

磁気熱電効果とフェルミ統計

宍戸文雄

電気電子工学科

Magneto-thermoelectric Effect and Fermi Statistics

SHISHIDO Fumio

Abstract

The response to an impulse electric field is analyzed in order to investigate the heat flow in an electric field and a magnetic field perpendicular to it. The relations of the Fermi statistics with the excited state by an impulse electric field and with the relaxation process are investigated. It is clarified that both are expressed by the strongly modified wave functions at the Fermi level together by the Fermi sphere under it. This state nearly corresponds to the semi-classical theory where the individual electron gains or loses momentum and energy. The heat flow is caused by the energy moment of the strongly modified wave function. It is again confirmed that if the relaxation is forbidden for cooling process the relaxation for heating process on the other edge is also forbidden owing to Fermi statistics.

Key Words: Response to an impulse electric field, Validity of semi-classical theory and Fermi statistics, Heat flow caused by the modified wave functions.

1. 序

Landau 反磁性に現れる界面電流が何らかの条件で巨大になることがあるのかの問題は未だに解明されていない。その重要性の一つは界面電流が大きな熱電効果を生ずることが予想されるからである[1-8]。しかしその定量的議論に量子力学を適用することは難しい。それは次の理由による。熱電効果とは電界で加速又は減速された電子が緩和により熱平衡に戻る過程の現象である。加速された電子が戻る過程は伝導率の計算と同じ取り扱いを適用でき半古典論も有効である。しかし減速された電子が戻る過程の扱いが難しい。半古典論でも量子論でも局所的エネルギーの和が全エネルギーであるという命題は成立する。ところが半古典論では局所的エネルギーの最低状態は電流が0のときである。勿論これは全エネルギーの最低状態ではない。全エネルギーの最低状態では界面電流が現れる。即ち遠方の電流との相関エネルギーを考慮しなければ問題を正しく扱えないのである。古典論では磁性は現れず量子論でのみ現れるという命題の一例である。

この困難を克服する方法が筆者によって示された[8]。すなわち静電場ではなくインパルス電場を印加直後の厳密解の緩和を調べることにより問題が明確に整理される。インパルス電場印加直後の厳密解を初期条件とした、もはや静電場が無いときの緩和だけを解けばよい。その結果、減速された電子の戻る過程が禁止されているときはその他端で加速された電子の戻る過程まで禁止される、フェルミ統計のためである。という重要な結論が得られた。

この論文ではインパルス電場印加直後の厳密解とフェルミ統計の関係、その後の緩和過程とフェルミ統計の関係、さらに緩和過程で生じる熱流を論ずる。全ての過程がフェルミ準位での波

動関数の歪みで記述されることを示す。減速された電子の戻る過程が禁止されているときはその他端で加速された電子が戻る過程まで禁止されることを再確認する。

2. 波動関数

ベクトルポテンシャルを $A=(0, Hx, 0)$ とすると、電場が無いときのハミルトニアン H は次の形になる。 z 方向は省略する。

$$H = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{eH}{c} x \right)^2 \quad (1)$$

y 方向には周期的境界条件を仮定すると、この固有解は[6-9]

$$\Phi(x, y) = \exp(iPy/\hbar) u_n [x + (P/m\omega)] \quad (2)$$

ここで $u_n(x)$ は調和振動子の固有解、 P は y 方向の運動量、 ω はサイクロトロン各周波数を表わす。

さて x 方向に電場を印加すると (1) に $-m\alpha x$ が加わる。その厳密解は簡単に求まり、

$$\Phi(x, y) = \exp(iPy/\hbar) u_n [x + (P - m\alpha/\omega)/m\omega]$$

すなわち $u_n(x)$ の形を変えず中心が α/ω^2 ずれたものである。これは y 方向への速度 α/ω の流れを意味し古典論に一致する。

ここまでは容易であるがこれに緩和を加えると難しい。緩和には何らかの近似が必要である。磁場と電場の両者が存在するときその近似が基本法則に矛盾しないのかどうかの判定が難しい。さらに数学的取り扱いの問題であるが、(1) は y 方向の速度を x の関数として調べるには有効であるが x 方向の速度を y の関数として調べるには適しない。ところが電場が x 方向のとき我々の興味は y 方向の上下端での発熱吸熱である。上下端ではなく左右端での発熱吸熱を調べるために y 方向に静電場を印加すると y 方向の周期的境界条件を満足しない。

そこで次の工夫をする。静電場を印加せず代わりにデルタ関数のインパルス電場を印加する。十分時間が経過した後は線形応答の直流成分だけが残る。この取り扱いの有利な側面が二つある。一つはデルタ関数のインパルス電場を印加した直後の状態は厳密解が得られること。二つ目はその厳密解が緩和によりどう推移するかを調べるときは、もはや電場は無いときの緩和の効果だけを調べればよいということである。以下この計算を進める。

y 方向にデルタ関数のインパルス電場を印加する。これは y 方向の周期的境界条件と矛盾しない。何故ならば y 方向の静電場は y の一次式のポテンシャルで表されこれは周期的境界条件と矛盾するが、デルタ関数のインパルス電場は空間的に定数であり時間的に変動するベクトルポテンシャルで表され、これは周期的境界条件を満足する。デルタ関数のインパルス電場 $[m\alpha/(-e)]\tau\delta(t)$ を印加する。ここで τ は微少時間を意味する。すると全ての電子について運動量が厳密に $m\alpha\tau$ だけ増える。従って $t < 0$ では (2) で表された状態が $t = +0$ では

$$\Phi(x, y) = \exp[i(P + m\alpha\tau)y/\hbar] u_n [x + (P + m\alpha\tau)/m\omega - (\alpha/\omega)\tau] \quad (3)$$

となる。これは厳密である。 $t < 0$ における (2) と $t = +0$ における (3) を比較すると両者の振幅はいたるところで同じであり y 方向の位相だけが異なる。 $t < 0$ では軌道中心が $x = -(P/m\omega)$ で n 番目のエネルギー準位の固有状態であった。 $t = +0$ では軌道中心が $x = -(P/m\omega) - (\alpha/\omega)\tau$ にずれ幾つかの異なるエネルギー準位の状態の重ね合わせとなる。その重ね合わせは $t = +0$ では固有状態と同じ形でその中心は軌道中心よりも $(\alpha/\omega)\tau$ ずれている。

励起状態 (3) のエネルギー分布の左右の歪みを調べる。(1) の右辺の第一項は左右対称で

H_y の期待値をエネルギーモーメントと定義するとそれと磁気モーメントとの関係は、 $\alpha \tau$ の一次までについて

$$\text{エネルギーモーメント} = (\alpha \tau) (m/e) \times \text{磁気モーメント} \quad (4)$$

3. フェルミ統計と半古典論の対応

次に (3) の励起状態とフェルミ統計との関係を考察する。

先ず (2) の基底状態を軌道中心の位置ごとに分類すると、

軌道中心が $x = -\delta$ のもの ($\varepsilon / \delta = m\omega$ として)

$$\exp(-i\varepsilon y)u_0(x+\delta), \exp(-i\varepsilon y)u_1(x+\delta), \exp(-i\varepsilon y)u_2(x+\delta), \dots, \exp(-i\varepsilon y)u_N(x+\delta)$$

軌道中心が $x=0$ のもの、

$$u_0(x), u_1(x), u_2(x), \dots, u_N(x) \quad (5)$$

すなわち y 方向の波数の増加が ε のときの軌道中心のずれを δ で表わす。最低状態 u_0 からフェルミ準位 u_N まで占有されている。緩和を論ずるには当然有限温度を扱わなくてはならないが、フェルミ統計との関係を調べるときは絶対零度の状態を論ずるだけで本質はつくされるので絶対零度の状態を扱う。

基底状態が励起されて y 方向の波数が ε 増加したとき、

軌道中心が $x = -\delta$ のもの、

$$u_0(x+\delta), u_1(x+\delta), u_2(x+\delta), \dots, u_N(x+\delta) \quad (6)$$

軌道中心が $x=0$ のもの、

$$\exp(+i\varepsilon y)u_0(x), \exp(+i\varepsilon y)u_1(x), \exp(+i\varepsilon y)u_2(x), \dots, \exp(+i\varepsilon y)u_N(x)$$

基底状態と励起状態では各波動関数は異なっている。他方フェルミ統計ではフェルミ球の底は変化しないはずである。一見すると矛盾のようにも見えるが、実は整合していることを以下に説明する。

軌道中心が $x = -\delta$ の励起状態 (6) を基底状態 (5) で展開する。 δ の一次までをとる。

$$u_n(x+\delta) = u_n(x) + \delta C[(\sqrt{n})u_{n-1}(x) - (\sqrt{n+1})u_{n+1}(x)] \quad (7)$$

と展開する。ここで C は n によらない定数である。 $u_0(x+\delta)$ から $u_N(x+\delta)$ までを組み合わせたスレーター一行列を作る。すると (7) の右辺の第二項は最高の $u_N(x+\delta)$ を残して消えてしまう。

$u_0(x), u_1(x), u_2(x), \dots, u_{N-1}(x), u_N(x) - \delta C(\sqrt{N+1})u_{N+1}(x)$, を組み合わせたスレーター一行列となる。

(7) は各波動関数の重心が $x = -\delta$ にあり、各励起エネルギーは $D\delta^2$ (D は n によらない定数) である。ところが $u_N(x+\delta)$ を展開した (7) から $u_{N-1}(x-\delta)$ の項が消えた式、すなわち

$$u_N(x) - \delta C(\sqrt{N+1})u_{N+1}(x) \quad (8)$$

の重心は $x = -(N+1)\delta$ であり、その励起エネルギーは $(N+1)D\delta^2$ である。

結論は、(6) で表される励起状態、すなわち底からフェルミ準位までの $(N+1)$ 個が各々 δ 程度励起された状態とは (5) の基底状態でフェルミ準位のすぐ下まで変化せず、フェルミ準位だけが $(\sqrt{N+1})\delta$ 程度励起された状態におきかえられる。即ち (6) の各重心が $x = -\delta$ 、各励起エネルギーが $D\delta^2$ である $(N+1)$ 個の電子は (5) の基底状態における N 個の電子と、重心 $x = -(N+1)\delta$ 、励起エネルギー $(N+1)D\delta^2$ である 1 個のフェルミ準位における電子におきかえられる。

その 1 個のフェルミ準位における励起電子の重心は $x = \pm(N+1)\delta$ 間を振動し、エネルギー $(N+1)D\delta^2$ を失い基底状態に落ちると重心は $x=0$ となる。このことは (6) の $x = -\delta$ を軌道中心とする $(N+1)$ 個の電子が軌道中心を $x=0$ までずれることに対応し、半古典論に一致する。これは緩和時間が $1/\omega$ よりも大きい、すなわち遅い緩和に対応する。

では緩和時間が $1/\omega$ よりも小さな、すなわち速い緩和の場合はどう考えればよいかを次に論ずる。重心が $x = -(N+1)\delta$ 、励起エネルギーが $(N+1)D\delta^2$ であるフェルミ準位がフォノンに 1 個の励起運動 $(N+1)$ 倍の運動量を与えて、基底状態における波動関数

$$\exp(-i(N+1)\varepsilon y)u_N(x+(N+1)\delta) \quad (9)$$

に遷移する過程を考える。(8) と (9) とは波動関数の重心が一致する。従って相互作用が強い

ときにはその遷移は急速に起こりうる。そのことを前述した(8)が運動量を変えずに緩和する場合と比較する。前者は位置の期待値が変化せず運動量だけを瞬間的に変化させるだけで遷移が完了する。後者は位置の期待値が変化する遷移であるから瞬間的に完了することはない。以上の議論から半古典論とフェルミ統計との対応をまとめると、

遅い緩和では

半古典論

初期状態 $x=-\delta$ に $(N+1)$ 個、各励起エネルギー $D\delta^2$

終状態 $x=0$ に $(N+1)$ 個

フェルミ統計

初期状態 $x=0$ に N 個、フェルミ準位に、重心 $-x=(N+1)\delta$ 励起エネルギー $(N+1)D\delta^2$ のもの 1 個

終状態 $x=0$ に $(N+1)$ 個

速い緩和では

半古典論

初期状態 $x=-\delta$ に $(N+1)$ 個、各励起エネルギー $D\delta^2$

終状態 $x=-\delta$ に $(N+1)$ 個

フェルミ統計

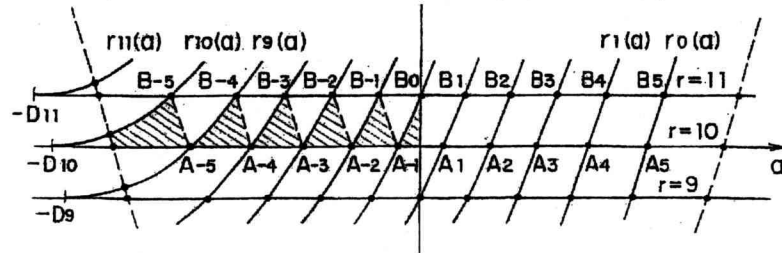
初期状態 $x=0$ に N 個、フェルミ準位に、重心 $x=-(N+1)\delta$ 励起エネルギー $(N+1)D\delta^2$ のもの 1 個

終状態 $x=0$ に N 個 フェルミ準位では、 $x=-(N+1)\delta$ に 1 個

全重心と全エネルギーでは整合するが左右端の電子の分布に整合するかは、この後論ずる端の電子状態とともに調べる。

4. 端の状態

ここまでは界面から遠い完全軌道（半古典論の円軌道）についての議論であったが、軌道が界面に近づくどう変わるかを整理する。図に量子数が一定で軌道中心が界面に接近するときエネルギーが上昇する様子をしめす。量子数 0 でエネルギーがフェルミ準位に等しい電子が最右端にある。



(5) に対応して、基底状態は

軌道中心が $x=-\delta$ のもの、

$$\exp(-i\varepsilon y)g_0(x), \exp(-i\varepsilon y)g_1(x), \exp(-i\varepsilon y)g_2(x), \dots, \exp(-i\varepsilon y)g_M(x)$$

軌道中心が $x=0$ のもの、

$$f_0(x), f_1(x), f_2(x), \dots, f_M(x) \quad (10)$$

M は N よりも小さな数である。右端では $M=0$ である。 $f_n(x)$ と $f_{n+1}(x)$ とのエネルギー差は $\hbar\omega$ よりも大きい。 $f_n(x)$ と $g_n(x)$ とはもはや平行移動の関係ではなく異なる形を持つ。

基底状態が励起されて y 方向の波数が ε 増加したとき、

軌道中心が $x=-\delta$ のもの、

$$g_0(x), g_1(x), \dots, g_2(x), \dots, g_M(x) \quad (11)$$

軌道中心が $x=0$ のもの、

$$\exp(+i\varepsilon y)f_0(x), \exp(+i\varepsilon y)f_1(x), \exp(+i\varepsilon y)f_2(x), \dots, \exp(+i\varepsilon y)f_M(x)$$

(11)を基底状態で展開すると、(7)に対応して、

$$g_n(x) = f_n(x) + \delta \sum C_{nj} f_j(x) \quad (12)$$

これを組み合わせたスレーター行列を作ると右辺の第二項は最高の $g_M(x)$ を残して消えてしまうということは同じである。大きな違いは $g_n(x)$ と $f_n(x)$ とのエネルギーは δ の一次に比例して異なることである。 $f_n(x)$ の軌道中心は $x=0$ であるが、その重心は $x=0$ と全く異なる。 $f_n(x)$ と $g_n(x)$ との重心の差は δ よりもはるかに小さい。スレーター行列を作ると最高の $g_M(x)$ は大きく歪んだ形になり、その重心を加えた平均は $x=-\delta$ である。そのエネルギーと $f_n(x)$ のエネルギーとの和は $g_n(x)$ のエネルギーの期待値の和に等しい。

基底状態が励起されて y 方向の波数が ε 増加したとき、軌道中心は一斉に δ 並進する。右端の近傍ではエネルギーが増加する。増加量は δ に比例する。図の曲線を見ると右端の近傍ではフェルミ球の上に電子が加わるかのように見えるがそれは正しくない。最右端にはフェルミ準位の下に1個だけの電子が存在する。それを $g_0(x)$ と書く。その軌道中心を $x=0$ と定める。軌道中心 $x=\delta$ には $f_0(x)$ がありフェルミ準位の上である。 $g_0(x)$ が励起されるそのエネルギーは $f_0(x)$ のものにほぼ等しい。実は δ の一次では厳密に等しいことが判っている。しかし重心は $f_0(x)$ ではなく $g_0(x)$ に一致する。励起されたものは $f_0(x)$ に $f_n(x)$ の項が加わり大きく歪んでいる。最右端の少し左にはフェルミ準位の下に2個の電子が存在する。 $g_1(x)$ が励起されてその隣の $f_1(x)$ と同じエネルギーを得る。しかしそれは大きく歪み重心は $g_1(x)$ よりもさらに左にある。 $g_1(x)$ の下にある $g_0(x)$ の重心が右に動いた分を補償するだけ $g_1(x)$ の重心は左にある。結局界面近傍での電子密度は励起の前後で全く変化しない。半古典論では当然の結果である。何故ならば(3)の波動関数と(4)とは同じ形で位相が異なるだけであるから。しかしフェルミ球の概念ではその説明が分かりにくい。フェルミ球の内部での固有状態の占有とフェルミ準位での歪んだ波動関数でこのことが把握できた。

上記は主として y 方向の運動量に着目した記述である。波動関数の重心に着目すれば次のようにも記述できそうに見える。「上から2番目以下の状態は基底状態と励起状態とで同じである。最高位の状態は重心を変えず、 y 方向の波数を $(M+1)\varepsilon$ 変化させて大きく歪む。」この記述はフェルミ準位の下の方が右端の1から2、 \dots , N と不連続に変化する境界の前後 $N\delta$ の幅では正しくない。最上位の準位と2番目の準位が干渉する。しかしそれは δ の二次の効果である。従って δ の一次に関しては、この単純な描像は正しい。次に緩和を論ずる。

5. 緩和

遅い緩和ではフェルミ準位での歪んだ波動関数が振動する。右端の近傍では電子数が増加する。これを調べるためには x 方向に生ずる電界の反作用を考慮しなければならない。しかし熱電気効果に対して重要なのは次に論ずる速い緩和であるから、遅い緩和はこれ以上論じない。

速い緩和ではフェルミ準位での歪んだ波動関数が運動量を失う。そして重心を変えずにエネルギーを失い固有関数となる。電子系は基底状態に戻る。基底状態からインパルス電場で瞬間的に励起されその後速い緩和で瞬間的に緩和する。その過程で電荷密度の分布は変化しない。運動量とエネルギーは変化する。フェルミ準位近傍よりも深いところは変化しない。フェルミ準位では電荷密度の分布は変化しないのであるが、励起後の波動関数は大きく歪み固有関数と異なる。

電子系からフォノン系への熱流の授受を調べるため、(8)のエネルギーモーメントを計算する。(2)は x 方向の対称性を保持していたので、エネルギー(1)の右辺の第二項だけを考慮すればよくこれは x と交換した。ところが(8)は対称性を失っているので第一項も考慮しなくてはならない。これは x と交換しないので xH と Hx との期待値は一般的には異なり、両者の和は実数、差は純虚数である。然るに(8)は x 方向に関しては位相変化が無いので xH と Hx との期待値は共に実数であるから両者は一致する。その結果、

$$\langle x H \rangle = \langle H x \rangle \propto \delta C (N+1)^2 \quad (13)$$

$(N+1)^2$ の因子はフェルミ球内の磁気モーメント $1/2$ から $(N+1/2)$ の和に対応する。結局歪んだ波動関数のエネルギーモーメントは全磁気モーメントに $(\alpha \tau) (m/e)$ の因子を掛けた値になるという

(4) が成立し、半古典論に一致する。従って界面近傍の常磁性モーメントと界面から離れた反磁性モーメントとの和であるランダウ反磁性に $(\alpha \tau) (m/e)$ の因子をかけたエネルギーモーメントに相当するエネルギーが両端に現れる。遅い緩和ではそのエネルギーモーメントが電子系内部で減少してしまうためフォノン系への熱流に寄与しない。速い緩和では電子系のエネルギーモーメントがフォノン系のエネルギーモーメントに変換されてそれが熱流となる。

さて低温でフォノン系は基底状態に近く、右側ではフォノンを放出できるが左側ではフォノン吸収できない条件を想定しよう。左側ではフェルミ準位の波動関数の歪みはとれず励起運動量を失わないということである。この条件で右側が緩和して運動量を失うとどうなるか。ある運動量については占有数が1を超えてしまう。フェルミ統計を満足するためにはフェルミ準位とその上の準位を占有しなくてはならない。左右一様の物性を仮定すると矛盾する。一様の仮定を除くとありえる。しかし一様の仮定を除くということは異なる物質を重ねることと等価であるから左と右が無関係なのは当然である。左右一様の仮定をすると左で緩和が禁止されて右で緩和が生ずることは有り得ない。従って減速された電子の戻る過程が禁止されているときはその他端で加速された電子が戻る過程まで禁止されることが再確認された[9-11]。

5. 結論

磁場内での電場に対する熱流の応答を調べるため静電場ではなくインパルス電場に対する応答を解析することは半古典論とフェルミ統計の関係を調べるためにも有用であることが示された。

緩和前の基底状態と緩和後の基底状態を比べると、フェルミ準位近傍よりも深いところは軌道中心が δ 右に並進する。フェルミ準位では大きく左に動いて補償する。このことは常識的な結果であるが一見分かり難く興味深いのは励起状態ではフェルミ準位の波動関数が大きく歪んでいるということである。運動量を得てフェルミ準位近傍よりも深いところから電子が上昇してくるのであるが電子密度は変化しないそしてエネルギーは上昇する。この半古典論では理解し難い状態が歪んだ波動関数により実現されている。減速された電子の戻る過程が禁止されているときはその他端で加速された電子が戻る過程まで禁止されることが再確認された。この場合左右一様の物性という当然の仮定が前提となる。

References

- [1] M.Calvo, J.Phys.C **19**(1986)7253.
- [2] Azbel, M.Y.: Phys.Rev.Lett. **82**, 2, (1999)422.
- [3] M.Steinberg, W.Ebeling and J.Ortner: Phys.Rev.
- [4] U.Sivan and Y.Imry, Phys.Rev.Lett. **61** (1988)1001.
- [5] V.A.Grazhulis, Solid.State.Comm. **79** (1991)917.
- [6] Shishido, F.: Phys.Lett.A **152**, (1991)443.
- [7] Shishido, F.: Phys.Lett.A **152**, (1991)427
- [8] Shishido, F.: Research Report of Ka.I.T No.B-29(2005)19
- [9] Nedorezov, S.S.: JETP **37**, (1973)317.
- [10] Nedorezov, S.S.: JETP LETT **33**, (1981)215.
- [11] D.Bohm: Phys.Rev. **75** (1949)502