

Dynamical Correlation ; 一つの応用

東教大理 沢 田 克 郎

Pines と Noziers がその本 (Quantum Liquid) で強調しているように多体系の Dynamical response がわかると系の equilibrium の性質がわかる (dielectric formalism)。(久保さんも同じ事を Vol17, No2 物性研究に述べておられる) Dynamical な response を実験で求めて理論と比較するお話は 2 日目にお話があり, 電子系, ボーズ系等での理論的な計算については 3 日目にお話がある筈である。

Scalar potential $\varphi(r, t)$ に対する response は, このポテンシャルと系の相互作用ハミルトニアン

$$H_e = \sum_q \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho_q^+ \varphi(q, \omega) e^{-i\omega t}$$

を perturbation として之で乱された系の波動関数で, 物理量 B の期待値を作り,

$$\chi_{B-\rho}(q, \omega) = \frac{\langle \rho(q, \omega) \rangle}{\varphi(q, \omega)}$$

之を B- ρ -response function という。(N-P P, 95-97 の定義)

具体的には

$$\chi_{\rho-\rho}(q, \omega) = \sum_n |(\rho_q^+)_{n0}|^2 \frac{2\omega_{n0}}{(\omega \pm i\eta)^2 - \omega_{n0}^2}$$

この χ は系の dynamic form factor $S(q, \omega)$ ($S(q, \omega) = (\sum_n |(\rho_q^+)_{n0}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}))$) と

$$\chi(q, \omega) = \int_0^\infty d\omega' S(q, \omega') \left\{ \frac{1}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega' + i\eta} \right\}$$

でむすびついており, $S(q, \omega)$ は $\varphi(q, \omega)$ による系のエネルギーの dissipation

$\text{rec} \frac{dE}{dt} = F \cdot \langle J \rangle = (-\nabla \varphi) \cdot \langle I \rangle$ を求め, 連続の式 $q \cdot \langle J(q, \omega) \rangle = \omega \langle \rho(q, \omega) \rangle$

によって χ を使ってかいて, これを S に直すと

$$\frac{dE}{dt} = 2\pi\omega |\varphi(q, \omega)|^2 S(q, \omega)$$

Dynamical correlation; 一つの応用

で、実験で dE/dt を求めれば $S(q, \omega)$ がわかることになる。(Born 近似) (この様な実験については 2 日目にお話があると思う) $\chi_{\rho-\rho}$ がわかると、例えば系のエネルギーが求められるがこの時は、連続的に相互作用の常数についても χ がわからないとだめである。 χ に附属した色々な sum rule によって、 ω_{no} の n の状態がどんなものか見当を付ける事ができる。之等は例えば Pines-Nozieres の本にまかせよう。

ここでは、response fu. をみつける方法として、Laser による Raman scattering を考えてみよう。何故 Laser を使うかというと、Q.E.D でよく御存知の様に、輻射場は所謂 radiation correction を生じるので、Laser の波長の radiation correction によって、 χ の中のパラメーターが勝手にかえられないか？そして χ をその“常数”についても連続的にしらべられないか？というわけであるが、そこ迄はまだ議論が行ってない。ただ、Raman scatt に χ がでてくる。(非常に低い Laser power で) ことをここでは示すのみであるが、power を上げれば当然 radiation correction が大きくなるだろう、というのであるが、どの程度かまだ当っていない。power を上げると当然 non-Linearity がきいてくるが、Laser は sharp なので、スペクトルの或るはんい(特に強いビームにかんした部分)を除いて考えるとやはりふつうの χ を使ってこの non-Linear な部分もあらわせる。

勿論、非常に複雑な問題になるが(実験の方からみるともっと複雑 $\because$ heat up の問題がある!) 考えてみてもよい様な気がする。それに、もう一つ理論的に面白いのは instability がおこって growing wave のでる事である。

以下簡単の為、laser-beam と stokes wave のみがあるとして話を進め又、光と電子ガス(プラズマ)が相互作用しているとし

$$H_{el-el} + \frac{e^2}{m} \int \psi \psi A A + H_{rad field}$$

型の相互作用のみを考えよう。(勿論電子-電子の相互作用は全部考えに入れる) 更に之を

$$H_{int} = \frac{e^2}{2m\Omega} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\ell} \omega_s}} (a_{\ell}^* a_s \rho_{\ell-s} + e.c.) + H_{int}^{(\ell, -s)} \rho_{\ell-s} = \int \psi \psi e^{i(\ell-s)} d\Omega$$

とわかる。先づ, $H_{el-el} + H_{ind}^{(\ell, -s)} + H_{rad}^{(\ell, -s)}$ が exact に解けているとする。そして, $t=0$ で作った packet

$$a_s^* a_\ell$$

の運動を追ってみる。但し, $t < 0$ で packet $\equiv 0$ という retarded boundary cond をとる。

$$\text{すると, } -i \frac{d}{dt} a_s^*(t) a_\ell(t) = (\omega_s - \omega_\ell) a_s^*(t) a_\ell(t)$$

$$+ \frac{e^2}{2m\Omega} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} a_\ell^*(t) \rho_{\ell-s}(t) a_\ell(t) - \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} a_s^*(t) \rho_{\ell-s}(t) a_s(t) \right\} - i \delta(t) a_s^* a_\ell$$

$$\approx (\omega_s - \omega_\ell) a_s^*(t) a_\ell(t) + \frac{e^2 N_\ell}{2m\Omega} \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} \sum_{m,n} |m \times n\rangle \langle m| \rho_{\ell-s} |n\rangle - i \delta(t) a_s^* a_\ell$$

ここで, $a_\ell^*(t) a_\ell(t) \sim N_\ell$ はレーザーの中にはいっている光の個数 (シャープな極限の近似) 又 $|n\rangle$ は $H_{el-el} + H_{int}^{(\ell, -s)} + H_{rad}^{(\ell, -s)}$ という ℓ, s の光のない系の固有状態である。“密度”マトリックス $|m \times n\rangle \langle m|$ の方程式は

$$\begin{aligned} -i \frac{d}{dt} |m \times n\rangle \langle m| &= (E_m - E_n) |m \times n\rangle \langle m| \\ &+ \frac{e^2}{2m} \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} \left[(a_\ell^* a_s \rho_{\ell-s} + a_s^* a_\ell \rho_{s-\ell}) |m \times n\rangle \langle m| - \right. \\ &\left. - |m \times n\rangle \langle m| (a_\ell^* a_s \rho_{\ell-s} + a_s^* a_\ell \rho_{s-\ell}) \right] - i \delta(t) |m \times n\rangle \langle m| \end{aligned}$$

で, ここで“一般化された” R.P.A を行う。これは

$$F |W F| m \times n\rangle = |n \times n\rangle \cdot \langle n| F |m\rangle$$

$$+ \sum_{p \neq n} |p \times n\rangle \cdot \langle p| F |m\rangle$$

の時に, $F |m \times n\rangle \doteq |n \times n\rangle \cdot \langle n| F |m\rangle$ ととる。

又 $|m \times n\rangle F \doteq |m \times m\rangle \cdot \langle n| F |m\rangle$ のみをのこし, phase のそろわない“密度”マトリックス $|p \times n\rangle$ 等をおとす。

すると, この近似では

$$-i \frac{d}{dt} |n \times n\rangle \langle n| = -i \delta(t) |n \times n\rangle \langle n|$$

Dynamical Correlation

となり $|n \times n|(\omega)$ は (step fu. $x|n \times n|$) になる。フーリエ変換して、

$$a_\ell^*(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} a_\ell^*(\omega) d\omega$$

等とすると、この近似で

$$\begin{aligned} \omega |m \times n|(\omega) &= (E_m - E_n) |m \times n|(\omega) \\ &+ (|n \times n| - |m \times m|) \frac{e^2}{2m\Omega} \frac{1}{\sqrt{\omega_\ell \omega_s}} (\{a_\ell^* a_s\}(\omega) \langle n | \rho_{\ell-s} | m \rangle + \{a_s^* a_\ell\}(\omega) \\ &\langle n | \rho_{s-\ell} | m \rangle) + |m \times n| \end{aligned}$$

がでて一方 $\{a_s^* a_\ell\}(\omega)$ は $a_s^* a_\ell(t)$ をフーリエ変換して、

$$\begin{aligned} (\omega - (\omega_s - \omega_\ell)) \{a_s^* a_\ell\}(\omega) &= \frac{e^2 N \ell}{2m\Omega \sqrt{\omega_\ell \omega_s}} \sum_{mn} |m \times n|(\omega) \langle m | \rho_{\ell-s} | n \rangle + a_s^* a_\ell \\ (\omega - (\omega_\ell - \omega_s)) \{a_\ell^* a_s\}(\omega) &= - \frac{e^2 N \ell}{2m\Omega \sqrt{\omega_\ell \omega_s}} \sum_{mn} |m \times n|(\omega) \langle m | \rho_{s-\ell} | n \rangle + a_\ell^* a_s \end{aligned}$$

がでる。そこで $|m \times n|(\omega)$ を代入すると、

$$\begin{aligned} (\omega - (\omega_s - \omega_\ell)) - \left(\frac{e^2}{2m}\right)^2 \frac{N \ell}{\Omega \omega_\ell \omega_s} \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} \frac{(|n \times n| - |m \times m|) |\langle m | \rho_{\ell-s} | n \rangle|^2}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)} \\ \{a_s^* a_\ell\}(\omega) = \frac{e^2 N \ell}{2m\Omega \sqrt{\omega_\ell \omega_s}} \sum_{mn} \frac{|m \times n| \langle m | \rho_{\ell-s} | n \rangle}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)} + a_s^* a_\ell \end{aligned}$$

が得られる。簡単にするために、 $\langle 0 | \rightarrow \leftarrow | 0 \rangle$ をとると

$$\begin{aligned} \langle 0 | \frac{1}{\Omega} \sum_{mn} \frac{(|n \times n| - |m \times m|) |\langle m | \rho_{\ell-s} | n \rangle|^2}{\omega - i\delta - (E_m - E_n)} | 0 \rangle \\ = \frac{1}{\Omega} \sum_n \left(\frac{|\langle n | \rho_{\ell-s} | 0 \rangle|^2}{\omega - i\delta - \omega_{no}} - \frac{|\langle n | \rho_{\ell-s}^* | 0 \rangle|^2}{\omega - i\delta + \omega_{nc}} \right) \\ = \chi^*(\omega, \ell-s) \end{aligned}$$

という response function になる。但し注意すべきは $|>$ のじょうたいは ℓ, s という光は全然はっていないので、全系の波動函数ではない。しかし一寸考えるとわかる様に、 ℓ, s という光が特別の役をするわけでないで、ほんとうの ($|>$ の中には "radiation" correction もはいつている) χ^* とこの χ^* の差は $0 \left(\frac{1}{\Omega} \right)$ である。故に以下 χ はほんとうの (rad. correction も入れた) ものを見て差支えない。

$$\{a_s^* a_\ell\}(\omega) = \frac{a_s^* a_\ell}{(\omega - (\omega_s - \omega_\ell) - (\frac{e^2}{2m})^2 \frac{N_\ell}{\Omega \omega_\ell \omega_s})} \chi^*(\omega, \ell - s)$$

(但しすべての量は $\langle 0 | | 0 \rangle$ をとったとりようかいする。) この様にして, t が十分たつたあとの packet のスペクトルは χ^* が直接にきいてくる。

neglect した項はすべて n_s, n_ℓ を含むので (一般化された RPA に対する補正も $||p \times n||$ の式に a_s^*, a_ℓ^* 等がでる) 実は展開は (N_ℓ/Ω) についてのもので, N_ℓ/Ω が大きければ χ^* の中にも当然この correction がでるだろう。

ついでにこの式から instability は直ちにでてくる。stokes の波は laser より ω が小さいので, $\omega_s - \omega_\ell < 0$ である。

今, $e^2 \ll$ として, weak-coupling limit をとってみると,

$$\text{Real } \omega \sim \omega_s - \omega_\ell <$$

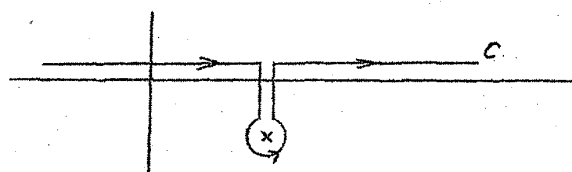
又

$$\text{Im } \omega \sim (\frac{e^2}{2m})^2 \frac{N_\ell}{\Omega \omega_\ell \omega_s} \text{Im } \chi^*(\omega_s - \omega_\ell, \ell - s)$$

$\omega_s - \omega_\ell < 0$ 故 χ の 2 項目より $\text{Im } \chi^* < 0$

$\therefore \text{Im } \omega < 0$ である。

$a_\ell(t)$ は $t < 0$ で 0 ととった故, ふつうの解は (decay するもの) $\text{Im } \omega > 0$ である筈であるが, 之は $\text{Im } \omega < 0$ にでたので $a_\ell^*(t) = 0, t < 0$ に合う様に積分路をかえて $\int_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \oint_C$



ととると, この波は Grow する事がわかる。(勿論, Grow しだすと N_ℓ/Ω が小さくなり, ここの近似はわるくなり higher-order を計算しなければならない) (同じ結論が, ふつうの R.P.A の範囲内で光を semi-classical にあつかって, Bloembergen と Shen によって得られている。P.R.141

298 (66) 以上の議論のもっと詳しい事及び関聯した事については Prog.T.

P.37 No6 に出る筈であるのでこの位にしておくが, ともかく, Laser による χ の direct な check というのは理論, 実験共に面白い事ではないだろうか?!