

금속에 있어서 전자-음향자
상호작용에 관한 연구

Investigation of the Electron-phonon
Interaction in Metals.

*김 성 규 (Kim Soung Gyu)

**김 예 현 (Kim Ye Hyun)

ABSTRACT

In this paper, the interaction of electron and phonon in metals is expressed using Hamiltonian operator as follows.

$$H_I = \sum_{\kappa q} g_{\kappa q} (a_{-q}^\dagger + a_q) C_{\kappa+q,\sigma}^\dagger C_{\kappa,\sigma}$$

By exchanging phonon energy $\hbar\omega_q$ with $\pm\hbar\omega_q$ in the vicinity of isotropic Fermi surface and using following electron and hole operators.

$$\begin{aligned} C_i^\dagger &= C_i^\dagger \text{ (creates electron)} \\ C_i &= C_i \text{ (destroys electron)} \quad \text{for } \epsilon_i > \epsilon_F \\ C_i^\dagger &= b_j \text{ (destroys hole)} \\ C_j &= b_j^\dagger \text{ (creates hole)} \quad \text{for } \epsilon_i \leq \epsilon_F \end{aligned}$$

We obtain the interaction of electron and phonon.

$$\begin{aligned} H_I &= \sum_{\sigma\kappa q} g_{\kappa q} (a_{-q}^\dagger + a_q) - \sum_{\sigma'\kappa q} g_{\kappa q} \\ & (a_{-q}^\dagger + a_q) b_{\kappa,\sigma'}^\dagger b_{\kappa+q,\sigma'} + \sum_{\sigma\kappa q} g_{\kappa q} \\ & (a_{-q}^\dagger + a_q) C_{\kappa+q,\sigma}^\dagger C_{\kappa,\sigma} \end{aligned}$$

And new Feynman Graphs are tried

*영남대학교 이과대학 물리학과 강사
**영남대학교 이과대학 물리학과 교수

with the following conditions on H_I .

First, when b_i state transfer C_j state, phonon cannot be created.

Second, when C_i state transfer b_j state, phonon cannot be destroyed.

Third, when C_i state transfer C_j state, phonon can be created or destroyed.

Fourth, when b_i state transfer b_j state, phonon can be created or destroyed.

1. Introduction

electron과 phonon에 대한 interaction 문제¹⁾에 대하여 Bardeen²⁾ Pines³⁾은 Fermi level 근방에 있는 전자들 사이의 가상적인 phonon에 의한 인력적 상호작용이 존재함을 밝혀내었다. 그 후 Fröhlich⁴⁾가 이론에 대한 보다 분명한 수학적 형식화를 시도했으며, Sham과 Ziman(1963) Joshi와 Rajagopal(1968)등에 의하여 이분야 확장 정립되었다.

본 논문에서 다루고 있는 것은 Hamiltonian operator을 사용하여 전자와 phonon 사이의 상호작용을 구하였으며, phonon energy $\hbar\omega_q$ 가 등방성인 Fermi면 부근에서 $\pm\hbar\omega_q$ 의 교환으로 전자상태들의 상호작용을 취급하는데 있어서, electron과 hole op-

erators⁵⁾을 사용하여 electron-phonon interaction^{6,7)}에 있어서 새로운 Feynman Graphs를 시도하였다.

2. Interaction of Electrons with Acoustic phonon.

다체문제에 대한 Hamiltonian에서, 전자와 이온의 상호작용은 각각의 격자이온의 기여의 합으로 표현된다.

$$H_{el-io} = \sum_{i,\alpha} V(\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha) \dots\dots\dots (1)$$

여기서 \vec{r}_i 는 전자의 위치이며, \vec{R}_α 는 이온의 위치이다. H_{el-io} 는 평형상태에서 이온에 대한 전자의 상호작용과 격자진동에 가인하는 상호작용으로 나눌 수 있다.

$$H_{el-io} = H_{el-io}^0 + H_I \dots\dots\dots (2)$$

여기서 H_I 는 electron-phonon interaction이다.

$$R_\alpha = R_{0\alpha} + \delta R_\alpha \dots\dots\dots (3)$$

이 되며, (3)을 (1)에 代入하면

$$\sum_{i,\alpha} V(\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha) = \sum_{i,\alpha} V(\vec{r}_i - \vec{R}_{0\alpha}) - \sum_{i,\alpha} \delta \vec{R}_\alpha \cdot \nabla V(\vec{r}_i - \vec{R}_{0\alpha}) \dots\dots\dots (4)$$

가 되며, (4)의 오른쪽 첫째항에서

$$H_{el-io}^0 = \sum_{i,\alpha} V(\vec{r}_i - \vec{R}_{0\alpha}) \dots\dots\dots (5)$$

가 되며 전자의 운동에너지와 합하여 제 2 양자화 시키면

$$H_{el-io}^0 = \sum_k \epsilon_k C_k^\dagger C_k \dots\dots\dots (6)$$

이 된다. (4)의 오른쪽 둘째 항에서

$$H_I = - \sum_{i,\alpha} \delta \vec{R}_\alpha \cdot \nabla V(\vec{r}_i - \vec{R}_{0\alpha}) = - \frac{1}{(MN)^{1/2}} \sum_{qj} \vec{\epsilon}_{qj} \cdot \nabla V(\vec{r}_i - \vec{R}_{0\alpha})$$

$$\times Q_{qj} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{0\alpha}} \dots\dots\dots (7)$$

이 된다. 여기서

$$\delta \vec{R}_\alpha = \frac{1}{(MN)^{1/2}} \sum_{qj} Q_{qj} \vec{\epsilon}_{qj} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{0\alpha}} \dots\dots (8)$$

이며, $\vec{\epsilon}_{qj}$ 는 polarization의 단위벡터이다. Q_{qj} 는 second quantized에서 phonon의 creation, destruction operator의 합으로 표현된다.

$$Q_{qj} = \left(\frac{\hbar}{2w_{qj}} \right)^{1/2} (a_{-qj}^\dagger + a_{qj})$$

두개의 Bloch wave 상태, ψ_K 와 $\psi_{K'}$ 사이의 H_I 의 행렬요소를 살펴보면,

$$V_{K'K} = \sum_Q V_Q e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}}$$

이 되며, 행렬요소에 대한 표현은

$$\langle \psi_{K'} | H_I(q) | \psi_K \rangle = \int \frac{d\tau}{(MN)^{1/2}} \times \sum_{Q\alpha} iQ \cdot \vec{\epsilon}_{qj} V_Q e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}_{0\alpha}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_{0\alpha}} \psi_K(\vec{r}) \dots\dots\dots (9)$$

가 된다. 여기서

$$\sum_\alpha e^{i(\vec{Q} - \vec{Q}') \cdot \vec{R}_{0\alpha}} = \sum_{K_n} N \delta_{Q - Q' + K_n} \dots\dots\dots (10)$$

이며, (10)을 (9)에 代入하면

$$\langle \psi_{K'} | H_I(q) | \psi_K \rangle = \sum_{K_n} N \frac{i(\vec{Q} + \vec{K}_n)}{(MN)^{1/2}} \epsilon_{qj} V_{Q+K_n} \times \int d\tau \psi_{K'}^\dagger(\vec{r}) \psi_K(\vec{r}) e^{i(\vec{Q} + \vec{K}_n) \cdot \vec{r}}$$

이 된다. \vec{K}_n 은 reciprocal lattice 벡터이며, 두 부분으로 나누어 생각할 수 있다.

첫째, $\vec{K}_n = 0$ 일때 즉 normal processes인 경우는 $\vec{K}' = \vec{K} + \vec{q}$ 가 되며, 둘째 $\vec{K}_n \approx 0$ 일 때 즉 Vmklapp processes인 경우는 $\vec{K}' = \vec{K} + \vec{q} + \vec{K}_n$ 이 된다. 편리상 $\vec{K}_n = 0$ 라고 가정하면 phonon은 가로축이나 세로축을 따라 이동한다. 그러므로 $\vec{\epsilon}_{qj}$ 는 \vec{q} 에 대

하여 평행이 아니면, 수직이다.

$$H_I = - \sum_{\sigma k q_j} i \left(\frac{N \hbar}{2 M \omega_{q_j}} \right)^{1/2} V_q \hat{\epsilon}_{q_j} \cdot \vec{q} \times \int \varphi_{k+q}^+(\vec{r}) \varphi_k(\vec{r}) d\tau (a_{-q_j}^+ + a_{q_j})$$

$$C_{k+q, \sigma}^+ C_{k, \sigma} \dots \dots \dots (12)$$

$$= \sum_{\sigma k q} q_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) C_{k+q, \sigma}^+ C_{k, \sigma} \quad (13)$$

이 된다. (12)에서 $\hat{\epsilon}_{q_j} \perp \vec{q}$ 이므로 $\hat{\epsilon}_{q_j} \cdot \vec{q} = 0$ 이다. 그러므로 longitudinal acoustic phonon 이 진자의 결합되어 있음을 알 수 있다.

3. Electron and Hole Operators.

금속중에서 전자가 이온핵의 격자에 기인하는 주기적인 field 속에서 움직이고 있다고 가정하면

$$\varphi_k(\vec{r}) = \exp(i \vec{K} \cdot \vec{r}) U_k(\vec{r}) \dots \dots \dots (14)$$

이 된다. 여기서 $U_k(\vec{r})$ 은 격자의 주기를 가지며, wavevector \vec{K} 는 결정구조에 기인한다.

이 경우, 하나의 전자함수는 K-space 에서 일정한 에너지의 표면에 존재하는 기지 상태 ϕ_0 를 의미한다. 이 에너지 표면을 Fermi surface (= ϵ_F)라 하며, ϵ_F 부근에서 phonon energy, $\hbar \omega_q$ 가 진자에 미치는 영향을 고려하여, 전자가 ϵ_F 외부에 존재하는 excited 된 상태와, 전자가 ϵ_F 내부에 존재하는 unexcited 된 상태, 즉 hole로 나누어 생각하면, 전자와 hole에 대한 새로운 creation operator 와 destruction operator 를 정의 할 수 있다.

첫째, $\epsilon_i > \epsilon_F$ 인 경우

$$C_i^+ = C_i^+ \quad (\text{creates electron})$$

$$C_i = C_i \quad (\text{destroys electron})$$

둘째, $\epsilon_j \leq \epsilon_F$ 인 경우

$$C_j^+ = b_j \quad (\text{destroys hole})$$

$$C_j = b_j^+ \quad (\text{creates hole})$$

로 정의 할 수 있으며, 다음의 교환관계가 성립한다

$$\{ C_i^+, C_k \} = \delta_{ik} \quad (15)$$

$$\{ b_j^+, b_l \} = \delta_{jl} \quad (16)$$

이 되며, ϕ_0 상태에 대해서

$$C_i \phi_0 = 0 \quad (17)$$

$$b_j \phi_0 = 0 \quad (18)$$

이 된다. (13)에서

$$H_I = \sum_{\sigma k q} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) C_{k+q, \sigma}^+ C_{k, \sigma}$$

$$= \sum_{\epsilon_d \leq \epsilon_F} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) b_{k+q, \sigma}^+ b_{k, \sigma}^+$$

$$+ \sum_{\epsilon_n > \epsilon_F} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) C_{k+q, \sigma}^+ C_{k, \sigma}$$

$$= \sum_{\sigma k q} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q)$$

$$- \sum_{\sigma k q} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) b_{k, \sigma}^+ b_{k+q, \sigma}^+$$

$$+ \sum_{\sigma k q} g_{kq} (a_{-q}^+ + a_q) C_{k+q, \sigma}^+ C_{k, \sigma}$$

..... (19)

이 된다.

4. Feynman Graphs

photon 과 electron 의 상호작용⁸⁾⁹⁾에서와 같이 수직축을 시간축으로 잡고, 수평축을 공간축으로 잡는다. 다음의 가정하에 Feynman Graph 를 구상하였다. 첫째, b_i 상태에서 C_j 상태로 전이 할 때에는 phonon 이 생성 될 수 없고, 둘째로 C_i 상태에서 b_j 상태로 전이 할 때에는 phonon 이 소멸 될 수 없다. 셋째, C_i 상태에서 C_j 상태로 전이 할

때는 phonon 이 생성, 소멸될 수 있으며, 넷째 b_i 상태에서 b_j 상태로 천이 할 때에도 phonon 이 생성, 소멸될 수 있다.

fig 1) 에서 구체적으로 살펴보면.

i) C_k 상태의 electron 이 C_i 상태가 되면서 phonon 하나를 생성한다.

ii) b_j 상태의 hole 이 b_i 상태가 되면서 phonon 하나를 소멸시킨다.

fig 1') 의 원은 Fermi면을 나타내며, 원 밖은 전자들의 상태이며, 원 안쪽은 hole 의 상태를 나타낸 것이다. fig 1) 과 fig 1') 는 같은 상태를 나타내고 있다.

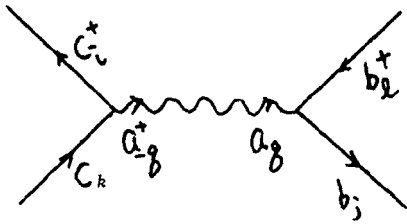


fig 1) $\langle ij|v|kl\rangle a^+ c_i^+ a b_j b_l^+ C_k$

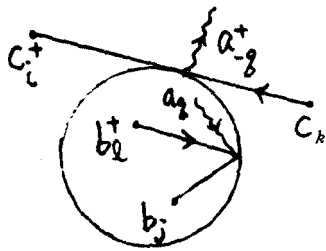


fig 1') $\langle ij|v|kl\rangle a^+ c_i^+ a b_j b_l^+ C_k$

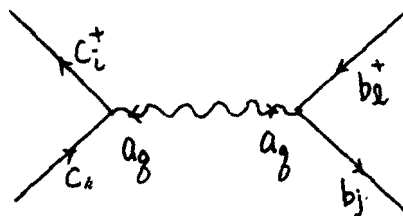


fig 2) $\langle ij|v|kl\rangle a c_i^+ a b_j b_l^+ C_k$

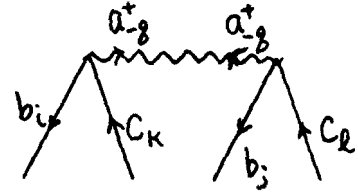


fig 3) $\langle ij|v|kl\rangle a^+ b_i a^+ b_j C_l C_k$

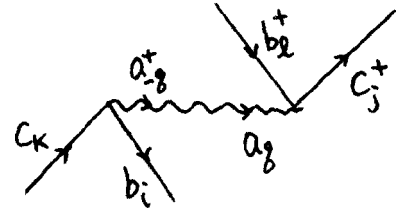


fig 4) $\langle ij|v|kl\rangle a^+ b_i a c_j^+ b_l^+ C_k$

5. Conclusions

등방성인 Fermi¹⁰⁾면 부근에서 phonon energy $\pm \hbar \omega_q$ 의 생성, 소멸에 의한 전자들의 상태변화를 Electron Operator 와 Hole Operator 를 사용하여 photon 와 electron 에 적용된 Feynman 시공도표를 phonon 과 electron 에 적용하여 Feynman 적인 시공도표를 시도하였다

6. Reference

1. Migdal, A. "Interaction Between Electrons and Lattice Vibrations in a Normal Metal". Sov. Phys. JETD, 7, 996 (1958)
2. Bardeen, J. and Pines, D. "Electron-Phonon Interaction in Metals" Phys. Rev. 99, 1140. 4월 (1955)
3. Pines, D and Nozières, P. "Corre-

- lation Energy of a Free Electron Gas”
Phys. Rev. 111, 442 (1958)
4. Haken, H. “ §29. Frohlich’s Hamiltonian Operator”
North-Holland Pub. Co. New York, Oxford. (1976)
5. Raimes, S. “ §7. Feynman Graphs.” North-Holland Pub. Co. New York. (1972)
6. Pines, D. “ §4. Electrons, Plasmons and Photons in Solids.” W.A. Benjamin, INC. New York. (1964)
7. Gallaway, J. “ §7. Electrons and Phonons.” Academic Press, INC. New York. (1974)
8. Mandl, F. “ §14. Feynman Graphs” Interscience Publishers, INC. New York. (1959)
9. Gasiorowicz, S. “ §9. The Feynman Graph Rules”
John Wiley & Sons, INC. New York (1966)
10. Bardeen, J. Cooper, L. N. and Schrieffer, J.R. “ Theory of Superconductivity.” Phy. Rev. 108, 1175 (1957)