

SGC ライブラリ-173

一歩進んだ理解を目指す  
**物性物理学講義**

加藤 岳生 著

サイエンス社

# まえがき

本書は、筆者が長年行ってきた大学院での物性物理学の授業をベースとした教科書である。学部で学ぶ初歩的な固体物理学の内容を前提としつつ、そこから最先端の研究活動で必要となる専門的な知識までの間のギャップを埋めるような教科書を目指して執筆されたものである。実際の研究活動で「これをわかっておくと見通しがよくなる」「ここまで知っておけば研究発表を聞いたときによく理解できるようになる」という事柄をあちこちに散りばめたつもりである。私が大学院生のときに「こういうことが書いてある物性物理学の教科書があったらいいのにな」と思った事を可能な限り書いた、という言い方もできる。そのため、シリーズでも最多に近いであろう多数の脚注にこの思いが反映されることとなった。標準的な大学院での物性物理学の講義内容を選んでいるので、学生だけでなく、教員の方々にも大学院での講義の参考になれば幸いである。

本書の特徴として、固体物理学では敬遠されがちな第二量子化（もしくは場の量子論の初歩）を用いた記述を積極的に行っていることが挙げられる。場の量子論の詳しい説明は省いてあるので、あまり理論に偏重することなく、様々な例を通して第二量子化の計算に慣れ親しむことができると思う。また、本書では最先端の流行のテーマについてはほとんど記述しなかったが、これは他書にゆずりたい。本書では、流行のテーマを追いかけているだけでは身につかない、研究者（の卵）の足腰を鍛えるような教科書を目指すこととした。

本書の第1章から第5章までが基本的な内容となっており、順に読んでいくとよいだろう。第二量子化を習得している方は第1章は飛ばして構わない。第6章から第8章はそれぞれ独立したトピックなので、第5章を読んだ後に興味があるところから読んでいただいて構わない。本書では電子の電荷は  $-e$  ( $e > 0$ ) と定義しており、第2章から第6章のほとんどの箇所で、 $\hbar$ ,  $e$ ,  $4\pi\epsilon_0$  を1とした自然単位系を用いている。注意していただきたい。

なお、本書のバンド計算で用いた Quantum ESPRESSO の入力ファイルをサポートページ

<https://github.com/takeokato719/SolidStatePhysicsText>

で公開している。ここには図表の作成に使った Python スクリプトを掲載予定である。また、本教科書に関する誤りの指摘や質問なども上記ホームページで受け付けている。教科書の誤りについては、見つかり次第、正誤表の情報をアップデートしていく予定である。参考になれば幸いである。

## 謝辞

本書では、結晶構造の描画に可視化ソフトウェア VESTA<sup>[1], [2]</sup>を、電子状態計算やバンド図の作成に Quantum ESPRESSO<sup>[3]~[5]</sup>を、フェルミ面の描画には FermiSurfer<sup>[6], [7]</sup>を利用させていただきました。このような便利なソフトウェアを公開していただいた開発者の方々に感謝申し上げます。また、専門的な内容について、原稿のチェックを快く引き受けてくださった笠松秀輔氏、山影相氏、松田巖氏、中島多朗氏、フォグリ・ヴォルフガング氏、近藤猛氏、長谷川幸雄氏、山下穰氏、松田康弘氏、上床美也氏、ならびに、X線回折実験のデータを提供していただいた矢島健氏にも深く御礼申し上げます。さらに SNS を通じての呼びかけに応じて本書の閲読を引き受けてくださった赤田龍之介氏、伊覇航氏、遠藤純矢氏、奥貴樹氏、梶山健一氏、澤田亮人氏、瀬尾豪一朗氏、竹川敦氏、内藤智也氏、西村俊祐氏、馬場惇氏、深川竜誠氏、福澤亮太氏、古川晴貴氏、三井隆志氏にも感謝の意を表します。最後に長年に渡って辛抱強く執筆を見守っていただいたサイエンス社の大溝良平氏、平勢耕介氏に心から感謝申し上げます。

2021 年 12 月

加藤 岳生

# 目次

<b>第 1 章 第二量子化</b>	<b>1</b>
1.1 第二量子化の概要	1
1.2 第一量子化の記法のまとめ	2
1.3 1 粒子状態	5
1.4 相互作用のないフェルミ粒子系	7
1.5 1 体相互作用の記述法	10
1.6 2 電子状態	11
1.7 2 体相互作用の記述法	13
1.8 場の演算子の時間発展	16
1.9 物理系の記述例	17
1.9.1 電子ガス模型	17
1.9.2 原子・分子	18
1.9.3 固体	19
1.10 期待値に関する公式	21
<b>第 2 章 原子・分子</b>	<b>24</b>
2.1 水素の原子軌道	24
2.2 $Z \geq 2$ の原子の原子軌道	27
2.3 擬ポテンシャル	31
2.4 フントの規則	32
2.5 分子軌道	33
2.6 分子軌道の分類	36
2.7 配置間相互作用法 (CI 法)	39
2.8 イオン結合	42
<b>第 3 章 共有結合</b>	<b>43</b>
3.1 ダイヤモンド構造での共有結合	43
3.2 強束縛模型 (tight-binding model)	47
3.3 ダイヤモンド構造の強束縛模型	52
3.4 バンド構造の見方	59
3.5 閃亜鉛鉱型結晶構造	61
3.6 グラフェン	62

<b>第 4 章</b>	<b>金属</b>	<b>66</b>
4.1	電子ガス模型	66
4.2	電子ガス模型の運動エネルギー	68
4.3	電子ガス模型の相互作用項	69
4.4	金属結合	73
4.5	相関関数	76
4.6	電子ガス模型の性質	80
<b>第 5 章</b>	<b>金属の線形応答</b>	<b>82</b>
5.1	自由電子系の外場応答	82
5.2	線形応答係数の導出	83
5.3	自由電子系の外場応答 (続き)	86
5.4	相互作用のある電子系の外部応答	94
5.5	静電遮蔽	100
5.6	フリーデル振動	102
5.7	応答関数の一般的な性質	103
<b>第 6 章</b>	<b>固体の電子状態</b>	<b>105</b>
6.1	密度汎関数理論の基礎	105
6.2	コーン-シャム方程式	108
6.3	密度汎関数理論で用いられる近似手法	110
6.4	金属元素	113
6.5	イオン結合	120
6.6	共有結合とイオン結合	125
6.7	強誘電体	126
<b>第 7 章</b>	<b>超伝導</b>	<b>129</b>
7.1	超伝導現象	129
7.1.1	超伝導の歴史	129
7.1.2	マイスナー効果	130
7.1.3	クーパー不安定性	130
7.1.4	電子格子相互作用による電子間の有効引力	132
7.2	BCS 変分波動関数	132
7.3	BCS ハミルトニアン	133
7.4	平均場理論	135
7.5	超伝導の状態密度	142
7.6	超伝導の比熱	146
7.7	外場に対する線形応答	148

7.8	マイスナー効果の導出 . . . . .	154
7.9	コヒーレンス長 . . . . .	155
7.10	ギンツブルグ-ランダウ理論 . . . . .	157
7.10.1	超伝導ギャップが一様で磁場がない時 . . . . .	161
7.10.2	超伝導ギャップが非一様で磁場がない時 . . . . .	161
7.10.3	超伝導ギャップが一様で磁場がある時 . . . . .	162
7.10.4	超伝導ギャップが非一様で磁場がある時 . . . . .	163
<b>第 8 章</b>	<b>実験手法</b>	<b>167</b>
8.1	散乱実験 . . . . .	167
8.1.1	X 線散乱 . . . . .	168
8.1.2	中性子散乱 . . . . .	172
8.1.3	電子線回折 . . . . .	175
8.2	光学応答 . . . . .	176
8.2.1	基本的な物理量 . . . . .	176
8.2.2	バンド間遷移 . . . . .	180
8.2.3	バンド間遷移における選択則 . . . . .	182
8.2.4	赤外吸収 . . . . .	184
8.2.5	交流伝導度 . . . . .	187
8.2.6	ラマン散乱 . . . . .	188
8.2.7	赤外吸収とラマン散乱における選択則 . . . . .	189
8.3	角度依存光電子分光 (ARPES) . . . . .	190
8.4	走査トンネル顕微鏡 (STM) . . . . .	192
8.5	熱力学量 . . . . .	194
8.5.1	比熱 . . . . .	194
8.5.2	磁化・帯磁率 . . . . .	197
8.6	極限環境 . . . . .	197
8.6.1	低温 . . . . .	197
8.6.2	強磁場 . . . . .	197
8.6.3	高圧 . . . . .	199
8.7	物質探索の面白さ—結びにかえて— . . . . .	201
<b>付録 A</b>	<b>さらに学びたいひとのために</b>	<b>203</b>
	<b>参考文献</b>	<b>207</b>
	<b>索引</b>	<b>210</b>

# 第 1 章

## 第二量子化

固体物理学の内容を理解する際に、第二量子化の手法を用いると記述が簡便になる\*1)。本章では、通常量子力学のブラケット表記に慣れた読者を対象に、最低限の知識をまとめることにする。理論の厳密性・一貫性は多少犠牲にしているが、概要は理解できると思う。既知の読者は本章を飛ばして構わない。

### 1.1 第二量子化の概要

まず、第二量子化\*2)の手続きを概観してみよう。固体物理の分野では、固体中の電子状態に興味があるので、ここでは主に電子(フェルミ粒子)だけを取り扱う。通常量子力学(第一量子化の手法という)では、電子の波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を考えてきた。しかし、第二量子化の手法では波動関数を直接扱うのではなく、場の演算子と呼ばれる線形演算子 $\Psi(\mathbf{r})$ を取り扱う。場の演算子 $\Psi(\mathbf{r})$ は見かけこそ波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ に似ているものの、その中身はまったく異なる。 $\Psi(\mathbf{r})$ は「位置 $\mathbf{r}$ にある電子を1つ消し去る」という操作を行う演算子(消滅演算子)であり、そのエルミート共役である $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ は「位置 $\mathbf{r}$ に電子を1つ付け加える」という操作を行う演算子(生成演算子)である。従来の波動関数が持っていた「位置 $\mathbf{r}$ での確率振幅」という意味は持たないことに注意せよ。

従来の教科書<sup>[8],[9]</sup>では、第一量子化の多粒子系の記法をまず学び、それを第二量子化で書き直すことが多いようである。ここでは逆の経路をたどることに

---

\*1) 固体物理の多くの教科書は第二量子化を用いないことが多い。しかし、量子化学や強束縛模型(tight-binding model)の記述には第二量子化が必須であり、現代の固体物理学においても重要なツールである。実験家も学ぶべき記述法である。

\*2) 「第二量子化」という用語は歴史的な用語であり、現代の物理学においてはあまり適切な名称ではないと思われる。波動関数に基づく普通の教科書に載っている「量子力学」のやり方は粒子が1つの場合に扱いやすい形式になっている。一方、ここで扱う第二量子化の方法は粒子が複数ある時に扱いやすい形式である。当然両方をよく知っておくことが大事である。

## 第 2 章

# 原子・分子

この章ではまず、物性物理の基本要素である原子・分子についてまとめる。原子軌道について簡単にまとめた後、その知識をもとにして分子における分子軌道の考え方を紹介する。

### 2.1 水素の原子軌道

まず最も簡単な原子である、水素原子を考えよう。水素原子のシュレーディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

と書き表される。ここで  $m$  は電子の質量、 $-e$  ( $e > 0$ ) は電子の電荷、 $\epsilon_0$  は真空の誘電率、 $\hbar = h/2\pi$  ( $h$ : プランク定数) である。このまま計算を進めると係数が煩雑になるため、本書では  $\hbar = e = m = 4\pi\epsilon_0 = 1$  とする原子単位系を採用する。この単位系では、電荷、質量をそれぞれ  $e, m$  を基準にして測る。また、長さ・エネルギーは、 $\hbar, e, m, 4\pi\epsilon_0$  を適当に組み合わせたものを基準とする。例えば、ボーア半径

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}, \quad (2.2)$$

はちょうど  $\hbar, e, m, 4\pi\epsilon_0$  の組み合わせで書けており、原子単位系では 1 になる。つまり原子単位系での長さの単位はボーア半径  $a_B$  である。また、水素の基底エネルギー  $E_0$  は、

$$E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} = -13.6 \text{ eV}, \quad (2.3)$$

と書き表されるが、原子単位系では  $E = -1/2$  となる。つまり、原子単位系では水素の基底エネルギーの絶対値を 2 倍したものがエネルギーの単位である。



# 第 3 章

## 共有結合

物性物理において、固体中の共有結合をよく理解することは重要である。ここでは代表的な共有結合結晶であるダイヤモンドとその類似物質を取り上げ、原子間結合がどのように生じるかを議論する。

### 3.1 ダイヤモンド構造での共有結合

まず、図 3.1 に示したダイヤモンド構造を取る IV 族元素<sup>\*1)</sup>の炭素 (C)、シリコン (Si)、ゲルマニウム (Ge)、灰色スズ ( $\alpha$ -Sn) を考えよう<sup>\*2)</sup>。これらの元素の基本的な性質を表 3.1 にまとめる。ダイヤモンド構造には、図 3.1 に示すように単位格子内に 2 つの A, B 副格子がある。ここで A 副格子だけに着目すると面心立方格子<sup>\*3)</sup>を成す。よって、A 副格子の原子座標は基本格子ベクトル  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  によって、

$$\mathbf{r}_A = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (n_1, n_2, n_3: \text{整数}), \quad (3.1)$$

表 3.1 ダイヤモンド構造を取る IV 族の元素。

元素	電気伝導性	格子定数 $a$	バンドギャップ
C	絶縁体	3.57 Å	5.5 eV
Si	絶縁体 (半導体)	5.43 Å	1.1 eV
Ge	絶縁体 (半導体)	5.65 Å	0.67 eV
$\alpha$ -Sn	金属	6.49 Å	

\*1) 標準化のための組織である IUPAC は、14 族元素と呼ぶことを推奨しているが、半導体の分野では IV 族元素と呼ぶことがまだ多い。

\*2) スズには灰色スズ ( $\alpha$ -Sn) と白色スズ ( $\beta$ -Sn) の 2 つの同素体が存在する。

\*3) 面心立方格子は英語で face-centered cubic lattice とかき、しばしば fcc と略字で表現する。

# 第 4 章

## 金属

金属の性質を理解することは、物性物理の中でも重要なテーマである。本章では、まず金属結合がどのように生じるかを説明した後に、外部電場に対する応答を議論し、金属の重要な性質である遮蔽効果を論じる。

### 4.1 電子ガス模型

金属の性質を記述するときに基本となる模型は、電子ガス模型である。電子ガス模型のハミルトニアンは以下のように与えられる<sup>\*1)</sup>：

$$H = H_T + H_C, \quad (4.1)$$

$$H_T = \sum_{\sigma} \int d^3\mathbf{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 \right) \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (4.3)$$

ここで  $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r})$  ( $\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ ) は電子の消滅 (生成) 演算子である<sup>\*2)</sup>。

第一項は自由電子の運動エネルギーを記述しており、第二項は電子間のクーロン相互作用を表す<sup>\*3)</sup>。  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  は電子スピンである。現実の金属では原子核やイオンが作る周期ポテンシャルが存在するが、ここではそれを無視しており、相当な簡単化が行われている。しかし、電子ガス模型は固体物理分野で非常に重要な役割を果たす。それは以下の理由による：

- アルカリ金属元素であるリチウム (Li)、ナトリウム (Na)、カリウム (K)、ルビジウム (Rb)、セシウム (Cs) では、価電子のバンド構造が自由電子の

---

\*1)  $m = \hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$  の単位系 (原子単位系) で書いていることに注意。第二量子化による表記法については第 1 章を参照せよ。

\*2) 本書では 3 次元の模型を考える。2 次元電子ガス模型も半導体ヘテロ構造で実現するのでよく調べられている。

\*3) 1.7 節参照。

## 第 5 章

# 金属の線形応答

金属を特徴づける重要な性質は外部電場に対する応答である。例えば、金属の特徴の一つである金属光沢は、金属の光 (= 振動電場) に対する応答によって決まっている。また静電遮蔽 (静電場に対して金属内で電場がゼロになる現象) は電磁気学における基本的な現象である。この章では、金属の外場応答について線形応答理論を用いて議論しよう。この章は式変形が多くフォローするのが大変かもしれないが、大事な議論なので頑張ってついてきてほしい。

### 5.1 自由電子系の外場応答

まず、本節では電子間クーロン相互作用のない場合を考え、線形応答理論の概略を紹介する。相互作用のない電子系のハミルトニアンに、時間に依存する外場を加えることを考えよう：

$$H = H_0 + \mathcal{V}(t), \quad (5.1)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5.2)$$

$$\mathcal{V}(t) = - \int d^3\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}). \quad (5.3)$$

ここで  $H_0$  は外場がないときの系のハミルトニアン、 $\mathcal{V}$  は時間に依存する外場の効果を表すハミルトニアン、 $\phi(\mathbf{r}, t)$  は外部から加えられた電位、 $\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}^2/2$  は波数  $\mathbf{k}$  の電子のエネルギーである\*1)。また、 $\rho(\mathbf{r})$  は電子密度演算子である：

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \rho_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (5.4)$$

$t < t_0$  で外場はないものとし、時刻  $t = t_0$  で系はハミルトニアン  $H_0$  の基底状

---

\*1) 電位  $\phi(\mathbf{r}, t)$  が正のとき、負の電荷を持つ電子のポテンシャルエネルギーが下がり、電子密度が増えることに注意せよ。また  $\hbar = m = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$  の単位系を用いていることに注意。

## 第 6 章

# 固体の電子状態

固体中の原子の結合様式や様々な性質を議論する際に、固体の電子状態を知ることとはとても重要である。本章では、まず固体の電子状態 (バンド構造) を得るための数値計算手法を簡単にまとめる。その後、実際のバンド構造を眺めながら物質の性質がどのように決まるのかを具体的に見ていくことにしよう。最後にイオン結合についても触れる。

### 6.1 密度汎関数理論の基礎

現実の固体の性質を詳しく議論するには、原子核の作るポテンシャルや電子間クーロン相互作用の効果も取り入れ、多電子のシュレーディンガー方程式を数値的に解く必要がある。当然ながら、厳密に解くことはできないので、何らかの近似手法が必要である。現在、電子状態計算 (バンド計算) の手法の主流は密度汎関数理論 (Density functional theory, 略して **DFT**) と呼ばれる理論体系に基づいている。そこで、まずは密度汎関数理論の基礎について述べる\*1)。

解くべき系のハミルトニアンは、

$$H = T + H_C + \sum_i v_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i), \quad (6.1)$$

$$T = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2, \quad (6.2)$$

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (6.3)$$

---

\*1) 密度汎関数理論に基づく電子状態計算 (バンド計算) はすでに無料の計算ソフトが多く公開されており、広く普及している状況にある。このような時代だからこそ、その電子状態計算 (バンド計算) がどのような原理に基づいて行われているかをきちんと把握することが重要なのである。

# 第 7 章

## 超伝導

超伝導は固体物理の華である。超伝導理論は固体物理に多くの物理概念をもたらし、その発展に多くの彩りをもたらした。この章では超伝導を記述する理論について簡単にまとめることにする。本章は、なるべく短い分量で超伝導の全体像がわかるように記述することを目的にし、式の詳しい導出は一部省くことにする。超伝導に関わる理論には様々なものがあり、そのすべてを紹介できないので、より詳しい説明は他の教科書 [46]~[48] を見てもらいたい。なお本章では、物理的な意味が読み取りやすいように、通常の SI 単位系を用いる。

### 7.1 超伝導現象

#### 7.1.1 超伝導の歴史

超伝導の発見の歴史は興味深い。20 世紀初頭、ライデン大学の教授だったオネスは低温技術を極めるべく、元素の液化に取り組んでいた。オネスが研究に着手する前には、酸素、窒素の液化 (1877 年)、水素の液化 (1898 年) が行われていた\*1)。そのような状況でオネスはヘリウムの液化に取り組んだのである。1906 年に水素の液化装置の改良を行い、その技術をベースとして 1908 年にヘリウムの液化を成功させた。しばらくの間、ヘリウムの固化に挑んだもののうまく行かず、液体ヘリウムを用いた低温における金属の電気抵抗の振る舞いを調べることにした。金や白金などの測定を試みた後、水銀の電気抵抗を調べたところ、驚くべきことに図 7.1 のようにおよそ 4 K の転移温度で電気抵抗がゼロになったのである。オネスは 1911 年 4 月 28 日にこの結果を発表したが、すぐに科学者の注目を集め、1913 年にノーベル賞を受賞した\*2)。

一方、なぜ超伝導になるかについては、長年謎であった。超伝導が理論的に

---

\*1) 水素の液化はデュワー瓶で有名なデュワーによる。

\*2) この話をしたのは、ある技術を極めると新しい物理現象を見つける可能性があることを強調したかったからである。

# 第 8 章

## 実験手法

言うまでもないことだが、物性物理学を学ぶ上で実験手法をよく理解することは必須である。理論研究者は実験手法を知るべきであるし、実験研究者は自分の専門とする手法以外の実験手法を知るべきである。当然ながら、それぞれの手法で詳細な説明をすることはできないが、それぞれの手法で何を観測することができるかについて、概略をまとめることにする\*1)\*2)。

### 8.1 散乱実験

散乱実験とは、試料に粒子線もしくは光線を照射し、その散乱に関する情報から試料の情報を得る方法である。物性でよく用いられるのは、X線、中性子線、電子線である。

まずは共通の観測原理を説明しよう。散乱実験の基本的なセットアップを図 8.1 に示す。入射粒子の波数ベクトルとエネルギーを  $\mathbf{k}_i, \epsilon_i$ 、散乱後の粒子の波数ベクトルとエネルギーを  $\mathbf{k}_f, \epsilon_f$  とする。このとき、散乱実験は大きく分けて、弾性散乱 ( $\epsilon_i = \epsilon_f$ ) と非弾性散乱 ( $\epsilon_i \neq \epsilon_f$ ) に分けられる。弾性散乱では粒子の波としての性質を利用し、試料の周期構造による波の干渉効果によって結晶構造の情報を得ることができる\*3)。この場合は、結晶の格子間隔程度 (1 Å 程度) の波長の粒子線を用いる。また非弾性散乱では、散乱後の波数ベクトル  $\mathbf{k}_f$  (もしくは運動量  $\hbar\mathbf{k}_f$ ) とエネルギー  $\epsilon_f$  を同時計測することで、物質中の励起状態に関する情報を得ることが可能である。またエネルギー分解せずに散乱

\*1) セミナーや研究会で実験データが何を意味しているかが大まかにわかるようになることを目標にしている。

\*2) 核磁気共鳴と電気抵抗について、詳しい説明を書くことができなかった。これは紙面の制約によるものであり、他意はなく、嫌いなわけではない(むしろ好き)。誠に申し訳ない。

\*3) 非結晶質(液体やガラス)の試料に対しても構造の情報を得ることができる。この場合は、原子の構造に分布があるので、原子間距離の分布などの情報が得られる。

## 付録 A

# さらに学びたいひとのために

本書では物性物理のなるべく多様な考え方の要点をまとめた。本書が物性物理に興味を持つ学生・研究者が、よりスムーズに物性物理の世界に入っていける手助けになれば幸いである。本書で取り上げた内容はまだ初歩的な内容にとどまっており、個別の項目についての掘り下げは十分でない。さらに勉強を進めたい方のために、次に読むべき教科書を紹介しておく。

**R. P. ファインマン著，西川恭治監訳「ファインマン統計力学」(丸善出版)**

第二量子化を詳しく学ぶには、この本の第6章を読むのが一番手っ取り早いと思われる。

**藤永茂著「入門分子軌道法—分子計算を手がける前に」(講談社サイエンティフィック)**

第2章で取り扱った分子・原子と共有結合について、物理的な意味を重視して詳しく解説している。著者も未だに読むと得るものがある、貴重な教科書であり、オススメである。

**平尾公彦，武次徹也著「新版 すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル」(KS 化学専門書)**

具体的に量子化学計算を行ってみたい人は本書を参考にするとよい。量子化学計算パッケージ Gaussian (有償)，GAMESS (無償) の簡単な使い方，どのような計算が可能か，などの説明がある。

**安藤恒也著「大学院物性物理 1—量子物性」第一章 (講談社サイエンティフィック)**

本書の第3章を書くにあたり、多大な影響を受けた本。ややとっつきにくさはあるが、とてもしっかりとした記述は安心感すら与える。絶版なのが惜しい。

## 参考文献

- [1] VESTA, Visualization for Electronoc and Structural Analysis (<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>).
- [2] K. Momma and F. Izumi, *J. Appl. Crystallogr.* **44**, 1272 (2011).
- [3] Quantum ESPRESSO Web page (<https://www.quantum-espresso.org/>).
- [4] P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
- [5] P. Giannozzi et al., *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
- [6] FermiSurfer: Fermi-surface viewer providing multiple representation schemes (<https://fermisurfer.osdn.jp/index.html.ja>).
- [7] M. Kawamura, *Comp. Phys. Commun.* **239**, 197 (2019).
- [8] R.P. ファインマン (西川恭治監訳), 『ファインマン統計力学』 (丸善出版, 2012).
- [9] 小形正男, 『物性物理のための場の理論・グリーン関数—量子多体系をどう解くか?』 (サイエンス社, 2018, 電子版: 2020).
- [10] J.J. サクライ, J. ナポリターノ (桜井明夫訳), 『現代の量子力学 (上) 第2版』 (吉岡書店, 2014).
- [11] 藤永茂, 『入門分子軌道法—分子計算を手がける前に』 (講談社サイエンティフィク, 1990).
- [12] 本郷研太, 小山田隆行, 川添良幸, 安原洋, フント則の起源は何か?, *日本物理学会誌* **60**, 799 (2005).
- [13] 佐甲徳栄, ヘリウム様原子におけるフントの第一規則の起源, *日本物理学会誌* **68**, 358 (2013).
- [14] 平尾公彦監修, 武次徹也編著, 『新版 すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル』 (KS化学専門書, 2015).
- [15] 伊達宗行監修, 福山秀敏/山田耕作/安藤恒也編著, 『大学院物性物理1—量子物性』 (講談社サイエンティフィク, 1996).
- [16] The home of maximally-localised Wannier functions (MLWFs) and Wannier90 (<http://www.wannier.org/>).
- [17] J.C. Slater and G.F. Koster, *Phys. Rev.* **94**, 1498 (1954).
- [18] G. グロツ, G.P. パラビチニ (安食博志訳), 『固体物理学 (上)』 (吉岡書店, 2004).
- [19] 今野豊彦, 『物質の対称性と群論』 (共立出版, 2001).
- [20] 高田康民, 『多体問題—電子ガス模型からのアプローチ』 (朝倉書店, 1999).
- [21] J.P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
- [22] W.A. Harrison, *Elementary Electron Structure, Revised Edition*, World Scientific, 2004.
- [23] G. Ortiz and P. Ballone, *Phys. Rev. B* **50**, 1391 (1994).
- [24] D.M. Ceperley and B.J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [25] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics—An Introduction*, Oxford University Press, 2004.



- [26] P. Coleman, *Introduction to Many Body Physics*, Cambridge University Press, 2015.
- [27] J. Rammer and H. Smith, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 323 (1986).
- [28] D. Bohm and D. Pines, *Phys. Rev.* **92**, 609 (1953).
- [29] G. Baym and L.P. Kadanoff, *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961).
- [30] G. Baym, *Phys. Rev.* **127**, 1391 (1962).
- [31] Y. Hasegawa, et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **61**, 399 (2007).
- [32] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- [33] R.M. マーチン (寺倉清之, 寺倉郁子, 善甫康成訳), 『物質の電子状態 (上)』 (丸善出版, 2012).
- [34] J.F. Janak, *Phys. Rev.* **18**, 7165 (1978).
- [35] 3D (VRML) Fermi Surface Database (<http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>).
- [36] 佐久間昭正, 『磁性の電子論』 (共立出版, 2010).
- [37] 上田和夫, 『磁性入門』 (裳華房, 2011).
- [38] Introduction of pymatgen, a robust, open-source Python library for materials analysis (<https://pymatgen.org/index.html>).
- [39] Database of Ionic Radii (<http://abulafia.mt.ic.ac.uk/shannon/ptable.php>).
- [40] MateriApps 開発チーム, NaCl 結晶の Bader 電荷解析, 2020 (<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app-post/2321>).
- [41] W. Zhong, D. Vanderbilt, and K.M. Rabe, *Phys. Rev. B* **52**, 6301 (1995).
- [42] R. Resta, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 899 (1994).
- [43] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*, Cambridge University Press, 2018.
- [44] C.S. Wang and B.M. Klein, *Phys. Rev. B* **24**, 3393 (1981).
- [45] D. Benson, O.F. Sankey, and U. Häussermann, *Phys. Rev. B* **84**, 125211 (2011).
- [46] J.R. シュリーファー (樺沢字紀訳), 『シュリーファー 超伝導の理論』 (丸善プラネット, 2010).
- [47] 北孝文, 『統計力学から理解する超伝導理論 第2版』 (サイエンス社, 2021).
- [48] 伊達宗行監修, 福山秀敏/山田耕作/安藤恒也編著, 『大学院物性物理 2—強相関電子系』 (講談社サイエンティフィク, 1997).
- [49] J. Bardeen, L. Cooper, and J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [50] 丹羽雅昭, 『超伝導の基礎 第3版』 (東京電機大学出版局, 2009).
- [51] N.B. Kopnin, *Theory of Nonequilibrium Superconductivity*, IClarendon Pr, International Series of Monographs on Physics, 2001.
- [52] W. Belzig, F.K. Wilhelm, C. Bruder, G. Schön, and A.D. Zaikin, *Superlattices and Microstructures* **25**, 1251 (1999); arXiv:cond-mat/9812297.
- [53] 田仲由喜夫, 『超伝導接合の物理』 (名古屋大学出版会, 2021).
- [54] G. Blatter, et al., *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
- [55] 石川哲也著, 寺田寅彦の「X線と結晶」から X線自由電子レーザーへ, *日本物理学会誌* **70**, 675 (2015).
- [56] M. Mohr, J. Maultzsch, E. Dobardžić, S. Reich, I. Miložević, M. Damnjanović, A. Bosak,

- M. Krisch, and C. Thomsen, *Phys. Rev. B* **76**, 035439 (2007).
- [57] C. キッテル (宇野良清, 津屋昇, 新関駒次郎, 森田章, 山下次郎訳), 『固体物理学入門 (上) 第 8 版』 (丸善出版, 2005).
- [58] 野田幸男, 『結晶学と構造物性—入門から応用, 実践まで』 (内田老鶴圃, 2017).
- [59] 中井泉, 泉富士夫編著, 『粉末 X 線回折の実際 第 3 版』 (朝倉書店, 2021).
- [60] C.G. Shull and J.S. Smart, *Phys. Rev.* **76**, 1256 (1949).
- [61] R.M. Nicklow, G. Gilat, H.G. Smith, L.J. Raubenheimer, and M.K. Wilkinson, *Phys. Rev.* **164**, 922 (1967).
- [62] M.T. Hutchings and E.J. Samuelsen, *Phys. Rev. B* **6**, 3447 (1972).
- [63] 一宮彪彦, 我が国における反射高速電子回折の発展と全反射陽電子回折への展開, *日本物理学会誌* **70**, 683 (2015).
- [64] G. グロツ, G.P. パラビチニ (安食博志訳), 『固体物理学 (中)』 (吉岡書店, 2004).
- [65] D. Brust, J.C. Phillips, and F. Bassani, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 94 (1962).
- [66] T.C. Chiang, J.A. Knapp, M. Aono, and D.E. Eastman, *Phys. Rev. B* **21**, 3513 (1980).
- [67] Study on the high spectral intensity at the Dirac energy of single-layer graphene on an SiC substrate, J. Hwang and C. Hwang, *New J. Phys.* **18**, 043005 (2016). DOI: 10.1088/1367-2630/18/4/043005.
- [68] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.* **6**, 57 (1961).
- [69] A.M. ザゴスキ (樺沢宇紀訳), 『ザゴスキ 多体系の量子論 新装版』 (丸善プラネット, 2012).
- [70] Y. Nakanishi-Ohno, M. Haze, Y. Yoshida, K. Hukushima, Y. Hasegawa, and M. Okada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 093702 (2016).
- [71] A.H. Compton, *Phys. Rev.* **6**, 377 (1915).
- [72] W.H. Lien and N.E. Phillips, *Phys. Rev.* **118**, 958 (1960).
- [73] K. Andres, J.E. Graebner, and H.R. Ott, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1779 (1975).
- [74] H. Ikeda, I. Hatta, and M. Tanaka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **40**, 334 (1976).
- [75] 金道浩一, 極限環境物理の新展開, *日本物理学会誌* **74**, 374 (2019).
- [76] D. Nakamura, A. Ikeda, H. Sawabe, Y.H. Matsuda, and S. Takeyama, *Rev. Sci. Instrum.* **89**, 095106 (2018).
- [77] A. Miyata, H. Ueda, Y. Ueda, H. Sawabe, and S. Takeyama, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 207203 (2011).
- [78] L. Dubrovinsky, et al., *Nature* **525**, 226 (2015).
- [79] T. Yamauchi, Y. Ueda, and N. Mōri, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 057002 (2002).
- [80] J.A. Flores-Livas, et al., *Phys. Rep.* **856**, 1 (2020).
- [81] O. Prakash, A. Kumar, A. Thamizhavel, and S. Ramakrishnan, *Science* **355**, 52 (2017).
- [82] A.P. Drozdov, et al., *Nature* **525**, 73 (2015).
- [83] 橋高俊一郎, 超伝導転移温度の推移 (<https://www.phys.chuo-u.ac.jp/labs/kittaka/contents/others/tc-history/index.html>).

# 索引

## 欧字

- ARPES 190
- BCS ハミルトニアン 135
- BCS 理論 130
- CI 法 40
- DFT 105
- DMFT 112
- GGA 111
- GL のコヒーレンス長 162
- GL 方程式 160
- GL 理論 157
- GW 近似 112
- HRTEM 175
- LCAO 法 34, 47
- LDA 110
- LDA +  $U$  法 112
- LSDA 111
- $\pi$  結合 38
- RPA 97
- SIC 112
- $\sigma$  結合 38
- $sp^2$  混成軌道 38
- $sp^3$  混成軌道 44
- STM 192
- TEM 175
- X 線回折実験 168
- X 線非弾性散乱実験 170

## ア

- イオン結合 42, 120
- イオン半径 42, 121
- 一次相転移 196

- 一般化勾配近似 111
- ウィックの定理 22
- 渦糸 165
- エネルギーギャップ 47

## カ

- 角度依存光電子分光 190
- 間接遷移 181
- 擬ポテンシャル 32, 75
- 逆格子ベクトル 54
- ギャップ方程式 140
- 強束縛模型 47
- 共有結合 36, 43
- 強誘電体 126
- 局所スピン密度近似 111
- 局所密度近似 110
- 巨視的波動関数 159
- ギンツブルグ-ランダウ方程式 160
- ギンツブルグ-ランダウ理論 157
- 空格子近似 58, 114
- クーパー対 131
- クーブマンズの定理 30
- グラフェン 62
- クラマース-クローニッヒの関係式 178
- 蛍光 182
- 結合性軌道 35
- 結晶場 49
- 原子軌道 18, 25
- 原子単位系 24
- 原子・分子 18, 24
- 高圧力 199
- 光学伝導度 176
- 交換相関エネルギー 109
- 交換ホール 79
- 高分解能透過電子顕微鏡 175

コーン-シャム軌道 108  
コーン-シャム方程式 110  
コヒーレンス長 155  
個別励起 90

## サ

磁化 197  
自己相互作用補正 112  
磁性 118  
遮蔽効果 101  
遮蔽長 101  
集団励起 99  
準粒子干渉計測 193  
状態密度 93  
消滅演算子 1  
  
スピン軌道相互作用 62  
スレーター波動関数 28  
  
生成演算子 1  
閃亜鉛鉱型結晶構造 61  
線形応答係数 85  
線形応答理論 82  
  
走査トンネル顕微鏡 192

## タ

第一種超伝導体 164  
帯磁率 197  
第二種超伝導体 164  
第二量子化 1  
ダイヤモンド構造 43  
  
秩序パラメータ 135  
中性子回折実験 173  
中性子非弾性散乱実験 173  
超伝導 129  
超伝導秩序パラメータ 135  
超伝導転移温度 136, 201  
直接遷移 181  
  
低温環境 197  
定常強磁場 198  
デバイ振動数 133  
電子ガス模型 17, 66  
電子ガス模型のエネルギー 72

電子格子相互作用 132  
電子正孔励起 90  
電子線回折 175  
電子相関効果 80

透過型電子顕微鏡 175  
動的平均場理論 112

## ナ

南部形式 137  
二次相転移 196

## ハ

ハートリー-フォック近似 27  
配置間相互作用法 40  
パウリの排他律 29  
場の演算子 1  
パリティ対称性 37  
パルス強磁場 198  
反結合性軌道 35  
反交換関係 2  
バンド 20  
  
比熱 194

フェルミ面 115  
フォトルミネッセンス 182  
フォノン 184  
フォノン分散 171  
複素屈折率 177  
複素誘電率 96, 177  
ブラケット記法 2  
プラズマ振動数 98  
フリーデル振動 103  
ブリルアンゾーン 51, 55  
ブロッホ関数 20  
ブロッホの定理 19  
ブロッホ波数 20  
分極関数 96  
分子軌道 18, 34  
フントの規則 32  
  
平均場近似 135  
  
ホーヘンベルク-コーンの定理 106

ボゴリユーポフ変換 137

## マ

マーデルングエネルギー 122

マーデルング定数 122

マイスナー効果 130

密度汎関数理論 105

## ヤ

ヤナックの定理 111

誘電関数 96

## ラ

ラマン散乱 188

乱雑位相近似 97

臨界磁場 161

リンドハード関数 88

ロンドン侵入長 154

ロンドン方程式 152

著者略歴

加藤 岳生

かとう たけお

- 1971年 静岡県生まれ  
1990年 静岡県立清水東高校卒業  
1994年 東京大学理学部物理学科卒業  
1999年 東京大学大学院理学系研究科博士課程(物理学専攻)修了  
博士(理学)  
1999年 学術振興会特別研究員 PD  
2000年 大阪市立大学工学部応用物理学科講師  
2004年 東京大学物性研究所准教授

専門 物性理論 (メゾスコピック系, スピントロニクス)

主要著書

- 「ゼロから学ぶ統計力学」(講談社サイエンティフィク, 2013)  
「電磁気学入門」(物理学レクチャーコース)(裳華房, 2022)

SGC ライブラリ-173

一歩進んだ理解を目指す

物性物理学講義 (電子版)

2024年9月25日 © 初版発行

この電子書籍は2022年3月10日初版第2刷発行の  
同タイトルを底本としています。

著者 加藤 岳生 発行者 森平敏孝

発行所 株式会社サイエンス社

〒151-0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷1丁目3番25号

営業 ☎ (03) 5474-8500 (代) 振替 00170-7-2387

編集 ☎ (03) 5474-8600 (代)

FAX ☎ (03) 5474-8900

組版 プレイン

《検印省略》

サイエンス社のホームページのご案内

<https://www.saiensu.co.jp>

ご意見・ご要望は

sk@saiensu.co.jp まで

本書の内容を無断で複写複製することは、著者および  
出版者の権利を侵害することがありますので、その場合  
にはあらかじめ小社あて許諾をお求め下さい。

ISBN978-4-7819-9022-4