

凝縮系物理の基礎

2012 年 3 月 12 日

1 イントロ

凝縮系の物理 (固体物理) で使う最も簡単なハミルトニアンを定式化し、仮定等を明らかにしておく。

2 電子-原子核系ハミルトニアン 最も簡単な場合

主役は電子と原子核イオン

電子の電荷を $-e, e > 0$ 、原子核の電荷を q とする。

電子の質量を m 、原子核の質量を M とする。

簡単のため原子核は 1 種類としているが、多種類に拡張するのは容易。

電子は n 個、原子核は N 個あるとする。

電子の持つ物理量は小文字で書く。

原子核の持つ物理量は大文字で書く。

例えば、 r, p, s は電子の位置、運動量、角運動量

この系のハミルトニアンは第一量子化で

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_e + \hat{H}_i + \hat{H}_{ei} \\ \hat{H}_e &= \sum_{i=1}^n \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + V_e(o_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ee}(r_i - r_j) \\ \hat{H}_i &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{P}_i^2}{2M} + V_i(O_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ii}(R_i - R_j) \\ \hat{H}_{ei} &= \sum_{i,j} V_{ei}(r_i - R_j)\end{aligned}$$

(e は electron, i は ion のつもり)

と一般に書ける。

仮定としては、非相対論的極限、クーロン相互作用がドミナント等を仮定している。

中性子星の中の物性等、相対論的な効果が出るところではダメ

外場として磁場をかけるとかするなら、ハミルトニアンは書きかえる必要がある。

これにさらに状況に応じてさまざまな仮定を置く。

最もよくつかわれるものは、原子核を対称性を持った点 (特に離散的空間並進対称性) に固定して

配置し、周期的境界条件を用い無限系に拡大し、電子-原子核相互作用を電子の一体ポテンシャル、原子核-原子核相互作用を定数項として無視する近似が使われる。

この時のハミルトニアンを第二量子化で書くと

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}_{ee} \\ \hat{H}_0 &= \sum_{\sigma} \int dr dr' \langle r' | \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) | r \rangle a_{\sigma}^{\dagger}(r') a_{\sigma}(r) \\ \hat{V}_{ee} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int dr dr' V_{ee}(r - r') a_{\sigma}^{\dagger}(r) a_{\sigma'}^{\dagger}(r') a_{\sigma'}(r') a_{\sigma}(r) \\ V_{ee}(r - r') &= \frac{-e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|r - r'|} \\ V(r + a_i) &= V(r)\end{aligned}$$

ここで、 a_i は結晶の基本並進ベクトル。

これも程度の問題で、必要ならば、仮定を緩める必要がある。

例えば、固定点からの微小振動を許すと、調和振動子と相互作用する電子系を記述することになるが、これは BCS 理論などで用いられる。

3 疑問点とか

いろいろ試してみたいことはいっぱいある。

ベクトルポテンシャルとの相互作用入れたらどうなるのかとか、弱い相互作用とか強い相互作用はどこまで無視できるのかとか。

正直こいつらがどんくらいのオーダー持ってるのかとかもよく知らん・・・こんなので物理やってるって言うていいのか！？

誰か教えてください。