

固体物理学 第2回

中 嶋 貞 雄

才1章 金属中の伝導電子

§ 2 LANDAU の Fermi liquid theory (承前)

○ Effective mass formula

並進不変性をもつ体系即ち系の hamiltonian を H , 並進の operator を T とするとき、 $[H, T] = 0$ であるような系には、例えば次のようなものがある。

① 液体ヘリウム ^3He

② 周期ポテンシャルの効果を無視した金属中の電子系即ちイオンを一様にぬりつぶされた正電荷の background でおきかえた electron gas or jellium model

この系において、quasiparticle の effective mass $m^* = m_t$ と、散乱関数 $f(p, \vec{p}')$ の間の関係を与えるのが LANDAU の effective mass formula である。

まず一電子当りの energy $E(\vec{p})$ が Hartree-Fock 近似で与えられる場合は、

$$E(\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + nv_0 - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} v_{\vec{p}-\vec{p}'} n(\vec{p}') \quad (1)$$

よつて group velocity は

$$\frac{\partial E(\vec{p})}{\partial \vec{p}} = \frac{\vec{p}}{m} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} v_{\vec{p}-\vec{p}'} \frac{\partial n(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'} \quad (2)$$

ここで、才二項では部分積分を行つた。Fermi 面の半径を p_0 とすると、

$$\frac{\partial n(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'} = \frac{\partial n(E(\vec{p}'))}{\partial E} \cdot \frac{\partial E(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'} = -\delta(\mu - E(\vec{p}')) \frac{p_0}{m^*} \frac{\vec{p}'}{p_0} \quad (3)$$

$$\frac{p_0}{m^*} \frac{\vec{p}}{p_0} = \frac{\vec{p}}{m} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} v_{\vec{p}-\vec{p}'} \delta(\mu - E(\vec{p}')) \frac{p_0}{m^*} \frac{\vec{p}'}{p_0} \quad (4)$$

$\vec{p}$ と $\vec{p}'$ のなす角を θ とすると、

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} v_{\vec{p}-\vec{p}'} \delta(\mu - E(\vec{p}')) \frac{1}{m^*} \cos \theta \quad (5)$$

$v_{\vec{p}_0 - \vec{p}_0} \equiv v(\theta)$, $\vec{p}'$ 方向への立体角を $d\Omega'$ とすると、(5)の右二項は

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} \delta(\mu - E(\vec{p})) v_{\vec{p}-\vec{p}'} \cos \theta = N^*(\mu) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} v(\theta) \cos \theta \equiv -N^*(\mu) f_1 \quad (6)$$

ここで $f_1 = -\int \frac{d\Omega'}{4\pi} v(\theta) \cos \theta$ は $v(\theta)$ の P 波成分である。

$$\text{よつて、} \quad \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} - \frac{1}{m^*} N^*(\mu) f_1 \quad (7)$$

$$\text{即ち} \quad m^* = m(1 + N^*(\mu) f_1) \quad (8)$$

これが Hartree-Fock 近似による effective mass formula である。

粒子の座標、運動量を $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i$, $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i + \vec{q}$ に変換したとき、多粒子系の波動関数は $\phi \rightarrow \phi' = e^{i\vec{q} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{r}_i} \phi$ のように変換する。今、 $H\phi = E\phi$ として、 H は translational invariant とすると、 ϕ は total momentum の同時固有関数である。即ち $(\sum_{i=1}^N \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}) \phi = \vec{P} \phi$ 。 $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \phi' = q \phi' + e^{i\vec{q} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{r}_i} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \phi}{\partial \vec{r}_i}$ であることを用いると、

$$(1) \quad \left\{ \begin{aligned} H \phi' &= (E + \frac{\vec{q} \cdot \vec{p}}{m} + \frac{Nq^2}{2m}) \phi' \end{aligned} \right. \quad (9)$$

$$\left\{ \begin{aligned} (\sum_{i=1}^N \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}) \phi' &= (\vec{P} + N\vec{q}) \phi' \end{aligned} \right. \quad (10)$$

はじめの系で $\vec{P} = 0$ とえらぶと、 $\vec{q}/m$ で走っている系での total energy の変化は、

$$\delta E_{\text{total}} = \frac{Nq^2}{2m} \quad (11)$$

固体物理学 才2回

である。以下便宜上 $\vec{q} \parallel z$ ととり q が小さく $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \vec{q}$ の変換が infinitesimal と考えられれば Fermi liquid の考えが使える。そこで、この変換による、分布関数 $n^0(\vec{p})$ の変化を変えると、 $n^0(\vec{p}) \rightarrow n^0(\vec{p} - \vec{q}) = n^0(\vec{p}) + \delta n(\vec{p})$ だから、

$$\delta n(\vec{p}) \cong - \frac{\partial n^{(0)}(p)}{\partial p_z} q_z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 n^{(0)}(p)}{\partial p_z^2} q_z^2 \quad (12)$$

一方は Fermi liquid theory により、(12) を使うと、

$$\begin{aligned} \delta E_{\text{tot}} &= 2 \sum_{\vec{p}} E^{(0)}(\vec{p}) \delta n(\vec{p}) + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \delta n(\vec{p}') \delta n(\vec{p}) \\ &= -2 \sum_{\vec{p}} E^{(0)}(\vec{p}) \frac{\partial n^0}{\partial p_z} q_z + \sum_{\vec{p}} E^{(0)}(\vec{p}) \frac{\partial^2 n^{(0)}}{\partial p_z^2} q_z^2 \\ &\quad + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\partial n^0}{\partial p_z} \frac{\partial n^0}{\partial p_z'} q_z^2 \end{aligned} \quad (13)$$

才一項は $\frac{\partial n^0}{\partial p_z} \propto p_z$ で $\vec{p}$ についての sum をとると 0 になる。

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{p}} E^{(0)}(\vec{p}) \frac{\partial^2 n^0}{\partial p_z^2} &= - \sum_{\vec{p}} \frac{\partial E^{(0)}(p)}{\partial p_z} \cdot \frac{\partial n^0}{\partial p_z} = \sum_{\vec{p}} \frac{p_0}{m^*} \frac{p_z}{p_0} \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p})) \frac{p_0}{m^*} \frac{p_z}{p_0} \\ &= \frac{1}{3} \left(\frac{p_0}{m^*} \right)^2 \sum_{\vec{p}} \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p})) = \frac{1}{3} \left(\frac{p_0}{m^*} \right)^2 V \frac{m^* p_0}{2\pi \hbar^3} = \frac{V}{2m^*} \frac{p_0^3}{3\pi^2 \hbar^3} = \frac{N}{2m^*} \end{aligned} \quad (14)$$

ここで $p_0^3 / 3\pi^2 \hbar^3$ は number density である。

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\partial n^0}{\partial p_z} \frac{\partial n^0}{\partial p_z'} &= \sum_{\vec{p}} \frac{p_0}{m^*} \frac{p_z}{p_0} \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p})) \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{p_0}{m^*} \frac{p_z}{p_0} \\ &\quad \times \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p}')) \end{aligned} \quad (15)$$

ここで 1 図のように $\vec{p}, \vec{p}'$ の方向をとると、 $p_z' = p_0 \cos \theta_{p'}$ だから、

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{p_0}{m^*} \frac{p_z}{p_0} \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p}')) = N^*(\mu) \frac{p_0}{m^*} \int \frac{d\Omega'}{m^*} f(\theta) \cos \theta_{p'} \quad (16)$$

ここで $\cos \theta_{p'} = \cos \theta \cos \theta_p + \sin \theta \sin \theta_p \cos \phi$ であり、
二項は $d\Omega'$ に関する積分で 0 になるから、(16) =

$$\cos \theta_p \frac{N^*(\mu) p_0}{m^*} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f(\theta) \cos \theta$$

$$\text{よつて、(15)} = \left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{p_0^2 d\Omega}{|\frac{\partial E}{\partial \vec{p}}|} \cos^2 \theta_p \left(\frac{p_0}{m^*} \right)^2 \right] N^*(\mu) f_1$$

$$= \frac{N N^*(\mu) f_1}{2m^*} \text{ となり、(14) と合せて、(13) は、}$$

$$\delta E_{\text{tot}} = \frac{N q^2}{2m^*} (1 + N^*(\mu) f_1) \quad (17)$$

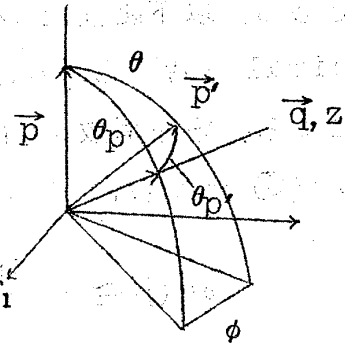


FIG.1

(11), (17) によつて effective mass formula は、

$$m^* = m(1 + N^*(\mu) f_1) \quad (18)$$

比熱の測定から m^* を知れば f の p-wave 成分がわかる。ここで、(18)の導出には translational invariance を使つたから、金属電子に対して、この式は exact ではない。

金属中の伝導電子間の相互作用は screening によつて、大体平均電子間距離程度の range をもつ相互作用になつてゐる。このような short range effective interaction では S 波成分が p 波成分よりも主に効く。事実 extremely short range な contact potential $v_0 \delta(\vec{r})$ であれば、その Fourier 成分 $v_{\vec{p}-\vec{p}'} = v_0 (\text{const.})$ である。Hartree-Fock 近似でこの型の相互作用を仮定すると、散乱関数は $f(\vec{p}, \vec{p}') = g(\vec{p}, \vec{p}') = -v_0$ となる。つまり非常に short range な相互作用では、散乱関数はほとんど定数になり、S 波成分が主に効く。スピン帯磁率 χ_s , 電子比熱 γT に対する modification には、散乱関数の各々 S 波、P 波成分が効くから、simple metal の場合電子間のクーロン相互作用は主としてスピン帯磁率に変化を与え、比熱の γ に対する影響は小さいと定性的に結論できる。

○ kinetic equation

空間的・時間的にゆつくり変化する外場 (ここで $\langle \text{ゆつくり} \rangle$ とは波数ベ

固 体 物 理 学 才 2 回

クトルを $\mathbf{k}$, 周波数を ω とするとき、 $k \ll p_0/\hbar$, $\omega \ll \mu/\hbar$ をさす) に対しては、普通にも Boltzmann 方程式を使うことができるが、Fermi liquid でも分布関数に対して kinetic equation が使えることを仮定する。この仮定は Fermi liquid theory の重要な仮定であり、これの正当化は多体理論の一つの流行問題であつたが、今はこれにはふれず、方程式の特徴と簡単な応用を試みるに止める。

quasiparticle の分布関数 $n(\vec{p}, \vec{r}, t)$ に対し、そのエネルギー $E(\vec{p}, \vec{r}, t)$ を一体の hamiltonian と考えて kinetic equation を立てる。

$$\frac{\partial n(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial E(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial n(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial E(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial n(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{p}} + e\vec{\epsilon} \cdot \frac{\partial n(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{p}} = I[\vec{p}] \quad (19)$$

ここで $\vec{\epsilon}$ は電場、 $I[\vec{p}]$ は quasiparticle の衝突による分布関数の変化をあらわす衝突項で、電子の数を保存するから、 $\sum_{\vec{p}} I(\vec{p}) = 0$ である。

$\vec{p}$ に対する和をとり、一回部分積分をすると、連続の方程式が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{\vec{p}} n(\vec{p}, \vec{r}, t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \left(\sum_{\vec{p}} \frac{\partial E(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{p}} n(\vec{p}, \vec{r}, t) \right) = 0 \quad (20)$$

$$\text{ここで } \left\{ \begin{array}{l} \text{charge density} = 2e \sum_{\vec{p}} n(\vec{p}, \vec{r}, t) \end{array} \right. \quad (21)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{current density} = 2e \sum_{\vec{p}} \frac{\partial E(\vec{p}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{p}} n(\vec{p}, \vec{r}, t) \end{array} \right. \quad (22)$$

普通の Boltzmann 方程式とのちがいは、外場が弱いとき、(19) を linearize するとはつきりする。弱い外場のとき、平衡分布関数 $n^0(\vec{p})$ からのずれ $n^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \equiv n(\vec{p}, \vec{r}, t) - n^{(0)}(\vec{p})$ が小さいとすると、(19) は

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial E^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] n^{(1)} + \left(e\vec{\epsilon} - \frac{\partial E^{(1)}}{\partial \vec{r}} \right) \cdot \frac{\partial n^{(0)}}{\partial \vec{p}} = I[\vec{p}] \quad (23)$$

但し、 $E^{(1)}$ は $n^{(0)} \rightarrow n$ に対応するスペクトルのずれで

$$E^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} f(\vec{p}, \vec{p}') n^{(1)}(\vec{p}', \vec{r}, t) \quad (24)$$

ここで $E^{(1)}$ が (23) の外場を modify するように働いていることに注意せよ。
今の近似で電流 (22) は、

$$\vec{J} = 2 \sum_{\vec{p}} e \frac{\partial E^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} n^{(1)} + 2 \sum_{\vec{p}} e n^{(0)} \frac{\partial E^{(1)}}{\partial \vec{p}}$$

$$\text{ここで } \sum_{\vec{p}} n^{(0)} \frac{\partial E^{(1)}}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} n^{(0)}(\vec{p}) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} [f(\vec{p}, \vec{p}') n^{(1)}(\vec{p}', \vec{r}, t)]$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} \frac{\partial n^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} f(\vec{p}, \vec{p}') n^{(1)}(\vec{p}', \vec{r}, t)$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \sum_{\vec{p}'} n^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\partial n^{(0)}(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'}$$

$$\therefore \vec{J} = 2 \sum_{\vec{p}} e n^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \left[\frac{\partial E^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\partial n^{(0)}(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'} \right] \quad (25)$$

低温で excitation が十分 Fermi 面の近くにあるとき、

$$-\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} f(\vec{p}, \vec{p}') \frac{\partial n^{(0)}(\vec{p}')}{\partial \vec{p}'} \cong \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} f(\vec{p}_0, \vec{p}'_0) \frac{\vec{p}}{m^*} \cos \theta \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p}')) = \frac{\vec{p}}{m^*} N^*(\mu) f_1$$

外場がない系に対して effective mass formula が使えれば (25) は

$$\vec{J} = 2 \sum_{\vec{p}} e n^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \left[\frac{\vec{p}}{m^*} + \frac{\vec{p}}{m^*} N^*(\mu) f_1 \right] = 2 \sum_{\vec{p}} e n^{(1)}(\vec{p}, \vec{r}, t) \frac{\vec{p}}{m} \quad (26)$$

衝突項の決定は難しい。低温の Fermi liquid では Pauli の禁制律によつて collision mean free path $\ell \propto 1/T^2$ で、十分低温では衝突項を無視できる。(今 $\vec{p} + \vec{p}_1 \rightarrow \vec{p}' + \vec{p}'_1$ なる衝突がおこるには、 $\vec{p}, \vec{p}_1$ は occupied, $\vec{p}', \vec{p}'_1$ は vacant state になければならぬ。occupied, vacant state の重なりの巾 $4p \sim T$ だから、運動量がこの $4p$ にあるときに衝突がおこる。衝突断面積は $\sum_{\vec{p}_1} \sum_{\vec{p}'_1}$ を含むが、 $0 < p_1, p'_1 < 4p \sim T$ だから、断面積 $\propto T^2$ 即ち

固 体 物 理 学 才 2 回

$\ell \propto 1/T^2$ である) よつて、低温での輸送現象を考える限り、衝突項を省略して

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial E^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] n^{(1)} + \left[e\vec{\epsilon} - \frac{\partial E^{(1)}}{\partial \vec{r}} \right] \cdot \frac{\partial n^{(0)}}{\partial \vec{p}} = 0 \quad (27)$$

この方程式は linear だから、平面波解をしらべればよい。 $\epsilon, n^{(1)}, E^{(1)} \propto e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$, $n^{(1)} \equiv -\frac{\partial n^{(0)}}{\partial E^{(0)}} \nu(\theta, \phi)$

とおくと、2図によつて、

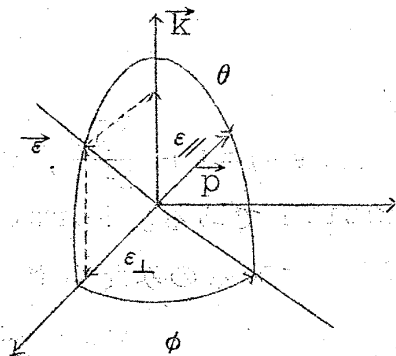


FIG 2

$$i[kv_0 \cos \theta - \omega] \nu = [e\epsilon_{\parallel} v_0 \cos \theta + e\epsilon_{\perp} v_0 \sin \theta \cos \phi - ikv_0 \cos \theta E^{(1)}] \quad (28)$$

$$\text{ここで } E^{(1)} = \frac{1}{V} \sum f(\vec{p}_0, \vec{p}'_0) \nu(\theta'; \phi') \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p}')) = N^*(\mu) \int \frac{d\Omega'}{4\pi} f(\theta) \nu(\theta', \phi')$$

但し θ は $\vec{p}, \vec{p}'$ との間の角、 $v_0 = \frac{p_0}{m^*}$ である。

○ kinetic equation の応用

① $\omega=0, \epsilon_{\perp}=0$ の場合

ν を $\vec{p}'$ の方向によらないとすると、 $E^{(1)} = N^*(\mu) f_0 \nu$ 。これを (28) に代入すると、

$$\nu = \frac{-\frac{i}{k} e\epsilon_{\parallel}}{1 + N^*(\mu) f_0} \quad (29)$$

一方 Poisson eq. から、

$$\text{div } \vec{\epsilon} = ik\epsilon_{\parallel} = 4\pi \sum_{\vec{p}} 2en^{(1)} = 8\pi eN^*(\mu) \nu \quad (30)$$

$$\text{よつて、 } ik\left(1 + \frac{k_S^2}{k^2}\right) \epsilon_{\parallel} = 0 \quad (31)$$

ここで $\epsilon(k) \equiv 1 + \frac{k_S^2}{k^2}$ とすると、(31)は $\text{div}(\epsilon(k)\epsilon_{//})=0$ で、 $\epsilon(k)$ は電子系の static wave number dependent dielectric functionである。但し

$$k_S^2 = \frac{8\pi e^2 N^*(\mu)}{1 + N^*(\mu)f_0} \quad (32)$$

(31)と同じ形が、電子系に Hartree-Fock 近似をして出すことができる。そ

の場合 $\epsilon(k) = 1 + \frac{k_{S0}^2}{k^2}$, $k_{S0}^2 = 8\pi e^2 N(\mu)$ は Thomas-Fermi の dielectric function である。Fermi liquid theory では、自由電子の状態密度 $N(\mu)$ が $N^*(\mu)$ に変わるのみならず、分母に $1 + N^*(\mu)f_0$ の factor が入る。この事情は Pauli のスピン帯磁率の場合とよく似ている。

② Anomalous skin effect

普通の温度で skin depth δ は伝導率 σ からわかるが、mean free path $\ell \gg \delta$ での skin effect

では Ohm の法則が成立たなくなる。 j と E との関係は non-local になる。つまり σ は k 依存性をもつようになる。この領域での skin effect を anomalous skin effect と呼ぶ。實際上、 $\omega \sim 10^{11} \text{ sec}^{-1}$, $\delta \sim 10^{-5} \text{ cm}$ 波数 $k \sim \delta^{-1} \sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ であつて、 $v_0 k \gg \omega$ (ここで Fermi velocity $v_0 \sim 10^8 \text{ cm sec}^{-1}$) となる。 $v + E^{(1)} = \tilde{v}$ とおくと、

$$\vec{j} = 2e \sum_{\vec{p}} \tilde{v}(\vec{p}) \delta(\mu - E^{(0)}(\vec{p})) \frac{\partial E^{(0)}(\vec{p})}{\partial \vec{p}} \quad (33)$$

kinetic eq. で ω を無視すると、

$$\tilde{v} = - \frac{ie \epsilon_{\perp} v_0}{kv_0 \cos \theta - i0^+} \sin \theta \cos \phi \quad (34)$$

ここで $t \rightarrow -\infty$ の initial condition として $\vec{\epsilon} = 0$, $n = n^{(0)}$ であり、 $\vec{\epsilon}$, $n^{(1)}$ の time dependence を $e^{-i\omega t} e^{\delta t}$ ($\delta > 0$) ととる。そして最後の

結果で $\delta \rightarrow +0$ とする。

$$\therefore j_{\perp} = 2N^*(\mu) e \int \frac{d\Omega}{4\pi} \tilde{v}(\theta, \phi) \frac{p_0}{m^*} \sin \theta \cos \phi \quad (35)$$

よつて、

$$\sigma = \frac{j_{\perp}}{\epsilon_{\perp}} = 2N^*(\mu) e^2 \frac{p_0}{m^* k} \frac{1}{4} \int_{-1}^1 dx (1-x^2) \frac{(-i)}{x - \frac{i0^+}{ikv_0}} \quad (36)$$

$\frac{1}{x - i0^+} = P \frac{1}{x} + i\pi \delta(x)$ を使うと、(36)は、

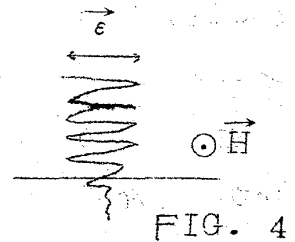
$$\sigma = \frac{\pi}{2} N^*(\mu) e^2 \frac{p_0}{m^* k} = \frac{3\pi n e^2}{4} \frac{1}{p_0 k} \quad (37)$$

この σ は座標空間では non-local である。又 p_0 は density だけで決まるから、相互作用による modification をうけない。つまり anomalous skin effect は、undressed particle の情報を与える。

③ Cyclotron resonance in metal (Azbel-Kaner effect)

Landau の kinetic eq. に定常磁場の効果を入れる。 $\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$ に対し、 $\vec{p} \rightarrow \vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ とし、 $n(\vec{r}, \vec{P}, t)$ に対して、kinetic eq. をそのままの形で使う。その際外場の加速項は $e\vec{\epsilon} \rightarrow e\vec{\epsilon} + \frac{e}{c} \frac{\partial E(\vec{P}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{P}} \times \vec{H}$ となるが Boltzmann eq. とのちがいは分布関数 n のずれによつて、スペクトルもずれることにある。これを、anomalous skin effect の limit で解けばよいが、磁場が加わると geometry が複雑になり、そのままの形で解くことはできない。そこで $p = p' = p_0$ として散乱関数 $f(\vec{p}, \vec{p}')$ を Legendre 展開し、クーロン相互作用の screening を考えて、大きな ℓ の寄与は小さいとして、 $\ell = 0, 1$ をとつて方程式を解く。[WATABE-NAKAJIMA, Prog. Theor. Phys. 30 772 (1963)] anomalous skin effect limit $\omega \ll kv_0$ の transverse conductivity σ に対する結果は、

$$\sigma = \frac{3\pi}{4} \left(\frac{ne^2}{p_0 k} \right) \coth \left[\frac{\pi}{\omega_{c\tau}^*} (1 - i\omega\tau) \right] \quad (38)$$



ここで τ は現象論的に導入された緩和時間で、低温で pure な物質に対して、 $\omega\tau \gg 1$ である。共鳴周波数は $\omega_c^* = eH/m^*c$ で、磁場がないときには多体効果は cancel したが、この場合には Landau theory で $m_c = m^* = m_t$ が期待されることがわかった。これは前にあげたアルカリ金属についての実験結果と一致している。

○ Fermi liquid effect

さて以上の議論により金属中の伝導電子はクーロン相互作用により Fermi liquid になつていくといふことができよう。実際には電子は phonon とも相互作用するので、実験では両者の和として観測される。従つて現象論的パラメーターを残さないためには、どちらか一方を理論的におさえる必要がある。そのためには散乱関数を計算すればよいが、これは Bohm-Pines, Gell-Mann-Brueckner 以来進歩してきた多体理論を使えばできそうである。しかし、ここで次のことに注意する必要がある。(i) 上記多体理論は現在のところ high density limit で妥当する。電子の密度が大きくなると、電子間の平均クーロンエネルギー $\ll$ 平均運動エネルギーとなり、クーロン相互作用を摂動で扱える。生のままのクーロン相互作用は long range であるため有限の項で切るとおかしくなるが、high density limit では重要な項は全部よせ集めることができ screening interaction をみちびくことができる。ここで平均クーロンエネルギーと平均運動エネルギーの比は $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$ (Bohr 半径) として、

$$\frac{\frac{e^2 n^{1/3}}{2m}}{\frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}} \sim \frac{1}{a_B n^{1/3}} \sim r_s \quad (39)$$

r_s は、 $\frac{1}{n} = \frac{4\pi}{3} (r_s a_B)^3$ で Bohr 半径で測つた平均電子間距離で、 $r_s \ll 1$ のとき、上記理論は成立つ。(ii) 上記理論は周期ポテンシャルを無視した jellium model, electron gas の近似である。実際の金属での r_s の値は、 $r_s \sim 1$ で (右表参照) この領域に high density limit の理論を使うと一種の extrapolation になる。以下に Fermi liquid effect の estimate のいくつ

	Li	Na	Rb	Al
r_s	3.22	3.96	5.18	2.07

固 体 物 理 学 才 2 回

かの試みを紹介する。それらはすべてjellium modelであり、金属の個性は r_s 即ち密度を通じてのみ入っている。

① Watabe の理論 [Prog. Theor. Phys. 29, 519 (1963)]

effective な相互作用 f に対し、screened static coulomb type potential を仮定する。Hartree-Fock 近似をまねて、

$$f(\vec{p}, \vec{p}') = g(\vec{p}, \vec{p}') = -v_{\vec{p}-\vec{p}'} \quad (40)$$

今 g として、bare coulomb int. $v_{\vec{p}-\vec{p}'}^C = 4\pi(n_e)^2 / |\vec{p}-\vec{p}'|^2$ をとつたのでは不都合で、screening のために static dielectric function $\epsilon(k)$ を使う。

$$v_{\vec{p}-\vec{p}'} = \frac{v_{\vec{p}-\vec{p}'}^C}{\epsilon\left(\frac{1}{n} |\vec{p}-\vec{p}'|\right)} \quad (41)$$

ϵ としては Landau の Fermi liquid theory の結果を使う、

$$\epsilon(k) = 1 + \frac{k_S^2}{k^2} \quad (42)$$

$$\text{但し、} \quad k_S^2 = k_{S0}^2 \left(\frac{m^*}{m}\right) \frac{1}{1+N^*(\mu)f_0} = k_{S0}^2 \frac{1+N^*(\mu)f_1}{1+N^*(\mu)f_0} \quad (43)$$

ここで k_{S0}^2 は density によつて決まる量であり、並進不変性を仮定して effective mass formula を使つた。(40) (41)により f_l を f_0, f_1 の関数としてきめることができ、 $\ell=0, 1$ に対しては f_0, f_1 を self-consistent にきめることができる。これから m_t, m_s が r_s の関数として計算される。

r_s	2	3	4
m_t/m	0.959	0.964	0.968
m_s/m	1.20	1.25	1.28

Na に対しては $r_s = 3.96 \sim 4$ を比べればよいが、実験は $m_t/m = 1.27$, $m_s/m = 1.77$ で定量的にはよくあわない。この原因は、(i) (42) はゆつくり変わる摂動 $\hbar k \ll p_0$ に対して成立つ式であるのに、これを $|\vec{p}-\vec{p}'| \sim p_0$ に使

つている点、(ii)この場合電子は v_0 で走っており shield は retardation を伴う dynamical shield であるのに static dielectric function を使つて点にあると思われる。しかし、Fermi liquid 効果を定量的に評価しようとした最初の試みという点で、Watabe 理論は高く評価されるべきである。

② Harmann-Overhanser の理論 [Phys. Rev. 143, 183 (1966)]

$\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ として、jellium に $(\mathbf{k}, \omega)$ の電場が入るときの response から求めたもの

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + 2v_k^c \sum_{\mathbf{p}} \frac{n^{(0)}(\mathbf{p}) - n^{(0)}(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})}{\epsilon(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{p}) - \omega - i0^+}, \quad \epsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m} \quad (44)$$

を使つて screening をあらわし、散乱関数を次の形にとる。

$$v_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}^c = \text{Re} \left[\frac{v_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}^c}{\epsilon(\frac{1}{\hbar}|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|, \frac{1}{\hbar}(\frac{p^2}{2m} - \frac{p'^2}{2m}))} \right] \quad (45)$$

これを使つた結果は

$a_B p_0 / \hbar$	0.3	0.4	0.5	0.6	Li	Na	K	Rb	Cs	
m_t / m	1.17	1.10	1.06	1.03	$a_B p_0 / \hbar$	0.593	0.482	0.395	0.362	0.332
m_s / m	2.18	1.81	1.62	1.50						

Na は大体 $a_B p_0 / \hbar \sim 0.5$ で m_s は ①にくらべてかなり大きくで、実験値 $m_s / m \sim 1.77$ にかなりよくあう。これで見ると何か dynamical effect を入れると m_s がふえてくるようであるが、(45)をこの形にとるという理論的根拠は明白でない。

③ 摂動展開による方法

分布関数 $n_{p\sigma}$ が与えられたとして、 $E_{\text{tot}}[n_{p\sigma}]$ を摂動で計算する。その場合全部の sum up はできないが、重要な項を Gell-Mann-Brueckner, Hubbard の理論を用いて計算することができる。この立場から散乱関数を計算したのは T.M.Rice [Ann. Phys. 31, 100 (1965)] である。彼の結果によると、 $\Delta m_t / m = 0.06$, $\Delta m_s / m = 0.47$ である。

以上により simple metal においてクーロン相互作用は m_s に対しては数

固体物理学才 2 回

10% の modification を与えるが、 mt に対しては一つ order の低い数% の寄与を与える。そして残りの効果は electron-phonon interaction によって説明されることが予想される。

才 2 章 多体系の統計物理

以下では多体系の統計物理の基本的な考え方を中心に formal な話を行う。計算のテクニック等については次のような本を参照するとよい。

Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinsky, Methods of the quantum theory of fields in statistical physics

阿部龍蔵、統計力学、東大出版会、1966

§ 3 量子統計力学の一般論

○ 統計行列、密度行列 ρ

これは macro な体系を量子力学的に議論するとき、波動関数の代りにでてくるもので、次の性質をもつ。

i) ρ は hermite operator であつて、物理量 Q の統計平均は、

$$\langle Q \rangle = \text{Tr}(\rho Q) \quad (1)$$

で与えられる。ここで $\text{Tr} A = \sum_{\alpha} \langle \alpha | A | \alpha \rangle$ で ① Tr の値は表現基底 $|\alpha\rangle$ のえらび方によらないから、計算に便利なものをとればよい。又 ② $\text{Tr}(A_1 A_2 \cdots A_n) = \text{Tr}(A_2 A_3 \cdots A_n A_1)$ で operator の cyclic な変換に関して不変である。

ii) $\text{Tr} \rho = 1$ (normalization condition) (2)

iii) ρ は次の NEUMANN の方程式をみたす：

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho(t)] = -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H} \rho(t) - \rho(t) \mathcal{H}) \quad (3)$$

$\mathcal{H}$ が t にならないときは

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \quad (4)$$

で時刻 t における統計平均は

$$\langle Q \rangle_t = \text{Tr}(\rho(t) Q) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} &= \text{Tr}(e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} Q) \\ &= \text{Tr}(\rho(0) Q(t)) \end{aligned} \quad (6)$$

$$\text{ここで } Q(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} Q e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \quad (7)$$

(5), (6) はそれぞれ量子力学の Schrödinger, Heisenberg picture に対応する。

iv) 孤立した熱平衡にある系において、時間 t によらない熱平衡をあらわす ρ は熱力学のオ二法則に対応する変分原理によつてえらびだす。即ち entropy

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \log \rho) \quad (8)$$

を副条件(2)及び

$$\text{Tr}(\rho \mathcal{H}) = E \text{ (const)} \quad (9)$$

のもとで最大になる。ここで(9)の物理的意味はこうである。即ち体系は大きな熱浴と接触してエネルギーを変換している。従つてエネルギーは揺動しているがその平均エネルギーは一定である。これは canonical 分布の考えである。Lahrange の未定乗数法により S を最大ならしめる ρ は

$$\rho = e^{-\frac{F}{k_B T}} e^{-\frac{H}{k_B T}} \quad (10)$$

で、未定乗数 T は体系の温度、 F は体系の自由エネルギーをあらわす。(2)により分配関数

$$Z = e^{-\frac{F}{k_B T}} = \text{Tr}(e^{-\frac{H}{k_B T}}) \quad (11)$$

である。

○ オ二量子化形式と ground canonical 分布

固 体 物 理 学 才 2 回

才二量子化法を用いると粒子数も力学変数になつて変化するので、grand canonical 分布を用いるのが便利である。位置 $\vec{r}$ に spin σ の電子をつくる operator を $\psi_{\sigma}^{+}(\vec{r})$ 、消す operator を $\psi_{\sigma}(\vec{r})$ とし、これらは次の反交換関係をみたす：

$$[\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r}')]_{+} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\vec{r}-\vec{r}') \quad (12)$$

$$[\psi_{\sigma}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}(\vec{r}')]_{+} = [\psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}), \psi_{\sigma'}^{+}(\vec{r}')]_{+} = 0 \quad (13)$$

ψ, ψ^{+} を平面波 $w_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}$ で展開すると、

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma} w_{\vec{p}}(\vec{r}) \end{array} \right. \quad (14)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^{+} w_{\vec{p}}^{*}(\vec{r}) \end{array} \right. \quad (15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [a_{\vec{p}\sigma}, a_{\vec{p}'\sigma'}^{+}]_{+} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\vec{p}\vec{p}'} \end{array} \right. \quad (16)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [a_{\vec{p}\sigma}, a_{\vec{p}'\sigma'}]_{+} = [a_{\vec{p}\sigma}^{+}, a_{\vec{p}'\sigma'}^{+}]_{+} = 0 \end{array} \right. \quad (17)$$

ここで $a_{\vec{p}\sigma}, a_{\vec{p}\sigma}^{+}$ は運動量 $\vec{p}$, スピン σ の電子を消す或はつくる operator である。又 $a_{\vec{p}\sigma}^{+} a_{\vec{p}\sigma}$ の固有値は 0, 1 で $(\vec{p}\sigma)$ 状態にある電子の数をあらわす。よつて全電子数をあらわす operator $\hat{N}$ は

$$\hat{N} = \sum_{\vec{p}, \sigma} a_{\vec{p}\sigma}^{+} a_{\vec{p}\sigma} = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \psi_{\sigma}(\vec{r}) \quad (18)$$

で、電子系のエネルギー $\hat{E}$ は自由電子モデルでは

$$\hat{E} = \sum_{\vec{p}, \sigma} \frac{p^2}{2m} a_{\vec{p}\sigma}^{+} a_{\vec{p}\sigma} = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{+}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_{\sigma}(\vec{r}) \quad (19)$$

である。grand canonical 分布では熱浴との間にエネルギーと、電子の交換が行われる。今度は電子数も揺動するが平均値は一定とする。このゆらぎは $\Delta N \sim \sqrt{N}$ だから、 $\Delta N/N \sim 1/\sqrt{N}$ となり、 $N \sim 10^{23}$ 程度の系を記述するとき

は非常に小さくなる。(2)及び

$$\text{Tr}(\rho \hat{E}) = E(\text{const.}) \quad (20)$$

$$\text{Tr}(\rho \hat{N}) = N(\text{const.}) \quad (21)$$

の条件のもとに(8)を最大ならしめる ρ は

$$\rho = e^{\frac{1}{k_B T} (\mathcal{Q} - \hat{E} + \mu \hat{N})} \quad (22)$$

である。ここで未定乗数 T は温度、 μ は chemical potential, $\mathcal{Q}$ は T, μ, V を熱力学変数としたときの熱力学ポテンシャルで、

$$e^{-\frac{\mathcal{Q}}{k_B T}} = \text{Tr} [e^{-\frac{1}{k_B T} (\hat{E} - \mu \hat{N})}] \quad (23)$$

$$S = -\left(\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial T}\right)_{\mu, \nu}, \quad N = -\left(\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial \mu}\right)_{T, \nu}, \quad p = -\left(\frac{\partial \mathcal{Q}}{\partial V}\right)_{T, \mu} \quad (24)$$

$\hat{E} - \mu \hat{N} = \mathcal{H}$ とかくと、形の上から canonical 分布のときと同じになる。以後 $\hat{E}$ でなく $\mathcal{H}$ を hamiltonian と考える。つまり一電子エネルギーを μ から測ることとする。

○ 例題 自由電子モデル

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \epsilon_{\vec{p}} a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}, \quad \epsilon_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m} - \mu \quad (25)$$

$a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma}$ が対角的になっている表示で計算すると、 $n_{\vec{p}\sigma} = 0, 1$ だから、

$$\begin{aligned} e^{-\frac{\mathcal{Q}}{k_B T}} &= \text{Tr} e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} = \sum_{\{n_{\vec{p}\sigma}\}} e^{-\sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon_{\vec{p}\sigma} n_{\vec{p}\sigma} / k_B T} = \prod_{\vec{p}\sigma} \sum_{n_{\vec{p}\sigma}=0,1} (e^{-\frac{1}{k_B T} \epsilon_{\vec{p}\sigma} n_{\vec{p}\sigma}}) \\ &= \prod_{\vec{p}\sigma} (1 + e^{-\frac{\epsilon_{\vec{p}\sigma}}{k_B T}}) \\ \therefore \mathcal{Q} &= -k_B T \sum_{\vec{p}} \sum_{\sigma} \ln (1 + e^{-\frac{\epsilon_{\vec{p}\sigma}}{k_B T}}) \end{aligned}$$

occupation number $n_{p\sigma}$ の平均値は、

$$\begin{aligned}\langle n_{p\sigma} \rangle &= \frac{\text{Tr}[e^{-\frac{1}{k_B T} \sum \epsilon_{p\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}]}{\text{Tr}[e^{-\frac{1}{k_B T} \sum \epsilon_{p\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}}]} = -k_B T \frac{\partial}{\partial \epsilon_{p\sigma}} \log(\text{Tr} e^{-\frac{1}{k_B T} \sum \epsilon_{p\sigma} a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}}) \\ &= \frac{\partial \Omega}{\partial \epsilon_{p\sigma}} = \frac{1}{e^{\epsilon_{p\sigma}/k_B T} + 1} \equiv f(\epsilon_{p\sigma})\end{aligned}\quad (27)$$

即ち $\langle n_{p\sigma} \rangle$ は Fermi 分布関数である。次に $k_B T \ll \mu$ で比熱を計算しよう。

一電子状態密度 $N(\mu + \epsilon) d\epsilon = \frac{4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} dp$ は $N(\mu + \epsilon) = C(\mu + \epsilon)^{\frac{1}{2}}$, $C = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3}$ である。従つて (26) は

$$\frac{\Omega}{V} = -2k_B T \int_{-\mu}^{\infty} d\epsilon N(\epsilon + \mu) \log(1 + e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}}) \quad (28)$$

となる。ここで $\int_{-\mu}^{\infty} = \int_{-\mu}^0 + \int_0^{\infty}$ と分けて、 $\int_{-\mu}^0$ の部分で $1 + e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} = e^{-\frac{1}{k_B T}} (1 + e^{\frac{\epsilon}{k_B T}})$ とかきなおすと、

$$\frac{\Omega}{V} = \frac{1}{V} \Omega_0 + \frac{1}{V} \Delta \Omega \quad (29)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\Omega_0}{V} &= 2 \int_{-\mu}^{\infty} \epsilon N(\epsilon + \mu) d\epsilon = -\frac{8}{15} C \mu^{\frac{5}{2}} \\ \frac{\Delta \Omega}{V} &= -2k_B T \left[\int_{-\mu}^0 N(\epsilon + \mu) \log(1 + e^{\frac{\epsilon}{k_B T}}) d\epsilon + \int_0^{\infty} N(\mu + \epsilon) \log(1 + e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}}) d\epsilon \right] \end{aligned} \right. \quad (30)$$

(31)

$k_B T \ll \mu$ だから $\epsilon < -\mu$ で $e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}} \sim 0$ である。よつて (31) の第一項で

$\int_{-\mu}^0 \rightarrow \int_{-\infty}^0$ にできる。又 $\log(1 + e^{\frac{\epsilon}{k_B T}})$, $\log(1 + e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}})$ が積分に効くのは、 $\epsilon \ll \mu$ のところだから、 $N(\epsilon + \mu) \rightarrow N(\mu)$ として積分の外に出す。(31) は従つて、

$$\frac{\Delta \Omega}{V} = -4k_B T N(\mu) \int_0^{\infty} d\epsilon \log(1 + e^{-\frac{\epsilon}{k_B T}}) = -4(k_B T)^2 N(\mu) \int_0^{\infty} dz \frac{z}{e^z + 1}$$

$$\begin{aligned}
 &= -4N(\mu)(k_B T)^2 \int_0^\infty dz \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} z e^{-\frac{nz}{k_B T}} = -4N(\mu)(k_B T)^2 \sum_{n=1}^\infty \frac{(-1)^{n-1}}{n^2} \\
 &= -\frac{\pi}{3} N(\mu)(k_B T)^2
 \end{aligned} \tag{32}$$

(24)により

$$\frac{S}{V} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_{\mu, V} = \frac{2\pi^2}{3} N(\mu) k_B^2 T \tag{33}$$

$$N = - \left(\frac{\partial Q}{\partial \mu} \right)_{T, V} = \frac{4}{3} V C \mu_0^{\frac{3}{2}} \quad (\text{at } T=0) \tag{34}$$

$$\text{ここで } T=0 \text{ の } \mu = \mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{p_0^2}{2m} \tag{35}$$

$$N = \frac{4}{3} C \mu^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{C}{\mu^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{at } T \neq 0) \tag{36}$$

μ を T の 2 乗まで求めると、(34), (36)により

$$\mu \cong \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_B T}{\mu_0} \right)^2 \right] \tag{37}$$

従つて (33) から T linear な範囲で比熱を求める限り $N(\mu) = N(\mu_0)$ とおけて、

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V, N} = \frac{2\pi^2}{3} V N(\mu_0) k_B^2 T \tag{38}$$