

準2次元電子系でのHartree-Fock 近似

メタデータ	言語: jpn 出版者: 明治大学教養論集刊行会 公開日: 2009-04-15 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 中村, 孔一 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10291/4952

準 2 次元電子系での Hartree-Fock 近似

中 村 孔 一

1. はじめに

Si MOS 反転層や GaAs/AlGaAs ヘテロ接合界面に生ずる準 2 次元電子系は、応用上重要であるだけでなく、物理学的にも興味のある多体系として近年多くの研究者の注目を浴びている⁽¹⁾。こうした準 2 次元系の物性を論ずる際に出発点になるのは、系での電子の一粒子エネルギー準位の決定である。この問題については、Stern と Howard による古典的な論文が存在する^{(2), (3)}。彼らは、Hartree 近似に基づいて、MOS 反転層での電子エネルギー準位（サブバンド構造）を決定した。しかし、その後、密度汎関数を用いた安藤の研究や温度グリーン関数を用いた大川やわれわれの研究により、この系では多体効果が大きく、Hartree 近似では不十分であることが明らかになってきた^{(4), (5), (6)}。特に、安藤による計算は、Kamgar 達による光共鳴吸収の実験結果を説明することに成功した（詳しくは、文献（1）の III B 節を参照）。しかし、密度汎関数法によるエネルギー固有値が本当に一粒子エネルギーを表わしているかという原理的な問題は依然として残っている。一方、温度グリーン関数を用いた計算は、途中で計算技法上のいくつかの近似を含み、特に高温での定量的な結果については、必ずしも信頼できない。

Hartree 近似を越えて、多体効果をとり入れる次のステップとしては

Hartree-Fock 近似がある。この小論では、準2次元系に対する Hartree-Fock 近似を有限温度の場合に使える形で定式化することを試みる。

第2節では、自由エネルギーに対する変分原理を証明する。第3節では、この変分原理に基づき、有限温度での Hartree-Fock 近似を導く。最後の節では、第3節の結果を準2次元系に適用し、エネルギー準位と束縛状態の波動関数を決定するための固有方程式を求める。

2. 変分法による密度行列の計算

系を記述するハミルトニアン \mathcal{H} および個数演算子 \mathcal{N} が与えられているとする。それに対し、正定値で $\text{Tr}\rho=1$ をみたす演算子 ρ を変数とする汎関数 $\Omega[\cdot]$ を定義する：

$$\Omega[\rho] \equiv \text{Tr} \left\{ \rho \left(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N} + \frac{1}{\beta} \ln \rho \right) \right\}. \quad (1)$$

ただし、 μ は化学ポテンシャル、 β は系の絶対温度 T と Boltzmann 定数 k を使って、 $\beta=1/kT$ と表わされる定数である。

このとき次のような変分原理が成り立つ。

$\Omega[\rho]$ を最小にする ρ は

$$\rho_0 \equiv \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N})] / \text{Tr} \exp[-\beta(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N})] \quad (2)$$

で与えられる。すなわち、正定値で $\text{Tr}\rho=1$ をみたす任意の演算子 ρ に対し、不等式

$$\Omega[\rho] \geq \Omega[\rho_0] \quad (3)$$

が成り立つ。ただし、等号が成り立つのは $\rho=\rho_0$ の場合である。

最小値 $\Omega[\rho_0]$ は系の自由エネルギーに他ならない。この変分原理は、密度行列 ρ_0 と自由エネルギー $\Omega[\rho_0]$ を近似的に求める方法を与える。適当な試行関数 ρ のクラスを考え、その中で $\Omega[\rho]$ を最小にすると、最小値は自由エネルギーの、最小値を与える ρ は密度行列の、それぞれ近似解になっていると考えられる。

不等式 (3) は次のようにして証明される。正定値で $\text{Tr}\rho=1$ である任意

の演算子 ρ は、適当なエルミート演算子 K を使って、

$$\rho = e^{-\beta K} / \text{Tr} e^{-\beta K}$$

と書き表わすことができる。

$$A \equiv K - (\mathcal{H} - \mu \mathcal{N})$$

として、パラメータ λ に依存する ρ_λ を

$$\rho_\lambda = e^{-\beta K_\lambda} / \text{Tr} e^{-\beta K_\lambda},$$

$$K_\lambda = \mathcal{H} + \lambda A - \mu \mathcal{N}$$

と定義すると、 $\rho_1 = \rho$ であり、 ρ_0 は式 (2) に一致する。したがって、

$$\Omega[\rho] - \Omega[\rho_0] = \int_0^1 d\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \Omega[\rho_\lambda] \quad (4)$$

汎関数 $\Omega[\cdot]$ の定義より

$$\Omega[\rho_\lambda] = -\frac{1}{\beta} \ln(\text{Tr} e^{-\beta K_\lambda}) - \lambda \text{Tr}(\rho_\lambda A)$$

であるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \Omega[\rho_\lambda] &= -(\beta \text{Tr} e^{-\beta K_\lambda})^{-1} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\text{Tr} e^{-\beta K_\lambda}) - \text{Tr}(\rho_\lambda A) \\ &\quad - \lambda \text{Tr} \left(\frac{\partial \rho_\lambda}{\partial \lambda} A \right) \end{aligned} \quad (5)$$

恒等式

$$-\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{-\beta K_\lambda} = -\beta \int_0^1 e^{-\beta \tau K_\lambda} \frac{\partial K_\lambda}{\partial \lambda} e^{-\beta(1-\tau)K_\lambda} d\tau \quad (6)$$

を使うと

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} (\text{Tr} e^{-\beta K_\lambda}) = -\beta \text{Tr}(A e^{-\beta K_\lambda}). \quad (7)$$

したがって、式 (5) の第 1 項と第 2 項は相殺し、

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \Omega[\rho_\lambda] = -\lambda \text{Tr} \left(\frac{\partial \rho_\lambda}{\partial \lambda} A \right) \quad (8)$$

ρ_λ の定義を λ で微分し、式 (6), (7) を使うと

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_\lambda}{\partial \lambda} &= -\beta (\text{Tr} e^{-\beta K_\lambda})^{-1} \int_0^1 e^{-\beta \tau K_\lambda} A e^{-\beta(1-\tau)K_\lambda} d\tau \\ &\quad + \beta (\text{Tr} e^{-\beta K_\lambda})^{-1} e^{-\beta K_\lambda} \text{Tr}(\rho_\lambda A). \end{aligned}$$

と書ける。これを式 (8) に代入すると、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \lambda} \Omega[\rho_\lambda] &= \beta \lambda \text{Tr} \int_0^1 D e^{-\beta \tau K_\lambda} D e^{\beta \tau K_\lambda} \rho_\lambda d\tau \\ &\quad - \beta \lambda \{\text{Tr}(\rho_\lambda D)\}^2 \\ &= \beta \lambda \text{Tr} \int_0^1 \{D_\tau - \text{Tr}(\rho_\lambda D_\tau)\}^2 \rho_\lambda d\tau. \end{aligned} \quad (9)$$

ただし、 D_τ は

$$D_\tau = e^{-(1/2)\beta \tau K_\lambda} D e^{(1/2)\beta \tau K_\lambda}$$

で定義される演算子である。 ρ_λ と $\exp[(1/2)\beta \tau K_\lambda]$ は交換するので、等式 $\text{Tr}(\rho_\lambda D_\tau) = \text{Tr}(\rho_\lambda D)$ が成り立つことに注意しよう。

式 (9) の右辺の積分は明らかに非負で、式 (4) の右辺の積分も非負になる。積分がゼロになるのは、 $D_\tau = \text{Tr}(\rho_\lambda D_\tau)$ 、すなわち、 D が恒等演算子の定数倍になるときだけである。そのとき $\rho = \rho_0$ である。こうして変分原理 (3) が証明された。

3. 有限温度での Hartree-Fock 近似

前節で導いた変分原理を用いて、電子系に対する Hartree-Fock 近似を有限温度の場合に拡張する。

電子を表わす場の演算子を $\psi(r)$ とすると、系のハミルトニアン \mathcal{H} と個数演算子 \mathcal{N} は、次のように書かれる：

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int dr \psi^\dagger(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(r) \right) \psi(r) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int dr dr' \psi^\dagger(r) \psi^\dagger(r') u(r-r') \psi(r') \psi(r), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\mathcal{N} = \int dr \psi^\dagger(r) \psi(r). \quad (11)$$

ここで、 $v(r)$ は系に対する外場のポテンシャルであり、 $u(r-r')$ は電子間にはたらく Coulomb ポテンシャルを表わす。

場の演算子 $\psi(r)$ を、適当な完全正規直交関数系 $\{\phi_k(r)\}$ を用いて、

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

のように展開すると、演算子 $a_{\mathbf{k}}$ と $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ は反交換関係

$$\{a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

をみたし、 $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を波動関数とする状態の電子を消滅あるいは生成する演算子とみなすことができる。展開 (12) を代入すると、式 (10), (11) は

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \mathbf{k} | h | \mathbf{k}' \rangle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | u | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\mathcal{N} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \quad (14)$$

と書き換えられる。ここで、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | h | \mathbf{k}' \rangle &= \int d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\mathbf{r}) \right\} \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}), \\ \langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | u | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{\mathbf{k}_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}_3}(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}_4}(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

式 (14) を導く際には、 $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ の正規直交性：

$$\int d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (15)$$

を用いた。

ここで、 ρ に対する試行関数として、

$$\rho = e^{-\beta K_1} / \text{Tr} e^{-\beta K_1}, \quad (16)$$

$$K_1 = \sum_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}} - \mu) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}$$

という形のものを考え、 $E_{\mathbf{k}}$ と $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ を変分パラメータとして、 $\Omega[\rho]$ を最小にすることを考える。

ρ を上の形にとると、次のようなトレースは容易に計算できる：

$$\text{Tr} e^{-\beta K_1} = \prod_{\mathbf{k}} [1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{k}} - \mu)}] \equiv Z_1,$$

$$\text{Tr} \rho a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f(E_{\mathbf{k}}),$$

$$\text{Tr} \rho a_{\mathbf{k}_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} = (\delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} - \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_4}) f(E_{\mathbf{k}_1}) f(E_{\mathbf{k}_2}).$$

ただし, $f(E)$ は Fermi 分布関数

$$f(E) = (e^{\beta E} + 1)^{-1}$$

を表わす。

これらの結果を使うと, $\Omega[\rho]$ は

$$\begin{aligned} \Omega[\rho] = & \sum_k (\langle k|h|k\rangle - E_k) f(E_k) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2} (\langle k_1 k_2|u|k_2 k_1\rangle - \langle k_1 k_2|u|k_1 k_2\rangle) f(E_{k_1}) f(E_{k_2}) \\ & - \frac{1}{\beta} \sum_k \ln \{1 + e^{-\beta(E_k - \mu)}\} \end{aligned} \quad (17)$$

と書ける。 $\Omega[\rho]$ を最小にするパラメータを求めるために, E_k による微分をゼロとおくと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial E_k} \Omega[\rho] = & \{ \langle k|h|k\rangle - E_k + \sum_{k'} (\langle k, k'|u|k', k\rangle \\ & - \langle k, k'|u|k, k'\rangle) f(E_{k'}) \} \frac{\partial}{\partial E_k} f(E_k) = 0. \end{aligned}$$

つまり,

$$E_k = \langle k|h|k\rangle + \sum_{k'} (\langle k, k'|u|k', k\rangle - \langle k, k'|u|k, k'\rangle) f(E_{k'}) \quad (18)$$

が得られる。 $\phi_k(\mathbf{r})$ による変分は, 正規直交条件 (15) をみたすという制限条件つきで行う必要がある。そのために Lagrange の未定乗数 $\lambda_{kk'}$ を導入すると, $\phi_k^*(\mathbf{r})$ による変分がゼロという条件は

$$\frac{\delta}{\delta \phi_k^*(\mathbf{r})} \{ \Omega[\rho] - \sum_{k, k'} \lambda_{kk'} \int d\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}') \phi_{k'}(\mathbf{r}') \} = 0$$

と書ける。 $\Omega[\rho]$ の具体的な表式 (17) を代入すると,

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\mathbf{r}) \right) \phi_k(\mathbf{r}) + \sum_{k'} \int d\mathbf{r}' \phi_{k'}^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_{k'}(\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) f(E_{k'}) \right. \\ & \quad \left. - \sum_{k'} \int d\mathbf{r}' \phi_{k'}^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}') \phi_{k'}(\mathbf{r}) f(E_{k'}) \right\} f(E_k) \\ & \quad - \sum_{k'} \lambda_{kk'} \phi_{k'}(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned}$$

あるいは,

$$\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f(E_{\mathbf{k}})$$

という記法を導入して、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}') \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \quad (19)$$

と書くこともできる。 $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ による変分がゼロという条件は、方程式 (19) に複素共役な式を与えるだけで、独立な条件にはならない。

まとめると、式 (16) で与えられる形をした ρ のクラスの中で、 $\Omega[\rho]$ を最小にする ρ は、変分パラメータ $E_{\mathbf{k}}$ と $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ を、方程式 (15), (18) および (19) を満足するように取ることで実現される。前節で導いた変分原理によればこのようにして求められた ρ は、系の密度行列の近似解を与えるはずである。

方程式 (15), (18), (19) を満たす $E_{\mathbf{k}}$ と $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ は次のような微積分方程式の固有値と固有関数で与えられる：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}') \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = \varepsilon_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (20)$$

ただし

$$\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) f(\varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (21)$$

適当な境界条件のもとで、この方程式をみたす $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を求めるという問題は典型的な固有値問題になる。

定義により、 $\rho^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 。このことから、式 (20) の左辺の第2項に現れる積分演算子はエルミート演算子であることがわかる。第1項の演算子がエルミートであることは自明だから、固有値 $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ は実数に限られる。また、異なる固有値に属する固有関数が互いに直交することも容易に証明できる。

条件 (15) をみたす固有関数の組 $\{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ と対応する固有値の組 $\{\varepsilon_{\mathbf{k}}\}$ を求めることができれば、これらが $\Omega[\rho]$ を最小にする条件、(15), (18), (19)

をみたくことは容易にわかる。実際に、 $E_k = \epsilon_k$ とし、Lagrange の未定乗数を $\lambda_{kk'} = \delta_{kk'} f(\epsilon_k)$ ととれば、式(20) は式(19) に他ならない。また、式(20) に $\phi_k^*(\mathbf{r})$ をかけて \mathbf{r} で積分すると、式(18) で E_k を ϵ_k に置きかえた式が得られる。これは E_k として固有値 ϵ_k をとればよいことを意味している。

こうして、 $\Omega[\rho]$ を最小にするパラメータを見つける問題は、方程式(20) で与えられる固有値問題を解くことに帰着された。いいかえると、エネルギー ϵ_k をもち、波動関数が $\phi_k(\mathbf{r})$ であるような状態にある電子が独立に運動している系の熱平衡状態が、相互作用をしている系の熱平衡状態のよい近似になっているというわけである。

方程式(20) が、Hartree-Fock 近似での電子の運動方程式を有限温度の場合に拡張したものになっていることは、一目瞭然である。実際に、温度をゼロにした極限、すなわち、 $\beta \rightarrow \infty$ の極限では、式(21) の $\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ は

$$\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = \sum_{|\epsilon_k| \leq \epsilon_F} \phi_k^*(\mathbf{r}') \phi_k(\mathbf{r}) \quad (22)$$

となり、式(20) は通常の Hartree-Fock 方程式に一致する。

式(22) で与えられる $\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ は、この近似での密度行列を \mathbf{r} 表示したものに他ならない。特に $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ とした $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ は、熱平衡状態での電子の空間分布を表わしている。

系の全電子数 N は

$$N = \int \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_k f(\epsilon_k) \quad (23)$$

で与えられる。これは、全電子数 N と化学ポテンシャル μ を結びつける式になっている。

4. 準2次元系への適用

前節で導出した有限温度の Hartree-Fock 方程式(20) を系が準2次元の場合に適用してみよう。

ここで、準2次元系と呼ぶのは、ある面に平行な方向に並進対称性をもつ系

である。具体的には、MOS 構造での表面反転層や、超格子構造のヘテロ界面に生ずる伝導電子層のような系を考えればよい。しかし、ここでは、ポテンシャルの具体的な形にはよらない一般的な議論をする。

並進対称性をもつ方向に xy 平面を、それに垂直に z 軸をとることにする。また記号、 $\mathbf{x}=(x, y)$, $\mathbf{r}=(\mathbf{x}, z)$ を用いる。この座標では、外場のポテンシャル v は z のみに依存する。また、電子間の相互作用は $u(\mathbf{x}-\mathbf{x}', z, z')$ と書ける。 z 方向の並進対称性はないので、一般には、 u は $z-z'$ のみの関数とは限らない。実際に、界面での鏡像力のようなものを考えると、 u は $z+z'$ に依存する項を含む。

xy 面内の並進対称性を考慮して、 $\phi_k(\mathbf{r})$ を次のような形に書き表わす。

$$\phi_{\nu, p}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \chi_{\nu, p}(z). \quad (24)$$

ここで、 $\mathbf{p}=(p_x, p_y)$.

この表式を、 $\rho(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ の定義式 (21) に代入すると

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) &= \sum_{\nu} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \chi_{\nu p}^*(z') \chi_{\nu p}(z) f(\epsilon_{\nu p}) \\ &= \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} g(z', z; \mathbf{p}) \end{aligned} \quad (25)$$

となる。ただし、

$$g(z', z; \mathbf{p}) = \sum_{\nu} \chi_{\nu p}^*(z') \chi_{\nu p}(z) f(\epsilon_{\nu p}). \quad (26)$$

相互作用ポテンシャル u が $\mathbf{x}-\mathbf{x}'$ の関数であることに注意すると

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}') \\ &= \int dz' \hat{u}(0, z', z) \int d\mathbf{q} g(z', z'; \mathbf{q}), \\ & \int d\mathbf{r}' u(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \phi_{\nu, p}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \int dz' \int d\mathbf{q} \hat{u}(\mathbf{p}-\mathbf{q}, z', z) g(z', z; \mathbf{q}) \chi_{\nu p}(z') \end{aligned}$$

と書ける。ただし、 \hat{u} は u の Fourier 変換

$$\tilde{u}(\mathbf{p}, z', z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, z', z)$$

を意味する。これらを，方程式 (20) に代入すると， $\chi_{\nu p}(z)$ に対する固有方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + v(z) + \int dz' \tilde{u}(\mathbf{0}, z', z) \int d\mathbf{q} g(z', z'; \mathbf{q}) \right\} \chi_{\nu p}(z) - \int dz' \int d\mathbf{q} \tilde{u}(\mathbf{p}-\mathbf{q}, z', z) g(z', z'; \mathbf{q}) \chi_{\nu p}(z') = \varepsilon_{\nu p}^{(0)} \chi_{\nu p}(z) \quad (27)$$

が得られる。ただし， $\varepsilon_{\nu p}^{(0)}$ は関係式

$$\varepsilon_{\nu p} = \varepsilon_{\nu p}^{(0)} - \frac{\hbar^2}{2m} p^2 \quad (28)$$

で与えられる。

$\chi_{\nu p}(z)$ に対して適当な境界条件 (例えば， $\chi_{\nu p}(0) = \chi_{\nu p}(\infty) = 0$) を課して得た固有値 $\varepsilon_{\nu p}^{(0)}$ を式 (28) に代入して得られる $\varepsilon_{\nu p}$ が Hartree-Fock 近似での一粒子エネルギーを与えることになる。また，対応する固有関数 $\chi_{\nu p}(z)$ を用い式 (24) によって得られる $\phi_{\nu p}(\mathbf{r})$ が，エネルギー $\varepsilon_{\nu p}$ ，波数 p によってきまる状態の波動関数を与える。

$u(\mathbf{x}-\mathbf{x}', z, z')$ として Coulomb ポテンシャル

$$u(\mathbf{x}-\mathbf{x}', z, z') = \frac{e^2}{\kappa_s} \frac{1}{\{(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2 + (z-z')^2\}^{1/2}} \quad (29)$$

をとると，Fourrir 変換 $\tilde{u}(\mathbf{p}, z, z')$ は

$$\tilde{u}(\mathbf{p}, z, z') = \begin{cases} \frac{2\pi}{p} e^{-p|z-z'|} & (p \neq 0) \\ 2\pi R - 2\pi|z-z'| & (p = 0) \end{cases} \quad (30)$$

と書ける。ここで， R は xy 平面の“半径”であり，本来は無限大になる量である。しかし，この発散は系の電気的中性をきちんと考慮すれば消去することができる。例えば，MOS 反転層の場合に，ゲート電極上の電荷のつくる電場を考えに入れると， R に比例する発散項は相殺されてしまう (詳しくは，文献 (6) を見よ)。

Hartree 近似，すなわち，方程式 (20) の左辺の最後の項を無視する近似

では、式 (20) は p に依存しなくなり、Stern と Howard が導いた方程式⁽²⁾ に帰着する。

文 献

- (1) 準2次元電子系についてのすぐれた総合報告として、T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern: Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 437. がある。
- (2) F. Stern and W. H. Howard: Phys. Rev. **163** (1967) 816.
- (3) F. Stern: Phys. Rev. **B5** (1972) 4891.
- (4) T. Ando: Phys. Rev. **B13** (1976) 3468.
- (5) F. J. Ohkawa: Surf. Sci. **58** (1976) 326.
- (6) K. Nakamura, H. Ezawa and K. Watanabe: Phys. Rev. **B22** (1980) 1892.