

固 体 物 理

中 嶋 貞 雄

§ 8. Screening—Polarization Function

今までずっと形式論の話をしてきたがもう一つだけ，金属内の電子が動き易いために起こり，金属のいろいろな性質に効いてくる本質的な現象，Screeningについて現在わかっていること，問題になっていることを簡単にのべる。jellium モデルをとり，外からこれに外場を加えたとき電子の密度にゆらぎが起こる。外場を簡単のため，場所と時間に依存するポテンシャル $u(\vec{r}, t)$ とし，これが小さい摂動であるとして，一次のオーダーまで考えることにする。電子密度のオペレータの空間について Fourier 成分をとったものは，

$$\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} a_{\vec{p}, \sigma}^{\dagger} a_{\vec{p}+\vec{q}, \sigma} \quad (\vec{q} \neq 0) \quad (8-1)$$

と書かれる。 $\vec{q} = 0$ は一様なずれであるから考えない。系が平衡状態にあるときは $\bar{n}_{\vec{q}} = 0$ であるが外場のあるときには KUBO formula で

$$\bar{n}_{\vec{q}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \pi^R(\vec{q}; t-t') u_{\vec{q}}(t') \quad (8-2)$$

$$\pi^R(\vec{q}, t-t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \frac{1}{V} \sum \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}(t')] \rangle \quad (8-3)$$

になっている。(3)の $\langle \rangle$ は熱平衡系での統計平均の意味である。retarded Green function π^R を求めるためには Green function

$$\pi(\vec{q}, t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{1}{V} \langle T \hat{n}_{\vec{q}}(t) \hat{n}_{-\vec{q}}(0) \rangle \quad (8-4)$$

がわかればよい。但し $i\hbar \leq t \leq -i\hbar$ で Wick の T 記号を定義しておく。(4)は $\langle a^{\dagger} a a^{\dagger} a \rangle$ というもので，一種の二電子 Green 関数である。T があるための $\hat{n}_{\vec{q}}, \hat{n}_{-\vec{q}}$ の入れかえをしても符号の変化がないので $\pi(\vec{q}, t)$ は t について periodic である。Fourier 変換すると

$$\pi(\vec{q}, t) = \frac{i}{\hbar\beta} \sum_{\ell} \pi(\vec{q}, i\nu_{\ell}) e^{-\frac{i}{\hbar} \nu_{\ell} t} \quad (8-5)$$

$$\nu_{\ell} = \frac{2\pi}{\beta} \ell \quad ; \quad \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

もしこの $\pi(\vec{q}, i\nu_{\ell})$ がわかれば複素エネルギー平面で解析接続して $\pi^R(\vec{q}, \omega)$ をだすことができる。 π を polarization function と呼ぶ。

○ 自由電子の polarization function

簡単な例として自由電子モデルを考える。Wick の定理で, (4) をただほぐしてやればよい。Diagram は図1のようなもの

だけで, analytic には

$$\pi(\vec{q}, i\nu_{\ell}) = \frac{2}{V\beta} \sum_{\vec{q}} \sum_{\epsilon_n} G^{(0)}(\vec{p}+\vec{q}, i\epsilon_n + i\nu_{\ell}) G^{(0)}(\vec{p}, i\epsilon_n)$$

(8-6)

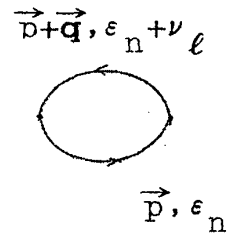


図 1

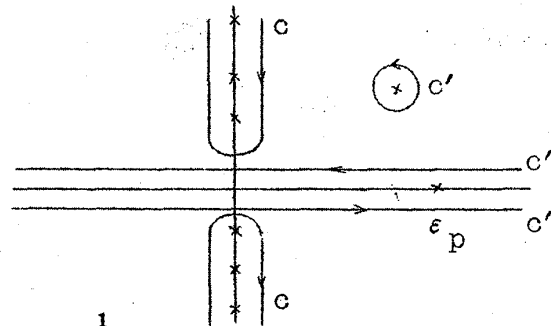
である。 ϵ_n についての和を先にやる。例によってフェルミ分布関数

$f(z) = (e^{\beta z} + 1)^{-1}$ が $z = i\epsilon_n$ で一次の pole をもち留数が $-\frac{1}{\beta}$ であることを

利用し, $\sum_{\epsilon_n}$ を図2の積分路Cをとる

積分におきかえ, 積分路をC'に移すこ

とをやる。すると(6)は



$$\pi(\vec{q}, i\nu_{\ell}) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{p}} \oint_C \frac{dz}{2\pi i} f(z) \frac{1}{(z + i\nu_{\ell} - \epsilon_{\vec{p}+\vec{q}})(z - \epsilon_{\vec{p}})}$$

$$= \frac{2}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{f(\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}}) - f(\epsilon_{\vec{p}})}{\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} - i\nu_{\ell}} \quad (8-7)$$

物理的に興味あるのは $i\nu_{\ell}$ を複素エネルギーとし実軸に上から近づけたもので

$$\pi^R(\vec{q}, \omega) = \pi(\vec{q}, \omega + i0^+) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{f(\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}}) - f(\epsilon_{\vec{p}})}{\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} - \omega - i0^+} \quad (8-8)$$

である。いまフェルミ速度を $v = p_0/m$, フェルミエネルギーを $\epsilon_F = p_0^2/2m$

として, $vq \ll \epsilon_F$, $\omega \ll \epsilon_F$ の limit を考える。そのとき $\epsilon_{\vec{p}+\vec{q}}$ と $\epsilon_{\vec{p}}$ の差は

小さいから $\vec{q}$, ω で展開すると(8)は次のようになる。

$$\pi^R(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{(\vec{p} \cdot \vec{q}/m) \cdot \frac{\partial f(\epsilon_{\vec{p}})}{\partial \epsilon_{\vec{p}}}}{\vec{p} \cdot \vec{q}/m - \omega - i0^+} \quad (8-9)$$

この式は実は Boltzmann 方程式から衝突項を無視して得られた式と同じである。それを見ると先ず分布関数 $n(\vec{p}, \vec{r}, t)$ に対する方程式は、

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial u}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial u}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial n}{\partial \vec{p}} = 0 \quad (8-10)$$

n を、平衡分布と小さなずれに分け（外場のポテンシャルが小さい場合で）

$$n = f(\epsilon_{\vec{p}}) + n_1 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{q} \cdot \vec{r} - (\omega + i0^+)t)}, u = u_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{q} - (\omega + i0^+)t)} \quad (8-11)$$

として (10) を linearize すれば

$$\left[\frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} - (\omega + i0^+) \right] n_1 - \frac{\vec{p} \cdot \vec{q}}{m} \cdot u_0 \frac{\partial f}{\partial \epsilon_{\vec{p}}} = 0 \quad (8-12)$$

これより密度のずれ n_1 は Spin の 2 倍を入れて、(9) と同じ形になる。

$$\frac{2}{V} \sum_{\vec{p}} n_1(\vec{p}) = (9)$$

興味があるのは Boltzmann 方程式であつかえないところである。そのために (8) の $\vec{p}$ の和をきちんとやる。 $T=0$ の場合にやることにすると (8) の和は elementary な積分になおる。

$$\pi^R(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\substack{\vec{p} < p_0 \\ |\vec{p} + \vec{q}| > p_0}} \left[\frac{1}{\epsilon_{\vec{p} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} + \omega + i0^+} + \frac{1}{\epsilon_{\vec{p} + \vec{q}} - \epsilon_{\vec{p}} - \omega - i0} \right] \quad (8-13)$$

$$\frac{2}{V} \sum = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} \text{ とし, } \epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} \text{ を仮定し, } \frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$$

の公式を使う。ここでは静的なばあい ($\omega=0$) の結果だけ示す。

$$\pi^R(\vec{q}, 0) = - \left(\frac{mp_0}{\pi^2 \hbar} \right) F(q) \quad (8-14)$$

$$F(q) = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{4p_0^2 - q^2}{4p_0 q} \log \left| \frac{2p_0 + q}{2p_0 - q} \right| \right] \quad (8-15)$$

中嶋貞雄

$F(q)$ の大体的ようすを図 3 に示す。大切なことは $q=2p_0$ で $F(q)$ の微分係数が対数的に発散することである。*) Kohn がその重要性を指摘したのでこの Singularity がいろいろのところに現れてきそうである。

$F(q)$ の逆変換 $F(\vec{r})$ を作ってみる。

$$\begin{aligned} F(\vec{r}) &= \int \frac{d^3 \vec{q}}{(2\pi\hbar)^3} F(q) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 \hbar^2 i r} \int_0^\infty d q \cdot q F(q) (e^{\frac{i}{\hbar} q r} - e^{-\frac{i}{\hbar} q r}) \equiv \frac{P_0^3}{\pi^2 \hbar^2 i r} I(a) \quad (8-16) \end{aligned}$$

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x}{2} \left(1 + \frac{1-x^2}{2x} \log \frac{x+1}{x-1} \right) e^{iax} \quad a \equiv \frac{2p_0 r}{\hbar}$$

この積分を遂行すればよい。図 4 の積分路をとる複素積分にして $\log \frac{x+1}{x-1}$ を $\log \frac{x+1}{x-1}$ とおきかえるときつけ加えるべき位相

の分の寄与があり、計算した結果は

$$I(a) = i\pi \frac{\sin a - a \cos a}{a^3}$$

となり求めるべき $F(\vec{r})$ は ($|\vec{r}|=r$ の関数で)

$$F(r) = \frac{2p_0^3}{\pi^2 \hbar^2} \phi \left(\frac{2p_0 r}{\hbar} \right), \quad \phi(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^4} \quad (8-17)$$

となる。すなわちもとの $F(q)$ が特異性をもつことの影響が $\frac{\cos x}{x^3}$ のような long range の振動として効いて来る。これは FRIEDEL-Oscillation と言われる。

このような効果が現れる例をいくつか見よう。

1. jellium の中に impurity を入れたとする。impurity と jellium 中の電子との相互作用を一種の pseudo potential U であらわしておき、 U 自身は screening をうけて short range になっているとする。そのとき polarization function の singularity の影響が熱力学ポテンシャル

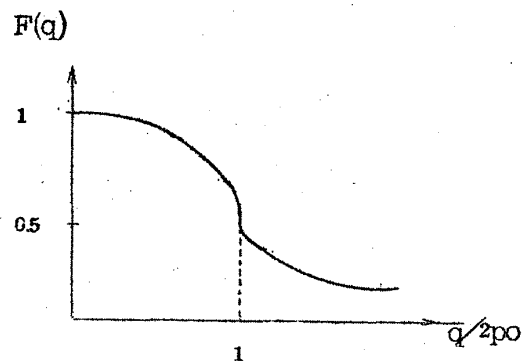


図 3

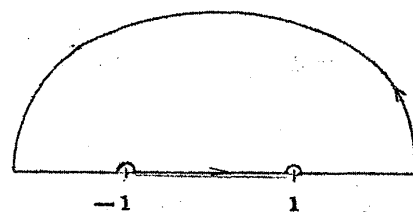
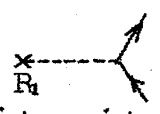
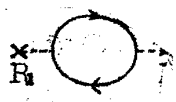


図 4

中嶋貞雄

に現れる。Uでの相互作用  から閉じたグラフを作ると  になる。R₁, R₂ は impurity site である。

これは analyticには

$$\Delta\Omega \propto \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} |U_{\vec{q}}|^2 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot (\vec{R}_1 - \vec{R}_2)} \pi(\vec{q}, \nu_{\ell}=0) \quad (8-18)$$

と書ける。これを見ると impurity atomの間には effective なポテンシャル

$$U_{\text{eff}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} |U_{\vec{q}}|^2 e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot (\vec{R}_1 - \vec{R}_2)} \pi(\vec{q}, \nu_{\ell}=0) \quad (8-19)$$

があると言える。自由電子ならば $|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$ のみの関数である。

$|\vec{R}_1 - \vec{R}_2| \gg (U \text{ の range})$ であるから $U_{\text{eff}}=0$ となりそうだが $\pi(\vec{q})$ のもつ singularity のため

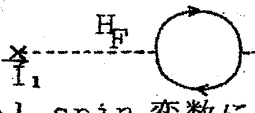
$$U_{\text{eff}}(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \sim \frac{2mp_0^4}{\pi^2 \hbar^3} |U_0|^2 \phi\left(\frac{2p_0 r}{\hbar}\right) \quad (8-20)$$

のような long range の振動となって残ることがわかる。

2° 核スピンと伝導スピンとの相互作用を通じて核スピン間の相互作用が生じる。

まず原点にある核スピン $\vec{I}$ と電子のスピンとの相互作用を Fermi タイプの

$$H_F = A \int d\vec{r} \vec{\sigma}(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \psi(\vec{r}) \vec{I} \quad (8-21)$$

とする。1° と同じように  の Diagram を計算すればよい。Green 関数はしかし spin 変数に依存するものをつかう。結果はやはり π の特異性から I₁ と I₂ の間に long range oscillatory な相互作用になる。これは RUDERMAN-KITTEL の相互作用と言われる。

3° S-f 相互作用。希土類元素は 4f 電子が一般に incomplete shell を作っていて金属内でも各原子に localize した magnetic moment がある。そして 5d, 6s が伝導電子のバンドを作っていて 4f shell magnetic moment と交換相互作用がある。それを象徴的に S-f 相互作用という。2° で見たのと同じに各原子の 4f モーメント $\vec{S}_i$ の間に $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ の long range oscillator な相互作用が出る。このこと希土類金属の spiral ordering とに関係があ

るのではないかと考えられる。

[K.YOSHIDA & A.WATABE Prog.Theor.Phys.28 361 ('62)]

その仕事は π をnearly free electron の近似で計算したことにあたる。その結果実験から知られているような, spiral ordering では7枚め毎にスピンのもとにもどることが導かれる。しかしその後希土類金属の伝導バンドの計算がされた結果伝導電子は5d であるためにnearly free よりもかなりちがったバンドになっていることがわかった。だからYOSHIDA の簡単な計算が現実の希土類金属で成立つかという疑問が生ずる。

4° 液体金属中のイオン

液体金属の融点はフェルミ温度よりも低く, 高温とは言えともかく伝導電子はフェルミ縮退をしている。たとえばアルカリ金属で見てもフェルミ面で分布関数はかなり急におちている。だからそのsingularityが π の振動となって効いていると思われる。中性子やX線の散乱の実験によってイオン間ポテンシアルに関する知見を得ようとするとき, 実験とポテンシアルの間をむすぶには, 現在ある液体論によることになるわけであるが, それを信用すると実験からポテンシアルの形を求めることができる。中性の例えばAr のようなものでは簡単なLenard-Jones 型だが金属では振動するポテンシアルが得られる。問題点は今の液体論のもつambiguity と, もう一つ電子の衝突が多く, 即ちmean free path が短いために π のlong range oscillation がぼけているのではないかということである。後者についてはたとえば,

[de GENNES : J de Phys Rad, 23 630 ('62)]

で調べられている。

金属中のCoulomb 相互作用のScreeningについて調べる。

Coulomb ポテンシアルをFourier変換すると,

$$v(\vec{r}) = \frac{e^2}{r} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} v_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad v_{\vec{q}} = \frac{4\pi (\hbar e)^2}{q^2} \quad [8.22]$$

散乱ポテンシアル $U_{\vec{q}}$ に代入すれば, クーロン相互作用になる。

金属中のCoulomb相互作用とelectronのkinetic energyとの比は,

$$\frac{\text{Coulomb 相互作用}}{\text{electron の kinetic energy}} \cong r_s$$

$r_s \sim 1$ であるため一般的な理論は困難であり，未完成である。

high density limit $r_s \ll 1$ の場合，クーロン相互作用を摂動として計算できる。

(Gell-Mann, Brueckner)

クーロンポテンシャルは long range であり momentum transfer " q " が 0 に近い項も重要になり，[8.2 2] により，その様な項は singular であるためこの発散をくいとめるには，摂動を低次で止めることが出来ない。

物理的にこのことは screening を意味し，effective に short-range potential になる。

摂動展開における形式的な注意。

1st 電子の 1 次の自己エネルギーについて

次の様なグラフが考えられる。

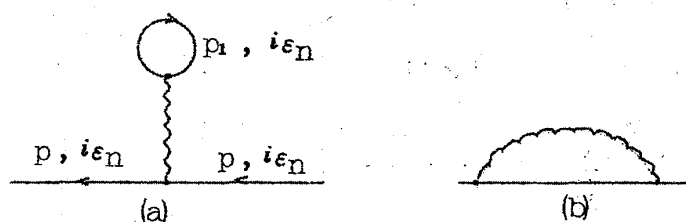


Fig-5

(a) の相互作用線の momentum transfer は， $q=0$ に対応するため発散を生ずる。1 次だけでなく一般には次の type のグラフは発散を生ずる。

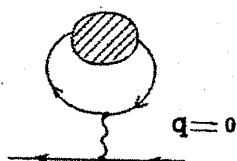


Fig-6

Fig-5 (a) に対する Green 関数は，

$$[G^{(0)}(\vec{p}; i\epsilon_N)]^2 \times 2 \times \sum_{\vec{p}_1, \epsilon_N} \frac{1}{V\beta} v_0 G^{(0)}(\vec{p}_1; i\epsilon_N)$$

Fig-6 に対しては，exact な Green 関数で $G^{(0)}(\vec{p}; i\epsilon_N)$ をおきかえて

$$[G^{(0)}(\vec{p}; i\epsilon_N)]^2 \times 2 \times \sum_{\vec{p}_1, \epsilon_N} \frac{1}{V\beta} v_0 G(\vec{p}_1, i\epsilon_N) \quad [8.2 3]$$

$$\frac{1}{\beta V} \sum_{\vec{p}_1, \epsilon_n} G(\vec{p}_1; i\epsilon_n) \equiv n$$

jellium model を考えれば，格子の atom は uniform positive charge でおきかえられ，電子はそれとも相互作用をしている。

electron average charge density = back ground charge density であり，電子がこの uniform positive charge と相互作用する場合 [8.23] における $\sum_{\vec{p}_1, i\epsilon_n} G(\vec{p}_1; i\epsilon_n)$ は電子の平均電荷密度を表わすが，これが atom のそれと等しいために同じ因数が生ずる。さらに uniform な分布であることより相互作用における momentum transfer は 0 に対応しているためにポテンシャルは v_0 である。これによって電子の格子 atom との相互作用も考えれば [8.23] と符号だけちがう補正が出てくるので結局 cancel する。

だから，この type の発散するグラフは始めから考えなくてもよい。

2° 次に Fig-5(b) type の自己エネルギーを調べる。

$$\Sigma^{(1)}(\vec{p}; i\epsilon_n) = -\frac{1}{V\beta} \sum_{\vec{p}_1, \epsilon_n} v_{\vec{p}-\vec{p}_1} G^{(0)}(\vec{p}_1; i\epsilon_n) \quad [8.24]$$

fermi 分布関数を用いて ϵ_n の和を行う。

$$= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}_1} v_{\vec{p}-\vec{p}_1} f(\epsilon_{\vec{p}_1})$$

$T=0$ において $\vec{p}_1$ の和を行えば，

$$\Sigma^{(1)}(\vec{p}; i\epsilon_n) = \frac{e^2}{\pi \hbar} \frac{1}{2} \left(\frac{p^2 - p_0^2}{p} \right) \log \left| \frac{p_0 - p}{p_0 + p} \right| + \frac{e^2 p_0}{\pi \hbar} \quad [8.25]$$

$p_0/\hbar$ はフェルミ波数であり， $p_0/\hbar \sim n^{1/3}$ と考えられ，第2項は $n^{1/3}$ に比例する。

high density の場合は， $e^2 n^{1/3} \ll \frac{p_0^2}{2m}$ であり fermi surface の近くでは第2項は小さいが，第1項は p で微分すると，fermi surface で対数的特異性をもつ。

この特異性が生じたのは，1次の摂動しか考えなかったためで，一般に無限次までの項をとらなければならないが，high-density-limit では適当な部分のみを考えるだけでこの発散は止まる。

この手続きは Bohm と Pines が行った方法にちなんで Random Phase Approximation (R.P.A) と呼ばれる。

$v_{\vec{p}-\vec{p}'}$ が $\vec{p}-\vec{p}' \approx 0$ のところより発散が生ずるのであるから，相互作用線を適当にかえてやればよいであろう。すなわち次の様な effective な interaction を考える。

$$D \equiv \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots$$

$$\equiv \text{---} \quad (8.26)$$

(R.P.A. Bubble 近似，リング近似とも言う)

すべての interaction line に $q \approx 0$ のものが出てくる。物理的には Coulomb interaction の Screening に相当する。

展開のはじめの項は，Polarization function を用いて，

$$\text{---} \bigcirc \text{---} = v_{\mathbf{q}} \pi(\mathbf{q}, i\nu_{\ell}) v_{\mathbf{q}} \quad (8.27)$$

π は energy transfer にも依存するから，一般に D は dynamical な interaction である。

〔8.27〕を用いて〔8.26〕を求めると，

$$D = v + v\pi v + v\pi v\pi v + \dots$$

$$= \frac{v}{1 - v\pi} \equiv \frac{4\pi (\hbar e)^2}{q^2 \epsilon(\mathbf{q}; i\nu_{\ell})} \quad (8.28)$$

これより， $\epsilon(\mathbf{q}; i\nu_{\ell})$ は Coulomb interaction を Screening する誘電率に相当する。

$$\epsilon(\mathbf{q}; i\nu_{\ell}) = 1 - v_{\mathbf{q}} \pi(\mathbf{q}; i\nu_{\ell}) \quad (8.29)$$

static limit の場合 ($i\nu_{\ell} = 0$)

$$\epsilon(\mathbf{q}) \equiv \epsilon(\mathbf{q}; 0) = 1 + \frac{C_S^2}{q^2} F(\mathbf{q}) \quad (8.30)$$

$F(\mathbf{q})$: Ruderman-Kittel function

$$q_s^2 = 4\pi e^2 \bar{n}^2 \left(\frac{m_F}{\pi^2 \hbar^3} \right) : \text{Thomas - Fermi Screening}$$

$F(0)=1$ であるから, $q < q_s$ の場合 $\epsilon(q) \approx 1 + \frac{q_s^2}{q^2}$

この近似で, effective interaction は,

$$D(q) \approx \frac{4\pi (e\hbar)^2}{q^2 + q_s^2} \cdot \frac{\text{Fourier 変換}}{(r\text{-space})} \rightarrow \frac{e^2}{r} \cdot e^{-q_s r} \quad (\text{Yukawa 型}) \quad [8.31]$$

この Fourier 変換では, $q < q_s$ の条件を満たしてない所まで積分はひろげられた。F(q)を用いれば, 一般にもっと複雑になり, $\cos\left(\frac{2p_0}{\hbar}r\right)$ の様な振動型になる。 $i\nu \neq 0$ とした場合は, 一般に dynamical な screening になる。これは, electron の spin paramagnetism の決定に重要であろう。

第 3 章 電子と格子振動 (フォノン) の相互作用と超電導について

今までのクーロン相互作用とすこし異なる多体相互作用である電子と格子振動の相互作用を調べる。

§ 9. electron-phonon 系

a) electron-phonon の coupling

jellium model を考え, さらに ion の格子振動を許して, 金属を連続弾性体とみなす, Fröhlich の model を考える。

まず古典的な弾性波の波動方程式を量子化することからはじめよう。

弾性媒質の微小変位 $\vec{u}(\vec{r}; t)$ は,

$$\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = v_s^2 \nabla^2 \vec{u} \quad v_s : \text{音速} \quad [9.1]$$

を満たす。

金属の場合 v_s を簡単なモデルで計算すれば,

$$\frac{v_s}{v_F} = \left(\frac{m}{M} \right)^{1/2} \approx 10^{-2} \sim 10^{-3} \quad \begin{array}{l} m : \text{electron mass} \\ M : \text{ion mass} \end{array}$$

ここで v_F は fermi-velocity である。

以後, 縦波について議論する。 $\vec{u}$ を Fourier 変換すれば,

$$\vec{u} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left(\frac{\hbar\vec{q}}{i} \right) \Phi_{\vec{q}}(t) \quad [9.2]$$

[9.1] より, $\Phi_{\vec{q}}(t)$ に対する方程式は,

$$\frac{\partial^2 \Phi_{\vec{q}}}{\partial t^2} = - \left(\frac{\omega_{\vec{q}}}{\hbar} \right)^2 \Phi_{\vec{q}} \quad \omega_{\vec{q}} = v_s q \quad [9.3]$$

$\vec{u}$ は実数であるから, $\Phi_{\vec{q}}^* = \Phi_{-\vec{q}}$

これより $\Phi_{\vec{q}}$ を次のように書きかえる。

$$\Phi_{\vec{q}} = B_{\vec{q}} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_{\vec{q}} t} + B_{\vec{q}}^* e^{\frac{i}{\hbar} \omega_{\vec{q}} t} \quad [9.4]$$

振動のエネルギーは古典的には,

$$\begin{aligned} H_{ph} &= \frac{Mn_i}{2} \int d\vec{r} \left[\dot{\vec{u}}^2 + v_s^2 (\text{div } \vec{u})^2 \right] \\ &= Mn_i \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}}^2 (B_{\vec{q}} B_{\vec{q}}^* + B_{\vec{q}}^* B_{\vec{q}}) \end{aligned} \quad [9.5]$$

n_i : ion averaged density

Φ や B を operator と考えれば量子論的になる。

$$B_{\vec{q}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}Mn_i}} b_{\vec{q}}; \quad B_{\vec{q}}^* \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{q}}Mn_i}} b_{\vec{q}}^+ \quad [9.6]$$

$b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}}^+$ に対して Bose commutation relation を仮定する。

$$\begin{aligned} [b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}^+] &= \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \\ [b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}] &= 0 \quad [b_{\vec{q}}^+, b_{\vec{q}'}^+] = 0 \end{aligned} \quad [9.7]$$

[9.5] に, この関係を代入すれば

$$H_{ph} = \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}} (b_{\vec{q}}^+ b_{\vec{q}} + \frac{1}{2}) \quad [9.8]$$

この様に quantize された振動を phonon とよぶ。 $\omega_{\vec{q}}$ はその粒子 (phonon) のエネルギーである。物理的に格子 (ion, atom) が振動することによって, 周期ポテンシャルが変形され, それにより電子が散乱を受けることを, phonon と electron の相互作用による散乱として見直すと, phonon と electron の相互作用がわかる。電荷のゆらぎは, Z を ion の valence とすると,

中嶋貞雄

$$\delta\rho = Z n_i \operatorname{div} \vec{u} \equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \delta\rho_{\mathbf{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad [9.9]$$

$\operatorname{div} \vec{u}$ に対する表式 [9.2] を代入して上式の両辺を比較すれば

$$\delta\rho_{\mathbf{q}} = \frac{Z n_i V_{\mathbf{q}}}{\sqrt{2 M n_i V \omega_{\mathbf{q}}}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \quad [9.10]$$

ion の charge の fluctuation によって電子に何如なる scattering potential が作用するか。

$$\delta U_{(\mathbf{r})} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \delta U_{\mathbf{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad [9.11]$$

$$\delta U_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e}{q^2} \delta\rho_{\mathbf{q}} \quad (\text{bare Coulomb interaction})$$

$$\delta U_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e}{q^2 \epsilon(q)} \delta\rho_{\mathbf{q}} \quad (\text{screened Coulomb int.})$$

金属中の Coulomb int. は ion の fluctuation がゆっくりだとすると static な screening を考えればよい。

electron-phonon interaction hamiltonian は [9.11] より

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \delta U_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ a_{\mathbf{p},\sigma} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{q}} a(\mathbf{q}) a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^+ a_{\mathbf{p},\sigma} \Phi_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad [9.12]$$

$$\Phi_{\mathbf{q}} = b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+ \quad a(\mathbf{q}) = \frac{4\pi Z e^2 n_i}{q^2 \epsilon(q)} \frac{q}{\sqrt{2 M n_i \omega_{\mathbf{q}}}} \quad (\text{Coupling constant})$$

Thomas-Fermi の screening の場合は,

$$\begin{aligned} \epsilon(q) &= 1 + \frac{q_s^2}{q^2} \quad Z n_i = n \quad (\text{中性の条件}) \\ a(q) &= \frac{2}{3} \epsilon_F \frac{\sqrt{\omega_{\mathbf{q}}}}{\sqrt{2 M n_i v_s^2}} = \left[\frac{\lambda(q)}{N(0)} \omega_{\mathbf{q}} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \epsilon_F &= \frac{P_0}{2m} \quad N(0) = \frac{3n}{4\epsilon_F} \quad \text{state density at fermi surface} \end{aligned} \quad [9.13]$$

$$M v_s^2 \sim m v_F^2 \sim \epsilon_F \quad \text{であるから, } a(q) \sim \left(\frac{\epsilon_F \omega_{\mathbf{q}}}{n} \right)^{\frac{1}{2}}$$

これより, $\lambda \sim 1$ となり electron-phonon の coupling はよわくない。

electron-electron 相互作用はこの章では無視する。

b) Green 函数

electron-phonon 系の全ハミルトニアンは,

$$H = H_0 + H_1 \quad [9.14]$$

$$\begin{cases} H_0 = \sum_{\vec{p}} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^\dagger a_{\vec{p}\sigma} + \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} \\ H_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}} a_{\vec{p}+\vec{q},\sigma}^\dagger a_{\vec{p},\sigma} \end{cases}$$

thermal Green function を求める。

$$\text{電子に対しては, } G(\vec{p}; t-t') \equiv \langle T a_{\vec{p},\sigma}(t) a_{\vec{p},\sigma}^\dagger(t') \rangle \quad [9.15]$$

$$\text{フォノンに対しては, } D(\vec{q}; t-t') \equiv \langle T \phi_{\vec{q}}(t) \phi_{-\vec{q}}(t') \rangle \quad [9.16]$$

ここにおいて, motion は H による motion であり, 平均 $\langle \rangle$ は H におけるものとする。

自由フォノンの Green 函数は ($H_1 \rightarrow 0$)

$$\phi_{\vec{q}}(t) = b_{\vec{q}} e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_{\vec{q}} t} + b_{\vec{q}}^\dagger e^{\frac{i}{\hbar} \omega_{\vec{q}} t}$$

であるから,

$$\langle b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta \omega_{\vec{q}}} - 1}; \quad \langle b_{\vec{q}} b_{\vec{q}}^\dagger \rangle = 1 + \frac{1}{e^{\beta \omega_{\vec{q}}} - 1} = \frac{e^{\beta \omega_{\vec{q}}}}{e^{\beta \omega_{\vec{q}}} - 1}$$

を用いれば, Fourier 変換した形で,

$$D_0(\vec{q}; t-t') = \frac{1}{\beta} \sum_{\ell} D_0(\vec{q}; i v_{\ell}) e^{-\frac{i}{\hbar} (i v_{\ell})(t-t')} \quad [9.17]$$

$$D_0(\vec{q}; i v_{\ell}) = \frac{1}{i v_{\ell} - \omega_{\vec{q}}} - \frac{1}{i v_{\ell} + \omega_{\vec{q}}} = \frac{2 \omega_{\vec{q}}}{(i v_{\ell})^2 - \omega_{\vec{q}}^2}$$

$$\text{Bose 統計によって, } v_{\ell} = \frac{2\pi\ell}{\beta}, \quad \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad [9.18]$$

同様にして, 自由電子の Green 函数は,

$$G_0(\vec{p}, i\epsilon_n) = \frac{1}{i\epsilon_n - \epsilon_{\vec{p}}} \quad [9.19]$$

次に相互作用 H_1 を入れて摂動展開を以前と同様に行う。

中嶋貞雄

摂動展開の係数のちがいは n 次のグラフに対して $(-1)^n \rightarrow (-1)^{n/2}$ になることである。

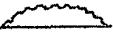
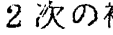
G_0 に対しては $\cdot \longrightarrow \cdot$

D_0 に対しては $\cdot \sim \cdot$

などを対応させて, exact な G, D をグラフより考察する。

摂動展開の始めのところをグラフで示すと, 例えば G については,

$$\begin{array}{c}
 \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \cdots \quad [9.20] \\
 (2\text{次}) \quad (4\text{次}) \quad (4\text{次}) \quad (c) \\
 (a) \quad (b)
 \end{array}$$

4 次までの展開をみれば, (a) は 2 次の項に対して電子の自己エネルギー型の 2 次の補正 , (b) は同様にフォノンの自己エネルギーの 2 次の補正 , (c) は electron-phonon vertex の modification と考えられる。

一般に高次まででも同様のことが言える。

今, exact な electron Green-function G を $\Longleftarrow$, phonon の D を $\sim$ で表わす。

すると高次までの補正を入れた electron, phonon の self-energy part はグラフで,

$$\begin{array}{ll}
 \text{electron : } \Sigma = & \text{~~~~~} \quad [9.21] \\
 \text{phonon : } \pi = & \text{~~~~~}
 \end{array}$$

ここで three vertex function Γ () を導入した。この Σ, π を用いれば, exact な Green function G, D に対しては self-consistent な Dyson eq に相当して, [9.20] より

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G. \quad [9.22]$$

$$D = D_0 + D_0 \pi D.$$

を得る。逆に上式を Σ, π に対する定義式とみなしてもよい。 Σ, π が求まれば G, D はわかるが, Σ, π の展開をするかわりに [9.21] を用いれ three

vertex function がわかればよいので, Γ に対する摂動展開を行う。

$$\Gamma = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots \quad [9.23]$$

Diagram 1: A vertex with an incoming wavy line labeled $Q \equiv (\vec{q}, i\nu_\ell)$ and two outgoing solid lines labeled $P+Q$ and $P \equiv (\vec{p}, i\varepsilon_n)$.

Diagram 2: A vertex with an incoming wavy line and two outgoing solid lines, with a wavy line connecting the two outgoing lines.

ここで Γ の展開の第1項の bare vertex を $a(q)$ で表わせば,

$$\Gamma = a(q) \left[1 + 0 \left(\frac{\omega q}{\varepsilon_F} \right) + \dots \right] \quad [9.24]$$

$$\omega q = v_s q, \quad \varepsilon_F = v_F p_0$$

と表わせる。一般に第2項以下は微小量である。

$$\text{それは, } \frac{\omega q}{\varepsilon_F} = \frac{v_s q}{v_F p_0} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \cdot \frac{q}{p_0} \sim \frac{q}{p_0} 10^{-2} \text{ であるが,}$$

phonon すなわち ion vibration の自由度は有限な $3N_i$ であるから, phonon momentum q は Debye cut によって $q < q_{max}$ である。

$$q_{max} \sim \frac{\hbar}{a} \sim p_0 \text{ だから, } \frac{q}{p_0} < \frac{q_{max}}{p_0} \sim 1 \text{ であり, 結局第2項は高々 } \sim 10^{-2} \text{ 程度となる。}$$

したがって Γ に対しては lowest order の近似すなわち bare interaction で十分である。これが Migdal-approximation であるが, 量的に調べてみるため Γ の展開の第2項を考えよう。

$$\Gamma^{(0)} = a(q)$$

$$\Gamma^{(1)} = a(q) \frac{1}{\beta V} \sum_{p'} a(p-p')^2 D_0(p-p') G_0(p'+Q) G_0(p') \quad [9.25]$$

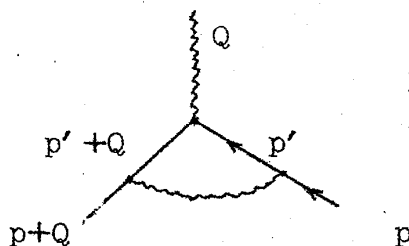


Fig-1

中嶋貞雄

まず D_0, G_0 に対する estimate を行う。

$|\vec{p}-\vec{p}'| \leq q_{max} \sim p_0$ で $|\epsilon_{n'} - \epsilon_n| \leq \omega_m$ の場合

$$D_0 \sim -\frac{2}{\omega_{p-p'}}$$

$|\epsilon_{n'} - \epsilon_n| > \omega_m$ の場合

$$D_0 \sim \frac{2\omega_{p-p'}}{|\epsilon_{n'} - \epsilon_n|^2} \text{ で減少する。}$$

$|\vec{p}-\vec{p}'| > q_{max}$ では, $D_0 = 0$

[9.2 5] は, 近似的に

$$\Gamma^{(1)} \sim \frac{\alpha^3}{\beta} N(0) \left(\frac{1}{\omega_m} \times \omega_m \beta \right) \frac{1}{\epsilon_F} \quad [9.2 6]$$

$\begin{array}{ccc} & \vdots & \vdots \\ & D_0 & G_0 \end{array}$

ここで α の q -dependence は無視し, $V^{-1} \sum_p \rightarrow N(0)$ とおきかえた。

[9.1 3] を用いて

$$\Gamma^{(1)} \sim \alpha \lambda \frac{\omega_m}{\epsilon_F} \sim \alpha \frac{\omega_m}{\epsilon_F} \quad (\lambda \sim 1) \quad [9.2 7]$$

したがって, $\Gamma^{(1)}/\Gamma^{(0)} \sim 10^{-2}$ となり, Γ に対する補正は小さく lowest term のみで近似はよい。従って例えば G を求めるには次の連立積分方程式をとけばよい。

$$\begin{cases} \Sigma = \text{diagram} \\ G = G_0 + G_0 \Sigma G \end{cases} \quad \text{(Migdal eq.)} \quad [9.2 8]$$

D の計算を実行しないで, フォノンの spectrum は中性子の非弾性散乱によって求められる。よって, Green 関数と Spectrum function との関係がわかれば D は求められる。

Phonon operator の相関関数は,

$$F(\mathbf{q}; t-t') = \langle \phi_{-\mathbf{q}}(t') \phi_{\mathbf{q}}(t) \rangle \quad [9.2 9]$$

であり, これが実験より知りうる。

Phonon の spectrum 函数は,

$$J(\mathbf{q}, t' - t) \equiv \langle [\phi_{\mathbf{q}}(t), \phi_{-\mathbf{q}}(t')] \rangle \quad [9.30]$$

時間で Fourier 変換を行くと,

$$J(\mathbf{q}, \omega) = (e^{\beta\hbar\omega} - 1) F(\mathbf{q}, \omega)$$

$\vec{q}$ と $-\vec{q}$ とが同等であるから,

$$J(\mathbf{q}, \omega) = J(\mathbf{q}, -\omega)$$

Phonon の Green-function は,

$$\begin{aligned} D(\mathbf{q}, i\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} \frac{J(\vec{q}, \omega)}{i\nu \ell^{-\omega}} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} J(\mathbf{q}, \omega) \left(\frac{1}{i\nu \ell^{-\omega}} - \frac{1}{i\nu \ell^{+\omega}} \right) \end{aligned} \quad [9.31]$$

また電子の Green 函数に対しては,

$$G(\mathbf{p}; i\epsilon_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \frac{I(\mathbf{p}; x)}{i\epsilon_n - x} \quad (\text{スペクトル表示}) \quad [9.32]$$

これらのことを用いて Migdal 方程式をといてみる。

[9.28] より

$$\Sigma(\vec{p}; i\epsilon_n) = \frac{-1}{\beta V} \sum_{\vec{p}', i\epsilon_n'} \alpha(\vec{p} - \vec{p}')^2 D(\vec{p} - \vec{p}'; i\epsilon_n - i\epsilon_n') G(\vec{p}'; i\epsilon_n')$$

スペクトル表示を代入すれば,

$$\begin{aligned} &= \frac{-1}{\beta V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} \sum_{\vec{p}'} \sum_{\epsilon_n'} \alpha(\vec{p} - \vec{p}')^2 I(\vec{p}', x) J(\vec{p} - \vec{p}'; \omega) \times \left(\frac{1}{i(\epsilon_n' - \epsilon_n) - \omega} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{i(\epsilon_n' - \epsilon_n) + \omega} \right) \frac{1}{i\epsilon_n' - x} \end{aligned} \quad [9.33]$$

Σ は複素積分になおして, fermi 分布函数を用いて留数計算をすることにより求まる。

中嶋貞雄

$$\int \frac{dz}{2\pi i} f(z) \left(\frac{1}{z-i\epsilon_n-\omega} - \frac{1}{z-i\epsilon_n+\omega} \right) \frac{1}{z-x}$$

$$= f(x) \left\{ \frac{1}{x-i\epsilon_n-\omega} - \frac{1}{x-i\epsilon_n+\omega} \right\} + \frac{1}{-e^{\beta\omega}+1} \cdot \frac{1}{i\epsilon_n+\omega-x} - \frac{1}{-e^{-\beta\omega}+1} \cdot \frac{1}{i\epsilon_n-\omega-x}$$

$T = 0^\circ \text{K}$ ($\beta \rightarrow \infty$) における状態を調べると,

$$\frac{1}{-e^{\beta\omega}+1} \longrightarrow 0$$

$$\frac{1}{-e^{-\beta\omega}+1} \longrightarrow 1$$

であるから, 次の置換えによって総和は実行される。

$$\sum_{\epsilon_n} \longrightarrow \frac{1-f(x)}{x-i\epsilon_n+\omega} + \frac{f(x)}{x-i\epsilon_n-\omega}$$

$\sum(\vec{p}; i\epsilon_n)$ は $i\epsilon_n$ の依存性が重要であり, Migdal 近似内では p の依存性は無視出来て, たとえば fermi-momentum を代入してやってもよい。

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{p}_0 \left(= \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} p_0 \right)$$

また複素エネルギーに $i\epsilon_n$ を解析接続すると,

$$i\epsilon_n \longrightarrow \zeta \quad (\text{Im } \zeta > 0)$$

$\sum(p_0; 0)$ は chemical potential の shift を与えるので重要でないので, それを差引いた $\Delta\sum(\zeta)$ についてのみ議論する。

$$\Delta\sum(\zeta) = \sum(p_0, \zeta) - \sum(p_0, 0) \quad [9.34]$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi\hbar} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi\hbar} a(p-p')^2 J(p-p', \omega) I(p', \omega)$$

$$\times \left[f(x) \left(\frac{1}{x-\zeta-\omega} - \frac{1}{x-i0^+-\omega} \right) + (1-f(x)) \left(\frac{1}{x-\zeta+\omega} - \frac{1}{x-i0^++\omega} \right) \right] \quad [9.35]$$

一般論により, ζ が上, 下方向より実数軸に近づく場合,

$$\sum(\vec{p}, x \pm i0^+) = \sum(p_0, 0) + a(p, x) \mp i b(p, x) \quad [9.36]$$

$\xi_{\vec{p}} \equiv \frac{p^2}{2m} - \frac{p_0^2}{2m}$ を用いて, 第2章 § 7.) の結果を用いれば,

$$I(\vec{p}', x) = \frac{2\hbar b(x)}{[x - \xi_{\vec{p}'} - a(x)]^2 + b(x)^2} \quad (b(x) > 0) \quad [9.37]$$

ここで $\sum_{\vec{p}'}$ を積分に直してこれを実行する。

$\vec{p}'$ の変化は $|k| \lesssim \omega_m$ の条件下のところを考える。

x の積分では $|x| \lesssim \omega_m$ のみが効いてくる。

この範囲では, $a(x) \sim \omega_m$ である。そして $\xi_{\vec{p}'}$ の積分で効いてくるのは, フェルミ面付近の $\omega_m \ll \epsilon_F$

であり, そのとき $b(p, x) = \text{const}$ として実行出来る。 $I(\vec{p}', x)$ は x の函数としては複雑な複素函数であるが, $\xi_{\vec{p}'}$ でみれば単純な Lorentzian である。

上の範囲では Lorentzian を δ -function で置きかえてもよい。

したがって $\vec{p}$ -summation は,

$$\sum_{\vec{p}'} \longrightarrow \int d\vec{p}' \longrightarrow \int \frac{dF'}{v(\vec{p}_0')} \int d\xi_{\vec{p}'} \\ v = \frac{\partial \xi_{\vec{p}}}{\partial p} \quad (\text{fermi-surface 上での積分})$$

となる。

ここで $\int I d\xi_{\vec{p}'} = 1$ や $f(x)$ は $T = 0^\circ \text{K}$ で step-function になることより,

$$\Delta \Sigma(\xi) = - \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{dF'}{v(\vec{p}_0')} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi\hbar} J(\vec{p}_0 - \vec{p}_0', \omega) \alpha(\vec{p}_0 - \vec{p}_0')^2 \\ \times \left\{ \int_{-\infty}^0 q^x \left(\frac{1}{x - \zeta - \omega} - \frac{1}{x - i0^+ - \omega} \right) + \int_0^\infty dx \left(\frac{1}{x - \zeta + \omega} - \frac{1}{x + \omega - i0^+} \right) \right\} \quad [9.38]$$

ここで $S(\omega)$ を次式で定義する。

$$\frac{1}{2} \lambda(0) \omega_m S(\omega) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^4} \int \frac{dF'}{v(\vec{p}_0')} \alpha(\vec{p} - \vec{p}_0)^2 J(\vec{p}_0 - \vec{p}_0', \omega) \quad [9.39] \\ (\text{fermi surface での平均})$$

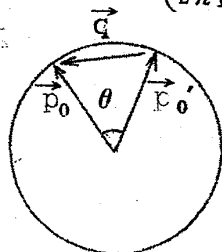


Fig-3

$S(\omega)$ は $\vec{p}_0$ の方向にも depend させれば anisotropic な場合にも用いられる。

今の場合, フェルミ面が isotropic であるとして,

上の積分変数を次の様に変換する。

中嶋貞雄

$$dF' = 2\pi p_0^2 \sin \theta d\theta, \quad q dq = p_0^2 \sin \theta d\theta$$

すると,

$$\frac{1}{2} \lambda(0) \omega_m S(\omega) = \frac{1}{2} \frac{N(0)}{p_0^2} \int_0^{q_1} q dq \alpha^2(q) \frac{1}{2\pi\hbar} J(q, \omega)$$

[9.4 0]

$$q_1 \equiv \text{Min}(q_{max}, 2p_0)$$

例えば Einstein model では,

$$\alpha(q)^2 = \frac{\lambda}{N(0)} \omega_m, \quad J(q, \omega) = 2\pi\hbar \{ \delta(\omega - \omega_m) + \delta(\omega + \omega_m) \}$$

であり, $q_{max} < 2p_0$ とすれば,

$$S(\omega) = \left(\frac{q_{max}}{2p_0^2} \right) \delta(\omega - \omega_m) \quad [9.4 1]$$

実際の金属では, δ -function type ではないが, 中性子回折で ω_m の近くに確かに peak を有することがわかっている。

この様に定義された $S(\omega)$ を用いれば [9.3 8]

は, $\int dx$ を実行して,

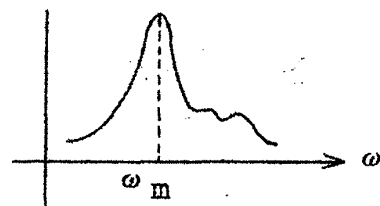


Fig-4

$$\Delta \Sigma(\zeta) = -\frac{\lambda(0)}{2} \omega_m \int_0^\infty d\omega S(\omega) \left(\log \frac{\omega + \zeta}{\omega + i0^+} - \log \frac{\omega - \zeta}{\omega - i0^+} \right) \quad [9.4 2]$$

$$a(x) = \text{Re} \Delta \Sigma(x + i0^+) = -\frac{\lambda(0)}{2} \omega_m \int_0^\infty d\omega S(\omega) \log \left| \frac{\omega + x}{\omega - x} \right| \quad [9.4 3]$$

C) 熱力学的諸量

thermodynamic potential Ω を求めるには Migdal 近似において, skelton diagram のうちから,  を Ω_c としてえらばよい。

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{1}{\beta} \sum_p \{ e^{i\epsilon_n 0^+} \log(\epsilon_p + \Sigma - i\epsilon_n) + \Sigma G \} \\ & + \frac{1}{\beta} \sum_q \{ e^{i\nu_\ell 0^+} \log(\omega_q + \pi - i\nu_\ell) + \pi D \} \\ & - \frac{1}{\beta} \sum_{p,p'} G(p) D(p-p') G(p') \end{aligned}$$

[9.4 4]

ここで，それぞれ電子系，フォノン系に対する thermodynamic potential Ω_e, Ω_{ph} は，

$$\begin{aligned}\Omega_e &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\epsilon_{\mathbf{p}} 0^+} \log (\epsilon_{\mathbf{p}} + \Sigma - i\epsilon_{\mathbf{p}}) \\ \Omega_{ph} &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{Q}} e^{i\nu_{\mathbf{Q}} 0^+} \log (\omega_{\mathbf{Q}} + \pi - i\nu_{\mathbf{Q}}) \end{aligned} \quad [9.45]$$

ここで， $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ についての summation は energy-momentum について行う。 Ω を Σ と π の汎関数と考えて， Σ, π について変分を考える。

$$\delta \Sigma, \delta \pi \longrightarrow \delta \Omega$$

$$\frac{d\Omega}{dT} = \frac{\partial \Omega}{\partial \Sigma} \frac{d\Sigma}{dT} + \frac{\partial \Omega}{\partial \pi} \frac{d\pi}{dT} + \frac{\partial \Omega}{\partial T}$$

ところで，1st order では， $\delta \Omega = \frac{\partial \Omega}{\partial \Sigma} \delta \Sigma + \frac{\partial \Omega}{\partial \pi} \delta \pi = 0$ であるから，

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} = S_e + S_{ph} \quad [9.46]$$

$$S_e = -\frac{\partial \Omega_e}{\partial T}, \quad S_{ph} = -\frac{\partial \Omega_{ph}}{\partial T}$$

となる。1次の近似で，stationary の条件 $\delta \Omega = 0$ より， $\frac{\partial \Omega}{\partial \Sigma} \delta \Sigma + \frac{\partial \Omega}{\partial \pi} \delta \pi = 0$ としたことは Migdal Approximation と consistent である。

[9.45] [9.46] による S_e の計算は，§6 の self-energy の計算と同じようにやればよい。 $\xi_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}$ ， $\Sigma(\mathbf{p}, x \pm i0^+) = \Sigma(\mathbf{p}_0, 0) + a(x) \pm i b(x)$ を用いると，

$$\Omega_e = -2 \sum_{\mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} f(x) e^{i0^+} \log \left[\frac{\xi_{\mathbf{p}+a(x)+i b(x)-x}{\xi_{\mathbf{p}+a(x)-i b(x)-x}} \right]$$

ここで $a(x), b(x)$ には $T=0$ のものを用いて，温度依存性は分布関数 $f(x)$ のみ入っているとする。 $f(-x) = 1 - f(x)$ を使って，積分を 0 から ∞ までになおし，一回部分積分すると，1の部分に温度によらない定数であるから，

$$\Omega_e = \text{const} + \frac{2}{\beta} \sum_{\mathbf{p}_0} \int_0^{\infty} \frac{dx}{2\pi i} \log(1 + e^{-\beta x}) \left\{ \frac{1 - \frac{\partial a(x)}{\partial x} + i \frac{\partial b(x)}{\partial x}}{x - \xi_{\mathbf{p}} - a(x) + i b(x)} - \frac{1 - \frac{\partial a(x)}{\partial x} - i \frac{\partial b(x)}{\partial x}}{x - \xi_{\mathbf{p}} - a(x) - i b(x)} \right\}$$

中嶋貞雄

$$+ \frac{1 + \frac{\partial a(-x)}{\partial x} + i \frac{\partial b(-x)}{\partial x}}{x + \epsilon_p + a(-x) + i b(-x)} - \frac{1 - \frac{\partial a(-x)}{\partial x} - i \frac{\partial b(-x)}{\partial x}}{x + \xi_p + a(-x) - i b(-x)} \}$$

となる。ここで

$$\{ \quad \} = - \frac{2i(1-a'(x))b(x)}{(x-\xi_p-a(x))^2+b^2(x)} - \frac{2i(1-a'(-x))b(-x)}{(x+\xi_p+a(-x))^2+b^2(-x)} \\ + \frac{2ib'(x)(x-\xi_p-a(x))}{(x-\xi_p-a(x))^2+b^2(x)} - \frac{2ib'(-x)(x+\xi_p+a(-x))}{(x+\xi_p+a(-x))^2+b^2(-x)}$$

と変形できるから, $\sum_p = N(0) \int_{-\mu}^{\infty} d\xi_p \simeq N(0) \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p$ として ξ_p に関する積分を

すると, b' に比例する項は 0 になって, $\text{Re}\sum$ の反対称部分を $a_1(x) \equiv \frac{1}{2}(a(-x) - a(x))$

とかくと,

$$\Omega_e = \text{const} - \frac{4}{\beta} N(0) \int_0^{\infty} dx \log(1 + e^{\beta x}) \frac{\partial}{\partial x} (x + a_1(x)) \\ = \text{const} - \frac{4}{\beta} N(0) \int_0^{\infty} dx f(x) (x + a_1(x)) \quad [9.47]$$

となる。 $\frac{\partial f(x)}{\partial T} = -\frac{x}{T} \frac{\partial f}{\partial x}$ なる関係を用いると,

$$S_e = \frac{4}{T} N(0) \int_0^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) x (x + a_1(x)) \quad [9.48] \\ = S_e^0 + \Delta S_e$$

$$\text{但し, } S_e^0 = \frac{4N(0)}{T} \int_0^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) x^2 \simeq \frac{2\pi^2}{3} N(0) k_B^2 T \quad [9.49]$$

で自由電子のエントロピーである。又, ΔS_e は (43) により,

$$\Delta S_e = \frac{4N(0)}{T} \int_0^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) x a_1(x) \quad [9.50]$$

$$a_1(x) = \frac{1}{2} \lambda(0) \omega_m \int_0^{\infty} d\omega \log \left| \frac{\omega+x}{\omega-x} \right| \quad [9.51]$$

となる。Einstein model では [9.41] を用いると,

$$a_1(x) = A_0 \left(\frac{\omega_m}{2} \right) \log \left| \frac{\omega_m+x}{\omega_m-x} \right|, \quad A_0 = \lambda(0) \left(\frac{q^2 m a x}{2 p_0^2} \right) \sim 1 \quad [9.52]$$

だから, ΔS_e は次のようになる。

$$\Delta S_e = \frac{2N(0)}{T} A_0 \omega_m \int_0^{\infty} dx \left(-\frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) x \log \left| \frac{\omega_m + x}{\omega_m - x} \right| \quad [9.53]$$

$x/kT = y$, $\omega_m/kT = \nu_m$, $\phi(y) = \frac{1}{e^y + 1}$ とおくと,

$$\Delta S_e = 2N(0) k_B^2 T A_0 \nu_m \int_0^{\infty} dy (-\phi'(y)) y \log \frac{y + \nu_m}{y - \nu_m} \quad [9.54]$$

この式の積分は $\nu_m \gg 1$ で $\frac{\pi^2}{3\nu_m}$, $\nu_m < 1$ で ν_m であるから, (54) は

$$\Delta S_e = \frac{2\pi^2}{3} N(0) k_B^2 T A(T) \quad] [9.55]$$

$$A(T) = A_0 \quad k_B T < \omega_m \quad [9.56a]$$

$$= \frac{3}{\pi^2} A_0 \left(\frac{\omega_m}{kT} \right)^2 \quad k_B T > \omega_m \quad [9.56b]$$

とかける。phonon のエネルギーよりも低温では, (52) からわかるように $A(T)$ は order 1 の補正 A_0 を与える。結論として, Debye 温度よりも低温では, 電子格子作用によって, 電子のエントロピーは

$$S_e = S_e^0 (1 + A_0)$$

と 100% ちかく自由電子のエントロピー S_e^0 に比べて enhance されるといえる。 A_0 を実際の金属で定量的に計算するには次のようなことを考慮すればよい。

- 1° 電子格子相互作用の結合定数 $\alpha(q)$ を pseudopotential の方法で計算する。この時, この pseudopotential による F.S の再現の程度によって $\alpha(q)$ の計算の良否を check することができる。

- 2° 電子格子相互作用で Umklapp process, つまり逆格子ベクトルを $\vec{K}$ として, $\vec{p}' = \vec{p} + \vec{q} + \hbar\vec{K}$ なる過程を考慮する。それには pseudopotential を計算するとき結晶の同期性を考入すればよい。

- 3° phonon のスペクトルには中性子の非弾性散乱の実験でえられたものを用いる。これらを考えに入れた計算の例として次のものをあげる。N.W. Ashcroft & J.W. Wilkins, Physics letters 14, 285 (1965)。彼らは Heine-Abarenkov の方法を用いて pseudopotential を F.S を再現するように定

中嶋貞雄

め、この pseudopotential を使って、 $\alpha(q)$ をきめた。彼らの結果を右表に示すが、これによると $(m^*/m)_{\text{obs}}$ と $(m^*/m)_{\text{band}}(1+A^0)$

	Na	Al	Pb
$(m^*/m)_{\text{band}}$	1.00	1.06	~1.12
A_0	0.18	0.49	1.05
$(m^*/m)_{\text{band}}(1+A^0)$	1.18	1.58	2.28
$(m^*/m)_{\text{obs}}$	125 (127)	145 (16)	200

は 10% の order では大体合うといえる。〔表のかっこ内の値は、§ 1 で用いたもので、Na, Al が低温で変態するための実験値の評価の差による〕 § 2 の終りでのべたようにクーロン相互作用は m_i に対して 1% の order の補正を与えられるので、 $(m^*/m)_{\text{obs}}$ と $(m^*/m)_{\text{band}}(1+A^0)$ の差は多分クーロン相互作用によって説明されられると思われる。simple metal で thermal mass m^* の bare mass m からの大きな外れは電子格子相互作用を考慮してはじめて説明しうる。

電子格子相互作用で大切な点は self-energy part $\Sigma(p, i\epsilon_n)$ の p でなく、 $i\epsilon_n$ 依存性が重要である点である。又単純な準粒子像はしばしば誤った結論にみちびく。 $m^*/m = 1 + A_0$ だから、スペクトル $E_p = p^2/2m^*$ なる準粒子像が有効と考えると、状態密度は $N^{(0)}/N(0) = 1 + A_0$ となるから、スピン帯磁率は $(1 + A_0)$ 倍になる筈であるが、実際の計算結果は $\chi_s = \chi_s^0 (1 + 0(\frac{v_s}{v_F}))$ でずっと小さく単純な準粒子像は成立たない。これは Σ のエネルギー依存性が重要なためで、時間依存性が自然に入ってくる Green 関数の方法がこのような問題に対しては有効である。

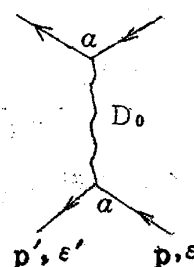
§ 10. 電子対凝縮と超電導

○ BCS モデルと normal state の不安定性

電子格子相互作用によって、電子間には phonon を媒介とした相互作用が生ずる。右のグラフに対応する相互作用は、

$$\alpha^2 (p-p') D_0(p-p', i(\epsilon_n - \epsilon_{n'}))$$

図 1



今 p, p' が F, S の近くで $|p-p'| \sim 2p_0 \sim q_{\text{max}}$ とすると、 $\omega_{p-p'} \sim \omega_m$ だから $|\epsilon_n - \epsilon_{n'}| < \omega_m$ ならば、

$$\text{effective potential} \cong -\frac{2}{\omega_m} \alpha^2 (q_{\text{max}}) \equiv -\frac{\lambda_{ph}}{N(0)} \quad [10.1]$$

で effective に引力になる。BCS (Bardeen, Cooper & Schrieffer) は物理的に同じことを、数学的に取扱いやすい形であらわした。つまり、 $|\xi_F| < \omega_0$ (ここで $\omega_0 \sim \omega_m \leq \xi_F$) の shell を考え、運動量がこの shell の中にある電子間に引力がはたらくとしたのである。ハミルトニアンは effective に、

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}} \quad [1.0.2]$$

$$\begin{cases} H_{\text{kin}} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}\sigma} \\ H_{\text{int}} = -\frac{J}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_1}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_2}^{\dagger} a_{\mathbf{p}_4} a_{\mathbf{p}_3}, \quad (J > 0) \end{cases} \quad [1.0.3a]$$

$$[1.0.3b]$$

とかける。ここで、 $\sum$ は shell の中にある運動量についてのみ和をとることを示す。 $\sigma_1 = \sigma_2$ の項は反交換関係によって、きえるから、(3b) は

$$H_{\text{int}} = -\frac{J}{V} \sum' a_{\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\downarrow}^{\dagger} a_{\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\downarrow} a_{\mathbf{p}+\frac{\mathbf{q}}{2}\uparrow} \quad [1.0.3b]$$

とかける。実際には金属中には short range なクーロン相互作用があるから、 $J = \lambda_{\text{ph}} / N(0)$ とはなっていない。Thomas-Fermi の近似によって、このクーロン相互作用の大きさを当ててみると $\frac{4\pi(\hbar e)^2}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|^2 + q_s^2} \sim \frac{4\pi(\hbar e)^2}{q_s^2} = \frac{1}{N(0)}$ だから、

$J = \frac{1}{N(0)} (\lambda_{\text{ph}} - \lambda_c)$ とかける。ここで、 $\lambda_{\text{ph}} \sim 1, \lambda_c \sim 1$ だから、大体この相互作用は相殺して、 $0 < JN(0) \ll 1$ である。そこで相互作用についての摂動展開を考えてみると、図 2 a に対する図 2 b の補正の factor は、 $G_0 = \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_{\mathbf{p}}}$

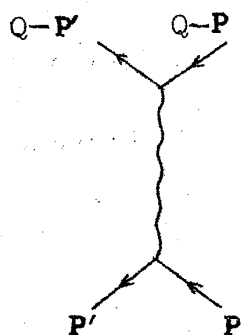


図 2 a

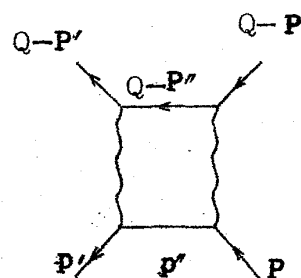


図 2 b

を電子の Green 関数として、

$$A_h(Q) = \frac{J}{\beta V} \sum_{\mathbf{p}''} G_0(\mathbf{p}'') G(Q - \mathbf{p}'') \quad [1.0.4]$$

である。

$$\begin{aligned} A_h(0) &= \frac{J}{V} \sum_{\mathbf{p}''} \frac{1 - 2f(\xi_{\mathbf{p}''})}{2\xi_{\mathbf{p}''}} \\ &= JN(0) \int_0^{\omega_0} \frac{d\xi}{\xi} (1 - 2f(\xi)) \end{aligned} \quad [1.0.5]$$

ここで $\omega_0 \sim \omega_m \leq \xi_F$ だから、状態密度は F.S の値 $N(0)$ を用いて、積分の外へ出

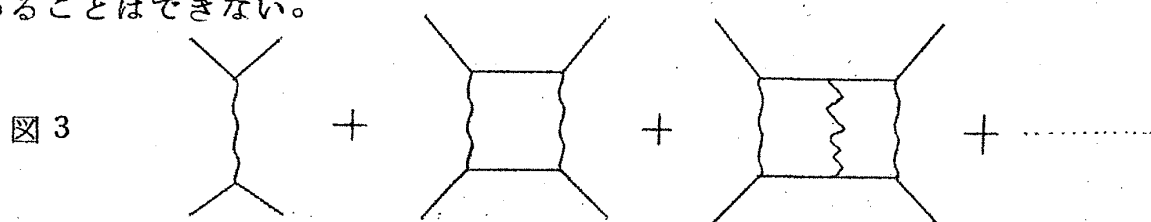
中嶋貞雄

した。この積分は， $\beta\omega_0 \gg 1$ で考えると，

$$\int_0^{\beta\omega_0} dx \frac{\text{th}x}{x} = \left[\text{th}x \log x \right]_0^{\beta\omega_0} - \int_0^{\beta\omega_0} dx \frac{\log x}{\text{ch}^2 x} \\ \cong \log \frac{\beta\omega_0}{2} - \int_0^\infty dx \frac{\log x}{\text{ch}^2 x} = \log(a\beta\omega_0) \quad (a = \frac{2r}{\pi})$$

従って， $A_1(0) = JN(0) \log \left(\frac{a\omega_0}{k_B T} \right)$ [10.6]

$JN(0) \ll 1$ であるが， T が下ってくるにつれ， $A_1(0)$ の補正は決して小さくはない。事実 $k_B T_c = a\omega_0 e^{-\frac{1}{JN(0)}}$ なる T_c で， $A_1(0) = 1$ となり摂動は有限次でとめることはできない。



そこで図 3 のようなグラフを全部たしあわせることにしても補正の factor は

$$A(0) = A_1 + A_1^2 + \dots = \frac{A_1}{1 - A_1} = \infty$$
 [10.7]

となり，先までたしてもうまくつじつまをあわせることはできない。摂動論は或る温度 T_c でだめになる。しかし，何が摂動論をだめにしているかは，以上の議論では何もいうことはできない。

○ Bose Condensation

今スピン 0 でボーズ統計に従う粒子を消す演算子を $\psi(\mathbf{r})$ ，つくる演算子を $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ とし，正規化された 1 粒子波動関数を $\eta(\mathbf{r})$ とすると，

$$b_\eta = \int d\mathbf{r} \eta(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$$
 [10.8a]

$$b_\eta^\dagger = \int d\mathbf{r} \eta(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r})$$
 [10.8b]

は各々 η なる 1 粒子状態に粒子を消し或はつくる演算子である。全体系の統計行列を ρ とすると，ボーズ粒子の平均の数は，

$$\langle b_\eta^\dagger b_\eta \rangle = \text{Tr}(\rho b_\eta^\dagger b_\eta)$$
 [10.9]

であるが $\langle b_\eta^\dagger b_\eta \rangle = N_0$ が macro な数になっている時， η -状態にボーズ

激縮が起っているという。ここで macro なる数 N_0 とは、系の全粒子の平均数を N 、全体積を V として、 $N/V = \text{const}$ で $V \rightarrow \infty$ にしたとき、 $N_0 \rightarrow \infty$ になるような数のことである。(9)は一粒子密度行列

$$\rho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) \rangle \quad [10.10]$$

を用いると、

$$\langle b_\eta^\dagger b_\eta \rangle = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \eta^*(\mathbf{r}) \rho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') \quad [10.11]$$

とかける。(10.10) のエルミート共役をとると、

$$\rho_1^*(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \text{Tr}(\psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') \rho) = \rho_1(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \quad [10.12]$$

であるから、 ρ_1 は $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ を足とするエルミート行列とみれば、 ρ_1 は

$$\int d\mathbf{r} \rho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \eta_\lambda(\mathbf{r}') = \nu_\lambda \eta_\lambda(\mathbf{r}) \quad [10.13]$$

なる固有方程式の実固有値 $\{\nu_\lambda\}$ と、それに対応する完全正規直交系をなす固有関数 $\{\eta_\lambda(\mathbf{r})\}$ によって、

$$\rho_1(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_\lambda \nu_\lambda \eta_\lambda(\mathbf{r}) \eta_\lambda^*(\mathbf{r}') \quad [10.14]$$

とスペクトル分解できる。これを用いれば (11) は、

$$\langle b_\eta^\dagger b_\eta \rangle = \sum_\lambda \nu_\lambda |(\eta_\lambda, \eta)|^2 \quad [10.15]$$

とかける。(15) で $\eta = \eta_\lambda$ ととると、

$$\langle b_{\eta_\lambda}^\dagger b_{\eta_\lambda} \rangle = \nu_\lambda \geq 0 \quad [10.16]$$

となる。今 $\max\{\nu_\lambda\} = \nu_{\max} \geq 0$ とかくと、 $\int |\eta(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$ 及 Parseval の等式によって、

$$\langle b_\eta^\dagger b_\eta \rangle \leq \nu_{\max} \sum_\lambda |(\eta_\lambda, \eta)|^2 = \nu_{\max} \quad [10.17]$$

となるから、ボーズ凝縮がおこっているとき $\nu_{\max}$ も macro なる数になる。又 (16)

中嶋貞雄

により逆に ρ_1 が macro な固有値をもっとそれに属する固有状態をしめるボーズ粒子の数は macro になる。従って, N_0 が macro な数となってボーズ凝縮をおこしていることと, ρ_1 が macro な固有値をもつこととは同等である。

今併進対称性をもつ体系を考え, Fourier 分解すると,

$$\rho_1(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} \nu_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad [10.17]$$

ここで $\nu_{\mathbf{p}}$ が固有値, $\frac{1}{V} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$ が固有関数である。体系が静止しているとすれば, $\mathbf{p}^1 - \mathbf{p}$ は equivalent だから, 系に縮退がないとすれば macro な固有値は $\mathbf{p} = 0$ にあらわれる。 $V \rightarrow \infty$ の極限で $\nu_{\mathbf{p}}$ が $\mathbf{p} = 0$ に $(2\pi\hbar)^3 \frac{N_0}{V} \delta(\mathbf{p})$ なる singularity をもつとすると, $\nu'_{\mathbf{p}}$ を non-singular な関数として,

$$\nu_{\mathbf{p}} = (2\pi\hbar)^3 \frac{N_0}{V} \delta(\mathbf{p}) + \nu'_{\mathbf{p}} \quad [10.18]$$

とかけるから, (17) は

$$\rho_1(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{N_0}{V} + \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \nu'_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad [10.19]$$

となる。(19)の第2項は $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ の極限で, Riemann-Lebesgue's lemma によって0になるから, $\rho_1(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rightarrow N_0/V$ となる。これはボーズ凝縮がおこっていれば finite で残るが, さもないときは $0 (1/V)$ となる。ボーズ凝縮がおこっていることは一粒子密度行列に off-diagonal long range order が存在することであるということもできる。例として完全ボーズ気体では, ハミルトニアンは

$$H = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} b_{\mathbf{p}}^{\dagger} b_{\mathbf{p}} \quad [10.20]$$

で, 基底状態ではすべての粒子を $\mathbf{p} = 0$ に収容している。ボーズ粒子が1個もない真空を $|0\rangle$ であらわすと, N 粒子完全ボーズ気体の基底状態 $|N\rangle$ は

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_0^{\dagger})^N |0\rangle \quad [10.21]$$

とかける。ボーズ凝縮は低温での液体ヘリウム-4でもおこっている。

○ 対凝縮 (Pair Condensation)

フェルミ粒子系では Pauli の禁制律によってどんな一粒子状態にも，粒子は高々 1 までしか収容されないので， ρ_1 は macro な固有値をもつことはできない。今スピン $1/2$ の粒子の対を考えて，これの正規化された 2 粒子波動関数を $\eta(\xi_1, \xi_2)$ とすると，この状態にフェルミ粒子をつくる演算子は

$$B_{\eta}^{+} = \int d\xi_1 d\xi_2 \eta(\xi_1, \xi_2) \psi_{\sigma_1}^{+}(\mathbf{r}_1) \psi_{\sigma_2}^{+}(\mathbf{r}_2) \quad [10.22]$$

である。ここで $(\mathbf{r}, \sigma) \equiv \xi$ とかいた。又 η は反対称だから， $\eta(\xi_1, \xi_2) = -\eta(\xi_2, \xi_1)$ である。 $\langle B_{\eta}^{+} B_{\eta} \rangle$ が或る macro な数 N_0 になっているときこのフェルミ粒子系は pair condensation をおこしているという。前節と同様に二粒子密度行列

$$\rho_2(\xi_1, \xi_2, \xi'_1, \xi'_2) = \langle \psi^{+}(\xi_1) \psi^{+}(\xi'_2) \psi(\xi_2) \psi(\xi'_1) \rangle \quad [10.23]$$

が macro な固有値をもつことと，系が対凝縮をおこしていることとは同等であるといえる。このとき (13) に対応する固有方程式は

$$\int d\xi_1 d\xi'_2 \rho_2(\xi_1, \xi_2; \xi'_1, \xi'_2) \eta_0(\xi'_1, \xi'_2) = N_0 \eta_0(\xi_1, \xi_2) \quad [10.24]$$

である。体系が併進対称性をもって，空間及スピン空間の回転に関して不変ならば， $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ ， $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ とかくと， ρ_2 は $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ のみの関数になる。固有関数は $\mathbf{R}$ に関しては平面波だから， $\eta_0 \propto e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}$ とかける。従って静止系では $\mathbf{q} = 0$ で対凝縮がおこることがわかる。従って，

$$\eta_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} f(\mathbf{r}, \sigma_1, \sigma_2)$$

とかける。今空間回転に関して不変系だから $\mathbf{r} = (r, \theta, \varphi)$ とかくと， f は θ ， φ については球関数 $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ ($\ell = 0, 1, 2, \dots$; $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$) で展開できるから，スピン関数を，

$$S=0 \text{ で } \theta_{00}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2)$$

$$S=1 \text{ で } \theta_{11}(\sigma_1, \sigma_2) = \sigma_1 \sigma_2, \theta_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2), \theta_{1-1} = \beta_1 \beta_2$$

とかくと， η_0 は

中嶋貞雄

$$\eta_0 = h(\mathbf{p}) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \theta_{sm_s}(\sigma_1, \sigma_2)$$

とかける。 η_0 は全体として反対称で、空間部分は $(-1)^\ell$ のパリティをもつから、spin singlet のとき $\ell = \text{even}$ 、triplet のとき $\ell = \text{odd}$ である。macro な固有値をもつ状態は一般には縮退しているだろうが、以下簡単のため $S=0$ 、 $\ell=0$ で対凝縮がおこるとする。このとき (22) は

$$\begin{aligned} B^+ &= \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 h(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi_{\uparrow}^+(\mathbf{r}_1) \psi_{\downarrow}^+(\mathbf{r}_2) \\ &= \sum_{\mathbf{p}} h_{\mathbf{p}} B_{\mathbf{p}}^+ \end{aligned} \quad [10.25]$$

$$B_{\mathbf{p}}^+ = a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{p}\downarrow}^+, \quad h_{\mathbf{p}} = \int h(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad [10.26]$$

とかける。対凝縮が explicit にどのようにおこっているかは形式論からはわからない、これを最初に示したのが BCS である。

○ BCS 状態

$N=2\nu$ 個のフェルミ粒子からなる系を考えると、 ν 個の対があるが、この ν 個の対をボーズ凝縮との類推から全部同じ状態に収容する。

$$\begin{aligned} |N\rangle &= \frac{1}{\sqrt{A_N} \nu!} (B^+)^{\nu} |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{A_N} \nu!} \sum_{\mathbf{R}} \cdots \sum_{\mathbf{P}_{\nu}} h_{\mathbf{R}} \cdots h_{\mathbf{P}_{\nu}} B_{\mathbf{R}}^+ \cdots B_{\mathbf{P}_{\nu}}^+ |0\rangle \end{aligned} \quad [10.27]$$

$$\langle N|N\rangle = 1 \quad [10.28]$$

$B_{\mathbf{p}}^+ B_{\mathbf{p}}^+ = 0$ だから、 $\mathbf{R}, \dots, \mathbf{P}_{\nu}$ はすべて互に異っている。この状態が一般に対凝縮をおこしているということはできない。例えば完全フェルミ気体の基底状態 $|F\rangle$ は

$$|F\rangle = \left(\prod_{\mathbf{p} < \mathbf{p}_0} B_{\mathbf{p}}^+ \right) |0\rangle \quad [10.29]$$

であるが、これは対凝縮をおこしてはいない。このときは $h_{\mathbf{p}}=1$ ($\mathbf{p} < \mathbf{p}_0$)、 $h_{\mathbf{p}}=0$ ($\mathbf{p} > \mathbf{p}_0$) で h が step function である。 $h_{\mathbf{p}}$ が $\mathbf{p}$ のなめらかに変わる関数のときに対凝縮がおこっている。以下にそれを示そう。 $|N\rangle$ から次の変換

$$|N\rangle = \left\{ \frac{\Phi(1)}{A_N} \right\}^{1/2} \oint \frac{d\alpha}{2\pi} e^{-i\nu\alpha} |a\rangle \quad [10.30]$$

によって, Bogoliubov 状態 $|a\rangle$ に移ると,

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Phi(1)}} \prod_{\mathbf{p}} (1 + h_{\mathbf{p}} e^{i\alpha} B_{\mathbf{p}}^+) |0\rangle \quad [10.31]$$

$$\Phi(z) = \prod_{\mathbf{p}} (1 + |h_{\mathbf{p}}|^2 z) \quad [10.32]$$

である。(これに対して, $|N\rangle$ を BCS 状態という。)

$$u_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{1+|h_{\mathbf{p}}|^2}} = \cos \theta_{\mathbf{p}}, \quad v_{\mathbf{p}} = \frac{h_{\mathbf{p}}}{\sqrt{1+|h_{\mathbf{p}}|^2}} = \sin \theta_{\mathbf{p}} e^{i\phi_{\mathbf{p}}} \quad [10.34]$$

によって定義される Bogoliubov のパラメーター $u_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}}$ を使うと, (31) は,

$$|a\rangle = \prod_{\mathbf{p}} (u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}} e^{i\alpha} B_{\mathbf{p}}^+) |0\rangle \quad [10.35]$$

とかける。今 $a_{\mathbf{p}\sigma}^+ \rightarrow e^{i\frac{\tau}{2}} a_{\mathbf{p}\sigma}^+, a_{\mathbf{p}\sigma} \rightarrow e^{-i\frac{\tau}{2}} a_{\mathbf{p}\sigma}$ なる位相変換を (35) で行くと,

$|a\rangle \rightarrow |a+\tau\rangle$ となる。つまり $|a\rangle$ は位相が絶対的に確定した状態であるといえる。これに対して $|N\rangle$ は全粒子数の確定した状態である。 N と a は量子力学的に正準共役量だから, ΔN と Δa の間には不確定関係 $\Delta N \Delta a \gtrsim 2\pi$ が成立つ。 $N \sim 10^{23}$ であるから, 粒子数に $\sqrt{N}$ のゆらぎをゆるしても $\Delta N/N \ll 1$ であり, 不確定関係により, 位相のゆらぎも $\Delta a \sim \frac{2\pi}{\sqrt{N}} \ll 1$ である。従って N と a は統計的な意味で確定した状態を考えることができ, 1 に対して $1/\sqrt{N}$ を無視すると, BCS 状態 $|N\rangle$ と Bogoliubov 状態 $|a\rangle$ とは物理的に同等である。次に BCS 状態 (27) の正規化因子 A_N をきめよう。

(30) により,

$$\begin{aligned} A_N &= \Phi(1) \oint \oint \frac{d\alpha d\alpha'}{(2\pi)^2} e^{-i\nu(\alpha-\alpha')} \langle \alpha' | \alpha \rangle \\ &= \oint \oint \frac{d\alpha d\alpha'}{(2\pi)^2} e^{-i\nu(\alpha-\alpha')} \Phi(e^{i(\alpha-\alpha')}) \\ &= \oint \frac{d\alpha}{(2\pi)^2} e^{-i\nu\alpha} \Phi(e^{i\alpha}) \\ &= \oint_{|Z|=1} \frac{dz}{2\pi i} \frac{\Phi(z)}{z^{\nu}} \end{aligned} \quad [10.36]$$

中嶋貞雄

である。

$$\Phi(z) = \prod_p (1 + |h_p|^2 z) = 1 + \sum_p |h_p|^2 z + \dots \quad [10.37]$$

(37) の収束半径を r とする。 h_p は constant factor だけ不定だから、今 $r > 1$ と仮定する。 $|h_p|^2 > 0$ だから、今実軸上を $z=0$ から $z=r$ まで動かすとき、 $\Phi(z)$ は 1 から ∞ まで単調に増加する。一方 $1/x^\nu$ は x の関数として ν が大きい程急速に単調減少する関数であるから、 $\Phi(x)/x^\nu$ は或る x の値 x_0 (今これを 1 になるように正規化する) でするとい極小値をとる。この時

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \log \frac{\Phi(x)}{x^\nu} \right]_{x=1} = 0 \text{ であるから,}$$

$$\sum_p \frac{|h_p|^2}{1 + |h_p|^2} = \nu \quad \text{i.e.} \quad \frac{1}{V} \sum_p |v_p|^2 = \frac{N}{2V}$$

一方単位円 $|z|=1$ 上では $z=1$ で $\Phi(z)/x^\nu$ は極大となり、 ν が大きいときは、 $z=1 \pm i\eta$ ですとくガウス関数的に減少する。 $\Phi(z)/z^\nu = e^{F(z)}$ とおくと、 $F(1)=0$ だから、

$$F(1+h) = F(1) + \frac{1}{2} F''(1)h^2 = F(1) - \frac{1}{2} F''(1)\eta^2 \quad (h=i\eta)$$

ここで $F''(1) = \sum_p u_p^2 |v_p|^2$ で $u_p |v_p| \neq 0$ ならば $F''(1)$ は $\nu \rightarrow \infty$ と共にいくらでも大きくなるから、上記ガウス関数の巾は $\sim 1/\sqrt{N}$ で小さくなり、peak は鋭くなっていく。従って (36) で $N \gg 1$ の極限では被積分関数を $z=1$ の値でおきかえて、

$$A_N \sim \frac{\Phi(1)}{1^\nu} \oint \frac{dz}{2\pi i} = \Phi(1)$$

とできる。よって、(30)により $N \gg 1$ の極限では

$$|N\rangle = \oint \frac{da}{2\pi} e^{-i\nu a} |a\rangle \quad [10.38]$$

とかける。物理量が $X = a^+ a$ の形の演算子の有限個の積でかけるときは、物理量は位相変換に関して不変量となるから、1 に対して $1/\sqrt{N}$ を無視する漸近的極限では、物理量の期待値に対して

$$\langle N | X | N \rangle \approx \langle a | X | a \rangle \quad [10.39]$$

が成立つ。例えば,

$$\langle N | a_{\mathbf{p}\uparrow}^+ a_{\mathbf{p}\uparrow} | N \rangle = |v_{\mathbf{p}}|^2 \quad (10.40)$$

$$\langle N | a_{\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}\downarrow} | N \rangle = |v_{\mathbf{p}}|^2 \quad (10.41)$$

$$\langle N | B_{\mathbf{p}'}^+ B_{\mathbf{p}} | N \rangle = |v_{\mathbf{p}}|^2 \quad (\mathbf{p}=\mathbf{p}') \quad (10.42a)$$

$$= u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}'} v_{\mathbf{p}'}^* \quad (\mathbf{p} \neq \mathbf{p}') \quad (10.42b)$$

二粒子密度行列を BCS 状態 ($q=0, \ell=S=0$) で計算すると,

$$\begin{aligned} \rho_2(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \mathbf{R}', \mathbf{r}') &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \langle N | a_{\mathbf{p}\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}'\downarrow}^+ a_{\mathbf{p}\downarrow} a_{\mathbf{p}'\downarrow} | N \rangle e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}'} \\ &= \eta(\mathbf{r}) \eta^*(\mathbf{r}') + \frac{1}{V} h(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (10.43)$$

$$\text{ここで} \quad \eta(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}} v_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (10.44)$$

$$h(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} |v_{\mathbf{p}}|^2 e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (10.45)$$

となる。 $u_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}} \neq 0$ ならば V が大きい極限で (43) の第 2 項は無視してよいから, $\rho_2 \sim \eta(\mathbf{r}) \eta^*(\mathbf{r}')$ となる。(off diagonal long range order!) 固有関数 $\eta(\mathbf{r})$ に属する固有値 N_0 は

$$N_0 = \int d\mathbf{R}' \int d\mathbf{r}' \eta^+(\mathbf{r}') \eta(\mathbf{r}') = V \left(\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}}^2 |v_{\mathbf{p}}|^2 \right) \quad (10.46)$$

となるが, $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} u_{\mathbf{p}}^2 |v_{\mathbf{p}}|^2$ は体積によらない finite value をとるから, N_0 は macro 量となり, 体系はこの状態で対凝縮をおこしている。

BCS モデル (ハミルトニアン (3a) (3b')) ただし $q=0$ でフェルミ真空からのエネルギーの下りを計算すると,

$$\begin{aligned} \Delta W &= \langle F | H | F \rangle - \langle N | H | N \rangle \\ &= \text{const} - 2 \sum_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} \sin^2 \theta_{\mathbf{p}} + \frac{J}{V} \sum_{\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'} \cos \theta_{\mathbf{p}} \frac{\sin \theta_{\mathbf{p}}}{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{p}'} \frac{\sin \theta_{\mathbf{p}'}}{\mathbf{p}'} \cos(\phi_{\mathbf{p}} - \phi_{\mathbf{p}'}) \end{aligned}$$

となるが, ここで ΔW がもっとも大きくなるように θ, ϕ をえらぶ。

$\phi_{\mathbf{p}} = \alpha = \text{const}$ で, $\frac{\partial \Delta W}{\partial \theta_{\mathbf{p}}} = 0$ から,

中嶋貞雄

$$\xi \frac{\sin 2\theta}{p} = |\Delta| \cos 2\theta_p \quad \text{i.e.} \quad \tan 2\theta_p = \frac{|\Delta|}{\xi_p}$$

ここで $\Delta = \frac{J}{V} \sum_p u_p v_p = |\Delta| e^{i\alpha}$ とおけば,

$$|\Delta| = \frac{J}{2V} \sum_p \frac{|\Delta|}{\sqrt{\xi_p^2 + |\Delta|^2}}$$

$\omega_0 \sim \omega_m \ll \epsilon_F$ だから, 状態密度にフェルミ面の値 $N(0)$ を用いて, 積分の外に出すと,

$$1 = JN(0) \int_0^{\omega_0} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}$$

今 $JN(0) \ll 1$ だから, $|\Delta| = 2\omega_0 e^{-\frac{1}{JN(0)}}$ である。 ΔW は

$$u_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + |\Delta|^2}} \right), \quad |v_p|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2 + |\Delta|^2}} \right)$$

のとき最大値

$$(\Delta W)_{\max} = \frac{1}{2} N(0) |\Delta|^2$$

をとる。(44)から重心の位置での波動関数

$$\eta(0) = \frac{1}{J} \Delta$$

で, r が大きいときは, $\xi = \frac{\hbar v}{|\Delta|}$ として,

$$\eta(r) \simeq \eta(0) [JN(0)] \frac{\sin p_0 r}{p_0 r} K_0\left(\frac{r}{\xi}\right)$$

となる。ここで $K_0(x)$ は変形ベッセル関数で

$$K_0(x) = \int_0^\infty dt \frac{\cos xt}{\sqrt{t^2 + 1}} \quad \frac{e^{-x}}{\sqrt{x}} \quad (x \rightarrow \infty)$$

である。つまり, $r \sim \xi$ で $\eta(r) \sim 0$ だから, ξ が対の広がり大きさをあらわすといえる。 ξ を coherence length という。BCSモデルを使って種々の物理量を計算することができるが, 最後に超電導での本質的なことについて一言ふれる。孤立系ではBCS状態 $|N\rangle$ と Bogoliubov 状態 $|a\rangle$ は同等であるが, 図のように $20 \sim 30 \text{\AA}$ の絶縁膜によって隔てられた位相の異なる2つの系で全体の相 $\frac{1}{2} (a_1 + a_2)$ は不定だが位相差 $a = a_1 - a_2$ は確定する。

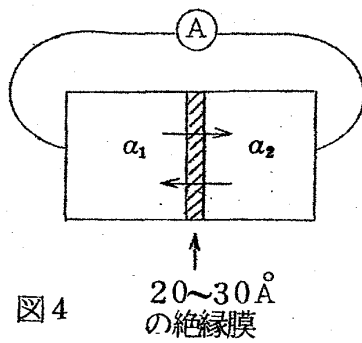


図4

tunneling をおこさせる相互作用に α に依存するものがあるため位相差があると，化学ポテンシャルは等しくても電流が流れることを示すことができる。つまり相対的位相が物理的な意味をもっている。孤立系においても subsystem の位相差がきまった 0 でない値をもつならば，

内部で電流が流れてもよく，事実 superconducting coupling はこの例である。 $\Delta W \sim |\Delta|^2$ だから， Δ は order parameter であるが， Δ の位相が系の中で場所的に変化していると平衡状態でも電流が流れる。

結局，超電導の本質を一言でいえば，対凝縮の結果として，位相をもった order parameter が出現すること，もっと高踏的にいえば gauge group に関して broken symmetry があらわれることである。このばあいの位相は一方では量子力学的な波動関数の位相であると同時に，他方では統計力学的な order parameter の位相であるという，二重の性格をもっている。後者の側面，たとえば位相のゆらぎ，についての研究は未完成であって，おそらく超電導に関して残された唯一の基礎的問題とおもわれる。