磁場内での熱電気効果

宍戸文雄
電気電子工学科(shishido@ele.kanagawa-it.ac.jp)

Thermoelectric Effect in a Magnetic Field

SHISHIDO Fumio

Abstract

The heat flow in an electric field and a magnetic field perpendicular to it is discussed. The response to an impulse electric field is analyzed instead of a static electric field. This method clarifies some quantum mechanical aspects of the problem, which is difficult to see in a static electric field. In most cases, the semi-classical theory is valid. This result intensifies the importance of Landau diamagnetism expected to lead to a significant thermoelectric effect. In some cases of low temperature such that the relevant phonons are not excited, the relaxation is forbidden not only for excited states having lower energy than in equilibrium but also for the whole electron system owing to Fermi statistics.

Key Words: Response to an impulse electric field, Validity of semi-classical theory and Landau diamagnetism, Forbidden relaxation for the whole electron system.

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[1-7]。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。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。界面電流と電場が同方向で発熱が生じる場合は半古典論が有効であると予想されるが、界面電流と電場が逆方向で吸熱が予想されるときは量子力学を適用してもそれが正しいのかどうか検証を要する。この困難をどう克服するかを以下に論ずる。静電場ではなくインパルス電場を印加してその厳密な解を得その後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を示す。

2． 古典論

最初に古典論での電子運動とその緩和を述べる。ｚ方向に一様な磁場H, x 方向に一様な電場E,を印加したときのｘｙ平面での運動方程式は複素数ｚ＝ｘ＋ｉｙで簡潔に記述出来る。

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = i\omega \frac{dz}{dt} + \alpha$$

但し $\omega = \dfrac{eH}{mc}$, $\alpha = \dfrac{-eE}{m}$ (1)

この解は $z = R\exp(i\omega t) + i(\alpha/\omega)t$ (2)
すなわち回転とｙ方向への並進との合成である。
次に緩和の項を入れる。 単純な摩擦力の仮定では具合が悪い。 それでは電子が止まってしまい多電子系はフェルミ統計を満足しなくなる。 そこで次の仮定をする。 電子の位置には緩和は影響しない、速度は電場が無かったときの速度に戻ろうとする。 現実にはこのような不自然な仮定は微視的にはあり得ない。緩和は多くの状態への遷移の合成である。それにもかかわらずこの仮定が有力であるのは次の理由による。励起された多電子系が最低状態の多電子系に緩和するときの現象論的係数を考える。現象論的係数は多くの微視的過程の合成で決まる。するとフェルミ統計を満足してしかも観測される量の近似値を導くと予想される。

$$\frac{d^2 z}{dt^2} = i\omega \frac{dz}{dt} + \alpha - \left(\frac{1}{\tau}\right)\left[\frac{dz}{dt} - i\omega R\exp(i\omega t)\right] \quad (3)$$

この解は $z = R\exp(i\omega t) + [\alpha\tau/(1 - i\omega\tau)]t$
すなわち斜め方向の並進が生ずる。

緩和があるときの熱流を計算することが目標であるが、その準備として緩和が無いときのエネルギー移動を計算する。この意味は電子は静電場とエネルギーを授受して加速減速を繰り返す。 電子はある位置でエネルギーを得て他の位置で放出する。すなわちエネルギーを運搬すると考える。その量Qを次式で定義する。但しKは運動エネルギーを表わす。

$$Q = \int y\left(-\frac{dK}{dt}\right)dt \quad (4)$$

これを計算すると

$Q = C\alpha$、 但し $C = \pi m\omega R^2$ (5)
電子は一周期にこの量だけ静電エネルギーをｙ方向に運搬する。

緩和があるときは
ｘ方向に $C\alpha\omega\tau/[1 + (\omega\tau)^2]$,
及び ｙ方向に $C\alpha(\omega\tau)^2/[1 + (\omega\tau)^2]$ (6)
この量は静電エネルギーの運搬と周囲の熱浴のエネルギーの運搬との和である。静電エネルギーの運搬量は緩和の有無に関係しない。従って熱浴のエネルギーの運搬量は
ｘ方向に $C\alpha\omega\tau/[1 + (\omega\tau)^2]$,
ｙ方向に $-C\alpha/[1 + (\omega\tau)^2]$ (7)
となる。

3．量子論

さて上記の古典論での結論が量子論ではどうなるかを論ずる。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。

$$H = \frac{1}{2m} p_x^{\ 2} + \frac{1}{2m}\left(p_y + \frac{eH}{c}x\right)^2 \quad (8)$$

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[6-9]

$$\Phi(x, y) = \exp(iPy/\hbar)u_n[x + (P/m\omega)] \quad (9)$$

ここで $u_n(x)$ は調和振動子の固有解である。

さて ｘ方向に電場を印加すると（8）に $-m\alpha x$ が加わる。それの厳密解は簡単に求まり、

$$\Phi(x, y) = \exp(iPy/\hbar)u_n[x + (P - m\alpha/\omega)/m\omega] \quad (10)$$

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方向への並進 α/ω 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、(10)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
$[m\alpha/(-e)]\varepsilon\delta(t)$ を印加する。ここで ε 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 $m\alpha\varepsilon$ だけ増える。 従って $t<0$ では (9) で表された電子が $t=+0$ では

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

$$=\exp[i(P+m\alpha\varepsilon)y/\hbar]u_n[x+(P+m\alpha\varepsilon)/m\omega)-(\alpha/\omega)\varepsilon] \tag{11}$$

となる。これは厳密である。$t<0$における（9）と$t=+0$における(11)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。$0<t$ では軌道中心が $x=-(P/m\omega)-(\alpha/\omega)\varepsilon$ 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 $(\alpha/\omega)\varepsilon$ ずれる。

時間の経過とともにどう推移するかをまず緩和が無いときについて論ずる。時間が経過するとエネルため重ね合わせの中心は軌道中心に一致していく。結局デルタ関数のインパルス電場
$[m\alpha/(-e)]\varepsilon\delta(t)$ すなわちデルタ関数のインパルス加速度 $\alpha\varepsilon\delta(t)$ を印加したことにより電子の位置は $-(\alpha/\omega)\varepsilon$ 移動した。このことはｙ方向の一定の加速度αに対してｘ方向に $-(\alpha/\omega)$の速度が生ずるという古典論に一致する。 さて補足であるが $0<t$ では励起状態はどんなエネルギー準位の重ね合わせかを調べると

$$u_n(x-\Delta)\cong u_n(x)-u_n'(x)\Delta=u_n(x)-\Delta[Au_{n+1}(x)+Bu_{n-1}(x)] \tag{12}$$

の関係から上下の隣のエネルギー準位の混じりで近似できることが分かる。さらに励起状態(11)のエネルギー期待値を調べる。 簡単のため $P=0$ として（8）と(11)から

$$H\{\exp(im\alpha\varepsilon y/\hbar)u_n(x)\}=\exp(im\alpha\varepsilon y/\hbar)\{\frac{1}{2m}p_x^{\ 2}+\frac{1}{2}m\omega^2[x+(\alpha/\omega)\varepsilon]^2\}u_n(x)$$

$$=\exp(im\alpha\varepsilon y/\hbar)\{\frac{1}{2m}p_x^{\ 2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2+m\omega\alpha\varepsilon x+\frac{1}{2}m\alpha^2\varepsilon^2\}u_n(x) \tag{13}$$

となることからこの励起状態のエネルギー期待値は｛ ｝内の第４項 $m\alpha^2\varepsilon^2/2$ だけ上昇していることが分かる。

後の議論のために第３項に着目するとそれは積分では消えるのであるが 左右半領域に限定した積分は
$\mp m\omega\alpha\varepsilon\langle|x|\rangle$ となる。

さて緩和を考える。$t=+0$ での(11)が緩和でどう推移するかを調べる。繰り返して強調するが(9)から(11)への推移は厳密である。その後(11)が緩和でどう推移するかは勿論近似を入れなくてはならない。しかし幸いなことにもはや電場は存在しないのである。電場は存在せず励起状態(11)がどう推移するかを考えればよいので難しくは見えない。

緩和が無いときの反対極限である緩和が強い場合を論ずる。そのときは(11)は急速に(9)に戻る。(13)の見積もりで得られた量すなわち励起状態のエネルギー期待値　$m\alpha^2\varepsilon^2/2$ を失いそれがフォノン系のエネルギーとなる。この量は拡がった波動関数全体に関してでありそのどこで発熱吸熱が生ずるのかを調べる必要がある。フォノン系は半古典的に取り扱ってよい即ち局所的エネルギーの和が全エネルギーでありしかも各局所的エネルギーが最低のとき全エネルギーも最低となる。低温ではフォノンが励起されていないという側面のみ量子論を考慮する。磁場内の電子系について再述するとある場所の局所的エネルギーを最低に定めるとそれが隣の領域の境界条件に影響してそこではエネルギーが逆に上昇することも起こりえる。留意すべきことは磁場内の電子系についても全エネルギーは局所的エネルギーの和であるという命題は成立している。(11)から(9)に戻る過程で全体では　$m\alpha^2\varepsilon^2/2$ のエネルギーを失う。その過程は電子の回転運動の周期よりも急速に起こるのであるからフォノン系とのエネルギーの授受は波動関数の各局所でその局所のエネルギー期待値の変化分だけ生じていなくてはならない。局所のエネルギー期待値の和は波動関数全体としてのエネルギー期待値であり矛盾はしない。(13)の期待値積分を左右の領域に分けるとその差は　$2m\omega\alpha\varepsilon<|x|>$、　和は $m\alpha^2\varepsilon^2/2$　となる。即ちαの一次に比例する発熱吸熱が生じる。その量はωxが速度であるから古典論に一致する。　$x \rightarrow x+dx$　の局所領域に分割すると各領域のエネルギー期待値の変化は

$$<\delta H>=<(\frac{\partial H}{\partial P})m\alpha\varepsilon>=<v_y(\frac{\partial P}{\partial t})>\varepsilon \tag{14}$$

でありその量が発熱吸熱とすると半古典論に完全に一致する。

4．低温での矛盾

以上の議論では緩和の無い場合も強い緩和の場合もどちらも半古典論に一致した。しかし全て半古典論が正しいという結論は奇妙である。低温でフォノンが励起されていないとき加熱が生ずることは納得できても冷却が生ずるのは奇妙である。この矛盾は強い緩和を仮定したことにある。実際に起こり得るかどうかは別として強力な電子フォノン相互作用を数学的に仮定する。　この場合フォノンが励起されていなくても電気伝導で励起された電子は急速に緩和する。すなわちτは小さい。(11)から(9)に戻る過程で右半分の発熱側ではこの電気伝導のτが有効であるかのように見える。左側の吸熱側ではτは小さくない。すなわちτは左右非対称であるかのように見える。しかしそれは正しくない。左側が緩和せず右側だけが緩和した状態はインパルスの印加前よりもエネルギー期待値が低くなってしまい多電子系はフェルミ統計を満足しなくなる。(11)の多電子系はフェルミ統計を満足する[10]。左右両側の増加したPが共に緩和していく過程もフェルミ統計を満足する。しかし片側だけの緩和はフェルミ統計を満足しない。　$t>1/\omega$ の時間が経過すると左右の正負の励起エネルギーの位置が平均化されて緩和する。しかしそれはα^2に比例する波動関数全体としての緩和でありαに比例する熱流は生じないという結論になる。

これまで議論した円軌道の波動関数に加えて試料のx座標の両端に局在する波動関数が重要な役割を持つ。それは両端での常磁性電流を担う。局在する状態の性質は中央の円軌道の状態と大きく異なる[6-9]。円軌道である固有状態(9)のエネルギーはPに依存しない。　励起状態(11)は固有状態に上下の隣のエネルギー准位で振幅がαに比例する固有状態の重ね合わせで近似される。このことは(12)で論じた。円軌道の状態とは異なり両端に局在する波動関数のエネルギーはPに強く依存する。従って固有状態であるままPから$(P+m\alpha\varepsilon)$へ変化した状態が励起状態であると近似してよい。すなわち両端でのPの基底状態からの励起状態とは$(P+m\alpha\varepsilon)$の固有状態であると考えて近似できる。励起状態は一端ではエネルギーが上がり他端では下がる。その上がった状態が緩和したとする。さらに中央の円軌道の電子も緩和したとする。他端のエネルギーの低い状態だけが取り残される。すると全電子のエネルギーはインパルスの印加前より

も下がってしまいフェルミ統計に反する。従ってそのことは起こりえない。結論として他端のエネルギーの下がった状態がフォノン系からエネルギーを奪えない場合電子系全体の励起が続くということになる。勿論一端のエネルギーの上がった状態もその状態を持続して発熱も生じないという興味深い結論が得られる。以上の議論での前提となるフォノンが励起されていない場合とは、電子フォノン相互作用への主な寄与が光学フォノンであり温度がデバイ温度よりもはるかに下の場合である。 音響フォノンまで励起されないような極端な条件はここでは論じない。光学フォノンによる緩和時間 τ_o と音響フォノンによる緩和時間 τ_a を考え $\tau_o \ll \tau_a$ の場合が興味深い。デバイ温度よりも高温では τ_o で記述される半古典論が成立し、デバイ温度よりも低温では τ_a で記述される半古典論が成立するというのが結論である。 音響フォノンまでが励起されず従って電子系全体の励起が持続するという極端な条件はここでは論じない。

半古典論が成立する場合の線形応答を再確認すると、緩和が無いとき波動関数(11)の重心の位置の時間推移 $z_0(t)$ は

$$z_0(t) = -(\frac{\alpha}{\omega})\varepsilon[1-\exp(i\omega t)] \tag{15}$$

で表される。緩和を考慮すると、

$$z(t) = \int \exp(-\frac{t}{\tau})[\frac{d}{dt}z_0(t)]dt = -(\frac{\alpha}{\omega})\varepsilon\frac{1}{1+i/(\omega\tau)} \tag{16}$$

これから時間因子 ε を除いたものが静電場内での速度であり半古典論の結果（6）に完全に一致する。

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が有効である。 通常は半古典論が成立する。 従ってランダウ反磁性で大きな界面電流が現れる場合は大きな熱電効果を期待できる。 通常でない場合とは電子フォノン相互作用への主な寄与が光学フォノンからであり温度がデバイ温度よりもはるかに下の場合である。 デバイ温度よりも高温では光学フォノンの緩和時間 τ_o で記述される半古典論が成立し、デバイ温度よりもはるかに低温では光学フォノンが緩和に寄与しない。電場からの励起によりエネルギーの下がった状態が緩和しないことは当然予想される結論であるが、 単にそれだけではなく電子系全体が緩和しない。 フェルミ統計のためである。デバイ温度よりもはるかに低温では音響フォノンの緩和時間 τ_a で記述される半古典論が成立する。 音響フォノンまでが励起されず従って電子系全体の励起が持続するという極端な条件はここでは論じない

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] Nedorezov,S.S.: JETP ３７,(1973)317.

[9] Nedorezov,S.S.: JETP LETT ３３,(1981)215.

[10] D.Bohm:Phys.Rev.７５,(1949)502