（6） 高電界下の非線型伝導

名大・工　沢　木　宣　彦

高電界下での電子ー格子相互作用を調べる目的で，久保の公式の拡張を試みている。従来の非線型伝導の取り扱いは大体ボルツマン方程式を基にしており，固体内でのシュタルク効果，バンド間遷移や散乱確率の電界依存性などは無視されている。ファイマンの経路積分の方法は一つの解決法ではあるが，さ程簡単ではない。電子ー格子相互作用が弱い場合には密度行列の方法を用いて比較的容易に定式化できる。用いた仮定は，① one band 近似，②弱い電子格子相互作用，③は電子間相互作用は考えない，④フォノン分布は電界によらず温度 T の熱平衡状態にある，などである。

§一般公式

時刻 $t=0$ で一定電界 F を印加したとき，密度行列 ρ の時間変化は[1)]

$$\rho=\rho_0+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t d\tau\ e^{-iH(t-\tau)/\hbar}\,[H,\rho_0]\,e^{iH(t-\tau)/\hbar}\ , \tag{1}$$

$$\rho_0=(1/Z)\exp-\beta\,(H_0+H_{int}),\quad Z=\mathrm{Tr}\,\rho_0 \tag{2}$$

で与えられる。但し，$H=H_0+H_F+H_{int}$，$H_0=H_e+H_L$（H_e：ブロッホ電子，H_L：フォノン，H_F：電界 eFx，H_{int}：電子格子相互作用）。もし，$(H_0+H_F)\varphi_i=W_i\varphi_i$ を満たす固有函数系 $\{\varphi_i\}$ を決めることができれば，H_{int} が小さいとする近似の範囲で，物理量 Q の期待値を次の形の摂動展開で求めることができる。

$$<Q>=\mathrm{Tr}\,\rho_0 Q+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t d\tau\,\mathrm{Tr}\,\rho_0\,[Q^H(\tau),H] \tag{3}$$

$$\simeq <Q>_0+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t d\tau <[Q(\tau),H]>_0$$

$$+\frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t d\tau\int_0^\tau d\tau_1 <[[Q(\tau),H_{int}(\tau_1)],H]>_0$$

$$+\cdots\cdots \tag{4}$$

但し $Q^H(\tau)=e^{iH\tau/\hbar}Qe^{-iH\tau/\hbar}$，$Q(\tau)=e^{i(H_0+H_F)\tau/\hbar}Q\,e^{-i(H_0+H_F)\tau/\hbar}$ なる記法を用いた。$\{\varphi_i\}$ として次のシュタルク・ラダー表示を用いる。

$$\Phi_\nu(k_\perp,\mathrm{r})=\int_{-\pi/a}^{\pi/a}A_\nu(k)\,\phi_k(r)\,dk_x\ , \tag{5}$$

$$A_\nu(k)=\sqrt{a/2\pi}\,\exp\{-\frac{i}{eF}\int_0^{k_x}[E_\nu(k_\perp)-\varepsilon(k)]\,dk_x\ , \tag{6}$$

$$E_\nu(k_\perp)=\nu\,eFa+\frac{a}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a}\varepsilon(k)\,dk_x,\qquad(\nu：整数) \tag{7}$$

但し，$\phi_k(r)$ は規格直交系としてのブロッホ函数で，$\varepsilon(k)$ はそのエネルギー，a は x ー軸方向（電界方向）の格子間隔である。

§電流

（3）式で $Q\to j_x$ として電流を求める。$<j_x>_0=0$ は自明。characteristic relaxation time τ_c が短くて $\nu eFa\ll\hbar/\tau_c$ なる低電界の場合，（3）式の被積分函数は H_{int} の2次までの近似で

$$<[j_x^H(\tau),H]>_0\sim\sum<1|j_x|2><2|\rho_0|1>W_{21}(1-\gamma t), \tag{8}$$

$$\gamma=-\frac{\sum<1|j_x|2><2|\rho_0|1>W_{21}\frac{2\pi}{\hbar}|<2|H_{int}|3>|^2\delta(W_{23})}{\sum<1|j_x|2><2|\rho_0|1>W_{21}}+\frac{\sum<1|j_x|2><3|\rho_0|4>W_{34}\frac{2\pi}{\hbar}|2|H_{int}|3>|^2\delta(W_{23})}{\sum<1|j_x|2><2|\rho_0|1>W_{21}}\ , \tag{9}$$

となる。但し $|i>$ は固有函数 $|\varphi_i>$ で，$W_{ij}=W_i-W_j$ である。(8)，(9) 式の和は $\varepsilon(k)$ の具体的な形が与えられれば容易に実行できる。例えば

$$\varepsilon(k)=\hbar k_\perp^2/2m_\perp+\hbar^2k_x^2/2m_x \tag{10}$$

を仮定し，（8）で $1-\gamma t\sim e^{-\gamma t}$ と書き（3）の時間積分も実行すれば

$$\langle j_x \rangle = -\frac{e^2 NF}{m_x \gamma}(1 - e^{-\gamma t}), \qquad (N：電子数密度) \tag{11}$$

を得る。$t \to \infty$ の定常状態ではオーム則様を示すが，γ は次に示す強い電界依存性をもっていて非線型伝導を与える。

$$\gamma = (1/N) \sum [f(k+q) - f(k)] \cdot (\nu^{+} + \nu^{-}), \tag{12}$$

$$\nu^{\pm} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_i(q)|^2 \binom{N_q + 1}{N_q} \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x \, \delta_E^{\pm} \quad , \tag{13}$$

$$\delta_E^{\pm} = \frac{1}{\pi} \int^{\frac{1}{eF}(\frac{\pi}{a} - k_x)} dt \cos\{ [\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_q] t + \frac{\hbar^2 q_x eF}{2 m_x} t^2 \} . \tag{14}$$

但し，$C_i(q)$ は電子格子相互作用の結合定数，$\varepsilon(k) = \varepsilon(-k)$，$\hbar\omega_q = \hbar\omega_{-q}$，$N_q = N_{-q}$ などとし，$\pm$ の符号は各々フォノンの放出と吸収に対応させてある。(14)式は $F \to 0$ では散乱のエネルギー保存則 $\delta(\varepsilon(k+q) - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_q)$ を与えるが，$F \neq 0$ では $\hbar^2 q_x eFt^2/2m_x$ の項の為にエネルギー保存則が破れることを示している。ファイマンの経路積分の方法でも類似の結果を得るが，[2] この方法ではモーメンタムの保存に関する議論はできない。我々の方法では電界に垂直な成分の保存則がマトリックス要素の計算の過程で自然にでてくる。

§運動エネルギー

(3)式で $Q \to H_e$ とし，前節と全く同じ仮定と手法を用いて計算を実行すると，

$$\langle H_e \rangle = \langle H_e \rangle_0 + \frac{N}{m_x} \left(\frac{eF}{\gamma}\right)^2 \{ 1 - (1 + \gamma t) e^{-\gamma t} \} \tag{15}$$

を得る。(15)式の γ は(9)式で $j_x \to H_e$ と書き替えたもので与えられ，エネルギーとモーメンタムの緩和時間 $1/\gamma$ は一般には異ることになるが，(10)を仮定すれば全く同

じ値を与える。 $t \to \infty$ の定常での電子のエネルギーの増加分((15)式第2項)は古典的線型理論で期待されるのと同じ型であるが，γ は強い電界依存性を示していて非線型である。

1) Sawaki, N. and Nishinaga, T., 1977 J. Phys. C **10** 5003
2) Thornber, K.K., 1978 Solid-St. Electron. **21** 259
Barker, J.R., 1978 Solid-St. Electron. **21** 267