

1 まえがき

量子力学における粒子とは、粒子と波動の二重性を持ち、その波動性のゆえに位置 x と運動量 p の分散は不確定性関係

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

を満たす。従って、量子力学的な粒子は位置と運動量を同時に確定させることは出来ない。つまり、古典力学では当たり前の、特定の運動量を持つ粒子の軌道を描く事が出来ないのである。

金属中の電子は、古典的粒子描像の印象が強い素粒子の一つだと思われる。それは、高校の物理などで、金属中の電流の正体は電子であり、内部で金属構成原子と衝突を繰り返すことが電気抵抗の原因であるように説明されているからである。しかし、実際には典型的な金属内部の電子状態は、波数 k で表される波動としての性質を強く示し、それが非常に重要である。

電気伝導率の高い、通常の金属中の電子はブロッホの定理によって、結晶格子の周期性を持った平面波で表される [1]。つまり、電子は金属中全体に波として広がっており、単に金属構成原子があるだけでは衝突によって散乱される事は無い。実際の金属の電気抵抗の原因は、金属原子の熱振動による格子点からの位置のズレ（格子振動）による電子の散乱である。散乱後、電子は再び波動として広がりまた散乱し・・・ということを繰り返している。単に金属原子によって散乱されることと、結晶格子の振動によって散乱されることは、金属中の電子物性を理解する上では非常に大きな違いである。

今、上記のような熱振動も含め、金属中に電子の波動性を阻害する原因が全くない場合を考えると、電子は自由粒子のように振舞うと考えてよい。この段階で初めて、電子の様子を粒子と見なしても大きな齟齬がなくなる。実際に、多くの金属で、電子を自由粒子と見る、自由電子モデルを用いて多くの金属物性を説明することに成功している。粒子として見る、といっても、全く古典力学的な粒子と見ることは、もちろん出来ない。“自由”の意味は、1個の電子が波動として金属中全体に広がっているという事である。

そのような電子に、外部から照射された光や格子振動との相互作用（散乱）があると、その場所で1個の電子として観測されたという事になる。その後、別の位置

で同様に1個の電子として観測されたとき、最初の点から移動したとみなせる。電子は当然不確定性関係を満たすので、粒子として観測された2点の間をどのような経路で移動してきたのかは全く分からない、あるいはあらゆる経路を通ってきたという事ができる。このような金属中の電子の状態、任意の2点間の移動の確率（遷移確率）はグリーン関数によって記述される。

2 グリーン関数

グリーン関数 G は、金属中のある点 $r = (x, y, z)$ 、ある時間 t における電子の生成・消滅演算子（場の演算子） $\psi(r, t)$ と $\psi^\dagger(r, t)$ を用いて

$$G(r_1 t_1, r_2 t_2) = -i \langle T[\psi(r_1, t_1) \psi^\dagger(r_2, t_2)] \rangle \quad (2)$$

と定義される。ここで、 T は $[\dots]$ 内の場の演算子を左から t が大きい順に並べ換える作用を持つ時間順序演算子、 $\langle \dots \rangle$ は統計平均を意味する。このグリーン関数は、伝搬関数とも言われ、時間 t_1 に位置 r_1 にいた電子が、時間 t_2 に位置 r_2 にいる（あるいはその逆の）確率を表す。

以後、グリーン関数の時間依存性は特に必要がないので省略し、座標依存性のみ残して $G(r_1, r_2)$ と書く。さらに $r_2 - r_1 = r$ 、 $\frac{r_1 + r_2}{2} = R$ を定義し、 $G(r_1, r_2) = G(r, R)$ とする。

3 準古典近似

上記のグリーン関数に対し、準古典近似と呼ばれる近似法を適用 [2] する。金属中の電子系を特徴づける物理量の中で最も重要なのはフェルミエネルギー E_F である。電気伝導などの物理現象に関与する電子は E_F のごく近傍のエネルギーを持つ電子である [1]。 E_F に対応した波数、フェルミ波数を k_F と書くと、注目すべき電子は $k_F \pm \delta k$ の範囲の波数を持っている。 E_F から測った電子のエネルギーを E 、金属中での電子の平均自由行程を ℓ とすると、この範囲は

$$\delta k \sim k_F \max \left\{ \frac{E}{E_F}, \frac{1}{k_F \ell} \right\} \quad (3)$$

によって規定される。つまり、 $\frac{\delta k}{k_F} \ll 1$ が近似が成立する条件であり、従って $1/(k_F \ell) \ll 1$ 、つまり $\ell \gg 1/k_F$ によって近似が成り立つ空間スケールが与えられる。

近似を用いるために、 r_1 と r_2 の間は空間的に一樣であるとし、 r についてフーリエ変換を導入し、

$$G(r_1, r_2) = G(r, R) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(k, R) e^{ik \cdot r} \quad (4)$$

と表す。ただし、 r と R は 2 体系の相対座標と重心座標のように書いてあるが、今は 2 つの電子ではなく、1 つ

の電子が取り得るある 2 点の座標をこのように置き換えているという事を注意しておく。従って、 r_1 と r_2 の 2 点間についてはフーリエ変換をし電子の波数 (運動量) k を導入しているが、 R の形で座標依存性を残している。 k についての積分は極座標で行う。この時、 z 軸からの角度を θ 、 x - y 面内の角度を ϕ として、 $G(k, R)$ は ϕ には依存しないとする。 $k \cdot r = kr \cos \theta$ と書いて

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} G(k) e^{ik \cdot r} &= \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi G(k, \cos \theta) e^{ikr \cos \theta} \\ &= 2\pi \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta G(k, \cos \theta) e^{ikr \cos \theta} \end{aligned} \quad (5)$$

注目する積分は k についてのものなので、 R を省略した。また、極座標の z 軸は r の方向に取っている。ここで、

$\cos \theta = -t$ と置き、部分積分をすると t についての積分が

$$\int_{-1}^1 dt G(k, -t) e^{-ikrt} = \frac{G(k, -t)}{-ikr} e^{-ikrt} \Big|_{-1}^1 + \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 dt \frac{\partial G(k, -t)}{\partial t} e^{-ikrt} \quad (6)$$

となる。今、波数 (運動量) k については $k = k_F \pm \delta k$ であり、 $\delta k \ll k_F$ なのだから $k \approx k_F$ である。従って、上の式の右辺第 2 項で $kr \gg 1$ と仮定すると、この項は上記積分範囲で激しく振動し積分の寄与は無視できるようになる [3]。ゆえに

$$\int_{-1}^1 dt G(k, -t) e^{-ikrt} \approx \frac{G(k, +1)}{ikr} e^{+ikr} - \frac{G(k, -1)}{ikr} e^{-ikr} \quad (7)$$

とすることができる。このように近似することを準古典近似という。なぜなら、今 $r = r_2 - r_1$ であり、その方向について $r \cdot k = rk \cos \theta$ の $\cos \theta$ が $+1$ と -1 の場合だけを残して、それ以外の寄与を無視したからである。つまり、電子が移動する方向 r に沿った運動量のみを取り出し、あたかも軌道と運動量を同時に考える [2] ことができるように近似しているのである。

元々、準古典近似を適用できる条件として $\ell \gg k_F^{-1}$ があったので、 $kr \gg 1$ は電子の伝搬に関して準古典近似で記述できる空間スケールを与える。典型的な金属でフェルミ波数が $k_F^{-1} \sim 10^{-8} [\text{cm}]$ という値を持つので、これよりも十分に大きな距離で準古典近似によって電子が古典的な軌道を持つと考えてもよい事になる。これは巨視的なスケールからすると十分にミクロであるが、原子スケールよりは大きい。つまり、中間的なメソスコピックといわれるスケールにも有効な近似法であることがわかる。これによって、金属中の電子について、準古典スケールで古典的な軌道を持つ粒子として運動していると考えてもよい事の根拠が与えられる。計算を進めると結

果的に、グリーン関数は

$$G(r_1, r_2) \approx -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{ik_F r}}{r} g_+(r_1, r_2) + \frac{m}{2\pi} \frac{e^{-ik_F r}}{r} g_-(r_1, r_2) \quad (8)$$

$$g_\pm(r_1, r_2) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} v_F d(k - k_F) G(\pm k \hat{r}, R) e^{\pm i(k - k_F)r} \quad (9)$$

となる [2]。この $g_\pm(r_1, r_2)$ を準古典グリーン関数 [4] といい、金属電子状態の様々な物理量の空間依存性を研究する際の非常に強力な理論手法 [5] として広く使われている。

参考文献

- [1] 岡崎誠、「固体物理学」、裳華房 (2002); 斯波弘行、「基礎の固体物理学」、培風館 (2007)。
- [2] A. Shelankov, J. Low Temp. Phys. Vol.60, (1985) p.29.
- [3] 山城、堺、吉田、第 3 回琉球大学物性研究会 & 強磁場研究グループ合同研究会 報告集、(2004)。
- [4] A. Seren and D. Rainer, Phys. Rep. Vol.101, (1983) p.221.
- [5] J. Rammer and H. Smith, Rev. Mod. Phys. Vol.58, (1986) p.323.