

Piezo-electric-polaron with screening of conduction electron

東大教養・基礎科学科 岡本 謙一

(3月1日受理)

§ 1 序

圧電性結晶中の伝導電子は格子振動により生ずるピエゾエレクトリックな電場の影響を受け、音響型フォノン系と比較的強く相互作用をする。我々は有極性結晶中の伝導電子と光学的フォノンとの相互作用との類似性より、圧電性結晶中の音響型フォノンの雲を伴った伝導電子のことをピエゾポーラロンと呼ぶ。我々はピエゾポーラロン問題に於いて、伝導電子の遮蔽の効果を考慮した。我々が遮蔽の効果を考えた理由は次のとおりである。

第1に遮蔽は今までの電子格子相互作用を因子 $q^2 / (q^2 + q_T^2)$ だけ修正するであろう。 q_T は絶対零度の時はトーマスフェルミの遮蔽定数である。また有限温度の時にはデバイーヒュッケルの遮蔽定数である。適当に与えられた伝導電子の密度 n により決定される $q_T = \left(\frac{6\pi n e^2}{E_F \epsilon} \right)^{1/2}$ は、 $k_s = \frac{m v_s}{\hbar}$ に比べて十分大きい。例えば $n \simeq 10^{13}$ の時 $\left(\frac{k_s}{q_T} \right)^2 \simeq 3 \times 10^{-3}$ である。電子格子相互作用は $q \simeq k_s$ に於いて $\left(\frac{k_s}{q_T} \right)^2$ ぐらい修正されるゆえ、 $q < k_s$ に対しては非常に小さくなる。従って遮蔽は無視できず、正確に取り入れねばならないことがわかる。エネルギー保存則よりわかるようにフォノンの波数と同じ程度の大きさの波数を持つ電子が強く相互作用するゆえ、 $P < \hbar k_s$ の運動量を持つ電子については遮蔽の効果が非常に効くことが期待される。従って $P < \hbar k_s$ の領域については、いくつかの物理量が今までの遮蔽を考慮していない理論から得られる値に比べて相当大きく修正されることが期待される。我々は実際に $P \ll \hbar k_s$ のバンドの底の方の自己エネルギーのシフトとポーラロン質量 m^* を2次摂動で計算することにより、期待したとおり遮蔽が相当効くことがわかった。

第2に図1からわかるように遮蔽を取り入れた結果 $q \rightarrow 0$ で相互作用ポテンシャルは0になる。その結果、今まで赤外発散していた物理量が発散しないで求められることになる。そのような量としては、絶対零度の場合には、伝導電子のまわりの virtual-phonon 数がある。また有限温度の時には、ポーラロンの寿命がある。

第3に通常ポーラロンの問題は、1個の電子とフォノン系との相互作用を問題にするが、実際の圧電性の半導体に於いては、電子も多体系であるゆえ、その効果を遮蔽といった形で取り入れることが、物理的に正しいと思われるからである。我々は遮蔽を通常のデ바이ーヒュッケルに従って取り入れた。また簡単のため2次摂動で計算してみた。2次摂動の結果は、無摂動系に縮退があるゆえ、ポーラロンの運動量 P

が $\hbar k_s$ を単位として1より小さい領域に於いてのみ意味がある。また coupling constant α が小さい場合のみ有効である。§2で絶対零度及び有限温度の場合の結果を述べる。表1, 2は遮蔽を取り入れた時と、取り入れない時を比較したものである。図1は通常の coupling と遮蔽を取り入れた時の coupling のちがいを定性的に示している。

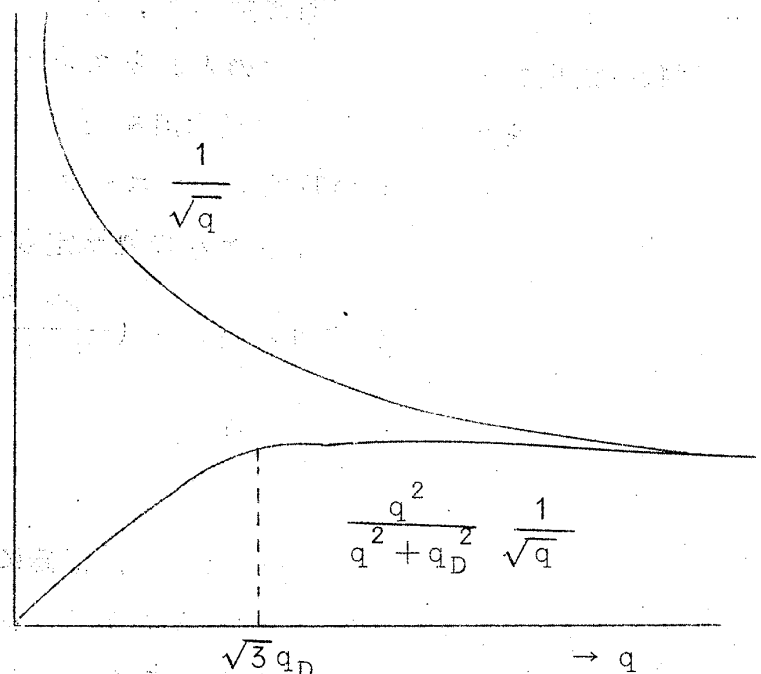


図 1

§2 2次摂動によるいくつかの量の計算

我々は長さの単位として $k_s^{-1} = \left(\frac{m v_s}{\hbar} \right)^{-1}$, エネルギーの単位として $m v_s^2$ を用いる。CdS の場合 v_s は shear mode の音速で $1.8 \times 10^5 \text{ cm/sec}$ また m はバンド質量で $0.2 \times m_{el}$ である。その結果、無次元化したハミ

ルトニアン

$$H = \frac{P^2}{2} + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{q}} \frac{q^2}{q^2 + q_D^2} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (1)$$

が得られる。ここに q_D は遮蔽定数で

$$\begin{aligned} q_D^2 &= \frac{4\pi n e^2}{K_B T \epsilon} \times \frac{1}{k_s^2} \quad \dots\dots\dots \text{有限温度の時} \\ &= \frac{6\pi n e^2}{E_F \epsilon} \times \frac{1}{k_s^2} \quad \dots\dots\dots \text{絶対零度の時} \end{aligned} \quad (2)$$

で与えられる。 ϵ は静電誘電率である。最初に絶対零度の場合を考える。ポーラロンのエネルギーは、2次摂動により

$$\begin{aligned} E(P) &= \frac{P^2}{2} + \frac{\alpha}{\pi P} \int_0^{q_m} dq \frac{q^4}{(q^2 + q_T^2)^2} \ln \left| \frac{q+2-2P}{q+2+2P} \right| \quad (3) \\ &\simeq E(0) + \frac{P^2}{2m^*} \quad \text{for } P \ll 1 \end{aligned}$$

で与えられる。 q_m は我々の単位に於けるデバイカットの値であるが、 $q_m \rightarrow \infty$ によって物理量が発散しない時は、 $q_m \rightarrow \infty$ とした。 m^* はポーロン質量である。

$$\begin{aligned} E(0) &= -\frac{4\alpha}{\pi} \int_0^{q_m} dq \frac{q^4}{(q^2 + q_T^2)^2} \frac{1}{(q+2)} \\ &= -\frac{4\alpha}{\pi} \left[\frac{16}{(q_T^2 + 4)^2} \ln \left| \frac{q_m + 2}{2} \right| \right. \\ &\quad + \frac{q_T^2 (q_T^2 + 8)}{2 (q_T^2 + 4)^2} \left\{ \ln \left| \frac{q_m^2 + q_T^2}{q_T^2} \right| - \frac{4}{q_T} \operatorname{arctg} \left(\frac{q_m}{q_T} \right) \right\} \\ &\quad \left. - \frac{q_T^2}{2 (q_T^2 + 4)} \left\{ \frac{q_m (q_m - 2)}{q_m^2 + q_T^2} - \frac{2}{q_T} \operatorname{arctg} \left(\frac{q_m}{q_T} \right) \right\} \right] \quad (4) \end{aligned}$$

岡本謙一

$q_T \rightarrow 0$, $E(0) = -\frac{4\alpha}{\pi} \ln \left| \frac{q_m+2}{2} \right|$ となり Whitfield et al⁽³⁾ と一致する。

$$\begin{aligned}
 \frac{m}{m^*} &= 1 - \frac{32\alpha}{3\pi} \int_0^{q_m} dq \frac{q^4}{(q^2+q_T^2)^2} \frac{1}{(q+2)^3} \\
 &= 1 - \frac{32\alpha}{3\pi} \left[\frac{1}{8} - \frac{q_m^3 + 2q_m^2 + 2q_T^2}{2(q_m^2+q_T^2)(q_m+2)^3} \right. \\
 &\quad - 12 \frac{q_T^2(q_T^2-4)}{(q_T^2+4)^4} \ln \left| \frac{4\{(q_m+2)^2 - 4(q_m+1) + q_T^2\}}{q_T^2(q_m+2)^2} \right| \\
 &\quad - \frac{q_T^2 q_m}{8(q_T^2+4)^3(q_m+2)^3} \{q_T^4(q_m^2+6q_m+12) \\
 &\quad \quad + 8q_T^2(q_m+3)(q_m+6) + (208q_m^2+960q_m+1172)\} \\
 &\quad \left. + \frac{3q_T(q_T^4-24q_T^2+16)}{(q_T^2+4)^4} \left\{ \arctg \left(\frac{q_T^2-2q_m}{q_T(q_m+2)} \right) - \arctg \left(\frac{q_T}{2} \right) \right\} \right] \quad (5)
 \end{aligned}$$

$q_T \rightarrow 0$ で $\frac{m}{m^*} \rightarrow 1 - \frac{4\alpha}{3\pi} \left[1 - \left(\frac{2}{q_m+2} \right)^2 \right]$ となり Whitfield et al と一致する。

$q_m \rightarrow \infty$ の時

$$\begin{aligned}
 \frac{m}{m^*} &= 1 - \frac{32\alpha}{3\pi} \left[\frac{1}{8} - \frac{q_T^2}{8(q_T^2+4)^3} \{(q_T^2+4)^2+192\} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{24q_T^2(q_T^2-4)}{(q_T^2+4)^4} \ln \left| \frac{2}{q_T} \right| - \frac{3\pi}{2} q_T \frac{(q_T^4-24q_T^2+16)}{(q_T^2+4)^4} \right] \quad (6)
 \end{aligned}$$

次に寿命は

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \sum_f |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (7)$$

で定義される。ピエゾポーラロンの時は

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\alpha}{P} \int_0^{q_m} dq \frac{q^4}{(q^2 + q_T^2)^2} \int_{-1}^1 dt \delta\left(t - \frac{1 + \frac{q}{2}}{P}\right) \quad (8.a)$$

で与えられる。

(i) $P < 1$ の時は

$$\frac{1}{\tau} = 0 \quad (8.b)$$

(ii) $P > 1$ の時には

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\alpha}{P} \left[2(P-1) + \frac{q_T^2(P-1)}{4(P-1)^2 + q_T^2} - \frac{3}{2} q_T \operatorname{arctg}\left(\frac{2(P-1)}{q_T}\right) \right] \quad (8.c)$$

となり $q_T \rightarrow 0$ で $\frac{1}{\tau} = \frac{2\alpha}{P} 2(P-1)$ となり Whitfield et al と一致する。

次に電子のまわりの Virtual フォノン数 N である。

$$N = \frac{\langle \psi | \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (9)$$

ここで ψ は波動関数で 1 次摂動の範囲で

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} (e^{i\mathbf{P}\mathbf{r}} |0\rangle + \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\sqrt{q}} \frac{q^2}{q^2 + q_T^2} \frac{e^{i(\mathbf{P}-\mathbf{q})\mathbf{r}}}{\left(\frac{P^2}{2} - \frac{1}{2}(\mathbf{P}-\mathbf{q})^2 - q\right)} b_{\mathbf{q}}^+ |0\rangle)$$

で与えられる。

結局

$$N(P) = \frac{\frac{4\pi\alpha}{V} \sum_q \frac{1}{q} \left(\frac{q^2}{q^2 + q_T^2} \right)^2 \frac{1}{(pq - q^2/2 - q)^2}}{1 + \frac{4\pi\alpha}{V} \sum_q \frac{1}{q} \left(\frac{q^2}{q^2 + q_T^2} \right)^2 \frac{1}{(pq - q^2/2 - q)^2}}$$

となり $P < 1$ について積分が実行され α の 1 次のオーダーまででは

$$\begin{aligned} N(P) &= -\frac{2\alpha}{\pi P} \int_0^\infty dq \frac{q^3}{(q^2 + q_T^2)^2} \left[\frac{1}{q+2+2p} - \frac{1}{q+2-2P} \right] \\ &= -\frac{2\alpha}{\pi P} \left[\frac{(2P+2)^3}{\{q_T^2 + (2P+2)^2\}^2} \ell n \left(\frac{2P+2}{q_T} \right) + \frac{\pi q_T \{q_T^2 + 3(2P+2)^2\}}{4 \{q_T^2 + (2P+2)^2\}^2} \right. \\ &\quad - \frac{P+1}{q_T^2 + (2P+2)^2} - \frac{(2-2P)^3}{\{q_T^2 + (2-2P)^2\}^2} \ell n \left(\frac{2-2P}{q_T} \right) \\ &\quad \left. - \frac{\pi q_T \{q_T^2 + 3(2-2P)^2\}}{4 \{q_T^2 + (2-2P)^2\}^2} + \frac{1-P}{q_T^2 + (2-2P)^2} \right] \quad (12) \end{aligned}$$

特に $P \ll 1$ の時には

$$N = \frac{8\alpha}{\pi} I_1 + \frac{32\alpha}{\pi} I_2 P^2 + O(\alpha^2) \quad (13.a)$$

$$I_1 = \left[\frac{q_T^2 - 12}{2(q_T^2 + 4)^2} + \frac{4(3q_T^2 - 4)}{(q_T^2 + 4)^3} \ell n \left(\frac{q_T}{2} \right) - \frac{q_T(q_T^2 - 12)}{(q_T^2 + 4)^3} \pi \right] \quad (13.b)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \left[2\pi q_T \frac{(3q_T^2 - 4)(q_T^2 - 12)}{(q_T^2 + 4)^5} + \frac{(q_T^2 - 4)(q_T^4 - 56q_T^2 + 16)}{(q_T^2 + 4)^5} \ell n \left(\frac{q_T}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3} \frac{1}{(q_T^2 + 4)^4} (7q_T^4 - 136q_T^2 + 112) \right] \quad (13.c) \end{aligned}$$

$q_T \rightarrow 0$ で $\log$ 発散する。適当な伝導電子の密度に対して m^*/m と N の値を表 2 に示す。

次に有限温度の時エネルギーは

$$E(P) = \frac{P^2}{2} + \sum_q \frac{4\pi\alpha}{V} \frac{1}{q} \left(\frac{q^2}{q^2 + q_D^2} \right)^2 \times \left\{ \frac{N_q}{\frac{P^2}{2} - \frac{1}{2}(P+q)^2 + q} + \frac{N_q + 1}{\frac{P^2}{2} - \frac{1}{2}(P-q)^2 - q} \right\} \quad (14)$$

で与えられる。ここで Mahan-Hopfield⁽¹⁾ 同様フォノンのプランク分布を高温近似する。つまり $N_q \simeq \frac{r}{q}$ $r = \frac{K_B T}{m v_s^2}$ である。

$$E(P) = \frac{P^2}{2} + \oint \frac{\alpha r}{\pi P} \int_0^{q_m} dq \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} \left\{ \ln \left| \frac{q+2-2P}{q+2+2P} \right| - \ln \left| \frac{q-2+2P}{q-2-2P} \right| \right\} \quad (15)$$

が得られる。ここに $\oint$ は主値積分の意味である。 $q_D \rightarrow 0$ ならば $E(P) = \frac{P^2}{2}$ for $P < 1$, $E(P) = \frac{P^2}{2} - \frac{\alpha r}{P}$ for $P > 1$ となり Mahan-Hopfield と一致する。自己エネルギー $E(0)$ は $q_m \rightarrow \infty$ として

$$E(0) = -\frac{4\alpha r}{\pi} \int_0^\infty dq \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} \left\{ \frac{1}{q-2} + \frac{1}{q+2} \right\} \\ = -2\alpha r \frac{q_D(q_D^2 + 12)}{(q_D^2 + 4)^2} \quad (16)$$

次に寿命 $1/\tau$ は

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi \sum_q \frac{4\pi\alpha}{V} \frac{1}{q} \left(\frac{q^2}{q^2 + q_D^2} \right)^2 \left\{ N_q \delta \left(\frac{1}{2}(P+q)^2 - \frac{P^2}{2} - q \right) \right. \\ \left. + (N_q + 1) \delta \left(\frac{1}{2}(P-q)^2 + q - \frac{P^2}{2} \right) \right\} \quad (17)$$

で与えられる。高温近似を用いて

表 1

		Screeningのない時	Screeningのある時
$T = 0^\circ\text{K}$	Self energy $E(0)$	$-\frac{4\alpha}{\pi} \ln \left \frac{q_m+2}{2} \right $	(4)
	Polaron mass m^*/m	$\frac{1}{1 - \frac{4\alpha}{3\pi}}$	(6)
	life time	$P < 1 \quad 0$	0
	$1/\tau$	$P > 1 \quad \frac{2\alpha}{P} 2(P-1)$	(8.c)
	Virtual phonon 数 N	$N(0) \quad \infty$ $N(P) \quad \infty$	$N(0) \quad (13.a, b)$ $P \ll 1 \quad (13.a, c)$ $P < 1 \quad (12)$
$T = \text{finite}$	Self energy $E(0)$	0	$-2\alpha r \frac{q_D(q_D^2+12)}{(q_D^2+4)^2}$
	life time $1/\tau$	$P < 1 \quad \frac{2\alpha r}{P} \ln \left \frac{1+P}{1-P} \right $ $P > 1 \quad \infty$	(18.b) (18.c)

() 内の番号は式の番号

表 2 ($T = 0^\circ\text{K}$)

	Screening のない時	Screening のある時		
		$n = 10^{11}$	10^{13}	10^{15}
		$q_T/k_s = 8.77$	1.89×10	4.07×10
m^*/m	$\frac{1}{1-0.4244\alpha}$	$\frac{1}{1-0.0115\alpha}$	$\frac{1}{1-0.0033\alpha}$	$\frac{1}{1-0.00085\alpha}$
N	∞	0.0105α + $0.000438\alpha P^2$	0.00278α + $0.0000454\alpha P^2$	0.000676α + $0.00000387\alpha P^2$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\alpha r}{P} \int_0^\infty dq \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} \int_{-1}^1 dt \left\{ \delta\left(t + \frac{q}{2P} - \frac{1}{P}\right) + \delta\left(t - \frac{q}{2P} - \frac{1}{P}\right) \right\} \quad (18.a)$$

となる。

(i) $P < 1$ の時

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\alpha r}{P} \left[\frac{q_D^2}{q_D^2 + 4(1+P)^2} - \frac{q_D^2}{q_D^2 + 4(1-P)^2} + \ell n \left| \frac{4(1+P)^2 + q_D^2}{4(1-P)^2 + q_D^2} \right| \right] \quad (18.b)$$

$q_D \rightarrow 0$ で $1/\tau \rightarrow \frac{2\alpha r}{P} \ell n \left| \frac{1+P}{1-P} \right|$ となる。

(ii) $P > 1$ の時

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} = \frac{\alpha r}{P} & \left[\frac{-4(P+1)^2}{4(P+1)^2 + q_D^2} - \frac{4(P-1)^2}{4(P-1)^2 + q_D^2} + \ell n \left| \frac{4(P+1)^2 + q_D^2}{q_D^2} \right| \right. \\ & \left. + \ell n \left| \frac{4(P-1)^2 + q_D^2}{q_D^2} \right| \right] \quad (18.c) \end{aligned}$$

となる。 $q_D \rightarrow 0$ $\frac{1}{\tau} \rightarrow \infty$ と $\log$ 発散する。

§ 3 Discussion

我々は、ピエゾポーロン問題に於いて、伝導電子系の遮蔽を考慮し、特に運動量 P が $\hbar k_s$ より小さい領域に対して議論した。その結果 $P < \hbar k_s$ に於いては、適当な伝導電子の密度に対して遮蔽は、いくつかの物理量にかなり影響を与えることがわかった。 $\hbar k_s < P < \hbar q_D$ に於いても、例えば $n \simeq 10^{15}$ の時 $P \sim 5 \hbar k_s$ では、相互作用は $1/20$ 位に減少するゆえ、やはり遮蔽の効果は、考慮する必要があると思う。 $P > \hbar q_D$ については遮蔽は余り影響を与えないだろう。ピエゾポーロンの場合には音響型フォノンを考えるゆえ、いくらでも小さい励起が、可能となりタムーダンコフの意味で many phonon state を考える必要があると考えられる。我々の結果は遮蔽が非常に効くため、一見これと矛盾する小さな virtual フォノン数 N を与えた。しかしタムーダン

岡本謙一

コフの意味でのフォノン state はフォノン数の分布を考えて始めて結論されるべきことと思われる。

遮蔽を取り入れることにより発散の困難は防げるが、これはピエゾポーロン問題本来の発散の解決にはなっていない。Q.E.D.の方法を使って赤外発散の問題は議論しなければならないだろう。

ここで我々は、遮蔽を考えない Whitfield et al の用いた L-L-P-G の近似について少し考える。L-L-P-G の方法はフォノン間相関を無視した many phonon state を考えた近似である。理論の正確さは、変分パラメータ f_q に依存している。 f_q は

$$f_q = \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{v}} \frac{1}{\sqrt{q}} \frac{1}{q + \frac{q^2}{2} - (1-\eta)P \cdot q} \quad (19)$$

で与えられる。 $(1-\eta)P$ はポーロンの速度という物理的意味を持つ。L-L-P-G の近似は、 v を速さとして、 $v < 1$ の範囲で正しいと考えられる。実際 $v \rightarrow 1$ で $P \rightarrow \infty$ となり、ポーロンの運動量が十分大きい時にも、定性的議論から期待される直線的な分散関係を持つ。直線的な分散関係の意味は、ポーロン + 大きい運動量の many フォノンと考えられる。我々はここで L-L-P-G に従って virtual phonon 数 N を計算しよう。光学的ポーロンの時は L-L-P-G では $N \sim \frac{\alpha}{2}$ である。ピエゾポーロンの時には、

$$N = \sum_q f_q^2 = \sum_q \frac{1}{q} \frac{4\pi\alpha}{v} \frac{1}{(q + \frac{q^2}{2} - v \cdot q)^2} \quad (20.a)$$

で与えられる。 $v < 1$ の範囲で $v \neq 0$ の時 N は

$$N = -\frac{2\alpha}{\pi v} \int_0^{q_m} \frac{dq}{q} \left[\frac{1}{q + 2 + 2v} - \frac{1}{q + 2 - 2v} \right] \quad (20.b)$$

で与えられ、これは発散する。また $v \rightarrow 0$ の時、 $v = P / \left[1 + \frac{4\alpha}{3\pi} \left\{ 1 - \left(\frac{2}{q_m + 2} \right)^2 \right\} \right]$

の関係があるゆえ $P = 0$ の時の virtual-phonon 数 $N(0)$ と考えられ

$$N(0) = \frac{4\pi\alpha}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{q} \frac{1}{q^2 \left(1 + \frac{q}{2}\right)^2} = \frac{8\alpha}{\pi} \int_0^{q_m} \frac{dq}{q} \frac{1}{(q+2)^2} \quad (20.c)$$

で与えられ、これも発散する。もし遮蔽を考慮すると L-L-P-G の $N(0)$ は 2 次摂動の $N(0)$ と一致する。

最後に原稿を批判的に読んで下さり、いくつかの有益な指摘をして下さった 斎藤基彦氏および阿部龍蔵先生に感謝します。また阿部研究室の皆さんに感謝します。

references

- 1) Mahan-Hopfield Phys. Rev. Letters. 9 241 (1964)
- 2) Y.Osaka J.F.S.J 19 2347 (1964)
- 3) G.Whitfield, J.Gerstner, K.Tharmalingam Phys. Rev. 165 993 (1968)
- 4) M.Porsch Phys. Letters 30A 416 (1969)