

Non Linear Response

京大理 谷 憲 輔

1) dynamical disturbance

半導体 Ge で観測されている non-ohmic 則 $J \propto \sqrt{E}$ ¹⁾ (J 電流, E 電場), Bi, CdS における J-E relation の kink effects^{2), 3)} 等 (種々の非平衡定常状態の例については ref. 4 参照) は Kubo⁵⁾ による linear response theory (或は linear theory を第一近似として E についての successive approximation) が適用出来ぬ意味で essentially non-linear な現象と云えよう。任意の強さの dynamical disturbance に対して response の厳密な表式が相関関数の形に求められた。それは非線型非可逆過程に対する fluctuation-dissipation theorem の表現と考えられる。⁶⁾ 電気伝導に対しては,

$$\sigma(E) = \langle J(E) \rangle / E = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon t} dt \int_0^{\beta} d\lambda \langle J(-i\hbar\lambda | H) J(t | H_T) \rangle \quad (1)$$

と表わされる。但し $J(-i\hbar\lambda | H) = e^{\lambda H} J e^{-\lambda H}$, $J(t | H_T) = e^{iH_T t / \hbar} J e^{-iH_T t / \hbar}$, $\langle \dots \rangle = \text{Tr} e^{-\beta H} \dots / \text{Tr} e^{-\beta H}$, $H_T = H + H_E$, H は系のハミルトニアン, H_E は電場による相互作用ハミルトニアン。(1) で $H_T \rightarrow H$ とすれば Kubo formula に reduce する。(1) の適用例として Ge 中の hot electrons による $\sigma(E) \propto 1/\sqrt{E}$ ($J(E) \propto \sqrt{E}$) を damping theoretical に導く⁷⁾ 報告をした。物理的には, $H_{ep} \ll H_{pp}$ ($H = H_e + H_p + H_{ep} + H_{pp}$; H_{ep}, H_{pp} はそれぞれ electron-phonon 相互作用, phonon-phonon 相互作用) の為, 電場による electrons の energy gain が phonons にさばき切れず, electron 温度が phonon 温度より高くなる為に mobility μ が $1/\sqrt{E}$ なる E 依存性をもつ事による。GaAs における Gunn effect は interband transition による $\mu(E)$ の E 依存性による。一方 Bi, CdS では $H_{pp} \lesssim H_{ep}$ であるので pho-

nons に生じた instability の electrons へのはね返りによる効果であるが, Bi, CdS の kink effects の様に磁場のある場合にも上述の damping theoretical method は拡張できる。その時磁場が存在することによって電場との相互作用をこめた electron の波動函数, 個有値が厳密に解けるので, 磁場の無い場合に比べて取扱いが簡単になる面もある。Esaki effect²⁾ に対する Boltzmann 方程式による理論⁸⁾ と実験との磁場依存性に関する不一致が collision term の磁場依存性によるものかどうか, など相関関数法(1)の立場から調べてみることも必要であろう。(1)の相関関数法が特に有効であるのは: (a) 強磁場下で carrier の cyclotron motion の半径が thermal de Broglie 波長と同程度若しくは短くなり, carrier の trajectory の概念が無意味になる。(b) carrier に対する散乱ハミルトニアンが強く long range の為 process を stochastic に取扱えぬ: 等従来の Boltzmann-Bloch の方法が適用出来ぬ問題に対してであろう。

II) thermal disturbance

温度勾配, 濃度勾配等ハミルトニアンとして記述できぬ所謂 thermal disturbance に対する response の表式は linear theory の範囲で Kubo et al⁹⁾, Mori¹⁰⁾, Luttinger¹¹⁾ 等によって与られている。non-linear の場合は, linear では問題にならなかった初期条件における local equilibrium の仮定が問題となる。¹²⁾

disturbance がハミルトニアンで記述出来ぬ困難と相俟って non-linear response は従来求められていなかったが, 此等の ambiguity を含まぬ厳密な response の表式が得られた¹³⁾ 様に思われるので報告した。拡散係数を例にとる。ref 11) を拡張し, (i) を援用する。系にポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ で与えられる外電場が adiabatic ($e^{\epsilon t}$, $\epsilon \rightarrow 0$) に作用したとする。全ハミルトニアンは $H_T = H + \int \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$, 但し $\rho(\mathbf{r})$ は charge density operator。 $\rho(\mathbf{r})$ に対する保存則は Fourier 成分で

$$\dot{\rho}_{\mathbf{k}} + ik_{\alpha} J_{\alpha \mathbf{k}} = 0. \quad (2)$$

現象則は

$$\langle J_{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle = \int \sigma_{\alpha r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') E_r(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' - \int D_{\alpha r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \nabla_r \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle d\mathbf{r}' \quad (3)$$

第二項は濃度勾配 $\nabla_r \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle$ による diffusion current であるが，拡散係数 D は非線型効果の為に $\nabla_r \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle$ に依存する，即ち $D_{\alpha r}(\mathbf{r}, \nabla_r \langle \rho(\mathbf{r}') \rangle)$ であるがそれを $D_{\alpha r}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と略記した。電場による第一項についても同様。(3) は Fourier 成分で

$$\langle J_{\alpha k} \rangle = V \sum_{\mathbf{k}'} \sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'} E_{r, -\mathbf{k}'} - V \sum_{\mathbf{k}'} D_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'} (-i \mathbf{k}')_r \langle \rho_{-\mathbf{k}'} \rangle. \quad (4)$$

(4) を (1) に代入して，

① $Dk^2 \ll \epsilon$ の場合：拡散は起らず従って

$$\langle J_{\alpha k} \rangle = \sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'} E_{r, -\mathbf{k}'} \quad (5)$$

一方 $\sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'}$ は non-linear conductivity tensor で (i) の (1) から

$$\sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\epsilon t} dt \int_0^\beta d\lambda \langle J_{r, \mathbf{k}'} (-i \hbar \lambda | H) J_{\alpha k}(t | H_T) \rangle \quad (6)$$

である。但し， H_T の H_E に相当する部分は $V \rho_{+\mathbf{k}} \varphi_{-\mathbf{k}}$ 。

② $\epsilon \ll Dk^2$ の場合：各瞬間の電場に応じて拡散流が生じ $\langle J_{\alpha k} \rangle = 0$ となるから

$$\langle \rho_{-\mathbf{k}'} \rangle = \frac{k_{\alpha} k'_{\alpha} D_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'}}{k_{\alpha} k'_{\alpha} \sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'}} \varphi_{-\mathbf{k}'} \quad (7)$$

であるが，此が任意の $\mathbf{k}$ に対して成立つ為には $\sigma_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'} = C(\mathbf{k}') D_{\alpha r, \mathbf{k} \mathbf{k}'}$ ，従って

$$\langle \rho_{-\mathbf{k}'} \rangle = C(\mathbf{k}') \varphi_{-\mathbf{k}'} \quad (8)$$

$C(\mathbf{k}')$ は $H'_T = H + V \rho_{\mathbf{k}'} \varphi_{-\mathbf{k}'}$ の下に於ける $\varphi_{-\mathbf{k}'}$ に対する response $\langle \rho_{-\mathbf{k}'} \rangle$ であるから，(i) の (1) を求めたと同様にして，結局 non-linear diffusion

constant

$$D_{\alpha\gamma, kk'} = \frac{\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\epsilon t} dt \int_0^\beta d\lambda \langle J_{\gamma, k'}(-i\hbar\lambda | H) J_{\alpha, k}(t | H_T) \rangle}{-i \lim_{s \rightarrow 0} V i k'_\alpha \int_0^\infty e^{-st} dt \int_0^\beta d\lambda \langle J_{\alpha k'}(-i\hbar\lambda | H) \rho_{-k'}(t | H'_T) \rangle} \quad (9)$$

を得る。分子, 母の $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}, \lim_{s \rightarrow 0}$ は夫々①, ②に対応した rapid, slow limit をとる事を意味する。上式で $H_T \rightarrow H; k, k' \rightarrow 0$ とすれば linear な場合の表式 9)-11) となり, Kubo によって与られた Einstein relation に reduce する。(9)式の derivation は local equilibrium の仮定等の ambiguity を含まない。此様に thermal disturbance に対しても non-linear response の厳密な表式が求められた。(i), (ii)で得られた相関関数表式について, damping theoretical method, 現象論における変分原理⁴⁾を相関関数法の立場から調べる等は将来の問題であろう。ともあれ non-linear な問題は具体的個々の物質の各現象を通して行わねばならぬであろう。

- 1) E. J. Ryder, Phys. Rev. 90(1953), 766.
- 2) L. Esaki, Phys. Rev. Letters 8(1962), 4.
- 3) R. W. Smith, Phys. Rev. Letters 9(1962), 87.
- 4) T. Matubara, (2日の講演)
- 5) R. Kubo, J. Phys. Soc Japan 12(1957), 570.
- 6) K. Tani, Prog. Theor. Phys. 32(1964), 167.
- 7) K. Tani, Harwell AERE-TP progress-report 1970 Jan-June; (発表予定)
- 8) R. Abe, Prog. Theor. Phys. 30(1963), 149.
- 9) R. Kubo, M. Yokota and S. Nakajima, J. Phys. Soc. Japan 12(1957), 1203.
- 10) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33(1965), 423.
- 11) J. M. Luttinger, Phys. Rev. 135(1964) A1505.
- 12) N. Hashitsume, 物性研究 6(1966), 29.
- 13) K. Tami, 発表予定.