F) k_B T_C \cdot k_B T_C \sim \frac{5 \times 10^{22}}{\frac{2 \text{ eV}}{\sim 3 \times 10^{-19} \text{ J}}} \cdot 10^{-22} \cdot 10^{-22} \sim 16 \times 10^{-3} \text{ J/cm}^3$$

$k_B T_C$ エネルギースケール

電子対を作るエネルギーを形成エネルギーを下げる。

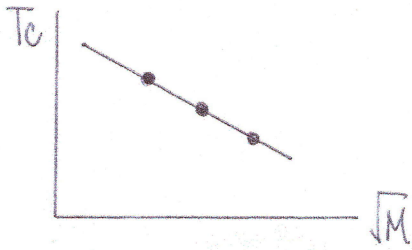
エネルギーの得 $k_B T_C \rightarrow$ Fermi level 近傍の $k_B T_C$ の寄与が X になる。



電子間の引力?

4.2 電子格子相互作用と引込相互作用

アインシュタイン効果

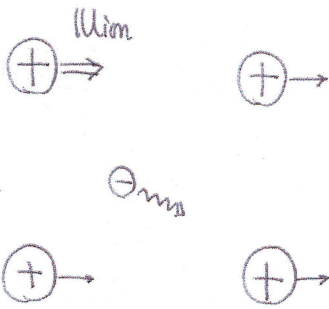


Hg 同位体 199, 200, 202

$$T_c \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$$

「Znのイオン性-リスタル?」 \sqrt{M}

電子格子相互作用の定式化



$$\nabla U(r) \propto \text{核電荷の変調 } dN_{ion}(r)$$

電子分布 $n(r)$

$$H_{int} = \frac{1}{\omega} \int C n(r) \nabla u dr$$

ω : 単位胞の長さ
 C : 相互作用定数

但し,

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

$$\psi_{\alpha}(r) = \frac{1}{\sqrt{NA}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}\alpha}$$

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{NA}} \sum_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} U_{\mathbf{g}} \quad U_{\mathbf{g}} = U_{\mathbf{g}} \hat{\mathbf{g}} = U_{\mathbf{g}} \mathbf{E}_{\mathbf{g}}$$

これ

$$\nabla \cdot (U_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}) = U_{\mathbf{g}} \frac{i|\mathbf{g}|^2}{|\mathbf{g}|} e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} = i U_{\mathbf{g}} |\mathbf{g}| e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}$$

に注意すると

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{g}} \frac{1}{\sqrt{NA}} \frac{1}{\sqrt{NA}} \frac{1}{\omega} \int C i U_{\mathbf{g}} |\mathbf{g}| e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} (e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}'}^{\dagger}) (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_{\mathbf{k}}) d\mathbf{r}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{g}} \frac{1}{\sqrt{NA}} i C |\mathbf{g}| \frac{1}{NA} \int e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{g})\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} U_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}'}^{\dagger} C_{\mathbf{k}}$$

$= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{g})$

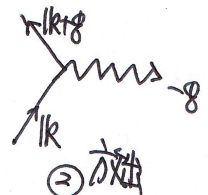
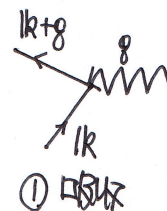
$$= \frac{1}{\sqrt{NA}} i C |\mathbf{g}| \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{g}} U_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^{\dagger} C_{\mathbf{k}}$$

$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\mathbf{g}}}} (b_{\mathbf{g}} - b_{\mathbf{g}}^{\dagger})$

$$= \frac{1}{\sqrt{NA}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{g}} i \alpha_{\mathbf{g}} (b_{\mathbf{g}} - b_{\mathbf{g}}^{\dagger}) C_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^{\dagger} C_{\mathbf{k}}$$

① ②

$$\alpha_{\mathbf{g}} = C |\mathbf{g}| \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\mathbf{g}}}}$$



4.3 3力相互作用のFeynmanの不安定性

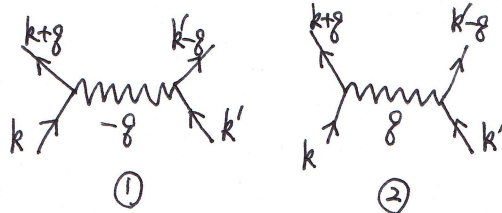
$$H = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} - V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} + \sum_{\mathbf{g}} \hbar\omega_{\mathbf{g}} (b_{\mathbf{g}}^\dagger b_{\mathbf{g}} + \frac{1}{2}) + H_{\text{el-ph}}$$

実効的相互作用

2-体相互作用 $c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{g}}^\dagger (c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}})$

$$E_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} + \hbar\omega_{\mathbf{g}} = \hbar\omega_{\mathbf{g}}$$



$$\textcircled{1} \frac{1}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} + \hbar\omega_{\mathbf{g}} - E_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{g}}^\dagger b_{\mathbf{g}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}'} = - \frac{\alpha_{\mathbf{g}}^2}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} + \hbar\omega_{\mathbf{g}} - E_{\mathbf{k}}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}$$

$$\textcircled{2} \frac{-\alpha_{\mathbf{g}}^2}{E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} + \hbar\omega_{\mathbf{g}} - E_{\mathbf{k}'}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}$$

よって

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{g}} \alpha_{\mathbf{g}}^2 \left[\frac{1}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} - \hbar\omega_{\mathbf{g}}} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} - \hbar\omega_{\mathbf{g}}} \right] c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}$$

近似。

よって

$$\alpha_{\mathbf{g}} = ic|g| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{g}}}}, \quad \frac{\alpha_{\mathbf{g}}^2}{\hbar\omega_{\mathbf{g}}} \propto \frac{|g|^2}{\omega_{\mathbf{g}}^2} \propto \text{const.}$$

$$E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{g}} \ll \hbar\omega_{\mathbf{g}}, \quad E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}-\mathbf{g}} \ll \hbar\omega_{\mathbf{g}}$$

結局として

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{g}} \frac{\alpha_{\mathbf{g}}^2}{\hbar\omega_{\mathbf{g}}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}$$

$$= -\frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{g}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}'}$$

よって

$$|\mathbf{k}+\mathbf{g}| = |\mathbf{k}'|, \quad |\mathbf{k} + \mathbf{k}'| = 0$$

よって

$$\theta = 0$$

よって

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

$$\Rightarrow H_{\text{eff}} \approx -V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}$$