Title	時間に依存する局所摂動によるエネルギー散逸(アンダーソンモデルの厳密解とその応用に関する理論的研究,科研費研究会報告)
Author(s)	馬越, 健次
Citation	物性研究 (1985), 43(6): 61-65
Issue Date	1985-03-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91520
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

時間に依存する局所摂動によるエネルギー散逸

阪大基礎工　馬越健次

金属表面の近傍を原子、あるいはイオンが運動する時、その運動を外から与えられた古典的な軌道とみなす近似（Trajectory approximation）がよく用いられる［1］。その時、電子系のハミルトニアンは場所に依存するものからその運動を通じて時間に依存するものへと変わる。従って、時間に露に依存するハミルトニアンを扱う必要がでてくる。

この種の時間に依存するハミルトニアンの古典的な問題としてはＸ線の吸収及び光電子放出のしきい値での異常の問題がある［2,3］。Ｘ線の吸収により出来た内殻の正孔が、伝導電子に局所ポテンシャルをおよぼす。電子系は吸収前とは異なる基底状態（温度Ｔ＝０のみ考える）へ、フェルミ面の存在を反映して、時間の逆べきで緩和し、吸収端の異常へと導く。これは基本的にはNozières-de Dominicis[3]により解かれ、その物理はAndersonの直交定理［4]により理解される。直交定理の最も一般的な形は最近Yamada-Yosida[5]により得られている。

Ｘ線の問題は、内殻正孔の急な出現という時間に関し階段関数で記述されるのに対し、表面の問題ではより一般的な時間依存性を扱う必要があるが、やはりいくらでも低いエネルギーの電子正孔励起が可能である為、非断熱過程のおこる事が予想される。実際、電子系に局所摂動がゆっくり加えられ、後に再びゆっくり消えた時、この時間の尺度の大きい極限をとっても、元の基底状態に戻る確率P_0、いわば電子系によるDebye-Waller因子は１にならないことが、Müller-Hartmann 他［6]により示された。実際に計算しようとする量は、P_0ばかりではなく、無限の時間がたった後電子系のエネルギーが初期のエネルギーE_0からεだけ励起された状態にある確率密度$P(\varepsilon)$、あるいはそのフーリエ変換$\Pi(\tau)$である：

$$P(\varepsilon) = \langle\infty|\delta(E_0+\varepsilon-H(\infty))|\infty\rangle \ , \tag{1}$$

$$\Pi(\tau) = \langle\infty|\exp[-i(H(\infty)-E_0)\tau]|\infty\rangle \ . \tag{2}$$

以下ではこの$\Pi(\tau)$（散逸関数と呼ぶ事にする）について議論するが、電子間相互作用がある場合には話が難しく、ここでは１体のハミルトニアンについてのみ考察する。従ってここで考えるハミルトニアンは

$$H(t) = H_0 + H'(t) \ , \tag{3}$$

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k \ , \tag{4}$$

$$H'(t) = \sum_{k,k'} V_{kk'}(t) c_k^+ c_{k'} \ , \tag{5}$$

である。ここで、H_0は初期のハミルトニアンで、適当な基底により対角化されているものとし、$V(-\infty)=0$ とする。

摂動の時間依存性が金属のバンド幅の逆数時間$1/D(\hbar=1)$よりも十分ゆっくりしている場合で、伝導電子の散乱が唯一の位相のずれにより記述される場合には、散逸関数は

$$\Pi(\tau) = \exp[C(\tau)] \ , \tag{6}$$

$$C(\tau) = \frac{1}{\pi^2}\int_0^\infty d\omega\ \omega|\delta(\omega)|^2[\coth\frac{\omega}{2k_BT}\ (\cos\omega\tau-1)-i\sin\omega\tau] \ , \tag{7}$$

と与えられる事が、Schönhammer-Gunnarsson[7] 及びBrako-Newns[8]により示された。ここで、$\delta(\omega)$は各時刻における瞬間的な位相のずれのフェルミ面における値のフーリエ変換である：

$$\delta(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dt\ \delta(0,t)e^{i\omega t}. \tag{8}$$

これらの理論は必ずしも明確ではなく、系統だった基礎をもっているわけでもない。一方、著者は、散逸関数が拡張された Keldyshグリーン関数で厳密に表わされる事を示し、これを基に遅い摂動の極限で Wolffモデルの場合T＝0で正しい事をMuskhelishviliの方法を用いて示した [9]。しかし、一般には散乱が唯一の位相のずれにより記述される必要はなく、また、位相のずれで表現できるかどうかも確かではない。特に前者については、摩擦係数の議論で、Nourtier[10]によりS-行列の時間微分の非対角項の効果は無視しきれない場合が在るという事が指摘されている。ここでは、最も一般的な散乱ポテンシャルを考え、散逸関数の一般的な形についてぎろんする。今のところ簡単な形で答えが求まっているわけではないが、得られた結果を見て幾つかの結論を引き出す事にする。

さて、散逸関数と拡張された Keldyshグリーン関数との関係は、前回の研究会の報告にも書いたので詳細は省いて結果のみを書くと次の様になる：

$$C(\tau) = -\int_0^1 d\lambda\int_{-\infty}^{\infty}dt\sum_{k,k'}[V_{kk'}(t+\tau)G^{++}_{k'k}(t,t^+;\lambda)-V_{kk'}(t)G^{--}_{k'k}(t^+,t;\lambda)], \tag{9}$$

ここで、$G^{\sigma\sigma}$ は時間の増加する分枝(σ=+) と減少する分枝(σ=-) からなる２×２の行列の形で表わされ、次の Dyson方程式を満足する

$$\underset{\sim}{G}(t,t') = \begin{bmatrix} G^{++}(t,t') & G^{+-}(t,t') \\ G^{-+}(t,t') & G^{--}(t,t') \end{bmatrix}, \tag{10}$$

$$\underset{\sim}{G} = \underset{\sim}{G}_0 + \underset{\sim}{G}_0\,\underset{\sim}{\Sigma}_\lambda\,\underset{\sim}{G}, \tag{11}$$

$$\underset{\sim}{\Sigma}_\lambda(t,t') = \lambda\begin{bmatrix} V(t+\tau) & 0 \\ 0 & -V(t) \end{bmatrix}\delta(t-t'). \tag{12}$$

ただし、時刻も行列の足として考え、行列の積を

$$(\underset{\sim}{A}\underset{\sim}{B})^{\sigma\sigma'}_{kk'}(t,t') = \sum_{\sigma''}\sum_{k''}\int dt''\ A^{\sigma\sigma''}_{kk''}(t,t'')B^{\sigma''\sigma'}_{k''k'}(t'',t'), \tag{13}$$

により定義するものとする。

$\underset{\sim}{G}$ を初期状態の電子占有数(n^0_k)による部分$\underset{\sim}{G}_L$とそうでない部分に分けると、(9)式の右辺の$\underset{\sim}{G}$ は$\underset{\sim}{G}_L$で置き換えられ、$G^{\sigma\sigma}_L$ は形式的に次の式で与えられる：

$$G^{++}_L(t,t') = iG^rN(1+iLN)^{-1}(G^a-L), \tag{14}$$

$$G^{--}_L(t,t') = i(G^r+L)(1+iLN)^{-1}G^a, \tag{15}$$

$$L = -G^a(\Sigma^{++}_\lambda+\Sigma^{--}_\lambda)G^r, \tag{16}$$

ここで、$G^r(G^a)$は次の Dyson方程式を満足する遅延（先進）グリーン関数である：

$$G^r = G_0^r + G_0^r \Sigma_\lambda^{++} G^r, \tag{17}$$
$$G^a = G_0^a - G_0^a \Sigma_\lambda^{--} G^a , \tag{18}$$

Nは初期の電子占有数を表わす行列で

$$N_{kk'}(t,t') = n_k^0\, \delta(t-t_-)\delta(t'-t_-)\delta_{kk'} . \tag{19}$$

で定義される($t_- \to -\infty$)。(14),(15) 式において、フェルミ面の効果は $(1+iLN)^{-1}$ に含まれている。もし $\tau=0$ ならば(この場合 $\underline{G}$ は普通の Keldyshグリーン関数になる)、$L=0$ となり、Blandin 他[11]により得られた $t>t'$ の時の $G^{++}(t,t')$ を G^r、G^a を用いて表わす式に帰着し、その場合局所的な電子数などに現われる同時刻の極限に異常な振る舞いはない。フェルミ面の効果は次式で与えられる局所的なグリーン関数の長時間の漸近形

$$\sum_k G_{0k}^r(t-t_-) n_k^0 G_{0k}^a(t_- - t') = -\rho(0)/(t-t'+i0) , \tag{20}$$

に現われるが、$G^{r/a}$ から作られる局所グリーン関数は、電子系の時間の尺度(1/D) より長い時間間隔に対して急に小さくなる。従って G^r を次の様に近似する事ができる:

$$G^r(t,t_-;\lambda) = \int \frac{d\varepsilon}{2\pi i} [1+g_0^r(\varepsilon)T_\lambda(\varepsilon;t+\tau)][g_0^a(\varepsilon)-g_0^r(\varepsilon)]G_0^r(t-t_-) . \tag{21}$$

ここで、$T_\lambda(\varepsilon;t+\tau)$ は各瞬間におけるT-行列で

$$T_\lambda(\varepsilon;t+\tau) = \lambda V(t+\tau)[1-\lambda g_0^r(\varepsilon)V(t+\tau)]^{-1} . \tag{22}$$

により与えられ、$g_0^r(\varepsilon)$ は $G_0^r(t-t')$ のフーリエ変換:

$$g_{0k}^r(\varepsilon) = (\varepsilon-\varepsilon_k+i0)^{-1} . \tag{23}$$

である。G^a にも同様な近似を適用し、(20)式同様な漸近形をNをはさむグリーン関数に適用すると次の式が得られる:

$$G_L^{++} = -[1+g_0^r T_\lambda(t+\tau)]F_\lambda(t,t')S_\lambda^\dagger(t')[1+T_\lambda(t'+\tau)g_0^r] , \tag{24}$$
$$G_L^{--} = -[1+g_0^a T_\lambda^\dagger(t)]S_\lambda(t+\tau)F_\lambda(t,t')[1+T_\lambda^\dagger(t')g_0^a] , \tag{25}$$

ここで、すべての行列はフェルミエネルギーでの値をとることとし、S_λ は各瞬間のVに対するon-shellのS-行列:

$$S_{\lambda kk'}(t) = [\delta_{kk'} - 2\pi i\delta(\varepsilon_k-\varepsilon_{k'})T_{\lambda kk'}(t)]_{\varepsilon_k=0} . \tag{26}$$

である。G_L^{++} と G_L^{--} に共通に出て来る関数(行列)$F_\lambda(t,t')$ がフェルミ面効果を表わし、次の積分方程式の解として与えられる:

$$F_\lambda(t,t') = \frac{1}{t-t'+i0} + \int \frac{dt_1}{2\pi i} \frac{[S_\lambda^\dagger(t_1)S_\lambda(t_1+\tau)-1]F_\lambda(t_1,t')}{t-t_1+i0} . \tag{27}$$

この積分方程式の解法はYamadaとYosida [5]により与えられており、その知識を援用して

$$C(\tau) = C_A(\tau)+C_{NA}(\tau) \ , \tag{28}$$

$$C_A(\tau) = -i\tau\Delta E \ , \tag{29}$$

$$\begin{aligned} C_{NA}(\tau)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{4\pi i}\int_0^1 d\lambda \mathrm{Tr}\{\frac{\partial\Delta}{\partial\lambda}\Delta^{\dagger}\sum_{n=1}^{\infty}\int\frac{dt_1\cdots dt_n}{(2\pi i)^n}\frac{[\Delta_1^{\dagger}-1]\cdots[\Delta_n^{\dagger}-1]}{(t_1-t+i0)\cdots(t_n-t_{n-1}+i0)(t_n-t+i0)} \\ +\Delta^{\dagger}\frac{\partial\Delta}{\partial\lambda}\sum_{n=1}^{\infty}\int\frac{dt_1\cdots dt_n}{(2\pi i)^n}\frac{[1-\Delta_1]\cdots[1-\Delta_n]}{(t_1-t-i0)\cdots(t_n-t_{n-1}-i0)(t_n-t-i0)} \\ +\dot{S}_{\lambda}(t)S_{\lambda}^{\dagger}(t)\ \frac{\partial S_{\lambda}(t+\tau)}{\partial\lambda}S_{\lambda}^{\dagger}(t+\tau)-\dot{S}_{\lambda}(t+\tau)S_{\lambda}^{\dagger}(t+\tau)\frac{\partial S_{\lambda}(t)}{\partial\lambda}S_{\lambda}^{\dagger}(t)\} \end{aligned} \tag{30}$$

が得られる。C_Aは基底エネルギーのずれを与え、分光学的言葉で言えばrelaxation shiftに当たり、C_{NA} が非断熱効果を表わす。ただし、$\Delta\equiv S_{\lambda}^{\dagger}(t)S_{\lambda}(t+\tau)$, $\Delta_m\equiv S_{\lambda}^{\dagger}(t_m)S_{\lambda}(t_m+\tau)$ と略記した。式(30)をさらに簡単化する事は未だ成功していないが、特別な場合には簡単になる事がある。それは異なる時刻におけるS-行列がすべて可換な場合で、第一に唯一の位相のずれで書ける場合である。この時は、S-行列はスカラーとなり、

$$C_{NA}(\tau)=\pi^{-2}\int_0^{\infty}d\omega\ \omega|\delta(\omega)|^2(e^{-i\omega\tau}-1), \tag{31}$$

と式 (7)のT＝0の結果を与える。従って、すくなくともT＝0で (7)式は Wolffモデルに限らず正しい事が証明されたといえる。

次に可能なのはX線の吸収端の異常の場合で、$S(t)=\theta(-t)+\theta(t)S$となり、時間依存性がスカラー関数として因子化出来る場合である。この時、散逸関数の漸近形は

$$\Pi(\tau)\sim(iD\tau)^{-\alpha}, \tag{32}$$

$$\alpha=-(4\pi^2)^{-1}\mathrm{Tr}\{\ln^2 S\}, \tag{33}$$

となり、$P(\varepsilon)$の異常は、relaxation shiftの分をエネルギーの原点に吸収して

$$P(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\alpha-1} \ , \tag{34}$$

となる。

この様な特殊な時間依存性ではなく一般の場合でも、散逸エネルギーの平均値$\Delta\varepsilon$は

$$\Delta\varepsilon=i\dot{C}_{NA}(0)=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dt}{4\pi}\ \mathrm{Tr}\{S^{\dagger}(t)\dot{S}(t)\}^2, \tag{35}$$

と簡単になる。しかし、一般のDebye-Waller因子は(30)式の初めの２項から出て来る為、今のところ簡単な表式は得られていない。問題は異なる時刻におけるΔが可換でない事に因るが、その交換関係がどの様な寄与をするのかは研究中である。

参考文献

[1] J.K. Nørskov and B.I. Lundqvist: Surf. Sci. 89, 251 (1970)

R. Brako and D.M. Newns: Vacuum 32, 39 (1982)

[2] P. Nozières and C.T. de Dominicis: Phys. Rev. 178, 1097 (1969)

[3] S. Doniach and M. Šunjić: J. Phys. C3, 285 (1970)

S. Doniach: Phys. Rev. B2, 3898 (1970)

[4] P.W. Anderson: Phys. Rev. Lett. 18, 1049 (1967)

[5] K. Yamada and K. Yosida: Prog. Theor. Phys. 68, 1504 (1982)

[6] E. Müller-Hartmann, T.V. Ramakrishnan and G. Toulouse: Phys. Rev. B3, 1102 (1971)

[7] K. Schönhammer and O. Gunnarsson: Phys. Rev. B22,1629 (1980)

[8] R. Brako and D.M. Newns: J. Phys. C14, 3065 (1981)

[9] K. Makoshi: J. Phys. C16, 3617 (1983)

[10] A. Nourtier: J. Physique 38, 479 (1977)

A. Yoshimori and J-L. Motchane: J. Phys. Soc. Jpn 51, 1826 (1982)

[11] A. Blandin, A. Nourtier and D.W. Hone: J. Physique 37, 369 (1976)