

Piezo-electric-polaron の ground state energy I (いくつかの optical-polaron 理論の応用)

東大教養基礎科学科 岡本 謙 一

(3月16日受理)

§ 1 序

CdS に於いて伝導電子のサイクロトロン質量が他の方法で観測される質量と比べて15%位小さい値を示すことの説明として、Mahan-Hopfield<sup>1)</sup> がピエゾ型電子-格子相互作用を導入して以来、ピエゾ型ポーラロン問題が、第1にサイクロトロン質量を計算するという立場から、第2に光学的ポーラロン問題との類似性(粒子とスカラー場との相互作用の例が固体中で実現されること)の観点から、多くの研究がなされて来た。第2の点に於いて Osaka<sup>2)</sup> は温度グリーン関数の簡単な自己エネルギー部分を用いて、Mahan-Hopfield とは異つたポーラロンの分散関係を得た。Whitfield 等<sup>3)</sup> は、0°K の場合のピエゾポーラロン問題を考え、Lee-Low-Pines-Gurari<sup>4)</sup> (以下L-L-P-G と書く)の方法を用いて、彼等のいわゆる Energy-Crossing-Argument とほぼ一致する分散関係を求めた。しかし、L-L-P-Gの方法では、Many-phonon-state を考慮しているが、波動関数自身が virtual-phonon 間の相関を無視した一種の Hartree 近似である欠点がある。これは、電子のまわりの virtual-phonon 数  $N$  が Coupling-Constant  $\alpha$  と  $N \sim \alpha/2$  で関係づけられる光学的ポーラロン問題の時には、せいぜい、2-phonon, 3-phonon のみを考えればよいわけだから、一応よい近似と言える。<sup>5)</sup> しかしピエゾ型ポーラロンの時には、L-L-P-G流に virtual-phonon 数を計算すると赤外発散が起こり、決定できない。それでも光学的ポーラロンとは本質的に異なり、ピエゾ型ポーラロンでは Many-phonon を考えねばならない事情にあることは明らかであるゆえ、Coupling constant が光学的ポーラロンと比較して小さいと言つても、virtual-phonon 間の相関は無視できない。実際に L-L-P-Gの方法に於いて2度カノニカル変換した後のハミルトニアンのおつりの項を2次摂動で計算すれば、それは相当大きくなり、Whitfield

岡本謙一

等の定性的議論から予想される分散関係（ポーラロンのエネルギー  $E(K)$  は全運動量  $K$  に対して、 $K \gtrsim 1$  の範囲でほとんど直線的に増加する）から外れて来る。

単なる L-L-P-G の近似では、 $K \gtrsim 1$  の範囲において分散関係は直線状な増加を示し、定性的議論と一致する。L-L-P-G が直線状な分散関係を与えるのは、図 1 から分かるように、L-L-P-G がよい近似と思われる光学的ポーラロンの時にも生ずることである。光学的ポーロン問題の時の Energy-Crossing-Argument から期待される分散関係は、電子のエネルギーが光学 phonon に近づく時 bend-over する特徴があるが、L-L-P-G ではこの傾向を示さない。ピエゾ型ポーラロンの時に、L-L-P-G が何故、定性的議論と合り分散関係を与えるかの説明について明確な答えは得られないゆえ、分散関係が  $K$  に linear に増加するのは、L-L-P-G の近似の性質であるようにも思われる。つまり L-L-P-G では、Many-phonon-state を考えているが、その結果 1-phonon-state すら正しい量子状態で取り入れられていない。

この点、我々が問題にした 1 次元モデルの weak-coupling ( $\gamma = 0.1$ ) の時にも図 2 に見られるように、L-L-P-G では、他の方法に見られる 0-phonon state と 1-phonon state との crossing に伴うエネルギー曲線の分離の様子は見られず、常に linear に増加する。全運動量  $K$  がどんなに大きくなってもエネルギーが  $K$  に linear で増加する傾向は、ground state としては、reasonable と思われる。つまり全運動量の大部分は phonon 系に食われていて、電子の方は完全に phonon を吐き出した状態にあり、運動量は殆んど 1 に等しく音速で動いているという像である。しかし運動量の大きい高速電子は、殆んど phonon と couple せず（ポーロンモデルは成立せず）その結果、分散関係は、むしろ Bloch 電子の  $K^2/2$  に近づいて行くのではないかと直感的には思われる。Mahan-Hopfield の結果は  $K$  の大きい時には、漸近的に  $K^2/2$  に近づいて行くことを示している。Whitfield 等も定性的議論においてエネルギー曲線が continuum state に入りこみ、phonon の着物を脱いだ裸の電子の分散に近づいて行く可能性を示唆している。我々は Haga<sup>6)</sup> が光学的ポーロン問題で用いた方法を適用して、

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

分散関係が  $K$  の 1 の近傍では直線状に増加し,  $K \rightarrow \infty$  では Bloch 電子に漸近的に近づいて行く結果を得た。Haga の方法では, L-L-P-G では無視されている virtual-phonon 間の相関がある程度含まれている。

§ 2 に於いては, 近似の性質を見るために, 1次元モデルに於ける厳密解といくつかの近似方法を比較する。§ 3 に於いては, Haga の方法をピエゾに適用した時の結果を示す。特に我々は基底状態のエネルギー  $E(0)$  に対して数値計算により  $\alpha^2$  のオーダーまで求めた。§ 4 においては, この問題に path-integral の方法を適用した時の結果と展望を述べる。

§ 2 1次元モデル

1次元モデルに於いては, ある種の厳密解が得られる。我々は, これを数値的に求め, 他のいくつかの近似と比較する。光学的ポーラロンの時の Gross の議論と同様, 簡単のため, 波数  $q$  の phonon のみ考える。ハミルトニアン  $H$  は次の形で与えられる。

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} (Y_q^2 + \omega_q^2 X_q^2) + \alpha_q \sqrt{\frac{2}{\hbar \omega_q}} (Y_q \sin qx - \omega_q X_q \cos qx)$$

$$\alpha_q = -\frac{4\pi\beta e}{\epsilon} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_q}} \frac{1}{\sqrt{L}} = A \cdot \frac{1}{\sqrt{q}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}}$$

$$\omega_q = v_s q$$

$\beta$  ; 圧電定数       $\epsilon$  ; 誘電率       $\rho$  ; 線密度       $v_s$  ; 横波の音速

$L$  ; 1次元結晶の長さ       $m$  ; 電子のバンド質量

我々は, エネルギーの単位として  $m v_s^2$ , 長さの単位として  $K_s^{-1} = \left(\frac{m v_s}{\hbar}\right)^{-1}$  を用いる。又  $L=1$ ,  $A/m v_s^2 = r/2$  とおく。次の漸化式が得られる。

$$v_{n-1} = \frac{-\frac{r}{2\sqrt{q}} n^{1/2}}{(n+1)q - E + \frac{1}{2}(\xi - \frac{1}{2}q - nq)^2 + \frac{r}{2\sqrt{q}}(n+1)^{1/2} v_n} \quad (2.1)$$

$$v_0 = -\frac{\sqrt{q}}{r} \left( q - 2E + \left( \xi - \frac{1}{2}q \right)^2 \right) \quad (2.2)$$

ここで  $\xi = \frac{\lambda}{m v_s^2}$        $\lambda$  ; 全運動量       $E$  ; エネルギー

(2.1), (2.2) より適当な所で漸化式を打ち切ることにより, エネルギーが求められる。次に L-L-P-G の近似で計算する。その結果, 次の (2.3), (2.4) の方程式によりエネルギー  $E$  が求められる。

$$\eta K = \frac{r^2}{4} \frac{1}{q^2 (1 - (1-\eta)K + q/2)^2} \quad (2.3)$$

$$E(K) = \frac{1}{2} (1-\eta)^2 K^2 + \left(1 + \frac{q}{2}\right) \eta K - r^2 / \{ 2q^2 (1 - (1-\eta)K + q/2) \} \quad (2.4)$$

(2.3) より  $K$  の各々の値に対して,  $\eta$  を求め, (2.4) に代入して  $E(K)$  を求めるのである。次に Haga の方法 (変分法) で計算する。結果は, 次の (2.5), (2.6) で与えられる。

$$E(K) = K^2/2 + \left(q + \frac{q^2}{2}\right) f_q^2 - \frac{r}{\sqrt{q}} f_q + \frac{1}{2} (q f_q^2)^2 - K q f_q^2 + E_s(K) \quad (2.5)$$

$$E_s(K) = \frac{q^2 f_q^2 (q f_q^2 - K)^2}{E_s(K) - q^2/2 - q + K q - 2q^2 f_q^2} \quad (2.6)$$

$$f_q = \frac{r / (2\sqrt{q})}{q - (1-\eta)K q + q^2/2} \quad (2.7)$$

我々は簡単のため,  $q=1$  の場合を考え,  $r=0.1, 1$  の各々の場合について結果を図 2, 3 で示した。この図において零点振動は, 無視されている。上に述べたように  $r=0.1$  において L-L-P-G は, one-phonon state を正しく取り入れていないことがわかる。又  $r=0.1, 1$  の場合共 L-L-P-G は直線状な増加を示す。Haga の方法は, one-phonon state まで正確に取り入れられているゆえ, その範囲では厳密解に L-L-P-G よりも近い。

## § 3 3次元 Piezo-electric-polaron 問題

我々は, Hutson<sup>8)</sup> の近似に従つて, 連続的, 等方的モデルハミルトニアン  $H$  を用いる。

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{int} \quad (3.1)$$

$$H_{el} = \frac{P^2}{2m}, \quad m; \text{バンド質量} \quad (3.2)$$

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar v_s q (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}) \quad (3.3)$$

$$H_{int} = - \sqrt{\frac{2\pi\alpha' v_s \hbar^3}{m a_B V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) \quad (3.4)$$

$$\alpha' = \frac{4\pi(\tilde{\epsilon})^2}{\epsilon \rho v_s^2} \dots\dots\dots \text{無次元 Coupling 定数} \quad (3.5)$$

$$a_B = \frac{\epsilon \hbar^2}{m e^2} \dots\dots\dots \text{Bohr 半径} \quad (3.6)$$

ここで,  $\tilde{\epsilon}$ ; 平均された圧電定数テンソル  $\epsilon$ ; 誘電率  $\rho$ ; 密度  $v_s$ ; shear-mode の音速,  $\alpha'$  は CdS の場合は  $\approx 0.035$ 。エネルギーの単位として  $m v_s^2$ , 長さの単位として  $(\frac{m v_s}{\hbar})^{-1}$  をとり, ハミルトニアンを無次元化する。

$$H = \frac{P^2}{2} + \sum_{\mathbf{q}} q (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2}) - \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} \right\} \quad (3.7)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\alpha'}{a_B K_s} \quad \text{CdS の時} \quad \alpha \approx \frac{3}{4} \pi \quad (3.8)$$

我々は以下零点振動を無視した (3.7) の形のハミルトニアンを問題にする。

2次摂動の結果は次のとおりである。

$$E(0) = -\frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right|, \quad q_m; \text{デバイ波数} \quad (3.9)$$

岡本謙一

$$m^* = \frac{m}{1 - \frac{4\alpha}{3\pi} + \frac{4\alpha}{3\pi} \left( \frac{2}{q_m + 2} \right)^2} \quad (3.10)$$

L-L-P-Gの結果は、次のとおりである。

$$\begin{aligned} \eta t^2 P = & \frac{\alpha}{\pi} \left[ (q_m + 2) \ln \left| 1 + \frac{2t}{q_m + 2} \right| \right. \\ & \left. - (q_m + 2) \ln \left| 1 - \frac{2t}{q_m + 2} \right| - 2 \ln |1+t| + 2 \ln |1-t| \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

ここで  $(\eta - 1)P$  を  $t$  と置いた。Pは全運動量。

$$\begin{aligned} E(P) = & \frac{t^2}{2} - \frac{\alpha}{\pi} \frac{1}{t} \left[ 2(q_m + 2) \ln \left| \frac{q_m + 2 + 2t}{q_m + 2 - 2t} \right| \right. \\ & \left. + 4 \ln \left| \frac{1-t}{1+t} \right| + 2t \ln |(q_m + 2 + 2t)(q_m + 2 - 2t)| \right. \\ & \left. - 2t \ln |(2 + 2t)(2 - 2t)| \right] \end{aligned} \quad (3.12)$$

Pの小さい所で展開して

$$E(0) = -\frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| \quad (3.13)$$

$$m^* = m \left[ 1 + \frac{4\alpha}{3\pi} - \frac{4\alpha}{3\pi} \left( \frac{2}{q_m + 2} \right)^2 \right] \quad (3.14)$$

光学的ポーラロン同様なポーラロン質量の表式が得られる。L-L-P-Gの近似では、1度カノニカル変換した phonon 系のみハミルトニアンに対して波動関数  $\Psi = \exp(\sum_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{\mathbf{q}}) f_{\mathbf{q}}) |0\rangle$  を用いている。Ψは展開すると、 $\Psi = \exp(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} |f_{\mathbf{q}}|^2) \times \{ |0\rangle + \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ |0\rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} f_{\mathbf{q}_1} f_{\mathbf{q}_2} b_{\mathbf{q}_1}^+ b_{\mathbf{q}_2}^+ |0\rangle + \dots \}$  であるゆえ Hartree 近似で、virtual-phonon 間の相関は入っていない。我々は以下 Haga の方法をこの問題に適用しよう。

$$H^* = U_1^{-1} H U_1 = H_1^* + H_2^* + H_3^* \quad (3.15)$$

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

ただし  $U_1 = \exp(i(P - \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}) \mathbf{r})$ ;  $\mathbf{P}$  は全運動量で C-Number である。

$$H_1^* = \frac{P^2}{2} + \sum_{\mathbf{q}} \left( q + \frac{q^2}{2} \right) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} - \left( \frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^{\dagger}) \quad (3.16)$$

$$H_2^* = \frac{1}{2} \left\{ \left( \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \right)^2 - \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} q^2 \right\} \quad (3.17)$$

$$H_3^* = - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \quad (3.18)$$

ここで  $U_2 = \exp\left(\sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} - b_{\mathbf{q}})\right)$  を用いてカノニカル変換する。ただし  $f_{\mathbf{q}}$  は  $H_1^*$  をカノニカル変換した時,  $b_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ ,  $b_{\mathbf{q}}$  の係数が 0 になるように選ぶ。

$$f_{\mathbf{q}} = \left( \frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{q}} \frac{1}{q + q^2/2} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = U_2^{-1} H_1^* U_2 &= \frac{P^2}{2} - \frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (q^2 + 2q) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = U_2^{-1} H_2^* U_2 &= \frac{1}{2} \left( \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \right)^2 \\ &+ \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}'}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}) f_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + 2b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'}) \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} q^2 b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\mathcal{H}_3 = U_2^{-1} H_3^* U_2 = - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{q} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + f_{\mathbf{q}}) (b_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}) \quad (3.22)$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 = \frac{P^2}{2} - \frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| + \mathcal{H}' \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}' = & \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \left( \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \right)^2 - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} \\
 & - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{q} f_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}'} \\
 & + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}}
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

$\mathcal{H}_2$ ,  $\mathcal{H}_3$  を各々  $\mathcal{H}_1$  の摂動と考えると2次摂動を実行する。 $\mathbf{P} \ll 1$  の範囲を振りゆえ  $\mathcal{H}_3$  を摂動と考えるのはよいと思われる。 $\mathcal{H}_2$  については、後で見るように、摂動として扱つてよい。

$$\mathcal{H}_2 |0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' |1_{\mathbf{q}} 1_{\mathbf{q}'}\rangle \tag{3.25}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta E_2 = & \sum_n \frac{|(\mathcal{H}_2)_{0n}|^2}{E_0 - E_n} = - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{|f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'|^2}{q^2 + 2q + q'^2 + 2q'} \\
 = & - \frac{64\alpha^2}{3\pi^2} \left[ \int_0^{\sqrt{2}-1} f_1 dq + \int_{\sqrt{2}-1}^{q_m} f_2 dq \right] \tag{3.26}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_1 = & - \frac{(4 - q^2 - 2q)}{q(q+2)^4} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| + \frac{2}{(q+2)^3} \left( \frac{1}{q_m + 2} - \frac{1}{2} \right) \\
 & + \frac{(\sqrt{1 - q^2 - 2q} - 1)^3}{2\sqrt{1 - q^2 - 2q} q(q+2)^4} \ln \left| \frac{q_m + 1 - \sqrt{1 - q^2 - 2q}}{1 - \sqrt{1 - q^2 - 2q}} \right|
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_2 = & - \frac{(4 - q^2 - 2q)}{q(q+2)^4} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| + \frac{2}{(q+2)^3} \left( \frac{1}{q_m + 2} - \frac{1}{2} \right) \\
 & - \frac{q^2 + 2q - 4}{2q(q+2)^4} \ln \left| \frac{(q_m + 1)^2 + q^2 + 2q - 1}{q^2 + 2q} \right|
 \end{aligned}$$

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

$$+ \frac{3q^2 + 6q - 4}{q(q+2)^4} \frac{1}{\sqrt{q^2 + 2q - 1}}$$

$$\times \left[ \text{Arctan} \frac{q_m + 1}{\sqrt{q^2 + 2q - 1}} - \text{Arctan} \frac{1}{\sqrt{q^2 + 2q - 1}} \right]$$

$$q = 0 \quad ; \quad f_1 = 0, \quad q = \sqrt{2} - 1; \quad f_1 = f_2 = -3 \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| \\ + 2 \left( \frac{1}{q_m + 2} - \frac{1}{2} \right) + 3 \ln |q_m + 1| - \left( 1 - \frac{1}{q_m + 1} \right)$$

我々は, Whitfield 等と同じく  $q_m \approx 300$  を用いて上の積分を数値計算した。実際の piezo 型結晶 CdS や ZnO では  $q_m \approx 5000$  ゆえ正しくはないが, 無振動エネルギー  $E(0)_{\text{unp}}$  も  $\ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right|$  の形で  $q_m$  が入り, 又 Integrand も早く減少する傾向なので  $\Delta E_2 / E(0)_{\text{unp}}$  の値は余り変化しないと思われる。数値計算の結果  $\Delta E_2 \approx -0.067 \alpha^2$  となる。従つて  $E(0) = E(0)_{\text{unp}} + \Delta E_2$  は  $\alpha^2$  のオーダーまで, (3.27) で与えられる。

$$E(0) / 6.4 = -\alpha - 0.0105 \alpha^2 + O(\alpha^4) \quad (3.27)$$

$\alpha = 6$  でも 6.3% ゆえ  $\mathcal{M}_2$  を振動で扱うことは reasonable であろう。 $\mathcal{M}_3$  に対して 2 次振動エネルギー  $\Delta E_3$  を求めれば (3.28), (3.29) になる。

$$\Delta E_3 = \sum_n \frac{|(\mathcal{M}_3)_{0n}|^2}{E_0 - E_n} = - \sum_q \frac{|\mathbf{P} \cdot \mathbf{q} f_q|^2}{q(q + q^2/2)} \\ = \frac{8\alpha}{3\pi} P^2 \left[ \left( \frac{1}{q_m + 2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] \quad (3.28)$$

$$m^* = m / \left( 1 - \frac{4\alpha}{3\pi} + \frac{4\alpha}{3\pi} \left( \frac{2}{q_m + 2} \right)^2 \right) \quad (3.29)$$

我々は, さらに上で求めたハミルトニアン  $\mathcal{H}'$  ((3.24) 式) に対して

$|\mathbf{P}\rangle = |0\rangle + \sum_{\mathbf{W}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) |1_{\mathbf{W}}\rangle$  なる trial-function を用いる。これは phonon 系のハミルトニアン  $H^*$  に対して  $U_2 |\mathbf{P}\rangle = \exp \left( \sum_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+ - b_{\mathbf{q}}) f_{\mathbf{q}} \right) \times (|0\rangle + \sum_{\mathbf{W}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) |1_{\mathbf{W}}\rangle)$  を trial-function として選ぶことになる。

岡本謙一

$U_2 |F\rangle$  を  $\Psi$  とおき展開すれば (3.30) 式になる。

$$\begin{aligned} \Psi = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} |f_{\mathbf{q}}|^2\right) & \left[ |0\rangle + \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}} \left(1 + \frac{C_{\mathbf{q}}}{f_{\mathbf{q}}}\right) |1_{\mathbf{q}}\rangle \right. \\ & + \frac{1}{2!} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} f_{\mathbf{q}_1} f_{\mathbf{q}_2} \left(1 + \frac{2C_{\mathbf{q}_2}}{f_{\mathbf{q}_2}}\right) |1_{\mathbf{q}_1}, 1_{\mathbf{q}_2}\rangle \\ & + \frac{1}{3!} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} f_{\mathbf{q}_1} f_{\mathbf{q}_2} f_{\mathbf{q}_3} \left(1 + \frac{3C_{\mathbf{q}_3}}{f_{\mathbf{q}_3}}\right) |1_{\mathbf{q}_1}, 1_{\mathbf{q}_2}, 1_{\mathbf{q}_3}\rangle \\ & \left. + \dots \right] \quad (3.30) \end{aligned}$$

これは, L-L-P-G とは異なり virtual-phonon 間の相関がある程度取り入れられている。

$\langle \mathbf{P} | \mathcal{H} | \mathbf{P} \rangle = E'(\mathbf{P}) \langle \mathbf{P} | \mathbf{P} \rangle$  より  $C(\mathbf{P}, \mathbf{w})$  を変分パラメータとして  $E'(\mathbf{P})$  を計算する。その結果,

$$\begin{aligned} \left(1 + \sum_{\mathbf{w}} |C(\mathbf{P}, \mathbf{w})|^2\right) E'(\mathbf{P}) &= - \sum_{\mathbf{w}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) \mathbf{P} \cdot \mathbf{w} f_{\mathbf{w}} - \sum_{\mathbf{w}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w})^* \mathbf{P} \cdot \mathbf{w} f_{\mathbf{w}} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{w}} |C(\mathbf{P}, \mathbf{w})|^2 \mathbf{w}^2 - \sum_{\mathbf{w}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{w} |C(\mathbf{P}, \mathbf{w})|^2 \\ &\mp \sum_{\mathbf{w}} \mathbf{w} |C(\mathbf{P}, \mathbf{w})|^2 + \sum_{\mathbf{w}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) f_{\mathbf{w}} \cdot \sum_{\mathbf{w}'} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}') f_{\mathbf{w}'} \quad (3.31) \end{aligned}$$

$\delta E'(\mathbf{P}) / \delta C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) = 0$  より

$$C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) = C(\mathbf{P}, \mathbf{w})^* = \frac{2(1-\eta) f_{\mathbf{w}} \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}}{\mathbf{w}^2 + 2\mathbf{w} - 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{w} - 2E'(\mathbf{P})} \quad (3.32)$$

$$\text{ここで } \eta \mathbf{P} = \sum_{\mathbf{w}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) \mathbf{w} f_{\mathbf{w}} \quad (3.33)$$

$$E'(\mathbf{P}) = - \sum_{\mathbf{w}} C(\mathbf{P}, \mathbf{w}) \mathbf{P} \cdot \mathbf{w} f_{\mathbf{w}} = - \eta \mathbf{P}^2 \quad (3.34)$$

従つて,

$$E'(\mathbf{P}) = -2 \sum_{\mathbf{w}} \frac{(\mathbf{E}'(\mathbf{P}) + \mathbf{P}^2) f_{\mathbf{w}}^2 \mathbf{w}^2 \cos^2 \theta}{\mathbf{w}^2 + 2\mathbf{w} - 2\mathbf{P} \cdot \mathbf{w} \cos \theta - 2E'(\mathbf{P})} \quad (3.35)$$

ここで,  $\mathbf{P}$  と  $\mathbf{w}$  のなす角度を  $\theta$  とおいた。(3.35) を変形して (3.36) の連分数の形にする。

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

$$E'(P) = -P^2 + \frac{P^2}{1 + 2 \sum_{\mathbf{w}} \frac{f_{\mathbf{w}}^2 w^2 \cos^2 \theta}{w^2 + 2w - 2Pw \cos \theta - 2E'(P)}} \quad (3.36)$$

第 1 近似として右辺の  $E'(P)$  を  $-P^2$  におきかえる。

分母の  $\sum_{\mathbf{w}}$  の項を積分に変形すれば、

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{w}} \frac{f_{\mathbf{w}}^2 w^2 \cos^2 \theta}{w^2 + 2w - 2Pw \cos \theta + 2P^2} \\ &= -\frac{\alpha}{2\pi P^3} \int_0^{q_{\text{II}}} \frac{dw}{w^2 (w+2)^2} \times \left[ 4Pw(w^2 + 2w + 2P^2) \right. \\ & \quad \left. - (w^2 + 2w + 2P^2)^2 \ln \left| \frac{w^2 + 2w - 2Pw + 2P^2}{w^2 + 2w + 2Pw + 2P^2} \right| \right] \quad (3.37) \end{aligned}$$

ポーラロン質量を求めるために  $P \ll 1$  に対して被積分関数の  $P^2$  の項を無視し、べき級数展開すれば、(3.37) は (3.38) になる。

$$\approx -\frac{\alpha}{2\pi} \left[ \frac{8}{3} \left\{ \left( \frac{1}{q_{\text{II}} + 2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right\} + \frac{P^2}{5} \left\{ \left( \frac{2}{q_{\text{II}} + 2} \right)^4 - 1 \right\} \right] + O(P^4) \quad (3.38)$$

従って

$$\begin{aligned} E(P) &= E'(P) + \frac{P^2}{2} - \frac{4}{\pi} \alpha \ln \left| \frac{q_{\text{m}} + 2}{2} \right| \\ &= \frac{P^2}{2m^*} - \frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_{\text{m}} + 2}{2} \right| \\ m^*/m &= \frac{1 + \frac{2\alpha}{3\pi} - \frac{2\alpha}{3\pi} \left( \frac{2}{q_{\text{m}} + 2} \right)^2}{1 - \frac{2\alpha}{3\pi} + \frac{2\alpha}{3\pi} \left( \frac{2}{q_{\text{m}} + 2} \right)^2} \quad (3.39) \end{aligned}$$

$\alpha$  の小さい時には、L-L-P-G の結果と一致する。(3.37) は  $P \rightarrow \infty$  で  $O(1/P)$  である故、 $E'(P) \rightarrow 0$  ( $P \rightarrow \infty$ )。従つて  $E(P) \rightarrow P^2/2$  ( $P \rightarrow \infty$ )。

岡本謙一

我々の結果は  $P$  が大きい時に漸近的に Bloch 電子に近づく。我々は、(3.37) の積分を一般の  $P$  に対して数値計算し、Coupling-constant  $\alpha$  のいくつかの値に対して、図 4, 5, 6 で示した。L-L-P-G の曲線は Whitfield による。

#### § 4 Path-integral Approach

phonon 系に対して調和振動子の座標  $X_{\mathbf{k}}$  と共役な運動量  $Y_{\mathbf{k}}$  を用いて、ハミルトニアン (3.1) を書きなおす。

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{Y_{\mathbf{k}}^2}{M} + M \omega_{\mathbf{k}}^2 X_{\mathbf{k}}^2 \right) - C \sum_{\mathbf{k}} (X_{\mathbf{k}} \cos \mathbf{k} \mathbf{x} - \frac{Y_{\mathbf{k}}}{M \omega_{\mathbf{k}}} \sin \mathbf{k} \mathbf{x})$$

$$C = 2 v_s \hbar \sqrt{\frac{\pi \alpha M}{m a_B}} \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (4.1)$$

我々は、R. Abe <sup>9)</sup> による path-integral の近似計算を用いる。密度行列の  $\mathbf{x}$  表示は次の形に書かれる。

$$\rho(\mathbf{x}' \{X_{\mathbf{k}}'\}, \mathbf{x} \{X_{\mathbf{k}}\}; \beta)$$

$$= \int \exp \left[ - \int_0^\beta \left[ \frac{m}{2\hbar^2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{M}{2\hbar^2} \left( \dot{X}_{\mathbf{k}} - \frac{\hbar}{i} r_{2\mathbf{k}} \right)^2 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} M \omega_{\mathbf{k}}^2 X_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}} M \omega_{\mathbf{k}} r_{1\mathbf{k}} \right] dt \right] \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \prod_{\mathbf{k}} \mathcal{D}X_{\mathbf{k}}(t) \quad (4.2)$$

ここで  $\{X_{\mathbf{k}}\}$  は phonon 系の座標。

$$r_{1\mathbf{k}} = - \frac{C}{M \omega_{\mathbf{k}}} \cos \mathbf{k} \mathbf{x}, \quad r_{2\mathbf{k}} = \frac{C}{M \omega_{\mathbf{k}}} \sin \mathbf{k} \mathbf{x} \quad (4.3)$$

phonon 系についてのみポテンシャルは高々 2 次であるゆえ path-integral の近似計算は実行できる。path-integral を行つた後、 $\{X_{\mathbf{k}}'\} = \{X_{\mathbf{k}}\}$  とおいて  $\{X_{\mathbf{k}}\}$  について積分すれば、

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

$$\begin{aligned}
 Z(\mathbf{x}', \mathbf{x}; \beta) &= \int \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \exp \left[ -\frac{m}{2\hbar^2} \int_0^\beta \dot{\mathbf{x}}^2 dt + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar c^2}{2M\omega_{\mathbf{k}0}} \int_0^\beta dt \int_0^t ds \right. \\
 &\quad \times \left( \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)) + \hbar\omega_{\mathbf{k}}(t-s)) / \{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}\beta} - 1\} \right. \\
 &\quad \left. \left. + \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)) - \hbar\omega_{\mathbf{k}}(t-s)) \cdot e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}\beta} / \{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}\beta} - 1\} \right) \right] \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

従つて正確な作用積分  $S_{\text{true}}$  は次の形に書かれる。

$$\begin{aligned}
 S_{\text{true}} &= -\frac{m}{2\hbar^2} \int_0^\beta \dot{\mathbf{x}}^2 dt \\
 &\quad + \frac{\alpha \hbar^3 v_s}{4\pi m a_B i} \int_0^\beta dt \int_0^\beta ds \left[ \frac{1}{|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|} \times \right. \\
 &\quad \times \int_0^\infty dk \left( e^{ik|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|} - e^{-ik|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|} \right) \\
 &\quad \left. \times \left( e^{-\hbar v_s k |t-s|} + \frac{(e^{\hbar v_s k |t-s|} + e^{-\hbar v_s k |t-s|})}{e^{\hbar v_s k \beta} - 1} \right) \right] \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

特に  $0^\circ\text{K} (\beta \rightarrow \infty)$  の場合を考える。(4.6) で与えられる。

$$\begin{aligned}
 S_{\text{true}} &= -\frac{m}{2\hbar^2} \int_0^\infty \dot{\mathbf{x}}^2 dt \\
 &\quad + \frac{\alpha \hbar^3 v_s}{2\pi m a_B} \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds \frac{1}{(\hbar v_s |t-s|)^2 + |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2} \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

我々は、有限温度について (4.5) の  $k$  についての積分を級数に変形して計算する。まず、

$$\begin{aligned}
 &\int_0^\infty dk \left( e^{ik|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|} - e^{-ik|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|} \right) e^{-\hbar v_s k |t-s|} \\
 &= 2i \frac{|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|}{(\hbar v_s |t-s|)^2 + |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2} \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

岡本謙一

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\infty} dk \left( e^{ik|\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|} - e^{-ik|\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|} \right) \\
 & \quad \times \frac{\left( e^{\frac{\hbar v_s k |t-s|}{\beta}} + e^{-\frac{\hbar v_s k |t-s|}{\beta}} \right)}{e^{\frac{\hbar v_s k \beta}{\beta}} - 1} \\
 & = 2i |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)| \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{(nx+y)^2 + |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|^2} \right\} \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1}{y^2 + |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|^2} \right] \tag{4.8}
 \end{aligned}$$

ただし  $\hbar v_s \beta = x$ ,  $\hbar v_s |t-s| = y$ ,  $0 < y < x$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{x^2 + (a + 2n\pi)^2} = \frac{\text{sh } x}{2x (\text{ch } x - \cos a)}$$

なる公式を用いて, (4.8) は (4.9) に変形される。

$$\begin{aligned}
 & \frac{i 2\pi}{\hbar v_s \beta} \left( \frac{\text{sh} (2\pi |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)| / \hbar v_s \beta)}{\text{ch} (2\pi |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)| / \hbar v_s \beta) - \cos \frac{2\pi |t-s|}{\beta}} \right) \\
 & \quad - \frac{2i |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|}{(\hbar v_s |t-s|)^2 + |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|^2} \tag{4.9}
 \end{aligned}$$

(4.9) の第2項は, (4.7) と消しあうゆえ  $S_{\text{true}}$  は (4.10) で書かれる。

$$\begin{aligned}
 S_{\text{true}} & = - \frac{m}{2 \hbar^2} \int_0^{\beta} \dot{\mathbf{x}}^2 dt \\
 & \quad + \frac{\alpha \hbar^2}{2 m a_B \beta} \int_0^{\beta} dt \int_0^{\beta} ds \frac{1}{|\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|} \\
 & \quad \times \left( \frac{\text{sh} \frac{2\pi |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|}{\hbar v_s \beta}}{\text{ch} \frac{2\pi |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|}{\hbar v_s \beta} - \cos \frac{2\pi |t-s|}{\beta}} \right) \tag{4.10}
 \end{aligned}$$

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

0°K の時 ( $\beta \rightarrow \infty$ ), (4.10) は当然のことではあるが (4.6) に一致する。我々は以下 0°K の場合を考えて,  $\hbar \rightarrow 1$ ,  $m \rightarrow 1$ ,  $v_s \rightarrow 1$  なる単位を用いる。新しい単位で書き変えた後, (4.6) は (4.11) になる。

$$S_{\text{true}} = -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\mathbf{x}}^2 dt + \frac{\alpha}{2\pi a_B K_s} \int_0^T dt \int_0^T ds \frac{1}{|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2 + |t-s|^2} \quad (4.11)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2 + |t-s|^2} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{d\mathbf{k}}{k} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s))} e^{-|t-s|k} \text{ を用いて}$$

$$S_{\text{true}} = -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\mathbf{x}}^2 dt + \frac{\alpha}{8\pi^2 a_B K_s} \int_0^T dt \int_0^T ds \int \frac{d\mathbf{k}}{k} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s))} e^{-|t-s|k} \quad (4.12)$$

我々は, Feynman の trial-action (これは物理的には two-coupled-particle-model である。) を用いる。C, W を変分変数として,

$$S_{\text{trial}} = -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\mathbf{x}}^2 dt - \frac{C}{2} \int_0^T dt \int_0^T ds |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2 e^{-W|t-s|} \quad (4.13)$$

ここで trial-action を用いた平均を (4.14) で定義する。

$$\langle \dots \rangle \equiv \int (\dots) \exp(S_{\text{trial}}) \mathcal{D}\mathbf{x}(t) / \int \exp(S_{\text{trial}}) \mathcal{D}\mathbf{x}(t) \quad (4.14)$$

$$S = \frac{1}{T} \langle S_{\text{true}} - S_{\text{trial}} \rangle = A + B$$

$$A = \frac{1}{T} \frac{\alpha}{8\pi^2 a_B K_s} \int_0^T dt \int_0^T ds \int \frac{d\mathbf{k}}{k} e^{-|t-s|k} \langle e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s))} \rangle$$

$$B = \frac{1}{T} \frac{C}{2} \int_0^T dt \int_0^T ds e^{-W|t-s|} \langle |\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(s)|^2 \rangle \quad (4.15)$$

岡本謙一

$\langle e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s))} \rangle$ ,  $\langle |\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)|^2 \rangle$  は, 各々  $|t-s|$  の関数ゆえ, 各々  $h(|\tau|)$ ,  $g(|\tau|)$  と書く。ただし  $t-s \equiv \tau$ 。

$$\left. \begin{aligned} h(\tau) &= \exp\left(-k^2\left(\frac{2C}{v^3W}(1-e^{-v\tau}) + \frac{W^2}{2v^2}\tau\right)\right) \\ v^2 &= W^2 + 4C/W \end{aligned} \right\} \quad (4.16)$$

A は, 計算の後 (4.17) となる。

$$A = \frac{\alpha}{\pi a_B K_S} \int_0^T d\tau \left[ \frac{1}{2\delta} - \frac{1}{2\delta\sqrt{\delta}} \tau \exp\left(\frac{\tau^2}{4\delta^2}\right) \times \text{Erf}\left(\frac{\tau}{2\sqrt{\delta}}\right) \right] \quad (4.17)$$

$$\text{ここで, } \delta = \frac{2C}{v^3W}(1-e^{-v\tau}) + \frac{W^2}{2v^2}\tau \quad (4.18)$$

Erf は Gauss の誤差関数で, (4.18) の  $\tau$  についての積分は, 発散する。従つて Feynman の trial-action はピエゾ型ポーラロンの時には, 適用できないことがわかる。我々は Feynman の trial-action を重ねあわせた, より一般的な trial-action (4.19) を用いようと思つている。

$$\begin{aligned} S_{\text{trial}} &= -\frac{1}{2} \int_0^T \dot{\mathbf{x}}^2 dt \\ &\quad - \frac{\gamma}{2} \int_0^T dt \int_0^T ds \int \frac{C(\mathbf{k})}{k} (\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s))^2 e^{-|t-s|k} d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{この時 } h(\tau) &= \exp\left[\frac{1}{2} \int_0^T \mathbf{f}(t') \cdot \mathbf{x}(t) dt'\right] \\ \mathbf{f}(t') &= i\mathbf{k}(\delta(t'-t) - \delta(t'-s)) \end{aligned} \right\} \quad (4.20)$$

ただし  $\mathbf{x}(t)$  は次の方程式を満足する。

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} - 2r \int d\mathbf{k} \frac{C(\mathbf{k})}{K} \int_0^T e^{-|t-s|k} (\mathbf{x}(t)-\mathbf{x}(s)) ds - \mathbf{f}(t) = 0 \quad (4.21)$$

(4.21) を解き, A を計算すれば, Feynman 同様, 他の値も計算できる。その結果, 変分変数  $C(\mathbf{k})$  についての積分方程式を解く必要になる。しかし,

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

(4.19) の形の trial-action を用いても、やはり事情は変わらないかも知れない。

§ 5 Discussion

我々は Haga の方法をピエゾ型ポーラロンに適用することにより、 $K \rightarrow \infty$  で自由電子に近づく分散関係を得た。又我々の得た曲線は Coupling constant  $\alpha$  の大きさによつても異なるが、 $1.3 \leq K \leq 2.0$  の領域において直線状に増加する。Whitfield 等が指摘しているとおり正確な ground-state の分散関係が、常に L-L-F-G の近似より下になければならないことはない。我々は、彼等の用いた energy-crossing-argument の定性的議論が  $K$  の大きい領域、つまりポーラロンモデルが適用できないぐらいの高速電子に対しても適用できるのか疑問に思っている。むしろ  $K$  の大きい時のポーラロンの分散関係は、自由電子の分散関係に近づくのではないかと思っている。この点についての詳しい解析と議論を期待している。

我々は、又 L-L-P-G の方法により、ポテンシャルと電子のまわりの induced-charge-density を計算した。 $H_{int}$  は無次元化しない時、(5.1) で与えられるが  $H_{int}$  の  $(-e)$  の係数は  $r$  における electrostatic-potential の operator である。

$$H_{int} = -e \left( \frac{2\pi\alpha\hbar v_s}{\epsilon} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{k}} (b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (5.1)$$

electron が  $r_{el}$  にいる時のこのポテンシャルの平均値  $\varphi(r, r_{el})$  は、(5.2) で与えられる。

$$\varphi(r, r_{el}) = \frac{1}{e} \left( \frac{2\pi\alpha\hbar^3 v_s}{m a_B} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} (\psi_{re} (b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + b_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \psi_{re}) \quad (5.2)$$

$$\psi_{re} = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (P - \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{r}_{el} \right] \times \exp \left( \sum_{\mathbf{k}} (b_{\mathbf{k}}^+ - b_{\mathbf{k}}) f_{\mathbf{k}} \right) |0\rangle$$

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\sqrt{k}} \left( \frac{2\pi\alpha\hbar^3 v_s}{m a_B} \right)^{1/2} \frac{1}{\hbar v_s k - \frac{\hbar}{m} (1-\eta) \mathbf{k} \cdot \mathbf{P} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

岡本謙一

その結果  $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el})$  は (5.3) の形に書かれるが、一般の  $\mathbf{P}$  の場合について (5.3) の積分は実行できそうもないので、特に  $\mathbf{P} = 0$  の場合を考える。それは、(5.4) で与えられる。(5.4) で ' は長さの単位として  $(m v_s / \hbar)^{-1}$  を用いた結果の無次元な量を意味している。

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) = \frac{4\pi\alpha\hbar^3 v_s}{e m a_B} \times \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}}{k} \frac{\cos \mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el})}{\hbar v_s k - \frac{\hbar}{m}(1-\eta)\mathbf{k} \cdot \mathbf{P} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) &= \frac{4\pi\alpha\hbar^3 v_s}{e m a_B} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|} \\ &\times \left\{ \text{Si } q'_D |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| - \cos 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| \right. \\ &\times (\text{Si}(q'_D + 2)|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| - \text{Si } 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|) \\ &+ 2 \sin 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| (\text{Ci}(q'_D + 2) \\ &\left. \times |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| - \text{Ci } 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|) \right\} \quad (5.4) \end{aligned}$$

(5.4) で  $\text{Si } x \equiv \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt$ ,  $\text{Ci } x \equiv -\int_x^\infty \frac{\cos t}{t} dt$  は、各々積分正弦、積分余弦関数である。又  $\mathbf{r}_{el}$  にいる電子によつて作られる induced-charge-density  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el})$  は、 $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) = -\frac{1}{4\pi} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el})$  で与えられ、ポテンシャル同様 (5.5) で与えられる。

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) &= \frac{e\alpha}{\epsilon \pi^2} K_S^3 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|} \\ &\times \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|} (1 - \cos q'_D |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|) \right. \\ &- \cos |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| (\text{Si}(q'_D + 2)|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| - \text{Si } 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|) \\ &+ 2 \sin |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| (\text{Ci}(q'_D + 2)|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'| \\ &\left. - \text{Ci } 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{el}'|) \right\} \quad (5.5) \end{aligned}$$

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

我々は,  $q_D' \approx 100$  を用いて  $-e\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) / \frac{4\hbar v_s \alpha}{\pi a_B}$ ,  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el}) / \frac{e d}{\epsilon \pi^2} K_s^3$  を図7, 8で示した。

$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{el})$  は波を打ち, 正負の値を互に持ちながら減衰することがわかる。

L-L-P-Gの方法におけるおつりの項は, (5.6)で与えられる。 $\Delta E$ は無視できない程度の大きさを持つ。

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sum_n \frac{|(\mathcal{X}_1)_{0n}|^2}{E_0 - E_n} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \frac{|\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2 f_{\mathbf{q}_1} f_{\mathbf{q}_2}|^2}{q_1 + q_2 + (\eta - 1)P(q_1 + q_2) + \frac{1}{2}(q_1 + q_2)^2} \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_1 &= \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^+, b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'}^+ + b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{q}} + 2b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}) \end{aligned}$$

我々は, Whitfield等と比較するために,  $q_{II} \approx 300$ を用いた。しかし CdS, ZnO共に実際のデバイ波数  $q_{II}$  は5000位であるゆえ, 我々は正確な  $q_{II}$  を用いて計算を実行中である。

最後に終始御指導して下さいました, 阿部龍蔵先生, いろいろ有益な議論をして下さった波田野彰先生に感謝します。

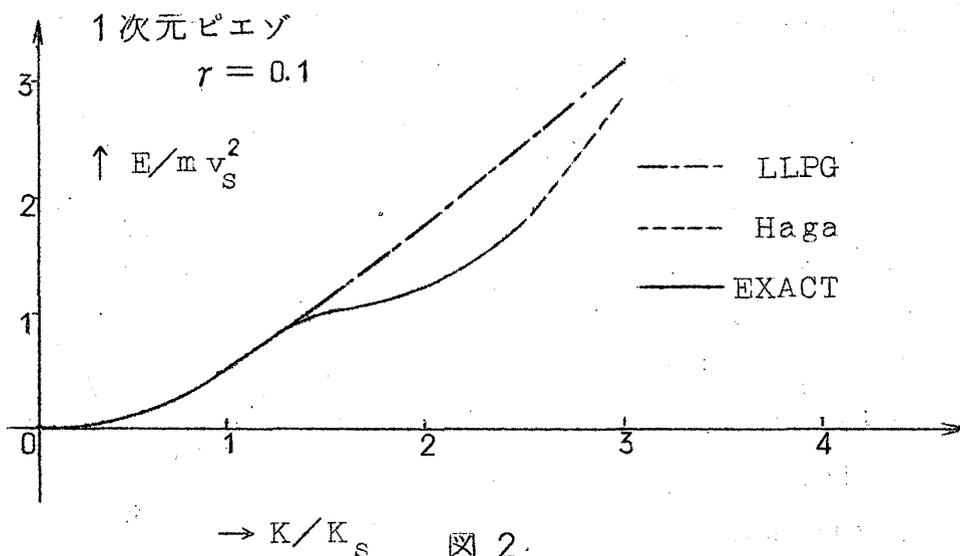
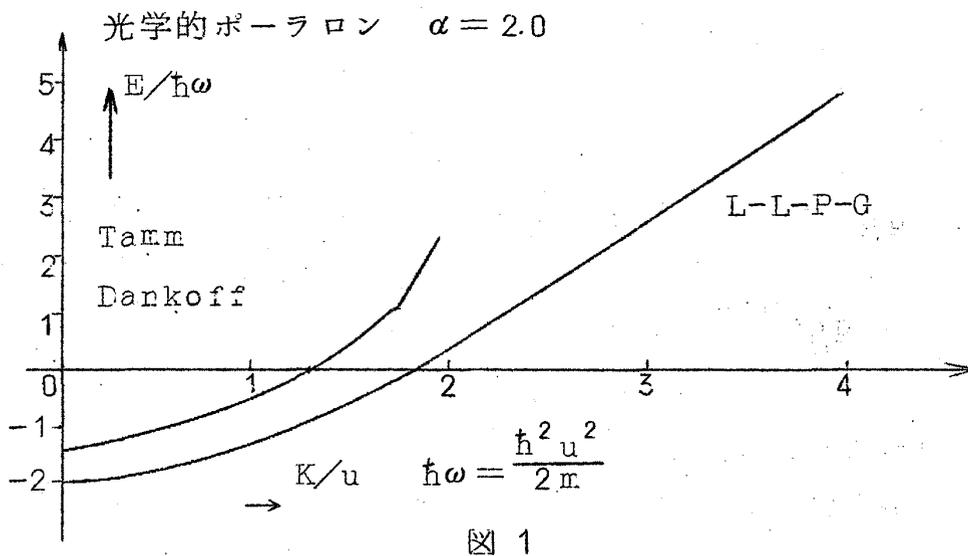
我々は数値計算に於いて東京大学大型計算センターの HITAC 5020 E を用いた。

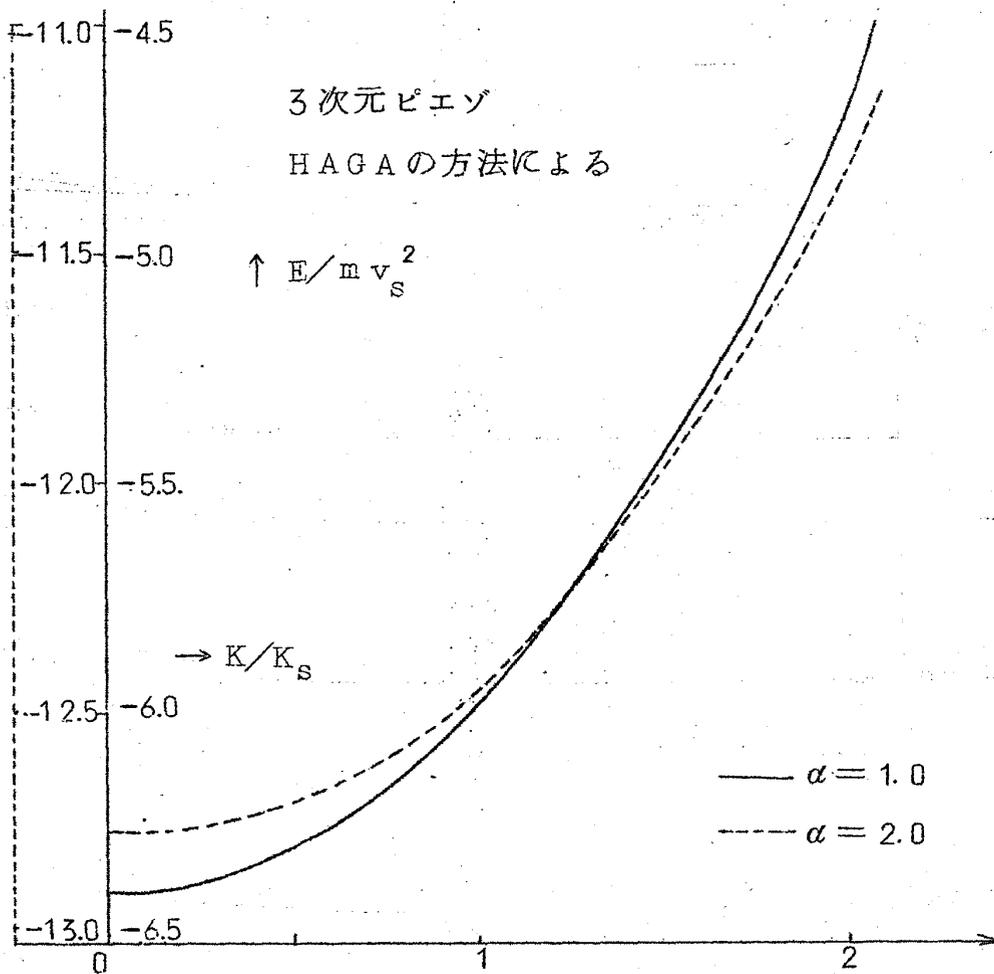
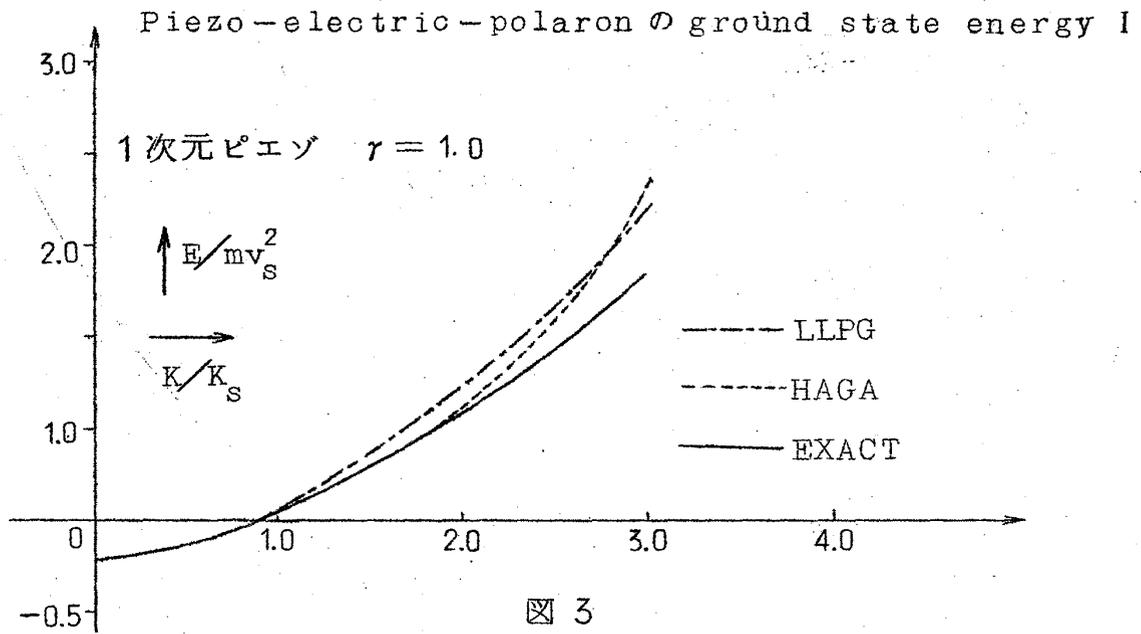
#### References

- 1) Mahan-Hopfield; Phys. Rev. Letter 12 241 (1964)
- 2) Y. Osaka; J. Phys. Soc. Japan 19 2348 (1964)
- 3) G. Whitefield, J. Gerstner & K. Tharmalingam; Phys. Rev. 165 993 (1968)

岡本謙一

- 4) Lee-Low-Pines; Phys. Rev. 90 297 (1953)  
M. Gurari; Phil. Mag. 44 329 (1953)
- 5) D.M. Larsen; Phys. Rev. 172 967 (1968)
- 6) E. Haga; Progress 11 449 (1954)
- 7) E. P. Gross; Phys. Rev. 84 68 (1951)
- 8) A. R. Hutson; J. Appl. Phys. Suppl 32 2287 (1961)
- 9) R. Ate ; 物性論研究 79号 101 (1954)
- 10) R. P. Feynman; Phys. Rev. 97 660 (1955)
- 11) K. Okamoto; thesis unpublished (1970)





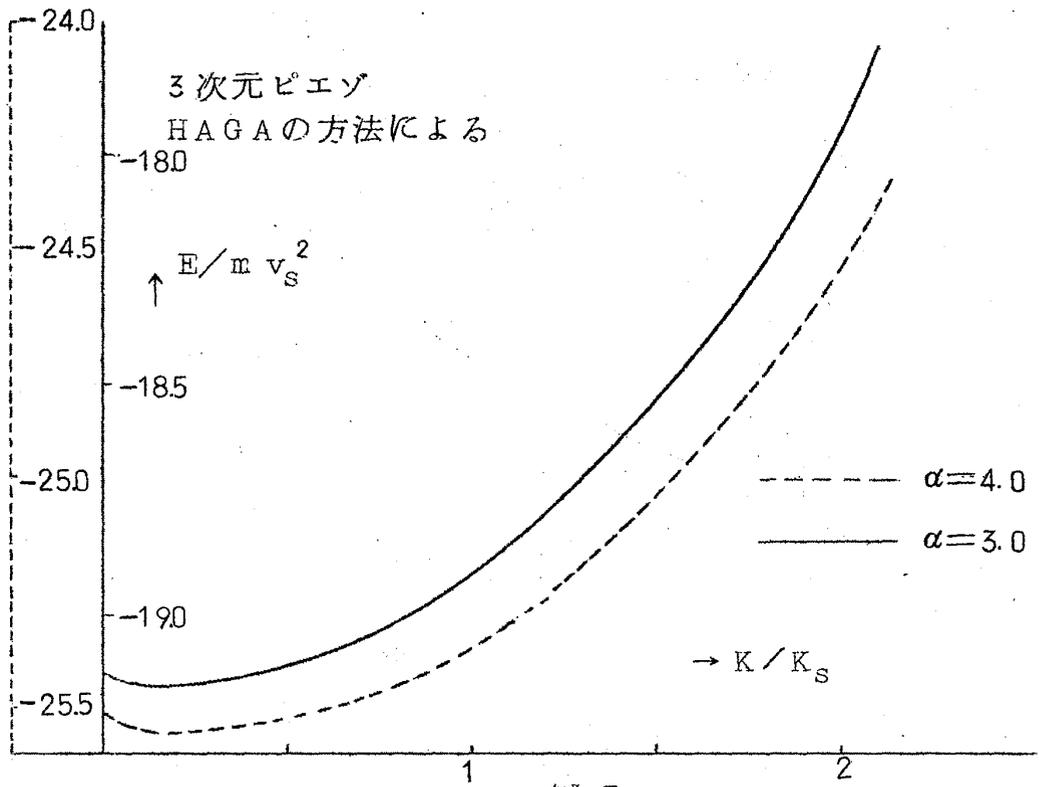


図 5

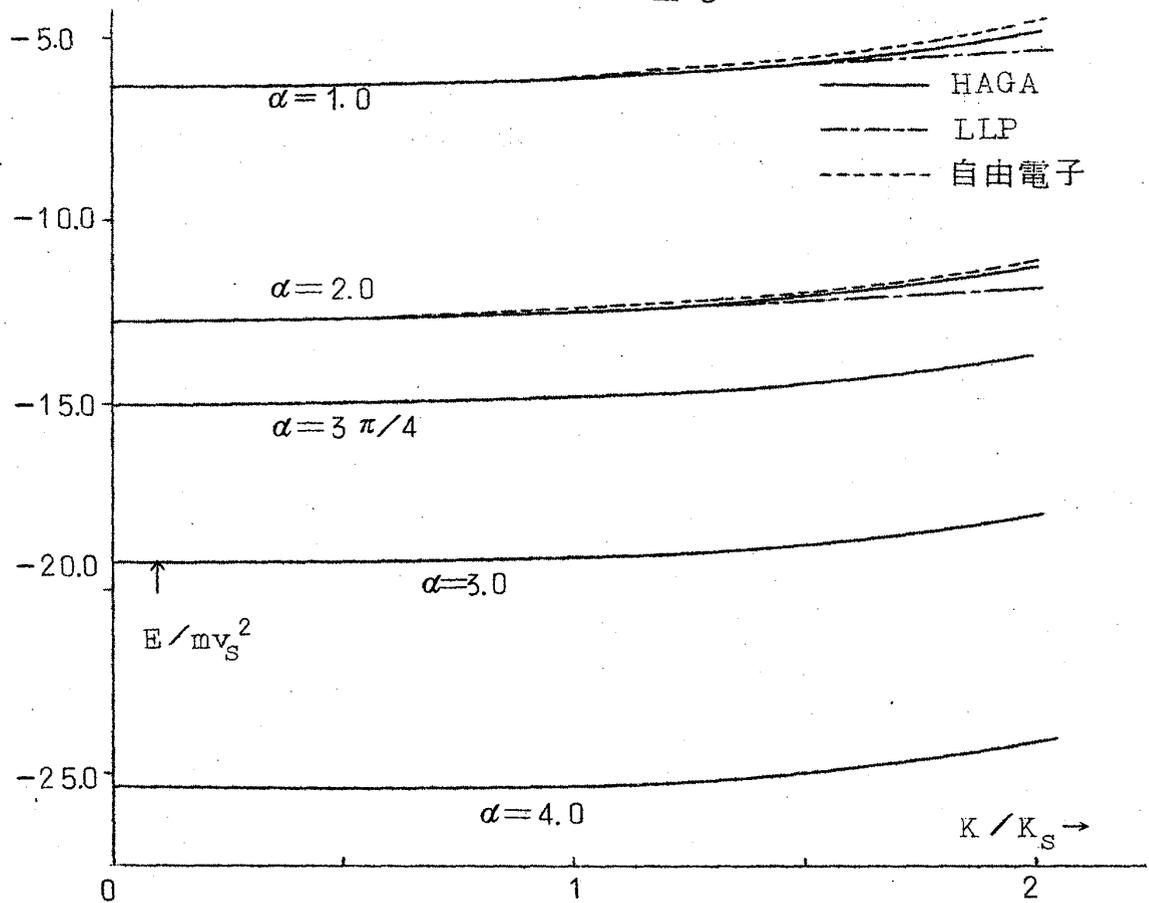


図 6

Piezo-electric-polaron の ground state energy I

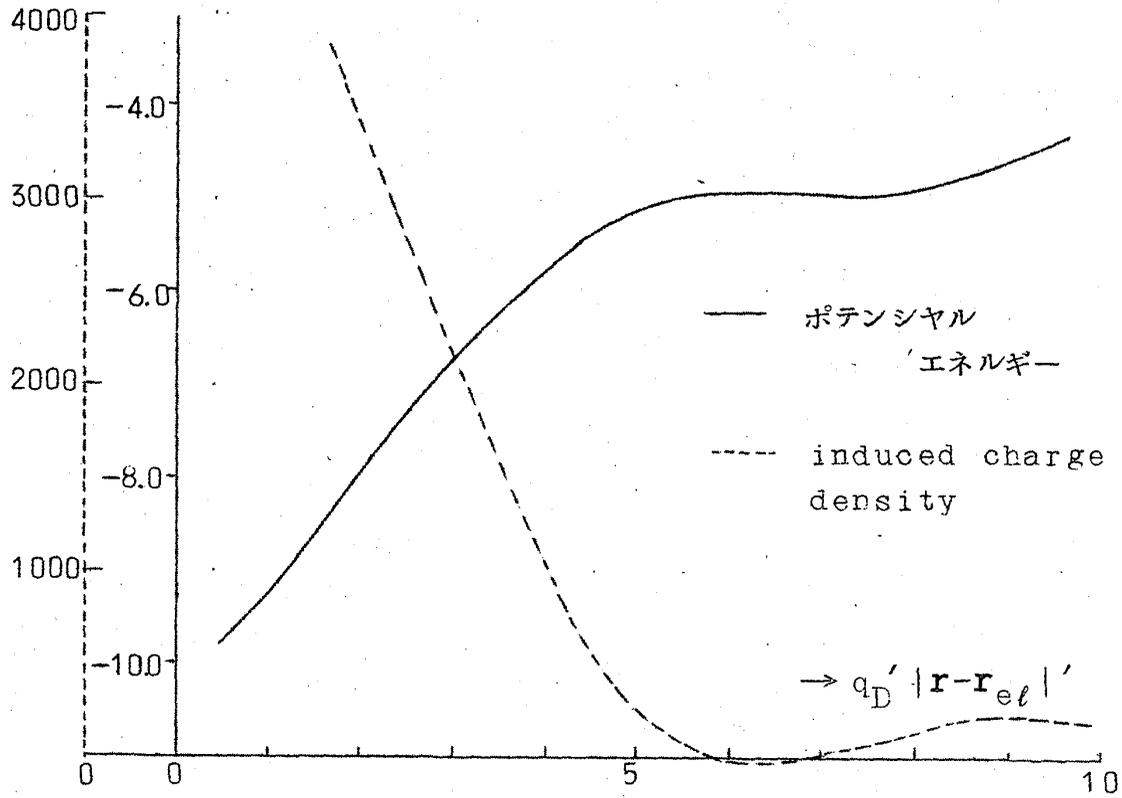


図 7

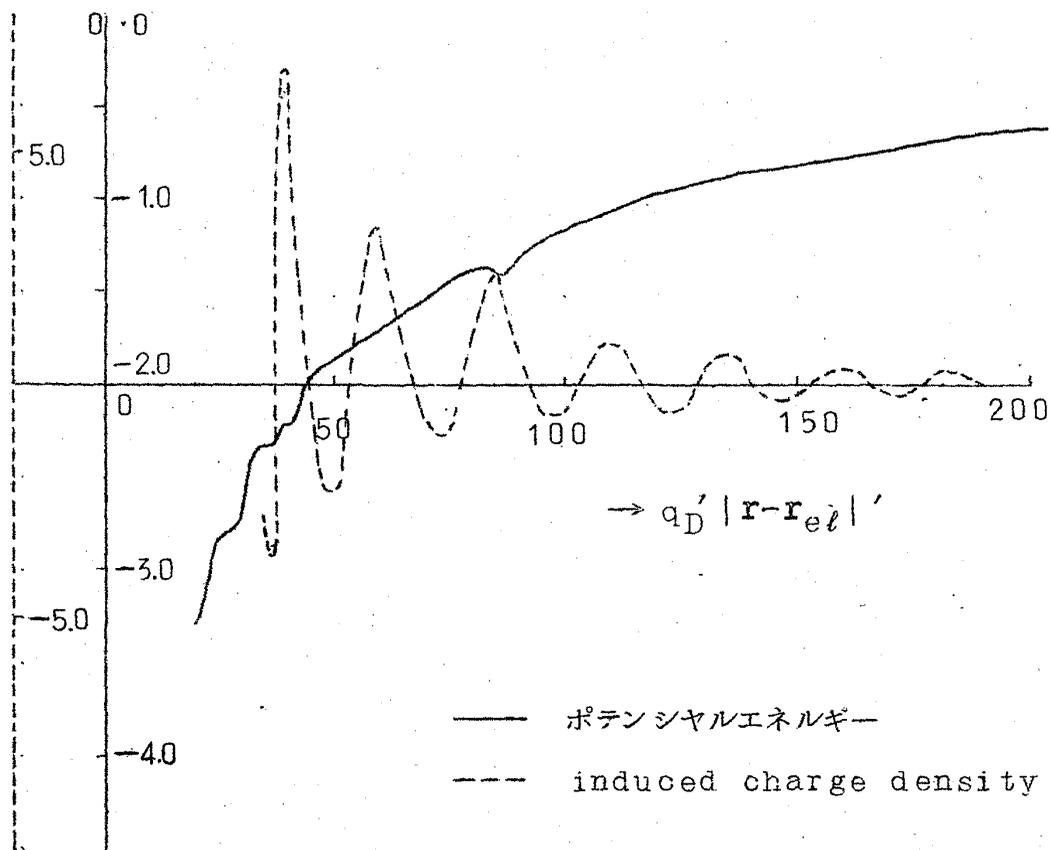


図 8