ボルツマン-ブロッホ方程式の一般解について

2015.9.3　　鈴木　実

1　はじめに

ボルツマン-ブロッホ方程式は，一様な静電場と静磁場が存在し緩和時間近似が成り立つ場合には一般的に解くことができる，と A. H. Wilson の The Theory of Metals [1] に書かれており，その一般解も記載されているが，そこに至る計算が十分説明されていない．これは必ずしも自明とは思われないので，このメモでは，その部分の計算を補足しておこう．SI 単位系で記述する．

2　ボルツマン-ブロッホ方程式

最初にボルツマン-ブロッホ方程式を示しておこう．出発点となる式は

$$\mathbf{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f-f_0}{\tau} \tag{1}$$

である．これに次の式で定義される関数 ϕ を導入する．

$$f = f_0 - \phi\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}} \tag{2}$$

これを式 (1) に代入すると，

$$\mathbf{v}\cdot\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\cdot\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}(f_0 - \phi\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}) = \frac{\phi}{\tau}\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}} \tag{3}$$

となる．ただし，左辺の第 1 項と第 2 項では $\phi(\partial f_0/\partial\mathscr{E})$ が f_0 に比較して十分小さいとみなして省略されている．つぎに，左辺第 3 項で，$\mathbf{k}$ に関する微分は

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{4}$$

であることに注意すると，

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{5}$$

より，ベクトル積 $\mathbf{v}\times\mathbf{B}$ との内積は 0 になる．$\partial f_0/\partial\mathscr{E}$ の微分に対しても同様である．また，左辺第 1 項の $\partial f_0/\partial\mathbf{r}$ に関しては，

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial f_0}{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}{\partial \mathbf{r}} = k_BT\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}{\partial \mathbf{r}} = T\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/T]}{\partial \mathbf{r}} \tag{6}$$

と変形できる．以上の関係式 (4)–(6) を式 (3) に代入し，両辺を $\partial f_0/\partial\mathscr{E}$ で割ると，

$$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}}T\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\mathscr{E}-\mu}{T} - \frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\cdot\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar^2}(\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\phi}{\tau} \tag{7}$$

となる．ここで，

$$\mathbf{P} = -e\mathbf{E} + T\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\mathscr{E}-\mu}{T} \tag{8}$$

とおくと，

$$-\frac{e}{\hbar^2}\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\times\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{k}}) - \frac{\phi}{\tau} = -\frac{1}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{9}$$

という式が得られる．磁場が z 軸を向いているとすると，上式は

$$\frac{eB}{\hbar^2}\left(\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial \phi}{\partial k_1} - \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial \phi}{\partial k_2}\right) - \frac{\phi}{\tau} = -\frac{1}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{10}$$

となる．この式は Wilson の 式 (8.55.1) である．

3　ボルツマン-ブロッホ方程式の一般解

式 (10) は非斉次線形 1 階偏微分方程式である．これをシャルピの方法 (Charpit)(寺澤寛一 [2] p.329) で解こう．シャルピの方法を用いるに際して，偏微分方程式を

$$f(x,y,z,p,q)=0,\quad p=\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x},\quad q=\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y} \tag{11}$$

と表す．そうすると，式 (10) は，

$$x=k_1,\quad y=k_2,\quad z=\phi,\quad p=\frac{\partial\phi}{\partial k_1},\quad q=\frac{\partial\phi}{\partial k_2}, \tag{12}$$

および，

$$f(x,y,z,p,q)=\frac{eB}{\hbar^2}\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}p-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}q\right)-\frac{\phi}{\tau}+\frac{1}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}=0 \tag{13}$$

となる．式 (13) は偏微分方程式に x，y が含まれていない場合 (寺澤寛一 p.331) で，そのときの特性微分方程式は，

$$\frac{\mathrm{d}x}{\dfrac{\partial f}{\partial p}}=\frac{\mathrm{d}y}{\dfrac{\partial f}{\partial q}}=\frac{\mathrm{d}z}{p\dfrac{\partial f}{\partial p}+q\dfrac{\partial f}{\partial q}}=-\frac{\mathrm{d}p}{p\dfrac{\partial f}{\partial z}}=-\frac{\mathrm{d}q}{q\dfrac{\partial f}{\partial z}} \tag{14}$$

となるから，最後の 2 つの式から

$$\frac{\mathrm{d}p}{p}=\frac{\mathrm{d}q}{q} \tag{15}$$

となり，これを解いて $\ln p=\ln q+C$ となり，

$$q=ap \tag{16}$$

が得られる．ただし，$a=\mathrm{e}^{-C}$ である．C は任意の定数であるから，ここで C を十分大きくとると，$q=0$ としても構わない．これを式 (10) に代入すると，

$$f=\frac{eB}{\hbar^2}\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial\phi}{\partial k_1}\right)-\frac{\phi}{\tau}+\frac{1}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}=0 \tag{17}$$

となる．これは非斉次一階常微分方程式で

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}+P(x)y=Q(x) \tag{18}$$

とすると，定数変化法を用いて解くことができる (寺澤寛一 p.238)．その一般解は

$$y=\mathrm{e}^{-\int P(x)\mathrm{d}x}\left[\int\mathrm{e}^{\int P(x)\mathrm{d}x}Q(x)\mathrm{d}x+A\right] \tag{19}$$

であるから，

$$P=-\frac{\hbar^2}{eB\tau\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}},\quad Q=-\frac{\hbar}{eB}\frac{1}{\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \tag{20}$$

とおけばよい．結局，ボルツマン-ブロッホ方程式 (10) の一般解として次式が得られる．

$$\phi=-\frac{\hbar}{eB}\exp\left(\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\int\left[\left(\frac{\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1 \tag{21}$$

この式は Wilson の 式 (8.55.3) である．

式 (21) の k_1 に関する積分は磁場中で $\mathbf{k}$ の運動する軌跡に沿って行う．磁場中で $\mathbf{k}$ は $\mathscr{E}$ 一定で，かつ磁場と $\mathbf{v}=\hbar^{-1}\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}$ に垂直な方向，つまり磁場および定エネルギー面の法線と直角に運動する．定エネルギー

面の法線は $\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}$ の方向であるから，$\mathbf{k}$ の運動する方向，すなわち $\mathrm{d}\mathbf{k}$ の方向は $\mathbf{B}\times\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}$ である．これから，$\mathrm{d}k_1$ と $\mathrm{d}k_2$ の比は，

$$\frac{\mathrm{d}k_2}{\mathrm{d}k_1}=\frac{\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}}{-\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}} \tag{22}$$

と与えられる．通常，$\mathbf{k}$ の軌跡は閉曲線となり k_1 は時間 t の周期関数となるので，積分は 1 回転すなわち t の 1 周期で行えばよい．

4　一般解の展開形式

式 (21) はボルツマン-ブロッホ方程式の一般解であるが，そのままでは具体的な解を得ることは困難である．また，k_1 と k_2 に関する対称性が欠けている．以下ではこのような点を解決する方法として Wilson が述べている部分展開の方法を説明する．その延長として最後に一般解の展開形式を示す．

式 (21) 後半の積分を部分積分する．そのため，次の式の微分を考えよう．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k_1}\left[\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]=\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\frac{1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right) \tag{23}$$

したがって，

$$\int\left[\frac{1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1=-\frac{eB}{\hbar^2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right) \tag{24}$$

という関係が成り立つ．この関係式を式 (21) の後半の積分の部分に適用して部分積分すると，

$$\begin{aligned}&\int\left[(\tau\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k})\frac{1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1\\ =\;&-\frac{eB}{\hbar^2}\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)+\frac{eB}{\hbar^2}\int\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k_1}\left(\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\right)\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1\end{aligned} \tag{25}$$

となる．ここで式 (22) より，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k_1}=\frac{\partial}{\partial k_1}+\left(\frac{\mathrm{d}k_2}{\mathrm{d}k_1}\right)\frac{\partial}{\partial k_2}=\frac{\partial}{\partial k_1}+\left(-\frac{\partial\mathscr{E}/\partial k_1}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\frac{\partial}{\partial k_2}=-\frac{\left(\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right)\dfrac{\partial}{\partial k_2}-\left(\dfrac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\right)\dfrac{\partial}{\partial k_1}}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2}=-\frac{\Omega}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2} \tag{26}$$

という関係式が成り立つ．ただし，ここで

$$\Omega=\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right)\frac{\partial}{\partial k_2}-\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\right)\frac{\partial}{\partial k_1} \tag{27}$$

とおいた．これを式 (25) に代入すると，

$$\begin{aligned}&\int\left[(\tau\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k})\frac{1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1\\ =\;&-\frac{eB}{\hbar^2}\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)+\frac{eB}{\hbar^2}\int\left[\frac{\Omega\tau\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1\end{aligned} \tag{28}$$

となる．これを式 (21) に代入すると，

$$\phi=\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}+\frac{1}{\hbar}\exp\left(\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\int\left[\frac{\Omega(\tau\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k})}{\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1 \tag{29}$$

という式が得られる．ここで，さらに式 (29) の第 2 項の積分に同様の部分積分を施すと，

$$\begin{aligned}\phi &= \frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{eB}{\hbar^2}\right)(\tau\Omega)\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \\ &+ \frac{1}{\hbar}\left(\frac{eB}{\hbar^2}\right)\exp\left(\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\int\left[\frac{(\tau\Omega)^2(\tau\mathbf{P}\cdot\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k})}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\exp\left(-\frac{\hbar^2}{eB}\int\frac{\mathrm{d}k_1}{\tau\partial\mathscr{E}/\partial k_2}\right)\right]\mathrm{d}k_1 \end{aligned} \tag{30}$$

となる．これを繰り返すことにより，次の一般解の展開式が得られる．

$$\phi = \frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{eB}{\hbar^2}\right)(\tau\Omega)\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} + \frac{1}{\hbar}\left(\frac{eB}{\hbar^2}\right)^2(\tau\Omega)^2\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \cdots \tag{31}$$

弱磁場近似の場合には例えば B^3 の項以下を省略することができる．一般の場合には具体的な解を得ることは困難であるが，$\mathscr{E} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ の放物形のエネルギーを有するときには，式 (31) において，Ω の 2 次以上の項は消えるので，厳密な式の計算が可能である．

参考文献

[1] A. H. Wilson, *The Theory of Metals*, Cambridge at The University Press (1956) Second Edition, p.224.
[2] 寺澤寛一,「自然科学者のための数学概論（増訂版）」岩波書店，(1970).