異方的Fermi面に関するノート

永井佑紀

平成18年9月5日

これは、2006年5月16日の未公開整理用ノートに若干の説明を足したものである。このノートの目的は、異方的Fermi面における状態密度の表式の導出と、Eilenverger方程式が群速度 $\boldsymbol{v}_g$ に沿った微分方程式であることを示すことにある。

1 異方的なFermi面の場合の物理量

物理量を計算する際に必要なのは

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} \tag{1}$$

という積分である。したがって、この積分を準古典理論で使いやすいように変形することを考える。最終的には、局所電子状態密度の表式を得る。等エネルギー面を考え、その面を張り合わせて p 空間を覆うとする。フェルミ面上での面積素を $dS_{\rm F}$ とすると[1]

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{dp dS_{\rm F}}{(2\pi)^3} \tag{2}$$

となる。ここで $dp = d|\boldsymbol{p}|$ である。このとき、

$$\boldsymbol{v}_g(\theta,\chi) = {\rm grad}\,\epsilon \tag{3}$$

という群速度を考えれば、ある θ、χ における、群速度の大きさ $v_g(\theta,\chi)$ は

$$v_g(\theta,\chi) = \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial p}\right) \tag{4}$$

と書け、dp は

$$dp = v_g(\theta,\chi)^{-1} d\xi_p \tag{5}$$

となり

$$\frac{d^3p}{(2\pi)^3} = \frac{dS_{\rm F}}{(2\pi)^3 v_g(\theta,\chi)} d\xi_p \tag{6}$$

となる。故に状態密度は

$$\nu(\boldsymbol{r},\epsilon) = -\int \frac{dS_{\rm F}}{2\pi^2 v_g(\theta,\chi)} {\rm Re\,Tr}\hat{g}^{\rm R} \tag{7}$$

となる。

[1]いま行う積分はフェルミ面全体に関する体積積分である、としている。

2 異方的な Fermi 面の場合の Eilenberger 方程式

Eilenberger 方程式導出のノートにおける $\nabla^2/(2m)$ を $\epsilon(-i\nabla)$ と置き換える。そのようにすると、式 (45) の第一項が

$$\left(\epsilon(\nabla_1/i) - \epsilon(\nabla_2/1)\right)\check{G} \tag{8}$$

となる。また、(46)、(47) 式は

$$\begin{aligned} \epsilon(\nabla_1/i) &= \epsilon(\bar{\nabla}_1/i) + \boldsymbol{v}(\bar{\nabla}/i)\frac{1}{2}\nabla/i \quad (9) \\ \epsilon(\nabla_2/i) &= \epsilon(\bar{\nabla}_2/i) - \boldsymbol{v}(\bar{\nabla}/i)\frac{1}{2}\nabla/i \quad (10) \end{aligned}$$

というテイラー展開の表式になる。これは、$\bar{\nabla}$ と ∇ の変動スケールの違いから言える。以上より、(51) 式の Eilenberger 方程式の速度 $\boldsymbol{v}$ が群速度となり、異方的な Fermi 面の場合の式を導くことができる。