〔物性論研究 88（1955）より転載〕

電気伝導計算のノート

名大教養部　中　野　藤　生

（1955年9月12日受理）

§1.

先にかいた「ひとつの電気伝導計算法」[1]においては久保，富田の論文[2]にひきずられすぎて猿マネになったキライがあり，そのため生じた議論の不必要なアイマイさが気になるまゝしばらくすてゝあった．さいわい名古屋にみえた *Feynman* 教授が同様な計算を手がけておられ，短時間であったが有益な討論で啓発されたのがキッカケとなって話が少し明瞭になった．一つは前の時から感じとしては考えておったことであるが，*high frequency part* をねぐることはキッチリ正確なことであるということ．もう一つは *grüneisen* の式を出すこと．前に高温抵抗を出しただけだったのはウカツだった．基研の集りの時，久保さんのご教示をおねがいしたおり，この式が出るはずと久保さんがいわれた．リバプールからテガミもいただいて，中嶋さんもこの計算をやったということを知った．その後，糟谷さんとの討論で *Umklap* に関連してあとで§5で述べることを考えようとしはじめたが，なまけているうち中嶋さんの計算が有山先生のところに届いたので，これと並列にⅠ以後に考えたことをかくことにした．

§2.

Ⅰの(8)式の変形をやる．即ち

$$\varphi_{\nu\mu}(t)=\int_0^\beta d\lambda \left\langle e^{\lambda\mathcal{H}} j_\nu\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t)\right\rangle \tag{1}$$

Ⅰ(8)式で積分の前の $\frac{1}{c}$ は余計であった．$\mathcal{H}$は電場のないときの系のハミルトニヤン

$$\mathcal{H}\psi_n = E_n\cdot\psi_n \tag{2}$$

と．$\mathcal{H}$の固有函数．その固有値をψ_n，E_nとする．

$$\varphi_{\nu\mu}(t)=\int_0^\beta d\lambda\, \mathrm{Tr}\left(e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t)\right)\Big/\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right)$$

ところで

$$\int_0^\beta \mathrm{Tr}\left(e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t)\right) d\lambda$$

-(54)-

$$=\int_0^\beta \mathrm{Tr}\left(e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t)\, e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu\right) d\lambda \qquad \beta-\lambda\to\lambda \text{ と積分変数をかえて}$$

$$=\int_0^\beta \mathrm{Tr}\left(e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\mu(t)\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\nu\right) d\lambda$$

$$=\frac{1}{2}\int_0^\beta \mathrm{Tr}\left(e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\nu\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\mu(t) + e^{(\lambda-\beta)\mathcal{H}} j_\mu(t)\, e^{-\lambda\mathcal{H}} j_\nu\right) d\lambda$$

となり．これは(2)を使うとさらに

$$=\frac{1}{2}\int_0^\beta d\lambda \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} e^{\lambda(E_m-E_n)}\left(j_{\nu mn} j_{\mu nm}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t} + j_{\mu mn} j_{\nu nm}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t}\right)$$

$$=\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{E_m-E_n}\,\mathrm{Re}\left[j_{\nu mn} j_{\mu nm}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}\right].$$

$$\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\mathcal{H}}\right)=\sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$\therefore\ \varphi_{\nu\mu}(t)=\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{E_m-E_n}\,\mathrm{Re}\left(j_{\nu mn} j_{\mu nm}\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)t}\right)\Big/\sum_n e^{-\beta E_n} \tag{3}$$

とくに

$$\varphi_{\mu\mu}(t)=\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{E_m-E_n}\,|j_{\mu mn}|^2\cos\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}t\right)\Big/\sum_n e^{-\beta E_n} \tag{4}$$

電気伝導度 σ は

$$\sigma=\int_{-\infty}^{t}\varphi_{\mu\mu}(t-t_0)\,dt_0=\int_0^\infty \varphi_{\mu\mu}(\tau)\,d\tau.$$

$$=\pi\hbar\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}}{E_m-E_n}\,|j_{\mu mn}|^2\,\delta(E_m-E_n)\Big/\sum_n e^{-\beta E_n}$$

$$=\frac{\pi\hbar}{kT}\sum_n e^{-\beta E_n}\sum_m |j_{\mu mn}|^2\,\delta(E_m-E_n)\Big|\sum_n e^{-\beta E_n} \tag{5}$$

Feynman 教授は完全に exact な式をえたといわれたが．この式のことである．(5)式を前と同じように次のように取扱う．

$$\sigma=\frac{1}{kT}\int_0^\infty \chi(t)\,dt. \tag{6}$$

$$\chi(t)=\frac{1}{2}\left\langle\left(e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}j_\mu e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}+e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}j_\mu e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\right)j_\mu\right\rangle \qquad (6')$$

Iと同じく

$$\langle X\rangle=\mathrm{Tr}(Xe^{-\beta\mathcal{H}})/\mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$$

を用いている．$\mathcal{H}=\mathcal{H}_0+\mathcal{H}'$．$\mathcal{H}_0$は自由な電子と自由な格子波とのハミルトニアン，$\mathcal{H}'$は両者の相互作用のハミルトニアンとして，

$$j_\mu(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}j_\mu e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$$

$$=e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0t}j_\mu e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0t}+\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1\left[\mathcal{H}'(t_1),j_\mu\right]$$

$$+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\left[\mathcal{H}'(t_1),\left[\mathcal{H}'(t_2),j_\mu\right]\right]+\cdots \qquad (6'')$$

のような展開を行い，$\langle X\rangle$ を $\langle X\rangle_0$：

$$\langle X\rangle_0=\mathrm{Tr}\ (Xe^{-\beta\mathcal{H}_0})/\mathrm{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}_0}) \qquad (6''')$$

でおきかえる．このとき$\mathcal{H}_0$としてはクリコミの操作によつて十分キモノをきせられた電子及び格子波フオノンのハミルトニアンをとるべきで$\mathcal{H}'$はその残りである両者の相互作用であるようにとつておくべきである．$\mathcal{H}=\mathcal{H}_0+\mathcal{H}'$は始めからそのように操作された後のものと考えておく．やゝ余談にわたるが，$\mathcal{H}_0$と$\mathcal{H}'$との形の精密な議論が，最近 *Bardeen* と *Pines* とによつてなされている．[3] 結論は従来とられているものが妥当だということになるのだけれど，*Bohm-Pines* の例の *plasma* の方法を使って論ずるわけで，*plasma* の方法の主要な成果はマジメに考えるとズボラにみえる従来の取扱いも偶然か必要か大過ないものであることを示した点にあると思うけれど，この場合もそういうことを示したわけである．

(6′)に(6″)をいれ，(6‴)を使うと，

$$\chi(t)=\langle j_\mu^2\rangle+\frac{i}{\hbar}\sum_\omega\left\langle\left[\mathcal{H}'_\omega,j_\mu\right]j_\mu\right\rangle\int_0^t\cos(\omega t_1)$$

$$-\frac{1}{\hbar^2}\sum_\omega\left\langle\left[\mathcal{H}'_\omega,\left[\mathcal{H}'_{-\omega},j_\mu\right]\right]j_\mu\right\rangle\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\cos\omega(t_1-t_2)$$

$$=\langle j_\mu^2\rangle-\frac{1}{\hbar^2}\sum_\omega\left\langle\left[\mathcal{H}'_\omega,\left[\mathcal{H}'_{-\omega},j_\mu\right]\right]j_\mu\right\rangle\int_0^t d\tau\,(t-\tau)\cos(\omega\tau)$$

この式もふくめて以後$\langle\cdots\rangle_0$を単に$\langle\cdots\rangle$とかいた．$\mathcal{H}'_\omega$等のイミはIと同じで，

-(56)-

$$e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t}\,\mathcal{H}'\,e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t} = \sum_{\omega}\mathcal{H}'_{\omega}\,e^{i\omega t}$$

上の式を

$$\chi(t) = \langle j^2 \rangle \left\{ 1 - \int_0^t d\tau\,(t-\tau)\,f(\tau) \right\} \qquad (7)$$

$$f(\tau) = \frac{1}{\hbar^2\langle j_\mu^2 \rangle}\sum_{\omega}\langle [\mathcal{H}'_{\omega}[\mathcal{H}'_{-\omega}, j_\mu]]\,j_\mu \rangle \cos(\omega\tau) \qquad (7')$$

とかく.

$$\chi(t) = \langle j_\mu^2 \rangle\, e^{\psi(t)} \qquad (8)$$

$$t \to \infty :\ \psi(t) \sim -\nu t \qquad (8')$$

を仮定すると

$$\nu = \int_0^\infty f(\tau)\,d\tau = \frac{\pi}{\hbar^2\langle j_\mu^2 \rangle}\sum_{\omega}\langle [\mathcal{H}'_{\omega}[\mathcal{H}'_{-\omega}, j_\mu]]\,j_\mu \rangle\,\delta(\omega)$$

$$= \frac{\pi}{\hbar^2\langle j_\mu^2 \rangle}\sum_{\omega}\langle [\mathcal{H}'_{\omega}, j_\mu][j_\mu, \mathcal{H}'_{-\omega}] \rangle\,\delta(\omega) \qquad (8'')$$

こゝでは *high frequency part* をねぐるような近似はいらぬ.

$$\sigma = \frac{1}{kT}\int_0^\infty \chi(t)\,dt = \frac{\langle j_\mu^2 \rangle}{kT}\int_0^\infty e^{-\nu t}\,dt$$

$$= \frac{\langle j_\mu^2 \rangle}{\nu kT} = \frac{\hbar^2\langle j_\mu^2 \rangle}{\pi kT}\,\frac{1}{\sum_{\omega}\langle [\mathcal{H}'_{\omega}, j_\mu][j_\mu, \mathcal{H}'_{-\omega}] \rangle\,\delta(\omega)} \qquad (9)$$

§3.

$\varepsilon_K = \frac{\alpha}{2}K^2$を仮定して (9)を計算する.

$$j_\mu = -\frac{e}{\hbar}\sum_K \frac{\partial\varepsilon}{\partial K_\mu}\,a_K^*\,a_K = -\frac{\alpha e}{\hbar}\sum_K K_\mu\,a_K^*\,a_K$$

$$\langle j_\mu^2 \rangle = \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 \left\langle \sum_K K_\mu a_K^* a_K \sum_{K'} K'_\mu a_{K'}^* a_{K'} \right\rangle$$

$$= \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 \left\langle \sum_K K_\mu a_\mu^* a_K \right\rangle^2 + \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 \left\{ \left\langle \sum_K K_\mu^2 (a_K^* a_K)^2 \right\rangle - \sum_K \langle K_\mu^2 a_K^* a_K \rangle \right\}$$

$$= 0 + \left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 \left\{ \sum_K K_\mu^2 (f_K - f_K^2) \right\}$$

$$= -\left(\frac{\alpha e}{\hbar}\right)^2 kT \sum_K K_\mu^2 \frac{\partial f_K}{\partial \varepsilon_K} = -\frac{1}{3}\left(\frac{e}{\hbar\pi}\right)^2 \alpha kT \int_0^\infty K^3 \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon$$

$$= \frac{1}{3}\left(\frac{e}{\hbar\pi}\right)^2 kT K_0^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial K}\right)_0 ,$$

$$f_K = \langle a_K^* a_K \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_K - \mu}{kT}} + 1}$$

K_0 : *Fermi* 準位の波数の 2π 倍.

$K_0^3 = 3\pi^2 n$ (n : 単位体積中の電子数)

$$[j_\mu, \mathcal{H}'_\omega] = -A\alpha \sum \sqrt{k}\, k_\mu\, a_{K+k}^* a_k b_k + A\alpha \sum \sqrt{k}\, k_\mu\, a_K^* a_{K+k} b_k^*$$

$$\varepsilon_{K+k} - \varepsilon_K - \hbar\omega_K = \hbar\omega \qquad \varepsilon_{K+k} - \varepsilon_K - \hbar\omega_k = -\hbar\omega$$

$$A = \left(\frac{2\hbar C^2}{9NMS}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{e}{\hbar}$$

M : イオンの質量. N : 単位体積中のイオンの数, S : 音速.

c : *Sommerfeld - Bethe* の常数

$$\therefore \sum \langle [j_\mu, \mathcal{H}'_\omega][\mathcal{H}'_{-\omega}, j_\mu] \rangle \delta(\omega)$$

$$= A^2\alpha^2 \sum_{\substack{K,k \\ \varepsilon_{K+k}-\varepsilon_K-\hbar\omega_k = \pm\hbar\omega}} k\, k_\mu^2 [f_{K+k}(1-f_K)(n_k+1) + f_K(1-f_{K+k}) n_k] \delta(\omega)$$

$$= A^2\alpha^2 \sum_{K,k} k\, k_\mu^2 [f_{K+k}(1-f_K)(n_k+1) + f_K(1-f_{K+k}) n_k] \delta\left(\frac{\varepsilon_{K+k} - \varepsilon_K}{\hbar} - \omega_k\right)$$

$$= 2A^2\alpha^2 \sum_{K,k} k\, k_\mu^2 (f_K - f_{K+k})(n_k+1) n_k \delta\left(\frac{\varepsilon_{K+k} - \varepsilon_K}{\hbar} - \omega_k\right)$$

$$= 2A^2\alpha^2 \frac{1}{\pi^2}\int_0^\infty K^2 dK \frac{1}{4\pi^2}\int_0^{k_0} k^2 dk \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\, k\, k_\mu^2 (f_K - f_{K+k})$$

$$\times (n_k+1) n_k \delta\left(\frac{\varepsilon_{K+k} - \varepsilon_K}{\hbar} - \omega_k\right)$$

$$= \frac{\hbar A^2}{6\pi^4}\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right) d\varepsilon \int_0^{k_0} k^4 dk\, \hbar\omega_k \left(-\frac{\kappa T}{\hbar S}\right) \frac{\partial n_k}{\partial k}$$

$$= -\frac{\hbar A^2}{6\pi^4}\int_0^{k_0} k^5 \frac{\partial n_k}{\partial k}\, dk$$

$$= \frac{4\hbar\, C^2 e^2 N}{3M} F\left(\frac{\Theta}{T}\right) \qquad n_k = \langle b_k^* b_k \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar s k}{kT}} - 1}$$

$$F(x) = x^{-6}\int_0^x y^5 \frac{e^y}{(e^y-1)^2}\, dy$$

これらを(9)にいれると

$$\sigma = \frac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial K}\right)_0^2}{4\pi^3 \hbar^2 C^2\, \Phi\left(\frac{\Theta}{T}\right)} \tag{10}$$

$$\Phi(x) = x^{-5}\int_0^x \frac{y^5\, e^y}{(e^y-1)^2}\, dy \tag{10'}$$

添字0は Fermi 準位での値．又は格子波の切断波数における値をいみする．ν は1原子あたりの電子数．　$\nu = n/N$

かくて Grüneisen の式をえた．

$$\Phi(x) \approx \begin{cases} \frac{1}{4} x^{-1} & (x \ll 1), \\ 120\, \zeta_5\, x^{-5} & (x \gg 1). \end{cases} \qquad \zeta_5 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^5}$$

故

$$\sigma = \begin{cases} \dfrac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial K}\right)_0^2}{480\, \pi^3 \hbar^3 C^2 \zeta_5} \left(\dfrac{\Theta}{T}\right)^5, & (T \ll \Theta) \\ \dfrac{\nu e^2 M s k_0 K_0 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial K}\right)_0^2}{\pi^3 \hbar^2 C^2} \dfrac{\Theta}{T} & \end{cases} \tag{11}$$

§4

ついでに交流電場の場合の計算もかいておく．

$E(t) = E\cdot\cos(\nu t)$ がかゝるときの系の電流密度は

$$J(t) = \mathcal{R}e\left[E\int_{-\infty}^{t} \varphi_{\mu\mu}(t-t_0)\, e^{i\nu t_0}\, dt_0 \right]$$

$$= \mathcal{R}e\left[E(t)\int_0^\infty \varphi_{\mu\mu}(\tau)\,e^{-i\nu\tau}\,d\tau\right]$$

$$= \mathcal{R}e\left[E(t)\sum_{m,n}\frac{e^{-\beta E_m}-e^{-\beta E_n}}{E_m-E_n}\,|j_{mn}|^2\int_0^\infty \cos\left(\frac{E_m-E_n}{\hbar}\tau\right)e^{-i\nu\tau}\,d\tau\right.$$

$$= \frac{1}{kT}\,\mathcal{R}e\left[E(t)\int_0^\infty d\tau\,\chi(\tau)\,e^{-i\nu\tau}\right]$$

(8) (8a) (8b) を使うと、§2で $a\nu$ を ν_0 とかいて

$$J(t) = \frac{1}{kT}\,\mathcal{R}e\left[E(t)\int_0^\infty d\tau\,\langle j_\mu^2\rangle\,e^{-\nu_0\tau-i\nu\tau}\right]$$

$$= \frac{\langle j^2\rangle}{kT}\,\frac{E}{\nu_0^2+\nu^2}\left\{\nu_0\cos(\nu t)+\nu\sin(\nu t)\right\} \qquad (12)$$

$$\widetilde{E}(t) = E\cdot e^{i\nu t}, \qquad E(t) = \mathcal{R}e\,\widetilde{E}(t), \qquad J(t) = \mathcal{R}e\,\widetilde{J}(t)$$

なるものを考えると、

$$\widetilde{J}(t) = \widetilde{\sigma}\,\widetilde{E}(t)$$

$$\widetilde{\sigma} = \frac{\langle j_\mu^2\rangle}{kT}\,\frac{e^{-i\eta}}{\sqrt{\nu_0^2+\nu^2}} \qquad (12')$$

$$\eta = tg^{-1}\,\frac{\nu}{\nu_0}$$

と表わせる。

§5.

Umklap を考えにいれないと、δ函数的なパルス電場をかけた後、系の全運動量は保存し、長時間の後も電流がきえないはずで、(8) (8′) のように仮定することは文字どおりにはよくないと思われる。この問題については又いづれ考えてみたい。今は物理的にみて、(8)、(8′) を仮定することは許されることだと考えておく。

Feynman 教授との討論の機会をつくってくださった有山先生、討論してくださったS研の皆さん、とくに有益でシンラツな批判をしていたゞく糟谷さんに謝意を表する。有益なご教示をいたゞいた久保さん、*Feynman* 教授、おテガミをいたゞいた中嶋さんにお礼申しあげる。中嶋さんには、酷暑にへばっていたまゝ、返事をさぼってしまったことをおわびしたい。

-(60)-

文　　　献

1) 中 野, 物研. 84. 25 (1955).

2) *R. Kubo & K. Tomita, Journ. Phys. Soc. Jap.* 9 (1954)

3) *Bardeen & Pines*, 中嶋さん宛名大に送ってきた予稿.