

超伝導はどのようにしておこるか？

—BCS理論による予測—

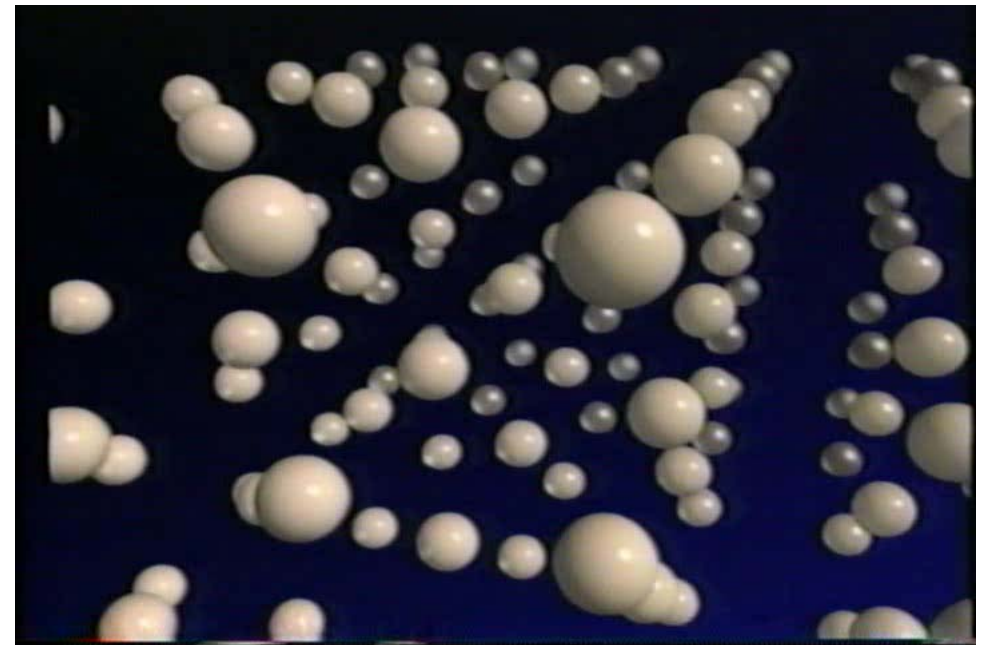


左から、

John Bardeen、Leon N. Cooper、
J. Robert Schrieffer

$$T_c \cong \theta_D \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right)$$

格子の周波数が高い方が
高い T_c に有利



映像：日立サイエンスシリーズ、超
伝導 より

超伝導現象の解明-BCS理論

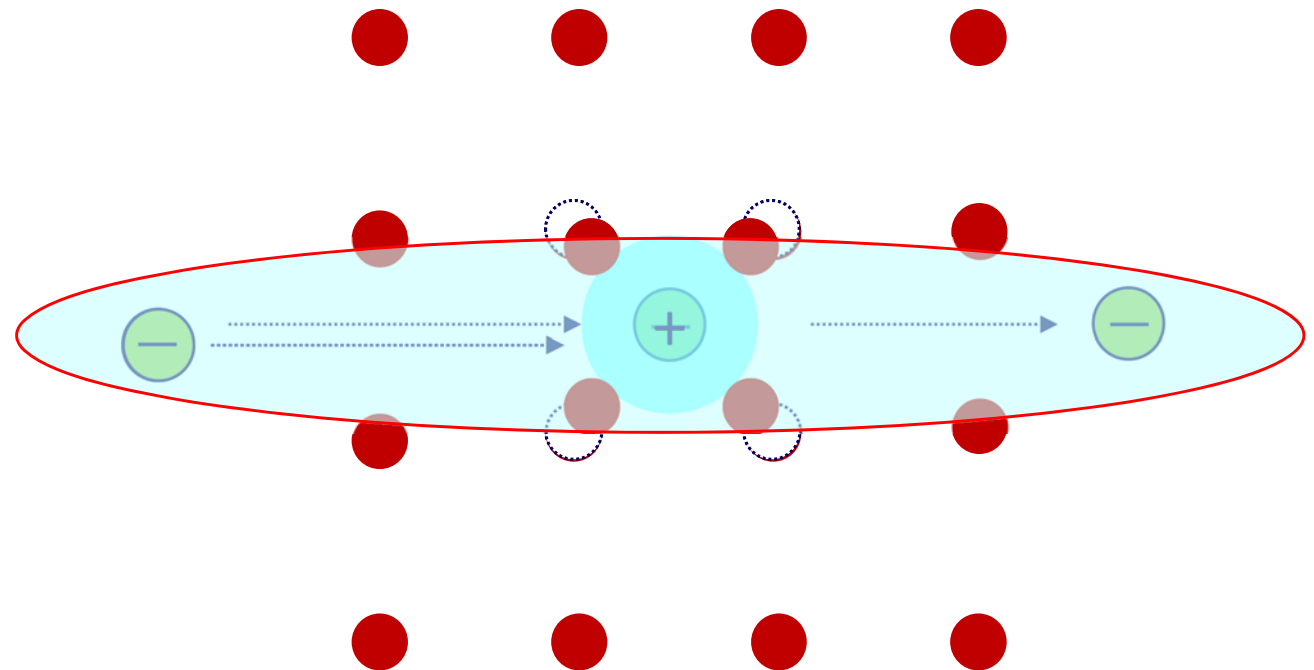
1957 Bardeen, Cooper, Schrieffer (BCS) 理論



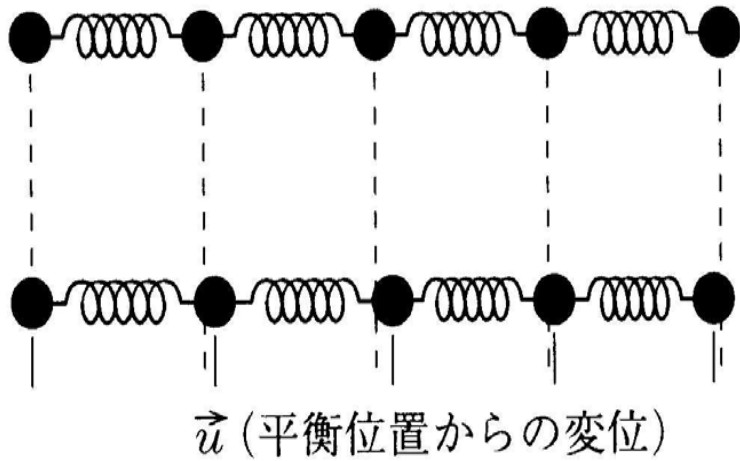
Nobel Prize (1972)

電子2個が対をつかって運動
(**クーパー対**を形成)

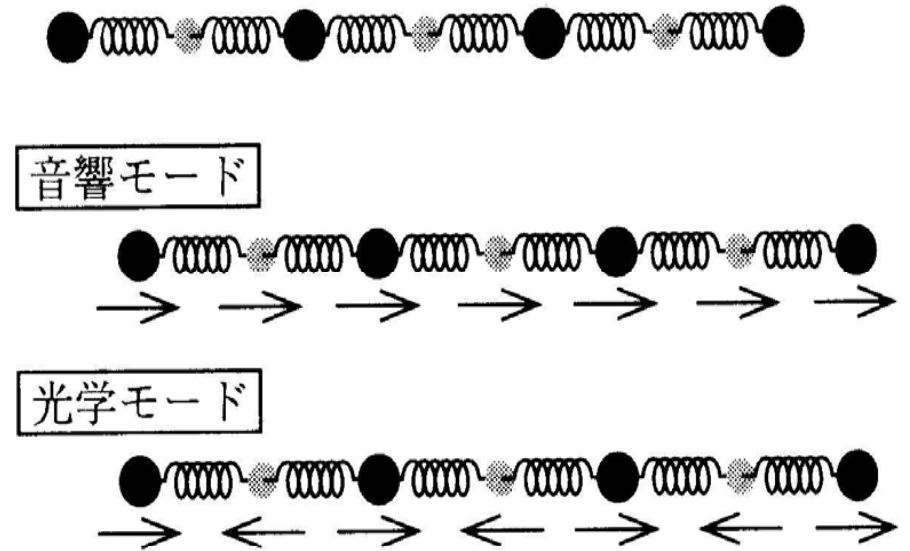
電子-格子相互作用を
媒介とした電子間引力



$$\omega_q = 2\sqrt{\frac{\kappa}{M}} \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \quad (6.7)$$



(a) 単原子からなる鎖



(b) 単位胞に2種類の原子をもつ鎖

図 6.1 1次元格子のモデル.

格子振動による電子散乱と電気抵抗

1次元格子モデル

もっとも単純なモデルとして図6.1のように直線上に配列した原子の鎖を考える。各原子は隣の原子とバネ定数 κ のバネで結ばれている。モデルを単純にするために、平衡位置からの原子の変位としては鎖に並行な方向のみを考えることにする。

運動方程式は

$$M\ddot{u}_l = -\kappa(u_l - u_{l-1}) + \kappa(u_{l+1} - u_l) \quad (6.5)$$

で与えられる。 $u_l = \tilde{u}_q e^{iq_l - i\omega t}$ とおいてこれを (6.5) 式に代入すると

$$\begin{aligned} M\omega^2 u_q &= (2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) \kappa u_q \\ &= 2\kappa(1 - \cos qa) u_q \\ &= 4\kappa \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right) u_q \end{aligned} \quad (6.6)$$

となる。これは調和振動子の運動方程式にほかならない。その固有振動数は

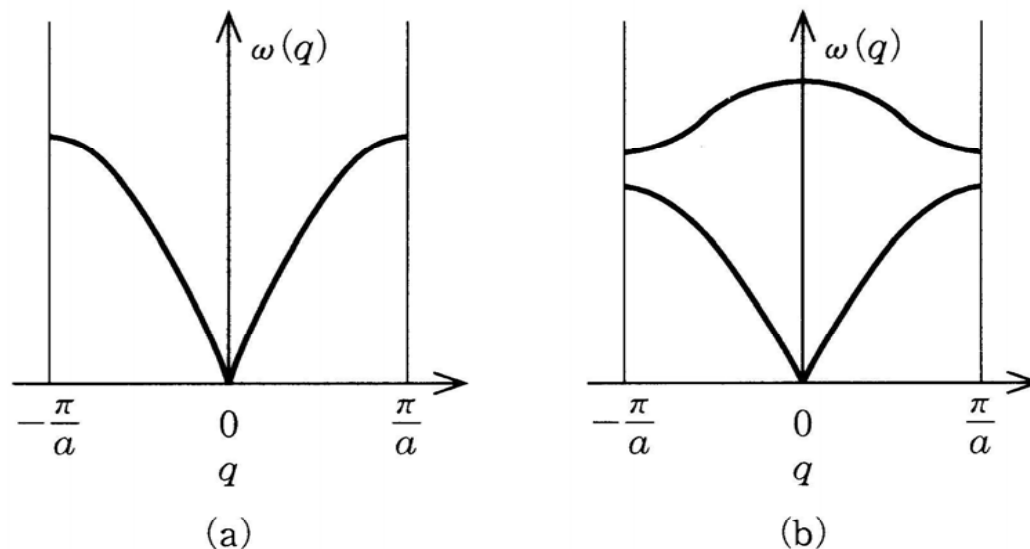


図 6.2 1次元格子の振動モード. それぞれ図 6.1(a), (b) の 1次元鎖に対応する.

固有振動数を波数 q の関数として描くと図 6.2(a) のようになる. 長波長の極限 ($qa \ll 1$) では \sin 関数とその引数で置き換えることができ, $\omega_q \approx a \sqrt{\frac{\kappa}{M}} q$ となる. この式は連続体近似における音波の分散関係 $\omega_q \approx c_s q$ (c_s は音速) と一致する.

系の長さ $L (=Na)$ を周期とする周期的境界条件を課すると, $e^{iqL} = 1$ であるから波数 q の値は $2\pi/L$ の整数倍となる, 第1ブリルアンゾーン $-(\pi/a) < q < \pi/a$ には N 個の振動モードが含まれている. すなわち, もともとの N 個の原子がもっていた振動の自由度 N に相当する格子振動の自由度は第1ブリルアンゾーン内の q によって尽くされている.

次にもう少し複雑な場合として、2種類の原子からなる図6.1(b)のような鎖を考えよう。先の場合と同様にして運動方程式は

$$M_1 \ddot{u}_q^{(1)} = -2\kappa u_q^{(1)} + 2\kappa \cos\left(\frac{qa}{2}\right) u_q^{(2)} \quad (6.8)$$

$$M_2 \ddot{u}_q^{(2)} = -2\kappa u_q^{(2)} + 2\kappa \cos\left(\frac{qa}{2}\right) u_q^{(1)}$$

と書ける。この連立方程式の固有値を与える永年方程式は

$$\begin{vmatrix} 2\kappa - M_1\omega^2 & -2\kappa \cos\left(\frac{qa}{2}\right) \\ -2\kappa \cos\left(\frac{qa}{2}\right) & 2\kappa - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (6.9)$$

となり、固有値は

$$\omega_{\pm}(q) = \sqrt{\frac{\kappa}{\mu} \pm \kappa \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}} \quad (6.10)$$

となる。ここで、 $\mu = \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^{-1}$ は換算質量である。これを波数の関数としてプロットすると図 6.2(b) のようになる。

図 6.2(b) を見ると、まず単一原子の場合(図 6.2(a))と同様、 $q \rightarrow 0$ で $\omega \rightarrow 0$ となる分枝 $\omega_-(q)$ がある。これは図 6.1(b) に示したように、その長波長極限ではすべての原子が同位相で変位するような振動モードである。このモードは、その長波長極限 ($q \rightarrow 0$) が連続弾性体を伝わる弾性波 (音波) に相当するところから、音響モード (acoustic mode) と呼ばれる。

図 6.2(b) に現れているもう一つの分枝 $\omega_+(q)$ は異なる種類の原子が互いに逆位相で変位するような振動モードである。このモードは $q=0$ の一様な変位に対しても復元力をもつので、音響モードとは異なり $\omega_+(q=0)$ が有限となる。このモードは光学モード (optical mode) と呼ばれる。光学モードという名称は、それが光 (電磁波) の電場と強く結合するところからきている。イオン結晶のように原子 1 と 2 が異なる電荷をもっている場合には、それらが逆位相で振動することにより誘電分極が生じ、それを通して電場と結合するのである。ただし、光学モードという名称は $q \rightarrow 0$ で有限の振動数をもつモード一般に対して使われており、必ずしも光学活性があるとは限らない。

ここまでは、議論を単純にするために1次元の鎖を考え、しかも原子の変位を一つの方向のみに限定した。現実の物質は3次元であり、各原子は3方向の変位の自由度をもっている。結晶が N 個の単位胞からなり、各単位胞に r 個の原子が含まれているとすると、原子の運動の自由度は全部で $3rN$ だけある。一方、第1ブリルアンゾーンに含まれる異なる \mathbf{q} の値は N 個である。したがって、全部で $3r$ 本の異なる分枝 $\omega_\nu(\mathbf{q})$ がある。つまり第1ブリルアンゾーン内の一つの値に対して $3r$ 個の異なる振動数がある。 $3r$ の分枝のうち三つは $q \rightarrow 0$ で $\omega(\mathbf{q}) \rightarrow 0$ となる音響モード、残りは $q \rightarrow 0$ で $\omega(\mathbf{q})$ が有限の値をもつ光学モードである。三つの音響モードのうち一つは原子の変位が \mathbf{q} ベクトルの方向と平行な縦波モード (longitudinal mode) であり、残りの二つは横波モード (transverse mode) である。同様に光学モードについても、縦波一つに横波二つという割合である。長波長極限では連続媒質の場合に帰着するので、縦波と

横波の区別は明確である。しかしながら一般の q における縦波モードと横波モードの区別は、対称性の高い方向以外ではそれほど明確ではないことを注意しておこう。

格子振動は結晶格子を構成する原子の多体系の低エネルギー素励起であり、これを量子化したものがフォノン (phonon) である。フォノンの振動数と波数との関係 $\omega(\mathbf{q})$ (分散関係) はいくつかの分枝からなる。フォノンの分枝は、Longitudinal, Transverse, Acoustic, Optical の頭文字を組み合わせて LA フォノン, TO フォノンなどと略称される。

格子振動の振幅が大きい範囲では、それらを $\omega_\nu(\mathbf{q})$ の固有振動数をもつ調和振動子の寄せ集めとして取り扱うことができる。格子点 \mathbf{l} の単位胞の中の \mathbf{b} という位置にある原子のその平衡位置からの変位 $\mathbf{u}_{\mathbf{l},\mathbf{b}}$ は、 \mathbf{q} , ν で指定されるいろいろな振動モードの足し合わせとして

$$\mathbf{u}_{\mathbf{l},\mathbf{b}} = \sum_{\mathbf{q},\nu} \left(\frac{\hbar}{2NM_b\omega_\nu(\mathbf{q})} \right)^{1/2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},\nu}^{\mathbf{b}} \quad (6.11)$$

と表される。 $\mathbf{e}_{\mathbf{q},\nu}^{\mathbf{b}}$ は \mathbf{q} という波数をもつ ν -モードのフォノンによって、 \mathbf{b} で指定される原子が変位する方向を表すベクトルである。

格子比熱

物質の熱的な性質（比熱・熱伝導など）は，その系の低エネルギー励起としてどのようなものがあるかによって決まっている．非磁性の絶縁体の場合にはその熱的な性質はすべてフォノンの寄与によるものである．（金属の場合にはこれに伝導電子の寄与が，また磁性体ではスピン励起の寄与がこれに加わる．）

ここではフォノンによる比熱がどのようなものになるかを見ることにしよう．

フォノンはボーズ粒子としてふるまうので，エネルギー $\hbar\omega$ のフォノンの平均の数は

$$\langle n_\omega \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (6.12)$$

で与えられる．全エネルギーの期待値は

$$E_{\text{total}} = \sum_q \left(\langle n_\omega \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

$$= \frac{1}{V} \int_0^\infty \hbar \omega \left(\langle n_\omega \rangle + \frac{1}{2} \right) D(\omega) d\omega \quad (6.13)$$

と表される。ここに現れた $D(\omega) d\omega$ は振動数が ω から $\omega + d\omega$ の間にあるフォノンの状態の数であり、

$$\begin{aligned} D(\omega) d\omega &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d^3q \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \int_{\omega=\text{const}} \frac{dS_\omega}{|\text{grad}_q \omega(\mathbf{q})|} \end{aligned} \quad (6.14)$$

によって与えられる。最後の式の積分は $\omega = \text{一定}$ の表面（今の場合は球面）での積分である。 $D(\omega)$ はフォノンの状態密度と呼ばれる。

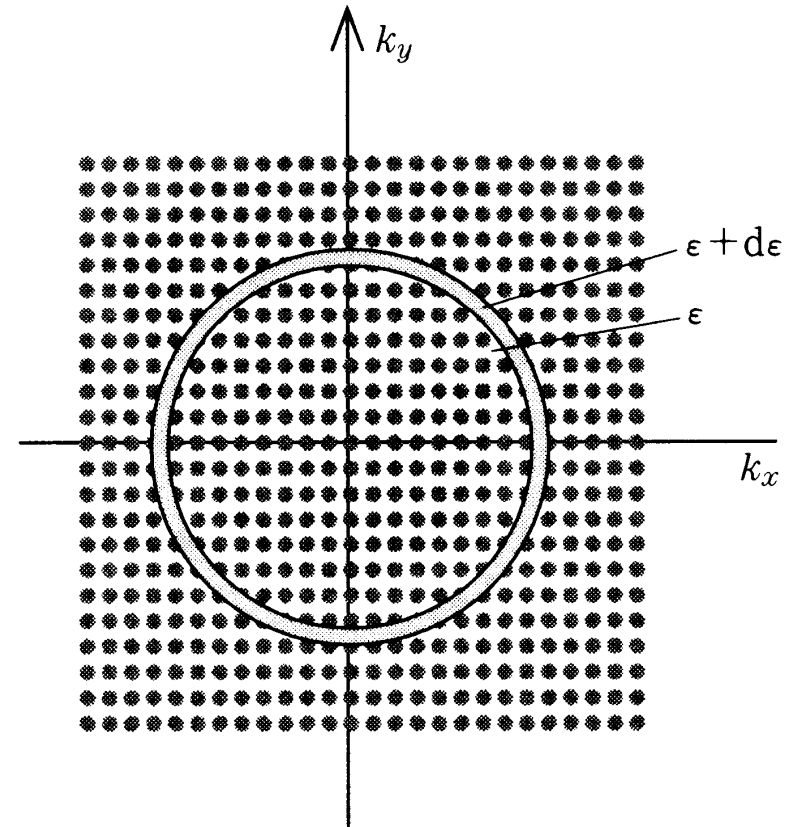
比熱（定積比熱）は、全エネルギーを（体積一定の条件のもとで）温度で微分することによって求められる。

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{1}{V} \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_v \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \int d^3q \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \\ &= \frac{1}{k_B T^2} \int_0^\infty \frac{(\hbar \omega)^2 e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} D(\omega) d\omega \end{aligned} \quad (6.15)$$

フォノンの状態密度 $D(\omega)$ がわかればこの式に従って比熱を計算することができる。

エネルギー ε から $\varepsilon+d\varepsilon$ の範囲にある電子状態の数（実空間の単位体積当たり）を $D(\varepsilon)d\varepsilon$ と書くとき、 $D(\varepsilon)$ を状態密度と呼ぶ。

右図で薄く影をつけた部分（球殻）の中に含まれる点（状態）の数にスピン縮重度の2を乗じたものである。



k -空間において、エネルギー ε と $\varepsilon+d\varepsilon$ の間の球殻に含まれる点（電子状態）の数が状態密度 $D(E)$ を与える。

$$D_{3D}(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{L^3} \times 2 \times \frac{L^3}{(2\pi)^3} \times 4\pi k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} d\varepsilon$$

$\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$ を用いて、
上式をエネルギー ε の関数として書き直すと、

$$\begin{aligned} D_{3D}(\varepsilon) d\varepsilon &= \frac{2}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} d\varepsilon & \frac{d\varepsilon}{dk} &= \frac{\hbar^2 k}{m} \\ &= \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} k d\varepsilon & k &= \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} \\ &= \frac{\sqrt{2} m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon \end{aligned}$$

フォノン状態密度 $D(\omega)$ は一般には図 6.3 にあるような複雑な形をしているが、比熱の表式はそれを積分の形で含むだけなので、 $D(\omega)$ の細かい構造にはそれほど敏感ではない。実際、次に述べるデバイ (Debye) モデルという極度に単純化したモデルによって、格子比熱のふるまいはかなりよく説明できる。図 6.2 からわかるように低エネルギーのフォノンは長波長の音響モードである。長波長極限 (連続体極限) での音響モードの分散関係は

$$\begin{aligned}\omega &= c_L q && \text{(縦波)} \\ \omega &= c_T q && \text{(横波) : 2重縮重}\end{aligned}\tag{6.16}$$

という直線である。実際のフォノン分散関係は波数 q の大きなところで直線からずれてくるが、デバイモデルではこの分散関係がブリルアンゾーンの端まで続くとする。(低温の比熱には、分散関係のうちエネルギーの低い部分だけが重要なので、ブリルアンゾーンの端の方の不正確さはあまり大きな影響を与えな

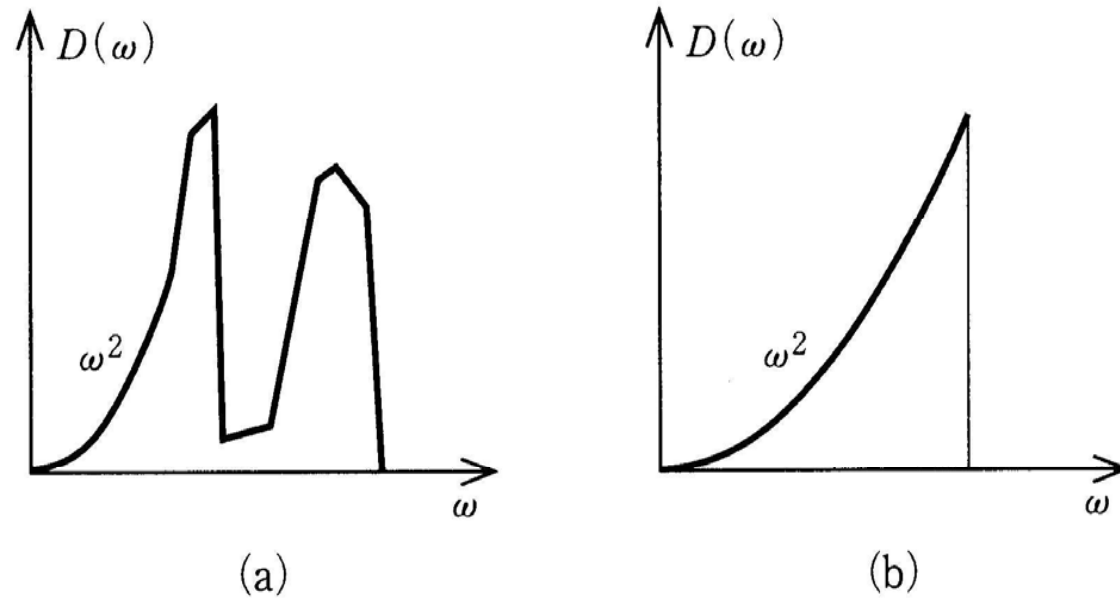


図 6.3 (a) 現実の固体での典型的なフォノン状態密度。
 (b) デバイモデルは低振動数の部分の ω^2 -依存性を延長したものである。

いのである。)

デバイモデルのフォノン状態密度は単純な表式になる。例えば LA フォノンについては $\text{grad}_q \omega(q) = c_L$ であるから、

$$\begin{aligned}
 D_{LA}(\omega) d\omega &= \frac{V}{2\pi^2} \frac{q^2}{c_L} d\omega \\
 &= \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_L^3} d\omega
 \end{aligned}
 \tag{6.17}$$

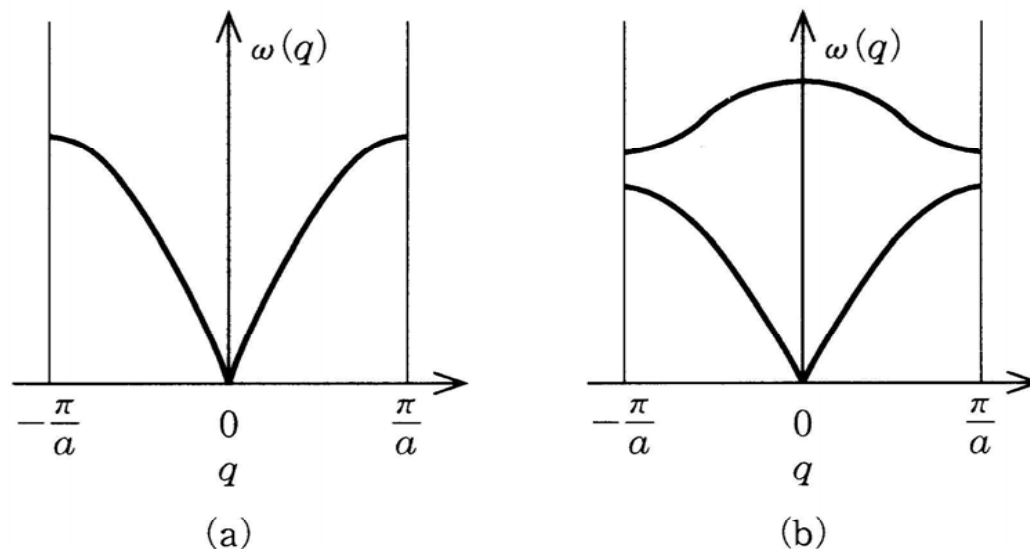


図 6.2 1次元格子の振動モード. それぞれ図 6.1(a), (b) の 1次元鎖に対応する.

固有振動数を波数 q の関数として描くと図 6.2(a) のようになる. 長波長の極限 ($qa \ll 1$) では \sin 関数とその引数で置き換えることができ, $\omega_q \approx a \sqrt{\frac{\kappa}{M}} q$ となる. この式は連続体近似における音波の分散関係 $\omega_q \approx c_s q$ (c_s は音速) と一致する.

系の長さ $L (=Na)$ を周期とする周期的境界条件を課すると, $e^{iqL} = 1$ であるから波数 q の値は $2\pi/L$ の整数倍となる, 第1ブリルアンゾーン $-(\pi/a) < q < \pi/a$ には N 個の振動モードが含まれている. すなわち, もともとの N 個の原子がもっていた振動の自由度 N に相当する格子振動の自由度は第1ブリルアンゾーン内の q によって尽くされている.

となる。LOフォノンの二つの分枝についても同様の式が得られる。これらを合わせるとフォノン状態密度は

$$D(\omega)d\omega = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \omega^2 d\omega \quad (6.18)$$

となる。上式を ω について積分すると発散してしまうので、適当なカットオフを入れる必要がある。カットオフ振動数 ω_D は状態密度を積分したものが全状態数（すべての原子の変位の自由度の合計）と一致するという条件

$$\begin{aligned} 3N &= \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_L^3} + \frac{2}{c_T^3} \right) \frac{\omega_D^3}{3} \end{aligned} \quad (6.19)$$

で決められる。この ω_D を用いて状態密度を書き直すと、

$$D(\omega)d\omega = \begin{cases} 3N \frac{3\omega^2 d\omega}{\omega_D^3} & \omega < \omega_D \\ 0 & \omega_D < \omega \end{cases} \quad (6.20)$$

となる。この状態密度を(6.15)式に代入することにより、デバイモデルの比熱が

$$= \frac{1}{V} \int_0^\infty \hbar \omega \left(\langle n_\omega \rangle + \frac{1}{2} \right) D(\omega) d\omega \quad (6.13)$$

と表される。ここに現れた $D(\omega) d\omega$ は振動数が ω から $\omega + d\omega$ の間にあるフォノンの状態の数であり、

$$\begin{aligned} D(\omega) d\omega &= \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\omega}^{\omega+d\omega} d^3q \\ &= \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \int_{\omega=\text{const}} \frac{dS_\omega}{|\text{grad}_q \omega(\mathbf{q})|} \end{aligned} \quad (6.14)$$

によって与えられる。最後の式の積分は $\omega = \text{一定}$ の表面（今の場合は球面）での積分である。 $D(\omega)$ はフォノンの状態密度と呼ばれる。

比熱（定積比熱）は、全エネルギーを（体積一定の条件のもとで）温度で微分することによって求められる。

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{1}{V} \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_v \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \int d^3q \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \\ &= \frac{1}{k_B T^2} \int_0^\infty \frac{(\hbar \omega)^2 e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} D(\omega) d\omega \end{aligned} \quad (6.15)$$

フォノンの状態密度 $D(\omega)$ がわかればこの式に従って比熱を計算することができる。

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{3Nk_B}{\omega_D^3} \left(\frac{\hbar}{k_B T} \right)^2 3 \int_0^{\omega_D} \frac{e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} \omega^2 d\omega \\
&= 3Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (6.21)
\end{aligned}$$

と求められる。ここで導入した $\Theta_D \equiv \hbar\omega_D/k_B$ はデバイ温度と呼ばれるパラメターである。(6.21) 式で表される格子比熱の温度依存性は図 6.4 のようである。二つの極限でのふるまいを見ておこう。

(1) $T \gg \Theta_D$ の場合：この場合には積分範囲全体で $x \ll 1$ であるから、被積

分関数を x で展開することができ、積分は $\int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4}{x^2} dx = \frac{1}{3} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^3$ と求め

られる。したがって、このときの比熱は

$$C_V = 3Nk_B \quad (T \gg \Theta_D) \quad (6.22)$$

となる。これは「十分高温ではすべての自由度にエネルギーが等分配されるので、比熱は (自由度) $\times k_B$ となる」というデュロン・プティ (Dulong-Petit) の法則に他ならない。

(2) $T \ll \Theta_D$ の場合：この場合には積分の上限を無限大に置き換えること

ができる。 $\int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx = \frac{4\pi^4}{15}$ であるから、比熱は

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \quad (T \ll \Theta_D) \quad (6.23)$$

となる。すなわち低温での格子比熱は T^3 に比例し、その比例係数はデバイ温度によって表される。

デバイ温度は「格子の硬さ」を表すパラメーターである。代表的な結晶のデバイ温度を表 6.1 に示した。デバイ温度が低い物質ほど格子は柔らかく、エネル

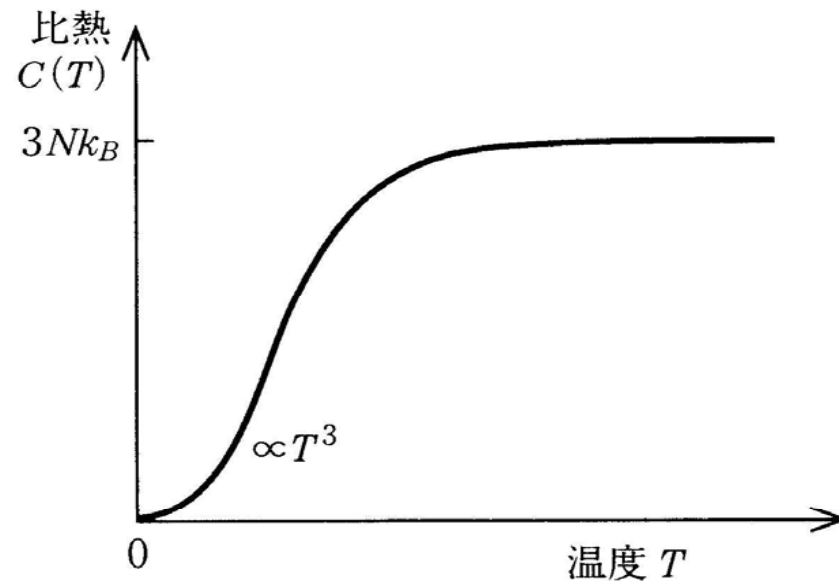


図 6.4 デバイモデルによる格子比熱の温度依存性。

表 6.1 いろいろな物質のデバイ温度 (Θ_D (K))

C(ダイヤモンド)	1860	Cu	315
Si	625	Au	170
Ge	360	Fe	420
K	100	W	310
Pb	88	Ar	85
		Ne	63

ギーの低いところにフォノン状態が多く存在するので低温での比熱は大きくなる。

金属の場合、格子比熱に伝導電子系の比熱が加わる。3.4節で見たように電子比熱は γT で与えられる。したがって低温での金属の比熱は、電子比熱と格子比熱の和として、

$$C = \gamma T + \alpha T^3 \quad (6.24)$$

という温度依存性を示す。これは $C/T = \gamma + \alpha T^2$ と書き直すことができる。比熱の温度依存性を実験で求めたものを C/T vs. T^2 という形にプロットすると直線になるはずである。その傾きからはデバイ温度 Θ_D 、縦軸の切片からは電子比熱係数 γ が求められる。

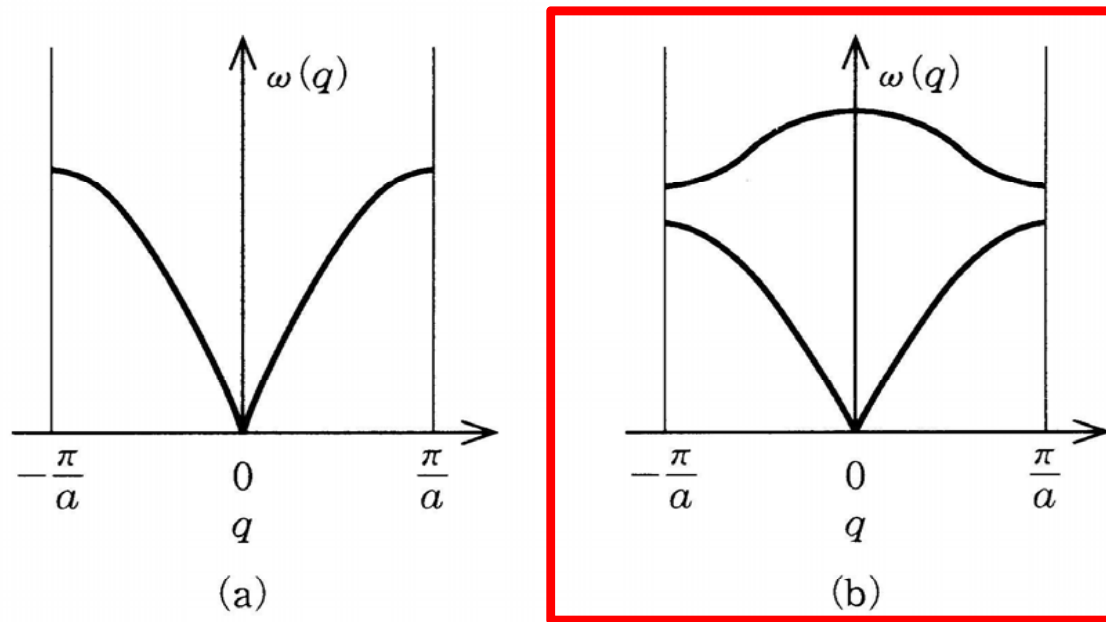


図 6.2 1次元格子の振動モード. それぞれ図 6.1(a), (b) の 1次元鎖に対応する.

固有振動数を波数 q の関数として描くと図 6.2(a) のようになる. 長波長の極限 ($qa \ll 1$) では \sin 関数とその引数で置き換えることができ, $\omega_q \approx a \sqrt{\frac{\kappa}{M}} q$ となる. この式は連続体近似における音波の分散関係 $\omega_q \approx c_s q$ (c_s は音速) と一致する.

系の長さ $L (= Na)$ を周期とする周期的境界条件を課すると, $e^{iqL} = 1$ であるから波数 q の値は $2\pi/L$ の整数倍となる, 第 1 ブリルアンゾーン $-(\pi/a) < q < \pi/a$ には N 個の振動モードが含まれている. すなわち, もともとの N 個の原子がもっていた振動の自由度 N に相当する格子振動の自由度は第 1 ブリルアンゾーン内の q によって尽くされている.

参考

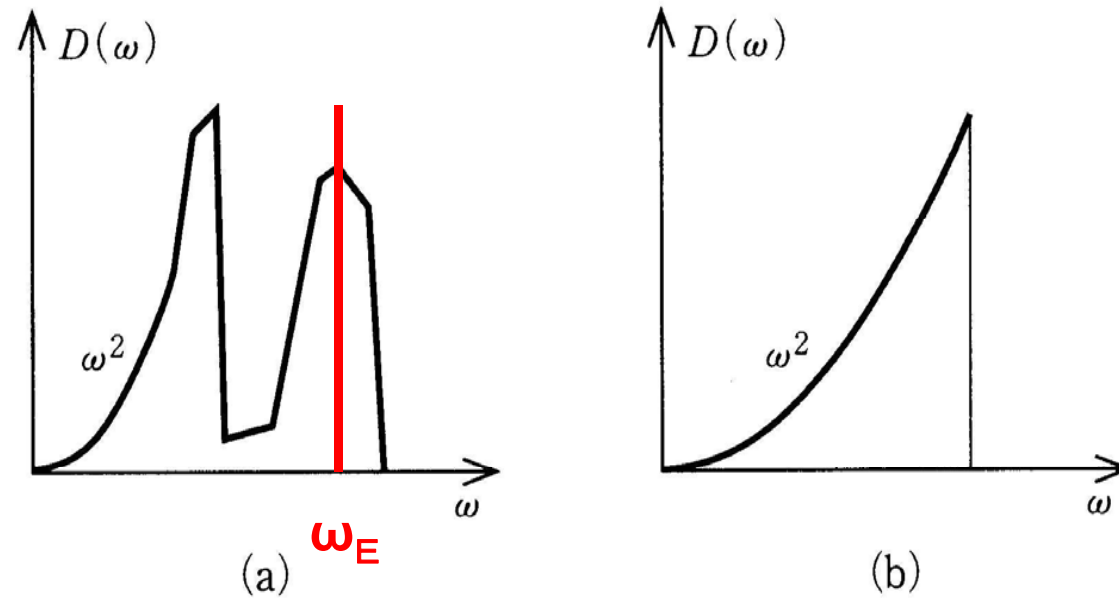


図 6.3 (a) 現実の固体での典型的なフォノン状態密度。
(b) デバイモデルは低振動数の部分の ω^2 -依存性を延長したものである。

いのである。)

デバイモデルのフォノン状態密度は単純な表式になる。例えば LA フォノンについては $\text{grad}_q \omega(q) = c_L$ であるから、

$$\begin{aligned} D_{LA}(\omega) d\omega &= \frac{V}{2\pi^2} \frac{q^2}{c_L} d\omega \\ &= \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c_L^3} d\omega \end{aligned} \quad (6.17)$$

単位胞に複数の原子をもつ結晶は，図 6.2(b) に示したように光学フォノン分枝をもつ．光学フォノンの振動数は波数にあまり依存しない．このことは状態密度のピークとして反映されている．このようなフォノンのモデルとしては，振動数が波数に依存しない一定の値 ω_E をとるとするアインシュタイン (Einstein) モデルが適切な場合がある．アインシュタインモデルによる比熱は

$$C_V = 3Nk_B \frac{(\Theta_E/T)^2 e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2} \quad (6.25)$$

という形になる． $\Theta_E \equiv \hbar\omega_E/k_B$ はアインシュタイン温度と呼ばれる．(6.25) 式は $T \ll \Theta_E$ では $C_V \propto e^{-(\Theta_E/T)}$ のように指数関数的に小さくなる．したがって，光学フォノンがある場合でも，低温の格子比熱はデバイモデルで表されるような音響フォノンが支配しており， $C_V \propto T^3$ というふるまいを示す．

電子と格子振動の相互作用

結晶中をイオンの作る周期場を受けて運動する電子は、イオンからの力に邪魔されることなく直進すると考えてよい。しかし、これはポテンシャルが完全に周期的である場合に限られる。前節で見たようなイオンの運動、すなわち格子振動が起こると、イオンの配列が乱れ、イオンのポテンシャルの周期性も乱れるので、それに伴って電子の運動も乱されることになる。

この電子と格子振動の相互作用がどうなるかを見るために、再び一次元の場合を考える。1種類の原子が等間隔に並んだ一次元の結晶で、 n 番目のイオンが平衡位置 R_n から u_n だけ動いたとする。このとき、イオンの作るポテンシャルは、完全な周期場

$$V(x) = \sum_{n=1}^N v(x - R_n) \quad (8-12)$$

から、乱れたポテンシャル

$$\tilde{V}(x) = \sum_{n=1}^N v(x - R_n - u_n) \quad (8-13)$$

から、乱れたポテンシャル

$$\tilde{V}(x) = \sum_{n=1}^N v(x - R_n - u_n) \quad (8-13)$$

に変わる。このポテンシャルを周期場 $V(x)$ とそれからの外れ $\delta V(x)$ との和に表わす。格子振動があまり激しくなく、 u_n が小さいとしてそれについて展開し、1次の項だけ残すと

$$\begin{aligned} \tilde{V}(x) &= V(x) + \delta V(x) \\ \delta V(x) &= \tilde{V}(x) - V(x) \\ &= - \sum_{n=1}^N v'(x - R_n) u_n \end{aligned} \quad (8-14)$$

となる。 $v'(x)$ は $v(x)$ の微分である。

多数の固有モードが同時に振動しているときには、 u_n はそれらの重ね合せで書かれる。すなわち、

$$u_n = \sum_q Q_q e^{iqR_n} \quad (8-15)$$

格子点 \mathbf{l} の単位胞の中の

\mathbf{b} という位置にある原子のその平衡位置からの変位 $\mathbf{u}_{\mathbf{l},\mathbf{b}}$ は, \mathbf{q} , ν で指定される
いろいろな振動モードの足し合わせとして

$$\mathbf{u}_{\mathbf{l},\mathbf{b}} = \sum_{\mathbf{q},\nu} \left(\frac{\hbar}{2NM_b\omega_\nu(\mathbf{q})} \right)^{1/2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{l}} \mathbf{e}_{\mathbf{q},\nu}^{\mathbf{b}}$$

と表される. $\mathbf{e}_{\mathbf{q},\nu}^{\mathbf{b}}$ は \mathbf{q} という波数をもつ ν -モードのフォノンによって, \mathbf{b} で指定される原子が変位する方向を表すベクトルである.

これを (8-14) に代入すると,

$$\delta V(x) = - \sum_q Q_q \sum_{n=1}^N v'(x - R_n) e^{iqR_n} \quad (8-16)$$

このようなポテンシャルが働くことによって、電子の運動はどのような影響を受けるだろうか。

このような外力が働くと、電子には状態の遷移が起こるが、いまの場合も、電子にポテンシャル $\delta V(x)$ が働くと、決まった波数をもつ周期場中の Bloch 状態 $\phi_k(x)$ から別の Bloch 状態 $\phi_{k'}(x)$ への散乱が起こる。その散乱の起こり方を決めるものは、行列要素

$$[\delta V]_{k'k} = \int \phi_{k'}^*(x) \delta V(x) \phi_k(x) dx \quad (8-17)$$

である。

電子の状態をもっとも簡単に自由電子で近似すると、(8-17) の積分は

$$\begin{aligned} [\delta V]_{k'k} &= - \sum_q Q_q \sum_{n=1}^N e^{iqR_n} \frac{1}{L} \int_0^L v'(x - R_n) e^{-i(k' - k)x} dx \\ &= - \sum_q Q_q \sum_{n=1}^N e^{i(q - k' + k)R_n} \frac{1}{L} \int_0^L v'(x') e^{-i(k' - k)x'} dx' \end{aligned}$$

となる。この計算は
まず、

$$v'_{k-k'} = \frac{1}{a} \int v'(x) e^{i(k-k')x} dx \quad (8-18)$$

と置くとこれは n に依存しない。 n についての和は

$$\sum_n e^{i(q-k'+k)Rn} = \begin{cases} N & (q-k'+k = G_m) \\ 0 & (q-k'+k \neq G_m) \end{cases} \quad (8-19)$$

となる。 G_m は逆格子ベクトル $(2\pi/a)m$ である。結局つぎが得られる。

$$[\delta V]_{k'k} = -v'_{k'-k} Q_q \quad (q = k' - k + G_m) \quad (8-20)$$

このような相互作用によって、格子振動の方にも状態の変化が起こる。(8-20)に残った Q_q は、古典論でいえば運動方程式に従って運動する量で、一粒子の振動の場合の座標 x に当たっている。

すなわち、格子振動の状態に関する Q_q の行列要素は、波数 q の振動子の状態 n と $n \pm 1$ の間で 0 でない。フォノ

ンの変化としていえば，フォノン1個の放出または吸収が起こることになる。
すなわち，相互作用 (8-16) によって，電子および格子振動に生じる変化は：

(a) 電子の波数が k から k' に変わり，同時に波数 q のフォノンが1個吸収される。

(b) 電子の波数が k から k' に変わり，同時に波数 $-q$ のフォノンが1個放出される。

いずれの場合にも，波数に関して

$$k - k' + q = G_m \quad (8-21)$$

が成り立たなければならない。(a)，(b) の変化の過程は，図 8-4 のように表わすことができる。図で実線は電子の状態を，波線は放出・吸収されるフォノンを表わしている。

(8-21) は，右辺が 0 であれば，電子とフォノンの衝突の際に成り立つべき

運動量の保存則を表わすように見える。 \hbar を掛けて、 $\hbar k$ と $\hbar k'$ が衝突前後における電子の運動量、その差額 $\hbar q$ がフォノンの運動量として放出・吸収されるのである。しかし、もともと波数は第一 Brillouin 帯の中だけで考えるべきものであった。 k, k', q のおのおのは第一 Brillouin 帯の中にあっても、 $k - k' + q$ は外に出る場合もある。(8-21) は、それが逆格子ベクトルに等しいときはそのような変化も起こりうることを示している。このように、(8-21) は厳密に“運動量保存則”になってはいない。周期場の中では運動量は保存され

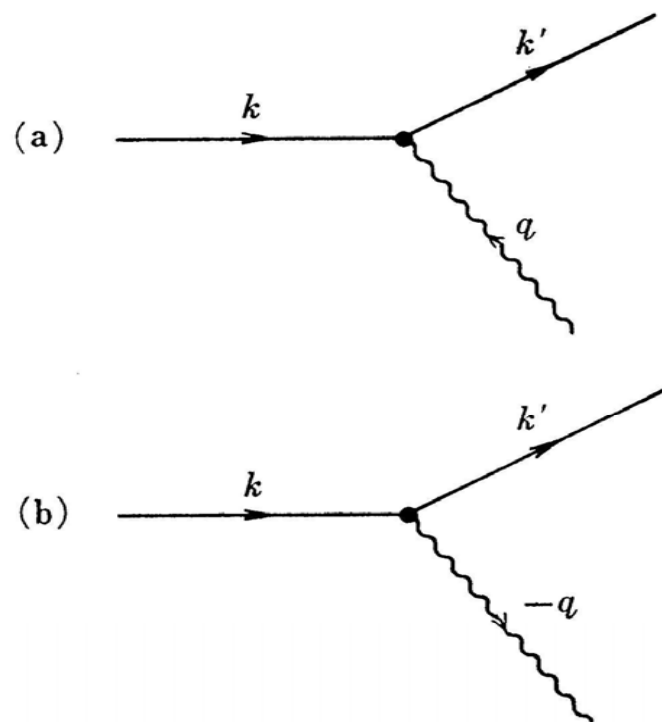


図 8-4 電子によるフォノンの吸収・放出

ず、波数には逆格子ベクトルだけの不定さがあることが、ここにも現われているのである。

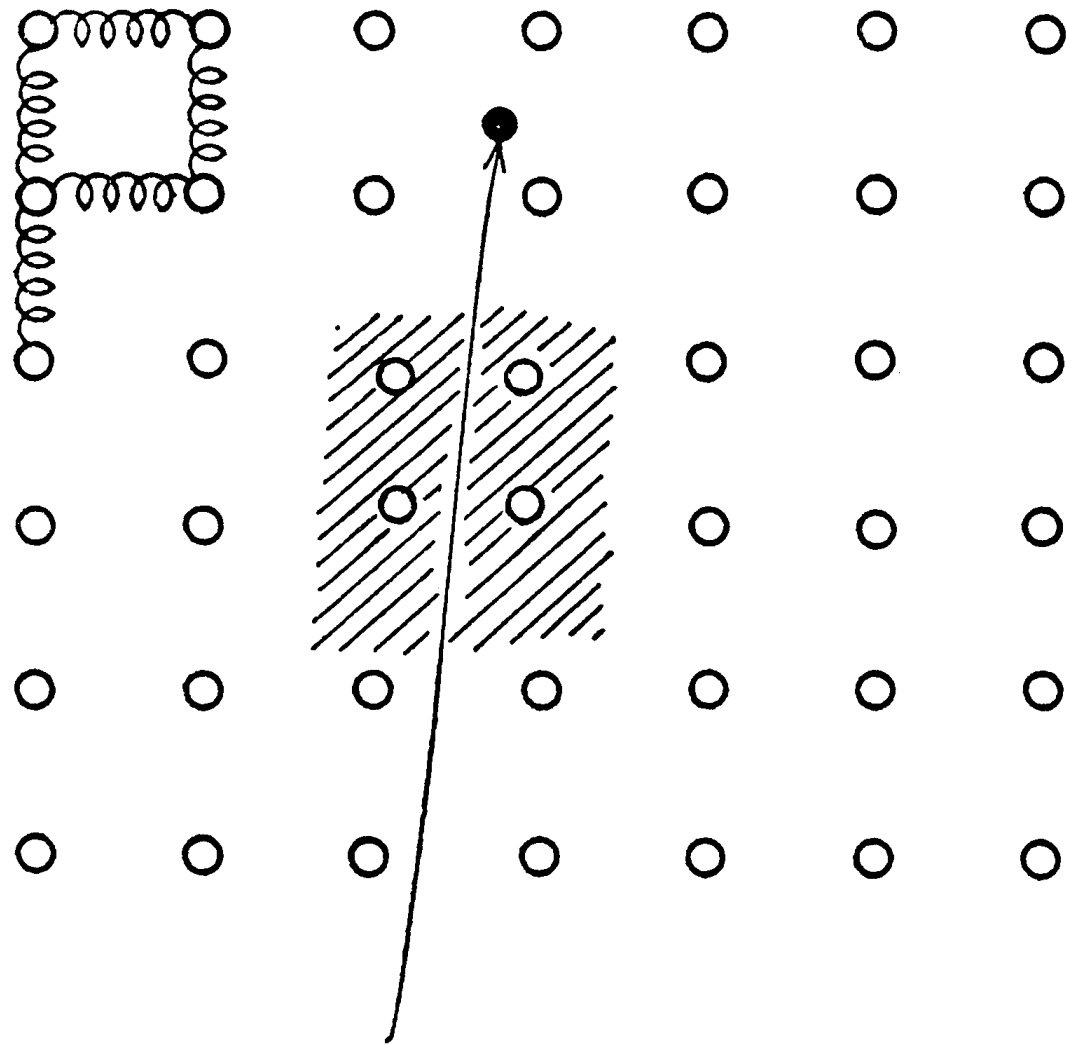
以上では、一次元の模型について考えたのであるが、三次元結晶でも事情は全く変わらない。変わる点は波数ベクトルが三次元のベクトル \mathbf{k} , \mathbf{k}' , \mathbf{q} になること、格子振動に縦波、横波の3種類があることだけである。電子と格子振動との相互作用によって生じる状態の変化は、図8-4の(a), (b)で表わされ、そこでは

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q} = \mathbf{G} \quad (8-22)$$

が成り立つ。 \mathbf{G} はその三次元結晶の逆格子ベクトルである。

このような相互作用が働くと、完全な周期場の中とは異なり、電子はいつまでも波数ベクトル \mathbf{k} の変わらない“直進運動”をすることはできないことになる。すなわち、格子振動による電子の散乱が起こる。この散乱は、電子の一方向に向かう流れを妨げ、たとえば金属等の電気抵抗の原因になる。

クーパー対の形成



質点とバネでできたイオン系とその中を走る電子

超伝導の起源は、十分低温で有効となる電子間の引力相互作用によってフェルミ面近傍の電子が電子対(クーパー対)を形成し、ボーズ粒子化する結果、ボーズ凝縮を起こすことにより巨視的な量子状態(ひとつの固有状態に莫大な電子対が存在する)を形成することである。

引力の起源？

ある条件では、格子振動を媒介とする相互作用が引力となることがある。

超伝導レポート8

フォノンのモデルとして、振動数が波数に依存しない一定の値 ω_E をとるとするアインシュタインモデルによる比熱は、

$$C_V = 3Nk_B \frac{(\Theta_E/T)^2 e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2}$$

で与えられることを示し、十分低温の比熱の温度変化を求めよ。

$\Theta_E \equiv \hbar\omega_E/k_B$ はアインシュタイン温度と呼ばれる。