

# 固体中の Stark ラダー電子と 光学的フォノンの強結合理論

東大教養物理 齋藤基彦

(2月8日受理)

## § 1. はじめに

1960年に Wannier<sup>1,2)</sup> は固体内の周期場を運動する電子は電場によって量子化される事を予言した。この量子化されたエネルギー準位は Stark ラダーと呼ばれ、

$$\epsilon_\nu = eFa\nu + \epsilon_\perp, \quad (\nu: \text{整数}) \quad (1.1)$$

で与えられる。ここで  $-e$  は電子の電荷、 $-F$  は  $x$  方向の電場、 $2\pi/a$  は  $x$  方向の Brillouin 域の周期、 $\epsilon_\perp$  は電場に垂直な方向の自由度による固有エネルギーである。その後この準位を実験的に確認しようとする試みが数多くなされたが、いずれも十分な信頼を得るに至っていない。これらの点については Maekawa の解説<sup>3)</sup> に詳しいので参照されたい。

最近 Maekawa<sup>4)</sup> は  $ZnS$  の結晶を用いて、Stark ラダーの存在の検証を試みた。彼は閃亜鉛鉱型の蒸着膜結晶を用い、 $[1, 1, 1]$  方向に強電場 ( $\leq 2 \cdot 10^6$  V/cm) をかけたところ、電気伝導率  $\sigma$  が Poole-Frenkel 効果<sup>5)</sup> による増加の他に電場と共に振動する事を見出した。 $\sigma$  は  $n$  を整数値として

$$F = n\hbar\omega/ea^* \quad (1.2)$$

で山となる。ここで  $\omega$  は光学的フォノンの角振動数、 $a^*$  は単位格子の体角線の長さである。この事実は電子と光学的フォノンが相互作用し、電子が  $\nu$  番目のラダーから  $\nu \pm 1$  番目のラダーに遷移する際  $n$  個の光学的フォノンを吸収あるいは放出する過程が存在する事を予想させる。

ここでは上に述べたような過程を漸熱近似に基づいて理論的に考察してみた。電子格子相互作用が強結合の場合に、強電場中のポーラロンが  $n$  個のフォノン

斎藤基彦

の吸収放出を共なって遷移する確率を求めた。このような遷移確率は実験的観測によるものよりずっと小さい事が判明した。

## § 2. 電場中のポーラロン状態

はじめに周期場中でx方向に電場-Fが加わった場合の電子状態 (Starkラダー準位) を求めておこう。電子のハミルトニアンは

$$H_e = p^2/2m_0 + V(\mathbf{r}) - eFx \quad (2.1)$$

で与えられる。ここで  $m_0$  は電子質量,  $V(\mathbf{r})$  は周期場である。さて電子の波動関数として

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} A^n(\mathbf{k}) B_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.2)$$

の形をとる事にしよう。ここで  $B_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  は Bloch 関数で,  $A^n(\mathbf{k})$  はその係数,  $\mathbf{k}$  の和は第1 Brillouin 域でとるものとする。係数に対する方程式は,

$$\begin{aligned} (\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon) A^n(\mathbf{k}) \\ = eF \sum_{\mathbf{k}'} X_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{n'n} A^{n'}(\mathbf{k}') \end{aligned} \quad (2.3)$$

ここで

$$X_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{n'n} = \int d^3r B_{n'}(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \times B_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.4)$$

通例のように帯間遷移を無視して良ければ<sup>6)</sup>

$$X_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{n'n} = i \delta_{n'n} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial k_x} \quad (2.5)$$

と近似して良い。(2.5) を (2.3) に代入して  $A^n(\mathbf{k})$  は

$$A^n(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{a}{L}} \exp \left[ \frac{i}{eF} \int_0^{k_x} \{ \epsilon - \epsilon(\mathbf{k}') \} dk'_x \right] \quad (2.6)$$

と求まる。ここで  $2\pi/a$  は Brillouin 域のx方向の周期,  $L$  は結晶の長さである。 $A^n(\mathbf{k})$  が  $\mathbf{k}$  について周期的であるという条件からエネルギー準位は

定まり

$$\epsilon_\nu = eFa\nu + \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x \epsilon(\mathbf{k}), \quad (\nu: \text{整数}). \quad (2.7)$$

特に  $\epsilon(\mathbf{k})$  が

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}_\perp^2 / 2m - W \cos ak_x \quad (2.8)$$

の形を持っているとしよう。波動関数を

$$\chi_\nu(\mathbf{r}) = \varphi_\nu(x) \psi(\mathbf{r}_\perp) \quad (2.9)$$

と書き,  $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} B_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \approx \text{const.}$  とすれば  $\varphi_\nu(x)$  は Bessel 関数で表わされて,

$$\varphi_\nu(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} J_{\nu + \frac{x}{a}} \left( -\frac{W}{eFa} \right) \quad (2.10)$$

となる。この形からあきらかなように, 電子は  $x = -\nu a$  を中心とし  $W/eF$  の程度の領域に局在している。 $\psi(\mathbf{r}_\perp)$  は後に定める。

次に格子系のエネルギーを考えよう。後の便宜のため実数表示の基準座標  $X_{\mathbf{q}j}$  ( $q_x > 0, j = 1, 2$ ) を用いれば格子系のハミルトニアンは

$$H_L = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}}' \sum_j (\dot{X}_{\mathbf{q}j}^2 + \omega^2 X_{\mathbf{q}j}^2), \quad (2.11)$$

である。ただし和記号のプライムは  $q_x > 0$  についてのみ和をとる事を意味する。また電子格子相互作用のハミルトニアンは

$$H_{eL} = - \sum_{\mathbf{q}}' \frac{2c}{\sqrt{\hbar\Omega}} \sqrt{\frac{\omega}{\hbar\Omega}} (X_{\mathbf{q}1} \sin \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + X_{\mathbf{q}2} \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.12)$$

である。ここで  $\Omega$  は系の体積,

$$c^2 = 4\pi\alpha \hbar^2 \omega^2 (\hbar/2m\omega)^{1/2}, \quad (2.13a)$$

ただし  $\alpha$  は結合強度で,

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar\omega} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (2.13b)$$

$\epsilon_\infty, \epsilon_0$  はそれぞれ光学のおよび静的誘電率である。

さて以下では強結合の場合を考えることにしよう。この時、電子の存在によって格子は歪み局在的なポーラロン状態が安定になると考えられる。これを断熱近似で取り扱う。従って (2.9) において

$$\psi_{\mathbf{R}_\perp}(\mathbf{r}_\perp) = (\pi b^2)^{-1/2} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r}_\perp - \mathbf{R}_\perp)^2}{2b^2}\right) \quad (2.14)$$

の形の試行関数を考えよう。変分パラメタ  $b$  は全ハミルトニアン  $H = H_e + H_L + H_{eL}$  の期待値が最低になるように定める。以後簡単のため量子数の組  $(\nu, \mathbf{R}_\perp)$  を  $\alpha$  で代表する事にする。  $H$  を  $|\alpha\rangle$  に射影する事により電子座標を消去すると、

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H | \alpha \rangle &= eF a \nu + \frac{\hbar^2}{2mb^2} - \sum'_q \sum_j \frac{\omega^2}{\sqrt{\Omega}} Y_{\mathbf{qj}}^{\alpha\alpha} X_{\mathbf{qj}} \\ &+ \frac{1}{2} \sum'_q \sum_j (\dot{X}_{\mathbf{qj}}^2 + \omega^2 X_{\mathbf{qj}}^2), \end{aligned} \quad (2.15a)$$

ただし

$$Y_{\mathbf{qj}}^{\beta\alpha} = \frac{2c}{q\omega\sqrt{\hbar\omega}} \left( \beta \left| \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \right| \alpha \right), \quad (2.16)$$

ここで  $j=1$  のときは上の  $\sin$ ,  $j=2$  のときは下の  $\cos$  記号を取るものと約束する。(2.15a) は従って

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H | \alpha \rangle &= eF a \nu + \frac{\hbar^2}{2mb^2} - \Delta_\alpha \\ &+ \frac{1}{2} \sum'_q \sum_j \left\{ \dot{X}_{\mathbf{qj}}^2 + \omega^2 \left( X_{\mathbf{qj}} - \frac{1}{\sqrt{\Omega}} Y_{\mathbf{qj}}^{\alpha\alpha} \right)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.15b)$$

$$\Delta_\alpha = \frac{1}{2\Omega} \sum'_q \sum_j \omega^2 (Y_{\mathbf{qj}}^{\alpha\alpha})^2$$

と書ける。(2.15b) でフォノンに關与するのは最後の項だけであり、この形よりフォノンの固有状態は中心が  $X_{\mathbf{qj}}^{\alpha} = Y_{\mathbf{qj}}^{\alpha\alpha} / \sqrt{\Omega}$  だけずれた調和振動子の波動関数

$$\phi_{m_{\mathbf{qj}}} (X_{\mathbf{qj}} - X_{\mathbf{qj}}^{\alpha}) \quad (2.18)$$

で書き表わせ、その固有値は  $(m_{\mathbf{qj}} + \frac{1}{2}) \hbar \omega$  である事がわかる。ポーラロン状態を記述する波動関数は

$$\Psi_{\alpha m} = \chi_{\alpha}(\mathbf{r}) \prod_{\mathbf{qj}} \phi_{m_{\mathbf{qj}}} (X_{\mathbf{qj}} - X_{\mathbf{qj}}^{\alpha}) \quad (2.19)$$

である。この固有値は

$$E_{\alpha m} = eFa\nu + \frac{\hbar^2}{2mb^2} - \Delta_{\alpha} + \sum_{\mathbf{qj}} (m_{\mathbf{qj}} + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (2.20)$$

で与えられる。この断熱近似の波動関数は  $eFa \gg \hbar \omega$  なる強電場で妥当とみなされる。

### § 3. b の決定

変分パラメタ  $b$  は  $E_b = \hbar^2 / 2mb^2 - \Delta_{\alpha}$  を最低にするよう定められる。このためには行列要素 (2.16) を知る必要がある。さて

$$\begin{aligned} & \int \varphi_{\nu'}(x) e^{iq_x x} \varphi_{\nu}(x) dx \\ & \simeq \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x \exp i [ a(\nu - \nu') k_x - a\nu' q ] \\ & \quad + \frac{W}{eFa} \{ \sin a k_x - \sin a (k_x + q_x) \} \\ & = \exp \left[ -\frac{i}{2} \{ (\nu' + \nu) a q_x - (\nu' - \nu) \pi \} \right] J_{\nu - \nu'} \left( \frac{2W}{eFa} \sin \frac{a q_x}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

また

斎藤基彦

$$\int \Psi_{R'_\perp}(\mathbf{r}_\perp) e^{i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} \psi_{R_\perp}(\mathbf{r}_\perp) d^2 r$$

$$= \exp \left\{ -\frac{1}{4} (b^2 q_\perp^2 + \frac{\rho^2}{b^2}) + i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp^0 \right\}, \quad (3.2)$$

$$\rho = R'_\perp - R_\perp, \quad R_\perp^0 = (R'_\perp + R_\perp)/2 \quad (3.3)$$

だから

$$(\beta | \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} | \alpha) = \exp \left\{ -\frac{1}{4} (b^2 q_\perp^2 + \frac{\rho^2}{b^2}) \right\} \times$$

$$\times J_{\nu'-\nu} \left( \frac{2W}{eFa} \sin \frac{aq_x}{2} \right) \times \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \left( \mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp^0 - \frac{\nu'+\nu}{2} aq_x - \frac{\nu'-\nu}{2} \pi \right).$$

$$(3.4)$$

特に

$$(\alpha | \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} | \alpha) = \exp \left( -\frac{b^2 q_\perp^2}{4} \right) J_0 \left( \frac{2W}{eFa} \sin \frac{aq_x}{2} \right)$$

$$\times \begin{pmatrix} \sin \\ \cos \end{pmatrix} (\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp - \nu aq_x) \quad (3.5)$$

これらの値を (2.17) に代入し和を積分に直せば

$$\Delta_\alpha = \frac{ac^2}{4\pi^2 \hbar \omega} \int_0^\infty dq_\perp q_\perp \exp \left( -\frac{b^2 q_\perp^2}{4} \right) I(q_\perp), \quad (3.6)$$

$$I(q_\perp) = \frac{1}{a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dq_x}{q_x^2 + q_\perp^2} J_0^2 \left( t \sin \frac{aq_x}{2} \right), \quad (3.7)$$

$$t = 2W/eFa. \quad (3.8)$$

(3.7) を厳密に評価する事はむずかしいから、次のようにして近似的に求めよう。被積分関数の分母の  $q_x^2$  を  $(2/a)^2 \sin^2(aq_x/2)$  で置換え、また Bessel 関数を

$$J_\mu^2(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi x} \left( \frac{x}{x_\mu} \right)^{2\mu}, & x < x_\mu \\ \frac{1}{\pi x}, & x > x_\mu \end{cases}, \quad (3.9a)$$

$$(3.9b)$$

$$x_{\mu} = (2^{2\mu}(\mu!)^2/\pi)^{\frac{1}{2\mu+1}} \quad (3.9c)$$

で近似する。この近似 (3.9) は振動的な部分は平均値で置換えているが、最初の山の位置は良く再現する。(3.7) で

$$p = a q_x / 2, \quad Q = a q_z / 2$$

と書き、 $\pi t \gg 1$  を考慮すれば

$$(3.8) \quad I \approx \left( \int_0^{\frac{1}{\pi t}} \frac{dp}{\sin^2 p + Q^2} + \frac{1}{\pi t} \int_{\frac{1}{\pi t}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dp}{\sin p} \frac{1}{\sin^2 p + Q^2} \right)$$

$$\approx \left[ \frac{1}{Q\sqrt{1+Q^2}} \tan^{-1} \frac{\sqrt{1+Q^2}}{\pi t Q} \right.$$

$$(3.9) \quad \left. + \frac{1}{\pi t Q^2} \left\{ \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1+Q^2}}\right) \ln 2\pi t \right. \right.$$

$$\left. \left. - \frac{1}{\sqrt{1+Q^2}} \ln \frac{1 + \sqrt{1+Q^2}}{2\sqrt{1+(\pi t Q)^2}} \right\} \right].$$

これより  $Q \ll (\pi t)^{-1}$  と  $Q \gg 1$  の漸近形を結ぶ事により、近似的に

$$I(Q) = \begin{cases} \pi/2Q, & Q < Q_0 \end{cases} \quad (3.10a)$$

$$(3.10) \quad \begin{cases} (\pi t Q^2)^{-1} \ln 2\pi t, & Q > Q_0 \end{cases} \quad (3.10b)$$

$$Q_0 = (2/\pi^2 t) \ln 2\pi t \quad (3.10c)$$

なる関数形を得る。(3.10) を (3.6) に代入して積分を実行すれば

$$\Delta_{\alpha} = \frac{c^2}{\pi^2 a^2 \hbar \omega} \frac{\pi a}{2\beta} \left\{ \text{Erf}(\beta Q_0) - \frac{\beta Q_0}{2} \text{Ei}(-\beta^2 Q_0^2) \right\} \quad (3.11)$$

ただし

$$\beta = \sqrt{2} b/a$$

$$E_{\text{rf}}(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt,$$

$$Ei(-x) = - \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt.$$

通常物質では  $t \gg 1$  (ZnSでは  $t \sim 40$ ) だから, (3.10c) の  $Q_0$  は 1 より十分小さい。従って  $\beta Q_0 \ll 1$  (強結合) とすれば (3.11) は

$$\Delta\alpha \approx \frac{c^2 Q_0}{2\pi\hbar\omega a} \ln \frac{e^{1-\frac{r}{2}}}{\beta Q_0}, \quad (3.12)$$

ここで  $r = 0.577 \dots$  は Euler の定数である。  $\partial E_b / \partial b = 0$  より  $b$  を定めれば,

$$\left(\frac{b}{a}\right)^2 = \frac{2\pi\hbar^3\omega}{mac^2 Q_0} = \frac{1}{\alpha Q_0} \left(\frac{W}{2\hbar\omega}\right)^{1/2} \quad (3.13)$$

ただし最後の等式では  $a^2 = \hbar^2/mW$  を用いた。この  $b$  によって定まる  $E_b$  が負でなければ試行関数 (2.14) は正しくない。そのための条件は

$$\alpha > 2 e^{2r-2} Q_0 (W/2\hbar\omega)^{1/2} \quad (3.14)$$

で与えられる。ZnSではこの条件は満たされている。

なお  $\beta Q_0 \gg 1$  (弱結合) の条件で  $b$  を求めると,  $\alpha$  に対する条件は

$$\alpha \ll 2 Q_0 (2W/\pi\hbar\omega)^{1/2} \quad (3.15)$$

となり, これは現実の物質では実現しない。

#### § 4. 遷移確率

(2.19) で表わされるような状態  $\Psi_{\alpha m}$  から  $\Psi_{\beta n}$  への遷移は

$$(x_\beta | H | x_\alpha) = \frac{(-)}{\sqrt{\Omega}} \sum_q' \sum_j \omega^2 Y_{qj}^{\beta\alpha} X_{qj} \quad (\beta \neq \alpha)$$

である事に注意すれば、行列要素は

$$\begin{aligned}
 (\beta, n | H | \alpha m) &= (\Psi_{\beta n} | \Psi_{\alpha m}) \frac{(-)}{\sqrt{\Omega}} \sum'_{\mathbf{q}} \sum_j \omega^2 Y_{\mathbf{q}j}^{\beta\alpha} \times \\
 &\times \frac{(\phi_{n_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j} - X_{\mathbf{q}j}^{\beta}) | X_{\mathbf{q}j} | \phi_{m_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j} - X_{\mathbf{q}j}^{\alpha}))}{(\phi_{n_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j} - X_{\mathbf{q}j}^{\beta}) | \phi_{m_{\mathbf{q}j}}(X_{\mathbf{q}j} - X_{\mathbf{q}j}^{\alpha}))} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

で与えられる。特に十分低温の場合を考えることにして  $m=0$  としてあらわに行列要素を求めると

$$\begin{aligned}
 (\beta, n | H | \alpha, 0) &= (\Psi_{\beta n} | \Psi_{\alpha 0}) \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum'_{\mathbf{q}} \sum_j \omega^2 Y_{\mathbf{q}j}^{\beta\alpha} \times \\
 &\times \frac{2n_{\mathbf{q}j} - \omega((X_{\mathbf{q}j}^{\beta})^2 - (X_{\mathbf{q}j}^{\alpha})^2)}{2\omega(X_{\mathbf{q}j}^{\beta} - X_{\mathbf{q}j}^{\alpha})} \quad (4.2)
 \end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned}
 (\Psi_{\beta n} | \Psi_{\alpha 0}) &= \prod'_{\mathbf{q}} \prod_j (n_{\mathbf{q}j}!)^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{\omega}{4\hbar}(X_{\mathbf{q}j}^{\beta} - X_{\mathbf{q}j}^{\alpha})^2\right\} \\
 &\times \left\{-\sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}(X_{\mathbf{q}j}^{\beta} - X_{\mathbf{q}j}^{\alpha})\right\}^{n_{\mathbf{q}j}} \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

さて (4.2) に基づきある特定の  $\mathbf{q}$  のフォノンの放出吸収を考えよう。電子が  $\alpha = (\nu, \mathbf{R}_1)$  から  $\beta = (\nu-1, \mathbf{R}_1')$  に遷移する際にフォノンをも放出しない場合の遷移行列要素は  $n_{\mathbf{q}} = n_{\mathbf{q}1} + n_{\mathbf{q}2} = 0$  を選べば良いから

$$\begin{aligned}
 (\beta, n_{\mathbf{q}}=0 | H(\mathbf{q}) | \alpha 0) &= (\Psi_{\beta 0} | \Psi_{\alpha 0}) \left(-\frac{1}{2}\right) \frac{\omega^2}{\sqrt{\Omega}} \times \\
 &\times \sum_j Y_{\mathbf{q}j}^{\beta\alpha} (X_{\mathbf{q}j}^{\beta} + X_{\mathbf{q}j}^{\alpha}) = 0 \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

従ってこういう確率は 0 である。次にフォノンをも 1 つ放出する場合は

$$\begin{aligned}
 (\beta, n_{\mathbf{q}j}=1, n_{\mathbf{q}}=1 | H(\mathbf{q}) | \alpha 0) &= (\Psi_{\beta 0} | \Psi_{\alpha 0}) \left(-\omega \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\Omega}}\right) Y_{\mathbf{q}j}^{\beta\alpha} \\
 &\quad (4.5)
 \end{aligned}$$

斎藤基彦

で与えられる。これより  $q_j$  フォノンを1つ放出して遷移する確率は

$$\Gamma_1 = \frac{2\pi}{\hbar} \sum'_q |(\Psi_{\beta_0} | \Psi_{\alpha_0})|^2 \frac{\hbar\omega^3}{2\Omega} |Y_{q_j}^{\beta\alpha}|^2 \delta(eFa - \hbar\omega) \quad (4.6)$$

である。これは  $j = 1, 2$  に対して同じ値をとる。次にフォノンを2個放出する過程を考えよう。例えば  $(n_{q_1} = 1, n_{q_2} = 1)$  とすると、

$$\begin{aligned} & (\beta, n_{q_1} = 1, n_{q_2} = 1 | H(q) | \alpha_0) = (\Psi_{\beta_0} | \Psi_{\alpha_0}) \\ & \times \frac{\omega^2}{2\sqrt{\Omega}} \prod_{j=1}^2 (X_{q_j}^{\beta} - X_{q_j}^{\alpha}) \sum_j Y_{q_j}^{\beta\alpha} (X_{q_j}^{\beta} - X_{q_j}^{\alpha})^{-1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

となり、これは (4.5) にくらべて  $X_{q_j}^{\alpha, \beta}$  に含まれる  $\Omega^{-\frac{1}{2}}$  だけ小さいから無視して良い。同様の理由で  $n_q \gg 2$  の場合は考慮する必要がない。すなわちポーラロンが  $\alpha$  から  $\beta$  に遷移する際放出されるフォノンの波数  $q$  は全て異っているという事ができる。

さて状態  $\alpha$  から  $\beta$  に遷移する際に  $n$  個のフォノンを放出するとすると、その遷移確率  $\Gamma_n$  は結局

$$\begin{aligned} \Gamma_n &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum'_{q^{(1)}} \cdots \sum'_{q^{(n)}} \left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^n \prod_{i=1}^n |X_{q^{(i)}}^{\beta} - X_{q^{(i)}}^{\alpha}|^2 \\ & \times |(\Psi_{\beta_0} | \Psi_{\alpha_0})|^2 \left| \sum_{i=1}^n \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\Omega}} \frac{Y_{q^{(i)}}^{\beta\alpha}}{X_{q^{(i)}}^{\beta} - X_{q^{(i)}}^{\alpha}} \right|^2 \delta(eFa - n\hbar\omega), \end{aligned} \quad (4.8a)$$

となる。ただしおのおのの  $q^{(i)}$  について分枝は  $j = 1, 2$  のいずれかを選ぶものとする。

$$\sum'_{q^{(i)}} \sum'_{q^{(\ell)}} \frac{\hbar^2\omega^2}{\Omega} |(X_{q^{(i)}}^{\beta} - X_{q^{(i)}}^{\alpha})(X_{q^{(\ell)}}^{\beta} - X_{q^{(\ell)}}^{\alpha}) Y_{q^{(i)}}^{\beta\alpha} Y_{q^{(\ell)}}^{\beta\alpha}| \quad (i \neq \ell)$$

のよりの項は寄与しない事に注意して和を実行すると

$$\Gamma_n = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(eFa - n\hbar\omega) n L K^{n-1}$$

を得る。ただし

$$L = |(\Psi_{\beta 0} | \Psi_{\alpha 0})|^2 \frac{\hbar \omega^3}{2\Omega} \sum_q |Y_{qj}^{\beta \alpha}|^2, \quad (4.9)$$

$$K = \frac{\omega}{2\hbar} \sum_q (X_{qj}^{\beta} - X_{qj}^{\alpha})^2. \quad (4.10)$$

また (4.10) の  $K$  を用いれば

$$|(\Psi_{\beta 0} | \Psi_{\alpha 0})|^2 = \exp(-K) \quad (4.11)$$

と簡単化される。  $L$  および  $K$  の評価は § 3 と同様にして行い事ができるが、これは付録に示す。こうして得た遷移確率より電流  $j$  を計算すると、  $n$  フォノン過程においては

$$j_n \simeq -ea \Gamma_n N / \Omega \quad (4.12)$$

になるだろう。ここで  $N$  は系の伝導電子数、従って電場  $F_n = n\hbar\omega/ea$  における電気伝導率  $\sigma_n$  は

$$\sigma_n = \frac{2\pi N e^2 a^2}{\hbar^2 \omega \Omega} \delta(eFa - n\hbar\omega) L(F_n) K(F_n)^{n-1} \quad (4.13)$$

で与えられる。付録の結果によれば  $t = W/eFa = W/n\hbar\omega$  として

$$L = \frac{\alpha \hbar \omega W}{6\pi^2} \langle e^{-\rho^2/2b^2} \rangle \frac{\ln 2\pi e t^3}{t} \ln \frac{e^{1-r}}{\beta^2 Q_1^2}, \quad (4.14)$$

$$K(\rho=0) = (\alpha Q_0)^2 \left(\frac{W}{2\hbar\omega}\right)^{1/2} \quad (4.15)$$

ただし  $\rho, Q_0$  は (3.3), (3.10c) で与えられ、  $\langle \dots \rangle$  はアンサンブル平均を示し、

$$Q_1 = \left\{ 8 \ln(2\pi e t^3) / 9\pi(4/\pi)^{1/3} t \right\}^{1/2} \quad (4.16)$$

これにより  $\sigma_n/\sigma_1$  を見積る事ができ、実験と比較する事ができる。

斎藤基彦

## § 5. 実験との比較

Maekawa の実験<sup>4)</sup> と比較するために閃亜鉛鋅型 ZnS の物質定数

$$2W = 1.6 \text{ eV}^{8)}$$

$$m/m_0 = 0.39^{9)}$$

$$\hbar\omega = 0.044 \text{ eV}^{10)}$$

$$\epsilon_\infty = 5.07, \quad \epsilon_0 = 8.3^{10)}$$

を用いると

$$\alpha = 0.84$$

$$t \approx 40/n$$

となる。これによって得られる  $Q_0$  の値を表に示すが、対応する  $K$  の値は非常に小さい。

表

n	$Q_0$
1	0.045
2	0.08
3	0.11
5	0.168
10	0.288
15	0.384
20	0.48

従って  $\sigma_n/\sigma_1 \ll 1$  となって実測される値 ( $\sigma_n/\sigma_1 \sim 1$ ,  $n=2\sim 3$ ) を再現しない。

以上強電場中の強結合のポーラロン状態について理論的に調べた。しかしながらここで調べた Stark ラダーとフォノンの結合は実験的観測よりずっと小さい。実験の説明には他の過程の考察が必要である。

終わりに有益な議論をして下さった水野幸夫助教授に感謝の意を表す。またいくつかの資料を御教示下さった電子技術総研の前川稔氏に感謝の意を表す。

## 付録 L および K の計算

(4.9) で  $q$  の和を積分に直すと,

$$L = \exp\left(-K - \frac{\rho^2}{2b^2}\right) \frac{ac^2}{8\pi^2} \int_0^\infty dq_\perp q_\perp \exp\left(-\frac{b^2 q_\perp^2}{2}\right) I_L(q_\perp) \quad (\text{A.1})$$

ただし

$$I_L(q_\perp) = \frac{2}{a} \int_{-\pi/a q_\perp}^{\pi/a} \frac{dq_x}{q_x^2 + q_\perp^2} J_1^2\left(t \sin \frac{aq_x}{2}\right) \left(\frac{\cos^2}{\sin^2}\right)(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_0), \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{R}_0 = \left(-\frac{\nu' + \nu}{2} a, \frac{R'_\perp + R_\perp}{2}\right). \quad (\text{A.3})$$

(A.2) で最後の因子を  $1/2$  近似し, 分母で  $q_x^2 = (2/a)^2 \sin^2(aq_x/2)$ ,  $J_1^2(x)$  を (3.8) で置き換えると, 積分は実行できる。その近似的な関数として  $Q = a q_\perp / 2 \ll t^{-1}$  および  $Q \gg 1$  で正しく振舞うような形

$$I_L(Q) = \begin{cases} \frac{3}{8} \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/3} t, & Q < Q_1 \\ \frac{1}{3\pi t Q^2} \ln(2\pi e t^3), & Q > Q_1 \end{cases} \quad (\text{A.4a})$$

$$(\text{A.4b})$$

$$Q_1 = \{8 \ln(2\pi e t^3) / 9\pi (4/\pi)^{1/3} t\}^{1/2} \quad (\text{A.4c})$$

をとる。(A.4) を (A.2) に代入して  $q_\perp$  で積分すれば

$$L = \frac{3c^2 t}{32\pi^2 a \beta^2} \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/3} \exp\left(-K - \frac{\rho^2}{2b^2}\right) \left\{1 - e^{-\beta^2 Q_1^2} - \beta^2 Q_1^2 \text{Ei}(-\beta^2 Q_1^2)\right\} \quad (\beta = \sqrt{2} b/a) \quad (\text{A.5})$$

$\beta^2 Q_1^2 \ll 1$  であるから

$$L \simeq \frac{\alpha \hbar^3 \omega}{6\pi^2 m a^2} \exp\left(-K - \frac{\rho^2}{2b^2}\right) \frac{\ln 2\pi e t^3}{t} \ln \frac{e^{1-\gamma}}{\beta^2 Q_1^2} \quad (\text{A.6})$$

齋藤基彦

次にKを(4.10)より書き直すと,

$$K = \frac{c^2}{2\pi^3 \hbar^2 \omega^2} \int \frac{d^3 q}{q^2} \exp\left(-\frac{b^2 q_{\perp}^2}{2} - \frac{\rho^2}{2b^2}\right) J_n\left(t \sin \frac{aq_x}{2}\right) \times \sin^2\left(\frac{q_{\perp} \cdot \rho}{2} + \frac{aq_x}{2}\right) \left(\frac{\sin^2}{\cos^2}\right) q \cdot R_0. \quad (\text{A.7})$$

前と同様最後の因子を $\frac{1}{2}$ で置き換え, 更に $\rho=0$ の場合を考える。積分

$$I_K = \frac{1}{a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq_x \frac{1}{q_x^2 + q_{\perp}^2} J_0^2\left(t \sin \frac{aq_x}{2}\right) \sin^2 \frac{aq_x}{2} \quad (\text{A.8})$$

の近似形として,

$$I_K(Q) = \begin{cases} (\pi Q_0/2), & Q < Q_2 = (\ln 2\pi et)^{-\frac{1}{2}} \\ (\pi t Q^2)^{-1}, & Q > Q_2 \end{cases} \quad (\text{A.9a})$$

$$(\text{A.9b})$$

をとる事にする。 $\beta^2 Q_2^2 \gg 1$ である事に注意すると

$$K(\rho=0) = \alpha \hbar Q_0 / 2mb^2 \omega \quad (\text{A.10})$$

を得る。(A.6), (A.10)から(4.14), (4.15)に移るのには(3.13)および $a^2 = \hbar^2 / mW$ を利用する。

### 参 考 書

- 1) G.H.Wannier: Elements of Solid State Theory (Cambridge Univ. Press, N.Y., 1959) p.190.
- 2) G.H.Wannier: Phys. Rev. 117 (1960) 432.
- 3) 前川 稔: 物理学会誌 25 (1970) 313.
- 4) S.Maekawa: Phys. Rev. Letters 24 (1970) 1175.
- 5) J.Frenkel: Phys. Rev. 54 (1938) 657.
- 6) 帯間遷移の影響は次のようにして見積る事ができる。nを今考えている伝導帯cとすると, n'のうち一番重要な寄与は価電帯vより来る。帯間

エネルギーを  $E_G$  と書けば  $P^x$  を運動量演算子として、

$$X^{vc} = i\hbar P_{vc}^x / m_0 E_G.$$

他方有効質量の表式

$$\frac{m_0}{m} = 1 + \frac{2}{m_0 E_G} |P_{vc}^x|^2$$

を用いれば、波動関数  $A^c$  に  $A^v$  が混じる度合は  $2W$  を伝導帯の帯巾として

$$\frac{eF|X_{vc}|}{E_G} = \frac{eFa}{E_G} \left\{ \frac{W}{2E_G} \left( 1 - \frac{m}{m_0} \right) \right\}^{1/2}$$

となるからこれは無視し得る。

また Stark ラダーの存在そのものを疑問とする Zak らの意見 (J. Zak: Phys. Rev. Letters 20 (1968) 1477; A. Rabinovitch: Phys. Letters 33A (1970) 403) もあるが、ラダーはここに述べたような共鳴準位であると思えば、その存在は否定しきれない。

- 7) 例えば豊沢 豊: 物性物理学講座 (共立出版, 1961) Vol. 7, p. 195.
- 8) M. L. Cohen and T. K. Bergstresser: Phys. Rev. 141 (1966) 789.
- 9) M. Cardona: J. Phys. Chem. Solids 24 (1963) 1543.
- 10) F. C. Brown: Polarons and Excitons, ed. C. G. Kuper and G. D. Whitfield (Oliver and Boyd Ltd., Edinburgh, 1963) p. 323.