物性物理学

20B01392 松本侑真

2023 年 1 月 29 日

概要

目次

1 固体中の電子 2
1.1 加速定理 2
2 Boltzmann 方程式の導出 3
3 温度勾配による電流と熱流 3

1　固体中の電子

　まず、自由電子の場合、電子が従う方程式は

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = E\psi \tag{1.1}$$

である。この解として、

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \tag{1.2}$$

$$E(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \left(\hat{\boldsymbol{P}}\psi = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \hbar\boldsymbol{k}\psi\right) \tag{1.3}$$

を得る。また、一般に電子を物質波と見たときのエネルギーは

$$E(\boldsymbol{k}) = h\nu(\boldsymbol{k}) = \hbar\omega(\boldsymbol{k}) \tag{1.4}$$

である。したがって、群速度（実際に観測される波の速度）は

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} \implies \boldsymbol{v}_g = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E \tag{1.5}$$

と表すことができる。

1.1　加速定理

　加速定理とは、外力 $\boldsymbol{F}$ が波束に加わった際の変化を表す定理である。系には仕事が加わるため、エネルギー変化は

$$\varDelta E = \boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}_g\varDelta t = \frac{\boldsymbol{F}}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E(\boldsymbol{k})\varDelta t \tag{1.6}$$

となる。一方で、

$$\varDelta E = \frac{\partial E}{\partial k_x}\varDelta k_x + \frac{\partial E}{\partial k_y}\varDelta k_y + \frac{\partial E}{\partial k_z}\varDelta k_z = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E\cdot\varDelta\boldsymbol{k} \tag{1.7}$$

より、

$$\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E\cdot\varDelta\boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{F}}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E(\boldsymbol{k})\varDelta t \tag{1.8}$$

となる。すなわち、

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{F}}{\hbar} \tag{1.9}$$

となる。これが加速定理である。この結果は、運動量が $\boldsymbol{P} = \hbar\boldsymbol{k}$ と表されるため、

$$\varDelta\boldsymbol{P} = \int\hbar\,\mathrm{d}\boldsymbol{k} = \int\boldsymbol{F}\,\mathrm{d}t \tag{1.10}$$

となることを再現している。

自由電子の場合

　自由電子の場合に加速定理を適用して、$\boldsymbol{P} = m\boldsymbol{v}$ を再現することを見る。

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_g = \frac{1}{\hbar}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}}E = \frac{\hbar\boldsymbol{k}}{m} \iff m\boldsymbol{v} = \hbar\boldsymbol{k} = \boldsymbol{P} \tag{1.11}$$

となる。

一般の場合

より一般には加速定理から運動方程式が成立することがわかる。まずは簡単のために一次元で考えると、

$$\frac{\mathrm{d}v_g}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right) = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)F \tag{1.12}$$

となる。したがって、有効質量 m^* を用いると、運動方程式

$$m^*\frac{\mathrm{d}v_g}{\mathrm{d}t} = F, \quad m^* = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)^{-1} \tag{1.13}$$

を得る。3 次元の場合は以下のように拡張される：

$$\frac{\mathrm{d}v_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k_i}\right) = \frac{1}{\hbar}\sum_j\left(\frac{\partial^2}{\partial k_i \partial k_j}E\right)\frac{\mathrm{d}k_j}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_j\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}\right)F_j\text{。} \tag{1.14}$$

したがって、有効質量は 3×3 行列（テンソル）となり、

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_j \partial k_i}\right) \tag{1.15}$$

と表される。したがって運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_x}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_x}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_x}\right) \\ \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_y}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_y}\right) \\ \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_z}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y \partial k_z}\right) & \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z \partial k_z}\right) \end{pmatrix}\boldsymbol{F} \tag{1.16}$$

となる。

2 Boltzmann 方程式の導出

3 温度勾配による電流と熱流