ボルツマン-ブロッホ方程式の等方的なエネルギーの場合の一般解について

2015.9.6　　鈴木　実

1　はじめに

一様な静電場と静磁場および温度勾配が存在している場合で緩和時間近似が成り立つ場合で，エネルギーが $\mathbf{k}$ 空間で等方的な場合には，ボルツマン-ブロッホ方程式は厳密に具体的に解くことができる．この計算の過程で，速度 $\mathbf{v}$ と波数ベクトル $\mathbf{k}$ に関する微分が出てくるが，$\mathbf{v}$ が $\mathbf{k}$ に比例する場合にボルツマン-ブロッホ方程式は代数的に解くことができるようになる．これが成り立つ条件はエネルギーが等方的であるということである．古典的な粒子の場合には等方的であるからこのような問題は考える必要はないが，固体中の電子を取り扱う場合，ボルツマン-ブロッホ方程式では波数ベクトルに関する微分になり，電子の速度は電子のエネルギー構造に依存することになるから，上の条件が必要になる．このことは「固体物性と電気伝導」ではあまり強調していないので，ここでは数式をなぞって明確にしておきたい．

なお,「固体物性と電気伝導」では電場が存在して温度勾配がない場合を想定していたが，ここでは両方存在している場合を考えている．両方を合わせたベクトル場を $\mathbf{P}$ と表しているが，電場 $-e\mathbf{E}$ と読み替えればより分かりやすいと思う．

2　ボルツマン-ブロッホ方程式

出発点となるボルツマン-ブロッホ方程式は

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

である．ここで f を次のようにおいて関数 ϕ を導入する．

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

f_0 は平衡状態の分布関数であるから，これにより，求める関数は f から ϕ に変換されたことになる．したがって，以下では ϕ を求めることを考えれば良い．式 (2) 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．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ため省略されている．

左辺第 1 項で $\partial f_0/\partial \mathbf{r}$ は,

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{r}}=\frac{\partial f_0}{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}{\partial \mathbf{r}}=\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/k_BT]}{\partial \mathbf{r}}=T\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial[(\mathscr{E}-\mu)/T]}{\partial \mathbf{r}} \tag{4}$$

と変形できる．つぎに，左辺第 2 項と第 3 項で，$\mathbf{k}$ に関する微分は

$$\frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{k}}=\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{5}$$

となる．ここで,

$$\mathbf{v}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{6}$$

の関係を代入すると，第 3 項ではベクトル積 $\mathbf{v}\times\mathbf{B}$ 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．

以上により，式 (3) は

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

となる．

両辺を $\partial f_0/\partial\mathscr{E}$ で割ると，

$$T\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\frac{\mathscr{E}-\mu}{T}\cdot\mathbf{v}-e\mathbf{E}\cdot\mathbf{v}+\frac{e}{\hbar}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{k}}=\frac{\phi}{\tau} \tag{8}$$

となる．ここで，

$$\mathbf{P}=-e\mathbf{E}+T\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\frac{\mathscr{E}-\mu}{T} \tag{9}$$

とおくと，

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}+\frac{e}{\hbar}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{k}}=\frac{\phi}{\tau} \tag{10}$$

という式が得られる．ちなみに古典的なボルツマン方程式も同じように変形できて次のようになる．

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}+\frac{e}{m}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{v}}=\frac{\phi}{\tau} \tag{11}$$

古典的なボルツマン方程式と比較して，ここまでは変数が $\mathbf{v}$ から $\mathbf{k}$ に変わっただけでそれ以外は変わらない．

3　古典的な場合　ボルツマン方程式

この後，古典的なボルツマン方程式 (11) の微分方程式を代数的に解くことを可能にするためには次のように ϕ を $\mathbf{v}$ とベクトル関数 $\mathbf{c}$ とのスカラー積とおく方法が取られる．

$$\phi=\mathbf{c}\cdot\mathbf{v} \tag{12}$$

このようにおけることは，$\mathbf{B}=0$ の場合にはまさに式 (12) の通りになることと，$\mathbf{B}\neq 0$ の場合でも，式 (11) の第 2 項は回帰的ではあるが，ベクトル・スカラー積を一度回転させれば $\mathbf{v}$ を 1 次の係数で含むので，十分可能であると考えてよい．$\mathbf{c}$ は主として $\mathbf{P}$ および $\mathbf{B}$ に依存するとするが，エネルギー $\mathscr{E}$ あるいは v に依存しても構わない．そのように考えて式 (12) を $\mathbf{v}$ で微分すると，

$$\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{v}}=\left(\frac{\partial c_x}{\partial v}v_x+\frac{\partial c_y}{\partial v}v_y+\frac{\partial c_z}{\partial v}v_z\right)\frac{\mathbf{v}}{v^2}+\mathbf{c} \tag{13}$$

となる．これを式 (11) に代入すると，式 (13) の第 1 項は消えてしまう．したがって，

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}+\frac{e}{m}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\mathbf{c}=\frac{1}{\tau}\mathbf{c}\cdot\mathbf{v} \tag{14}$$

となる．この式はもう微分方程式ではないので代数的に計算することができる．左辺第 2 項のスカラー・ベクトル積を 1 回循環して，

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{v}+\frac{e}{m}(\mathbf{B}\times\mathbf{c})\cdot\mathbf{v}=\frac{1}{\tau}\mathbf{c}\cdot\mathbf{v} \tag{15}$$

となる．$\mathbf{v}$ は任意の変数であるから，

$$\mathbf{P}+\frac{e}{m}(\mathbf{B}\times\mathbf{c})=\frac{\mathbf{c}}{\tau} \tag{16}$$

という式が得られる．$\mu=\tau e/m$ とおくと，

$$\tau\mathbf{P}+\mu(\mathbf{B}\times\mathbf{c})=\mathbf{c} \tag{17}$$

となる．あとは結果まで一直線である．まず，次の $\mathbf{B}$ のベクトル積を 2 階のテンソル $\widetilde{B}$ を用いよう．

$$\widetilde{B} = \begin{pmatrix} 0 & -B_z & B_y \\ B_z & 0 & -B_x \\ -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

そうすると，

$$\tau\mathbf{P} + \mu\widetilde{B}\mathbf{c} = \mathbf{c} \tag{19}$$

とかけるので，

$$(1 - \mu\widetilde{B})\mathbf{c} = \tau\mathbf{P} \tag{20}$$

から，$(1 - \mu\widetilde{B})$ の逆行列を使って $\mathbf{c}$ は，

$$\mathbf{c} = \tau(1 - \mu\widetilde{B})^{-1}\mathbf{P} \tag{21}$$

と表すことができる．逆行列に関しては，

$$(1 - \mu\widetilde{B}) = \begin{pmatrix} 1 & \mu B_z & -\mu B_y \\ -\mu B_z & 1 & \mu B_x \\ \mu B_y & -\mu B_x & 1 \end{pmatrix} \tag{22}$$

であるから．

$$(1 - \mu\widetilde{B})^{-1} = \frac{1}{1 + \mu^2 B^2} \begin{pmatrix} 1 + \mu^2 B_x^2 & -\mu B_z + \mu^2 B_x B_y & \mu B_y + \mu^2 B_x B_z \\ \mu B_z + \mu^2 B_y B_x & 1 + \mu^2 B_y^2 & -\mu B_x + \mu^2 B_y B_z \\ -\mu B_y + \mu^2 B_z B_x & \mu B_x + \mu^2 B_z B_y & 1 + \mu^2 B_z^2 \end{pmatrix} \tag{23}$$

となる．あるいはベクトルで表記すれば，

$$(1 - \mu\widetilde{B})^{-1} = \frac{1}{1 + \mu^2 B^2}(\widetilde{I} + \mu\widetilde{B} + \mu^2 \mathbf{B} \circ \mathbf{B}) \tag{24}$$

となる．したがって，

$$\mathbf{c} = \frac{\tau}{1 + \mu^2 B^2}[\mathbf{P} + \mu(\mathbf{B} \times \mathbf{P}) + \mu^2 \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{P})] \tag{25}$$

という結果が得られる．これによりボルツマン方程式の解が厳密に代数的に得られたことになる．

4　ボルツマン-ブロッホ方程式が代数的に解ける条件

式 (10) と式 (11) の違いは ϕ が $\mathbf{k}$ に関する微分であるか，$\mathbf{v}$ に関する微分であるかということである．前節の数式展開の流れを見ればわかるように，$\phi = \mathbf{c} \cdot \mathbf{v}$ とおいても $\phi = \mathbf{c} \cdot \mathbf{v}$ とおいても，式全体が $\mathbf{v}$ あるいは $\mathbf{k}$ の同類項にもならないということがわかる．これからわかることは $\mathbf{v}$ と $\mathbf{k}$ が比例関係にあれば前節と同じように数式処理ができることがわかる．そのような関係は放物的なエネルギー $\mathscr{E}$ を持つ場合であることがわかる．すなわち，

$$\mathscr{E} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \tag{26}$$

という関係を保つ場合で，その時に $\mathbf{v}$ は

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar}{m}\mathbf{k} \tag{27}$$

となり，$\mathbf{v}$ と $\mathbf{k}$ の比例関係が得られる．この関係の意味するところは，等エネルギー面の法線方向 $(\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k})$ が動径方向 $(\mathbf{k})$ と一致するということであり，すなわち球対称あるいは等方的であるということである．つまり

$\mathscr{E}$ が等方的（球対称）であれば，ボルツマン-ブロッホ方程式の厳密な解が代数的に得られることを意味する．ただし，$\mathscr{E}$ が等方的であっても $\mathbf{k}$ の 2 次関数ではない場合，$\mathscr{E}$ は k の関数と考えられるが，そうすると，

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k}\frac{\partial k}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k}\frac{\mathbf{k}}{k^2} \tag{28}$$

となって，$\mathbf{v}$ は $\mathbf{k}$ に比例するようにはなるが，実質的に有効質量 m^* が k に依存するために，$\mathbf{c}$ は代数的に求めることができても，その後の計算が $\mathbf{k}$ の積分を含むようになるので，余程簡単な関数でない限りは数値計算などでない限りはあまり実質的ではない．

5　等方的なエネルギーの場合のボルツマン-ブロッホ方程式の一般解

エネルギーが波数空間で等方的な場合，結局式 (27) が成り立ち，古典的な式 (12) に対応して，

$$\phi = \mathbf{c} \cdot \mathbf{k} \tag{29}$$

とおくことができる．そうすると，式 (10) は

$$\frac{\hbar}{m}\mathbf{P} \cdot \mathbf{k} + \frac{e}{m}(\mathbf{B} \times \mathbf{c}) \cdot \mathbf{k} = \frac{1}{\tau}\mathbf{c} \cdot \mathbf{k} \tag{30}$$

となる．したがって，式 (17) に対応して，

$$\frac{\hbar}{m}\tau\mathbf{P} + \mu(\mathbf{B} \times \mathbf{c}) = \mathbf{c} \tag{31}$$

となる．式 (18) を用いれば，

$$\mathbf{c} = \frac{\hbar}{m}\tau(1 - \mu\widetilde{B})^{-1}\mathbf{P} \tag{32}$$

と表される．後は同様な変形によって次の結果を得ることができる．

$$\mathbf{c} = \frac{\hbar}{m}\frac{\tau}{1 + \mu^2 B^2}[\mathbf{P} + \mu(\mathbf{B} \times \mathbf{P}) + \mu^2\mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{P})] \tag{33}$$

これが等方的なエネルギーの場合におけるボルツマン-ブロッホ方程式の一般解である．

参考文献

[1] 「固体物性と電気伝導」森北出版，(2014).