フェルミ面での励起と対角和

宍戸文雄
電気電子工学科

Relation of diagonal sum to Fermi surface

SHISHIDO Fumio

Abstract

The relation of the excitation on the Fermi surface in quantum theory to the excitation of many individual electrons in semi-classical picture is clarified by the invariance of diagonal sum by unitary transformation. The proof is given that the effect of small perturbations on many electrons is equivalent to strong modification of a few electrons on the Fermi surface, so long as the perturbing operator is unitary. The problem of cooling process in thermoelectric effect under a magnetic field, which is difficult to treat in conventional method, is clarified by this correspondence.

Key Words: Fermi surface, Semi-classical picture, Invariance of diagonal sum.

１．序

Landau 反磁性界面電流による熱電効果の量子論において、半古典論と量子論がどう対応しているのかの理解が難しく、そのため量子論の適用の妥当性の評価が難しい。この問題は僅かの近似が誤った結果をもたらすことが多いことが分かっているので、量子論の適用の妥当性の評価には半古典論との対応が重要である[1-7]。それを克服するために、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ことが筆者により示された。インパルス電場を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[8,9]。

その結果、半古典論においてはＮ個の電子の各々が小さな摂動を受けることに対応して、量子論においてもＮ個の電子の各々が小さな摂動を受けると考えてもよいが、それはフェルミ面の電子だけが大きく歪んでフェルミ球内部の電子は全く摂動を受けないということと等価であることが示された。それはスレーター行列の計算で導かれたのであったが、このことは一般的に成立することを示す。それはユニタリー変換により対角和は不変であるという基本的な法則から導かれる。

摂動の効果がユニタリー変換でない場合は半古典論と量子論が対応しなくなる。輸送現象では、外場の効果はユニタリー変換であり半古典論と量子論はよく対応し、フォノン系への緩和はユニタリー変換ではなく、半古典論と量子論は大きく異なるという違いを統一的に理解できる結論を導く。

２．簡単な例示

摂動前の波動関数を

$$u_0,\ u_1, u_2,\qquad u_N \tag{1}$$

摂動後の波動関数を

$$v_0,\ v_1, v_2,\qquad v_N \tag{2}$$

と表す。インパルス電場による摂動演算子は $\exp(-iHt)$, $(H\to\infty,\ t\to 0,\ )$ で表されるので、これはユニタリー変換である。

物理量 X の摂動前の観測値は

$$\langle u_0 1X1 u_0\rangle+\langle u_1 1X1 u_1\rangle+\quad +\langle u_{n-1}1X1u_{n-1}\rangle+\langle u_N 1X1 u_N\rangle \tag{3}$$

これは $u_0, u_1,\quad u_N$ が張るベクトル空間における X の対角和である。

物理量 X の摂動後の観測値は

$$\langle v_0 1X1 v_0\rangle+\langle v_1 1X1 v_1\rangle+\quad +\langle v_{n-1}1X1v_{n-1}\rangle+\langle v_N 1X1 v_N\rangle \tag{4}$$

簡単な例として摂動項は隣り合う準位間だけで有限、X の行列要素も隣り合う準位間だけで有限の場合を考えよう。

$$v_n= u_n+\delta\,[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}] \tag{5}$$

次の二つの波動関数を考える。

$$w_n=u_n(x)+\delta\,[A_n u_{n-1}]\qquad W_n=u_n(x)+\delta\,[B_n u_{n+1}]$$

$v_0,\ v_1,\quad v_{n-1}, v_N$ の代わりに $v_0,\ v_1,\quad v_{n-1}, w_N$ を考えよう。後者は $u_0, u_1,\quad u_N$ が張るベクトル空間に含まれ一次独立である。そして δ の一次までは互いに直交する。従って、それは δ の一次までは $u_0, u_1,\quad u_N$ のユニタリー変換されたものである。従って、

$$\langle v_0 1X1 v_0\rangle+\langle v_1 1X1 v_1\rangle+\qquad +\langle v_{n-1}1X1v_{n-1}\rangle+\langle w_N 1X1 w_N\rangle$$
$$=\langle u_0 1X1 u_0\rangle+\langle u_1 1X1 u_1\rangle+\qquad +\langle u_{n-1}1X1u_{n-1}\rangle+\langle u_N 1X1 u_N\rangle \tag{6}$$

何故ならばユニタリー変換により対角和は不変であるから。従って摂動による観測値の変化は、

$$\langle v_0 1X1 v_0\rangle+\langle v_1 1X1 v_1\rangle+\qquad +\langle v_{n-1}1X1v_{n-1}\rangle+\langle v_N 1X1 v_N\rangle$$
$$-\{\langle u_0 1X1 u_0\rangle+\langle u_1 1X1 u_1\rangle+\qquad +\langle u_{n-1}1X1u_{n-1}\rangle+\langle u_N 1X1 u_N\rangle\}$$
$$=\langle v_N 1X1 v_N\rangle-\langle w_N 1X1 w_N\rangle$$
$$=\langle u_n+\delta\,[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]\,1X1\,u_n+\delta\,[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]\rangle-\langle u_n(x)+\delta\,[A_n u_{n-1}]\,1X1\,u_n(x)+\delta\,[A_n u_{n-1}]\rangle$$
$$=\delta\,\{B_n\langle u_n 1X1 u_{n+1}\rangle+\ B_n^*\langle u_{n+1}1X1u_n\rangle\} \tag{7}$$

この結果はフェルミ球 $u_0, u_1,\quad u_{n-1}$ の上に $W_n= u_n+\delta\,[B_n u_{n+1}]$ が現われたことと等価である。

波動関数 $v_n=u_n+\delta\,[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]$ は u_n が小さな摂動を受けたものである。それに対して $w_n=u_n(x)+\delta\,[A_n u_{n-1}]$ は大きく歪んでいる。それは $v_0,\ v_1,\quad v_{n-1}$ の (N-1) 個への摂動を殆ど打ち消すほど大きいことが(6)から分かる。$W_n=u_n+\delta\,[B_n u_{n+1}]$ も w_n の大きな歪みを打ち消すほど大きく歪んでいる。この一電子とフェルミ球の干渉だけで N 個の摂動に等価となる。単に u_{n+1} の状態が励起されても、それは一電子加わることと等価であり、X の観測値に殆ど影響しない。u_n と u_{n+1} の干渉している状態ということが本質的である。

3. 一般論

摂動前の波動関数を

$$u_0,\ u_1, u_2,\qquad u_N$$

摂動後の波動関数を

$$v_i=u_i+\delta\,\Sigma\,[C_{jk}u_k+D_{jl}u_l]\quad 但し\quad k\leqq N,\quad N<l, \tag{8}$$

とする。

$$w_i=u_i+\delta\,\Sigma\,[C_{jk}u_k]\qquad W_i=u_i+\delta\,\Sigma\,[D_{jl}u_l] \tag{9}$$

と定めると、$w_i=u_i+\delta\,\Sigma\,[C_{jk}u_k]$ は δ の一次までは $u_0, u_1,\quad u_N$ のユニタリー変換されたものであるから、

$$\Sigma\langle w_i|X|w_i\rangle=\Sigma\langle u_i|X|u_i\rangle \tag{10}$$

従って、物理量Xの摂動による観測値の変化は、

$$\begin{aligned}&\Sigma\langle v_i|X|v_i\rangle-\Sigma\langle u_i|X|u_i\rangle=\Sigma\langle v_i|X|v_i\rangle-\Sigma\langle w_i|X|w_i\rangle\\&=\Sigma\langle W_i|X|W_i\rangle\end{aligned} \tag{11}$$

との結論になる。(11)の一行目から二行目への変形は(8)と(9)を比較すると得られる。これが一般論の結論である。W_iはフェルミ面の電子とフェルミ面の上の波動関数が干渉して歪んだ状態である。これをフェルミ球に重ねた状態がN個の電子の各々が小さな摂動を受けた状態と等価である。次にインパルス電場を印加された電子を論ずる。

4．インパルス電場を印加

z方向に一様な磁場内の電子を考える。ベクトルポテンシャルを　A＝(0,Hx,0) ととると、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。

$$H=\frac{1}{2m}p_x{}^2+\frac{1}{2m}(p_y+\frac{eH}{c}x)^2 \tag{12}$$

y方向には周期的境界条件を仮定すると、これの固有解は

$$\Phi(x,y)=\exp(iPy/\hbar)u_n[x+(P/m\omega)] \tag{13}$$

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はサイクロトロン角周波数を表す。

さて　x方向に電場を印加すると（12）に −mαx　が加わりそれの厳密解は簡単に求まる。ところが電場がx方向のときの我々の興味は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。y方向のインパルス電場は次の式のA_yをステップ関数とおいて表わされる。

$$H=\frac{1}{2m}p_x{}^2+\frac{1}{2m}(p_y+\frac{eH}{c}x+\frac{e}{c}A_y(t))^2 \tag{14}$$

t<0 の解は t=+0 で不変である。しかしそれはもはや固有解ではない。固有解で展開すると、上下の隣の準位の状態が混じる。0<t では$A_y(t)$が定数と考えてもよいし、それをゲージ変換で零として代わりにその分だけp_yを変えてもよい。軌道半径がx方向の試料の大きさよりも小さいときには、摂動の効果は上下の隣の準位の状態が混じることであり、一般論に対応する。

弱磁場で軌道半径がx方向の試料の大きさよりも大きいときは事情は異なる。極端な場合として磁場が無いときを考えよう。

$A_y(t)$を無限小とする。ゲージ変換でそれを零として代わりにその分だけp_yを変えるとy方向の周期的境界条件が破れる。従って 0<t での状態は t<0 の固有解で展開できない。0<t では$A_y(t)$が定数としてもよい。その場合は t<0 の ときの解がそのまま 0<t　の解として持続する。しかし 0<t の電流は t<0 とは異なる。二つの解釈のどちらも一般論の定式には当てはまらない。次に$A_y(t)$を無限小ではなくy方向の周期的境界条件を満足させる有限値とする。　すると t<0 でのある固有解は隣の固有解に移る。これも一般論あるいは通常の摂動論、すなわち

$v_n=u_n+\delta[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]$　という摂動後は元の状態に別の状態が僅かに加わるという定式には当てはまらない。半古典論では電場内での電子の加速という最も簡単な問題にみえるのであるが、それは通常の摂動論の定式に当てはまらないのである。その理由は周期的境界条件を満足させる電子が全体に拡がるためである。

通常の摂動論の定式に無理やり当てはめるためにはベクトルポテンシャルではなくスカラーポテンシャルで周期的境界条件を満足させるものを印加してやればよい。すると半周期で反対向きの電場を受けて励起された状態は上下の隣の準位の状態が混じる。$t=+0$　での厳密解は得られるが、$0<t$　では解けない。この場合、$v_n=u_n+\delta[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]$　のいう定式に当てはまる。では v_n は小さな摂動を受けており、$\mathbf{w}_i$ と $\mathbf{W}_i$　大きく歪むという判定に如何なる物理量を基準とするべきかを次に論ずる。

5．大きな歪み

簡単な例示で示した、$v_n=u_n+\delta[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]$　は小さい摂動を受けており、$w_n=u_n(x)+\delta[A_n u_{n-1}]$　と　$W_n=u_n(x)+\delta[B_n u_{n+1}]$　は大きく歪んでいることがどの程度一般化できるのかを論ずる。

摂動Aを作用させた後、物理量Bを観測してその効果を観測するとする。例えば座標xの関数のポテンシャルをインパルスとして作用させた直後はxは変化せずpは変化する。古典論のハミルトン形式で、ある一般化された座標のポテンシャルをインパルスとして作用させた後それに正準共役な運動量が変化する。すなわちAとBが正準共役の関係にあれば摂動Aを作用させた後その効果の判定として物理量Bの観測が適当であるといえる。量子論では、AとBが正準共役の関係にあるということは、その交換関係が、

$$[A,B]=i h \tag{15}$$

と解釈できる[10]。簡単のため上下の隣の準位だけが混じる場合を論ずると、

$$0=\langle n+1|[A,B]|n-1\rangle=\langle n+1|A|n\rangle\langle n|B|n-1\rangle-\langle n+1|B|n\rangle\langle n|A|n-1\rangle$$

これを漸化式とみなすと、

$$\langle n+1|B|n\rangle=C\langle n+1|A|n\rangle,\qquad \langle n|B|n+1\rangle=C^*\langle n|A|n+1\rangle$$

が得られる。次に、

$$\begin{aligned}
i h=\langle n|[A,B]|n\rangle&=\langle n|A|n+1\rangle\langle n+1|B|n\rangle+\langle n|A|n-1\rangle\langle n-1|B|n\rangle\\
&-\langle n|B|n+1\rangle\langle n+1|A|n\rangle-\langle n|B|n-1\rangle\langle n-1|A|n\rangle\\
&=C\langle n|A|n+1\rangle\langle n+1|A|n\rangle+C^*\langle n|A|n-1\rangle\langle n-1|A|n\rangle\\
&-C^*\langle n|A|n+1\rangle\langle n+1|A|n\rangle-C\langle n|A|n-1\rangle\langle n-1|A|n\rangle\\
&=(C-C^*)\left[|\langle n+1|A|n\rangle|^2-|\langle n|A|n-1\rangle|^2\right]
\end{aligned}\tag{16}$$

結局

$$|\langle n+1|A|n\rangle|^2=|\langle 1|A|0\rangle|^2+n(ih)/(C-C^*) \tag{17}$$

の結論が得られる。 従って、摂動Aを作用させた後物理量Bを観測すると、$w_n=u_n(x)+\delta[A_n u_{n-1}]$ と　$W_n=u_n(x)+\delta[B_n u_{n+1}]$　の状態での観測値は　$v_n=u_n+\delta[A_n u_{n-1}+B_n u_{n+1}]$　の状態での観測に較べてn倍程度であるとの結論が得られた。

6．非ユニタリー変換

これまでの議論は摂動の効果がユニタリー変換であるということが前提であった。輸送現象では外場の効果はそうである。ところがフォノン系との相互作用による緩和はそうではない。電子系とフォノン系全体を考え、全体のハミルトニアンを考えると、電子系とフォノン系全体はユニタリー変換される。しかし電子系だけに着目するとユニタリー変換にならない。従って半古典論と量子論は対応しない。輸送現象を外場の効果とフォノン系との相互作用による記述とみなす

と、前者はユニタリー変換であり半古典論と量子論はよく対応し、後者はユニタリー変換でなく半古典論と量子論が対応しないとの統一的理解ができる。

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] Shishido,F.:Research Report of Ka.I.T No.B-30(2006)33

[10] D.Bohm:Phys.Rev. 75 (1949)502