

1. 時間に依存するアンダーソンモデル

金属表面上の吸着子の電子状態に関連した現象を理解しようとする時、広く用いられるモデルとしてアンダーソンモデルがある。

$$H_A(z) = \sum_{\sigma} \varepsilon_Q(z) n_{a\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} (V_k(z) c_{a\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + h.c.) + U(z) n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} \quad (1)$$

ここで、吸着子のイオン化レベル ε_a 、吸着子の軌道と金属中の状態との間の移動積分 V_k および原子内クーロン相互作用 U は、表面からの距離の関数になっている。

今、金属表面による原子或いはイオン（以下では単にイオンと書くことにする。）の散乱過程を考える。イオンの運動の時間の尺度（例えば、金属の格子間距離を進むに要する時間）が、金属のプラズマ振動の時間の尺度 ω_p^{-1} より十分大きく、プラズマ振動はイオンの運動に断熱的について行けるとすると、全系のハミルトニアンは、イオンの質量を M 、運動量を P 、イオンの感じる断熱ポテンシャルを $W(z)$ として、

$$H_{tot} = \frac{P^2}{2M} + W(z) + H_A(z) \quad (2)$$

と書けるであろう。しかし、(2) のハミルトニアンを量子論的に解くことは非常に難しく、"Trajectory" 近似がとられることが多い。表面の近傍でイオンが比較的速く運動し、表面との相互作用が顕著になる領域で、もっている運動エネルギーに比べて、その間に失う（或いは得る）エネルギーが十分小さければ、その運動は、古典的なある与えられた軌道をとると考えても良からう。この "trajectory" 近似を採用すると、イオンの位置 z 、従って電子系のハミルトニアンは時間 t に露わに依存することになる²⁾。

$$H(t) = \sum_{\sigma} \varepsilon_a(t) n_{a\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} (V_k(t) c_{a\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + h.c.) + U(t) n_{a\uparrow} n_{a\downarrow} \quad (3)$$

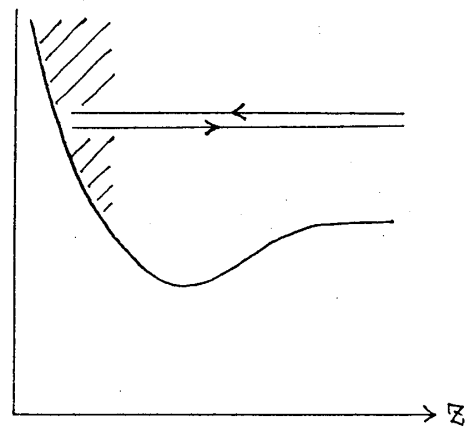


図1

このハミルトニアンが出発点であるが、ここで問題にしたい量は、イオンが去った後で電子系のエネルギーが初期の値 E_0 から E だけ励起された状態にある確率³⁾

$$P(E) = \langle \infty | \delta(E_0 + E - H(\infty)) | \infty \rangle \quad (4)$$

或いは、そのフーリエ変換

$$\Pi(\tau) = \langle \infty | e^{-i[H(\infty) - E_0]\tau} | \infty \rangle \quad (5)$$

である。 $P(\varepsilon)$ は、イオンの運動から金属の電子-正孔励起にわたされたエネルギー分布を与えることになる。従って、エネルギーを失う(或いは得る)ことにより、イオンの軌道自体変化するはずであるから、自己無撞着にはなっていない。

一般にハミルトニアンが時間に依存する場合、断熱定理は成り立たず、基本的に非平衡状態を扱わねばならないが、その様な取扱いを可能にする方法として、Keldyshのグリーン関数法⁴⁾があるが、そのままでは(5)式の計算には役立たないので、拡張する必要がある。

2. Keldyshグリーン関数の拡張と $\Pi(\tau)$ ⁵⁾

話を簡単にするため、一体のハミルトニアンについて考察する。電子間相互作用があっても厳密な関係式に変更はない。

一体の時間に依存するハミルトニアンならば一般的に次の様に書ける。

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (6)$$

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k C_k^+ C_k \quad (7)$$

$$H'(t) = \lambda \sum_{k,k'} V_{kk'}(t) C_k^+ C_{k'} \quad (8)$$

ここで、状態 $|k\rangle$ は適当な量子数 k で指定され、 H_0 を対角化する基底で、 $V(-\infty) = 0$ を仮定する。 λ は無次元相互作用定数で、0 と 1 の間の値をとるとする。(5)式から明らかな様に $\Pi(-\tau) = \Pi(\tau)^*$ の関係があるので、 $\tau \geq 0$ の場合のみ考える。さらに先ず有限の時間間隔 $[t_-, t_+]$ で考え、後で $t_{\pm} \rightarrow \pm\infty$ の極限をとることにする。

時間発展の演算子 $\hat{U}(t, t')$ を導入すると、 $(\hat{U}(t, t')|t\rangle = |t\rangle)$ $\Pi(\tau)$ は

$$\Pi(\tau) = \langle t_- | \hat{U}(t_-, t_+) e^{-iH(t_+)\tau} \hat{U}(t_+, t_-) e^{iH_0\tau} | t_- \rangle \quad (9)$$

と書ける。ここで $|t_-\rangle$ は H_0 の 1 つの固有関数であるとした。 $(H_0|t_-\rangle = E_0|t_-\rangle)$

$\hat{U}(t, t')$ は

$$\hat{U}(t, t') = \begin{cases} T_+ \exp\left[-i \int_{t'}^t H(t_1) dt_1\right] & (t > t') \\ T_- \exp\left[i \int_t^{t'} H(t_1) dt_1\right] & (t < t') \end{cases} \quad (10)$$

で与えられる。ここで T_+ は従来通り左から時刻の大きい順に並べる演算子、 T_- は逆の順に並べる演算子であるが、これらは異なる時刻のハミルトニアンが互いに交換しない為に必要で、その時場の演算子にも仮想的な時刻がついているものと解釈すべきである。

ここで $e^{-iH(t_+)\tau}$ は固定されたハミルトニアン $H(t_+)$ で時刻を τ だけずらす演算子であるから

$$\Pi(\tau) = \langle t_- | \hat{U}(t_-, t_+) \hat{U}(t_+ + \tau, t_-) e^{iH_0\tau} | t_- \rangle \quad (11)$$

と書ける。ただし、 $t > t_+$ の時は

$$H(t) = H(t_+) \quad (12)$$

と約束する。

相互作用表示に移ると $\Pi(\tau)$ は

$$\Pi(\tau) = \langle t_- | U^{(-)} U^{(+)} | t_- \rangle \quad (13)$$

$$U^{(-)} = T_- \exp \left[i \int_{t_-}^{t_+} dt \mathcal{H}'_t(t) \right] \quad (14)$$

$$U^{(+)} = T_+ \exp \left[-i \int_{t_- - \tau}^{t_+} dt \mathcal{H}'_{t+\tau}(t) \right] \quad (15)$$

$$\mathcal{H}'_t(t) = \lambda \sum_{k,k'} V_{kk'}(t) C_k^+(t) C_{k'}(t) \quad (16)$$

$$C_k(t) = e^{iH_0 t} C_k e^{-iH_0 t} \quad (17)$$

となるが、(15)式で行列要素と演算子の時刻のずれは $e^{\pm iH_0 \tau}$ の項が $\tilde{U}^{(+)}$ をはさんでありすべて打消さずに、演算子の時刻のみをずらすからである。ここでも、 $t > t_+$ の時

$$V_{kk'}(t) = V_{kk'}(t_+) \quad (18)$$

ととることとする。図2に(14),(15)式で実行する積分の道筋と、その時にとるべき行列要素を示す。

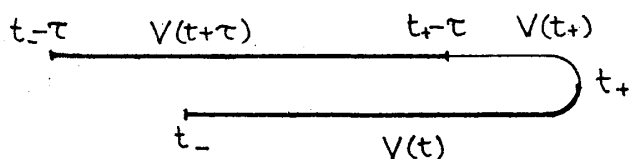


図2. 積分路と行列要素のとり時刻

ここで、(13)式の λ に対する対数微分をとると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \Pi(\tau)}{\partial \lambda} = & -i \left[\int_{t_- - \tau}^{t_+} dt \sum_{k,k'} V_{kk'}(t+\tau) \langle U^{(-)} [T_+ C_k^+(t_+) C_{k'}(t) U^{(+)}] \rangle \right. \\ & \left. - \int_{t_-}^{t_+} dt \sum_{k,k'} V_{kk'}(t) \langle [T_- U^{(-)} C_k^+(t) C_{k'}(t)] U^{(+)} \rangle \right] / \Pi(\tau) \end{aligned} \quad (19)$$

が得られる。ただし、 $t^\pm = t \pm i0^+$ で、同時刻の極限のとり方を示している。

Keldysh に従い、時刻 t のかわりに図2の積分路に沿って変数 s

$$s = \begin{cases} t & s < t_+ \\ t_+ - t & s > t_+ \end{cases} \quad (20)$$

と、 s の大きい順に左から並べる演算子 T_s を導入し、新しいグリーン関数を

$$G_{kk'}(s, s') = -i \langle T_s [U^{(-)} C_k(s) C_{k'}^+(s') U^{(+)}] \rangle / \Pi(\tau) \quad (21)$$

により定義する。この理由は、今考えている系では断熱定理が使えず、常に $\psi^{(-)}$ と $\psi^{(+)}$ が現われ、 $\psi^{(-)}$ から出てくる $\mathcal{H}'_t(t)$ は常に $\psi^{(+)}$ から出てくる $\mathcal{H}'_t$ より左側になければならないという事情による。

この様に定義されたグリーン関数の計算にはダイアグラムの方法が使え、自己エネルギー

ギ一部分 Σ が定義でき、Dyson 方程式を書くことができる。

$$G(\delta, \delta') = G_0(\delta, \delta') + \int d\delta_1 \int d\delta_2 G_0(\delta, \delta_1) \Sigma(\delta_1, \delta_2) G(\delta_2, \delta') \quad (22)$$

この G を δ, δ' がのっている時間の分枝 ($t_- \rightarrow t_+$ の時+, $t_+ \rightarrow 2t_+ - t_-$ の時- と示す) に従って 2 行 2 列の行列に分解し、もとの t で表わせば、

$$\underline{G}_{kk'}(t, t') = \begin{pmatrix} G_{kk'}^{++}(t, t') & G_{kk'}^{+-}(t, t') \\ G_{kk'}^{-+}(t, t') & G_{kk'}^{--}(t, t') \end{pmatrix} \quad (23)$$

Dyson 方程式は、

$$\underline{G}(t, t') = \underline{G}_0(t-t') + \int dt_1 \int dt_2 \underline{G}_0(t-t') \underline{\Sigma}(t_1, t_2) \underline{G}(t_2, t') \quad (24)$$

となり、 $\Pi(\tau)$ は、

$$\Pi(\tau) = e^{-C(\tau)} \quad (25)$$

$$C(\tau) = \int_0^1 d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dt \sum_{k, k'} (V_{kk'}(t+\tau) G_{kk'}^{++}(t, t^+) - V_{kk'}(t) G_{kk'}^{--}(t, t^-)) \quad (26)$$

となる。 $\underline{G}_0$ の具体的な形は

$$\underline{G}_{0kk'}(t-t') = -i\delta_{kk'} e^{-iE_k(t-t')} \begin{pmatrix} \theta(t-t') - \eta_k^0 & -\eta_k^0 \\ 1 - \eta_k^0 & \theta(t'-t) - \eta_k^0 \end{pmatrix} \quad (27)$$

で、 η_k^0 は初期状態で $|k\rangle$ の占有数である。 $\underline{\Sigma}$ は 1 体問題の時

$$\underline{\Sigma}_{kk'}(t, t') = \lambda \delta(t-t') \begin{pmatrix} V_{kk'}(t+\tau) & 0 \\ 0 & -V_{kk'}(t) \end{pmatrix} \quad (28)$$

と簡単な形になるが、電子間相互作用がある時には、対角項のみならず、非対角項にも成分が現れ、単純な表式ではなくなる。

今までや、できたこと、及び (25), (26) 式を見てもわかり通り、ここでや、たことは、従来の温度グリーン関数法により熱力学ポテンシャルの計算を行なうのと平行した話になっている。また、時間変化が階段関数 ($V \propto \theta(t)$) になる場合には、 $\Pi(\tau)$ は

$$\Pi(\tau) = \langle 0 | e^{-iH\tau} e^{iH_0\tau} | 0 \rangle \quad (29)$$

となり、 V による散乱がない状態と、 $t=0$ から急に V の擾動がはい、た後にとる電子系の状態との重なり積分になり、ており、この理論は、Nozières + de Dominicis の理論の一般的な時間変化への拡張とみることもできる。

以上で、拡張された Keldysh のグリーン関数と $\Pi(\tau)$ の間の厳密な関係式は求まる、たことになるが、電子間相互作用も含めた取扱いは、今までやられておらず、非常に難しい問題であるので、以下では 1 体問題を取扱い、しかも、擾動の時間依存性が、バンド中の逆数の時間より遅い場合を扱う。

3. 遅い摂動に対する応用

話の内容を明確にするため、ここでは相互作用のない Wolff モデルについて考察することにする。ハミルトニアンは

$$H = H_0 + \lambda V(t) \sum_{k,k'} C_k^\dagger C_{k'} \quad (30)$$

であるが、アンダーソンモデルでも結果は変わらないと思われる。

Wolff モデルで、計算しなければならないグリーン関数は、局所的なグリーン関数:

$$\underline{G} = \sum_{k,k'} \underline{G}_{kk'} \quad (31)$$

であり、その Dyson 方程式は

$$\underline{G} = \underline{G}_0 + \underline{G}_0 \underline{\Sigma} \underline{G} \quad (32)$$

となり、 $\underline{\Sigma}$ は (29) 式で、添字の k, k' を取除いておけばよい。ここで、特別にこじわらない限り、行列の積は、量子数、時間の分枝、及び時間の積分すべてを実行することと約束する。

まず、遅い摂動とは何かを明確にする為に、 $\underline{G}_0$ の性質を考える。今、初期状態は $T=0$ 、即ち、基底状態 ($E_F=0$ とする) とすると $\underline{G}_0$ は次の様に書ける。

$$\underline{G}_0 = \begin{pmatrix} G_0^r + F & F \\ G_0^r - G_0^a + F & -G_0^a + F \end{pmatrix} \quad (33)$$

$$G_0^r(t-t') = -i\theta(t-t') \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')} \quad (34)$$

$$G_0^a(t-t') = G_0^r(t'-t)^* \quad (35)$$

$$F(t-t') = i \int_{-\infty}^0 d\varepsilon \rho(\varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')} \quad (36)$$

ここで、 $\rho(\varepsilon)$ は非摂動系の 1 電子状態密度で、 G_0^r (G_0^a) は遅延 (先進) グリーン関数である。(34)~(36) 式から明らかな様に、 G_0^r と G_0^a は、バンド巾を D とした時、 $|t-t'|$ が $1/D$ より小さい場合のみ大きな値をもち、従ってその意味で短い時間内に減衰する。一方、 F は金属のフェルミ面の存在を反映し、長時間では $(t-t')^{-1}$ に従って減衰する。ここでの遅い摂動とは、時間 D^{-1} に比べて遅いという意味である。

上述の 2 種類の時間変化に従って $\underline{G}_0$ と $\underline{G}$ を 2 つの部分に分ける:

$$\underline{G}_0 = \underline{G}_{0S} + \underline{G}_{0L} \quad (37)$$

$$\underline{G} = \underline{G}_S + \underline{G}_L \quad (38)$$

$$\underline{G}_{0S} = \begin{pmatrix} G_0^r & 0 \\ G_0^r - G_0^a & -G_0^a \end{pmatrix} \quad (39)$$

$$\underline{G}_{0L} = \begin{pmatrix} F & F \\ F & F \end{pmatrix} \quad (40)$$

$\underline{G}_S$ の Dyson 方程式

$$\underline{G}_S = \underline{G}_{0S} + \underline{G}_{0S} \underline{\Sigma} \underline{G}_S \quad (41)$$

に従うとすると、 $\underline{G}_L$ の従う方程式は、

$$\underline{G}_L = (1 + \underline{G}_S \underline{\Sigma}) \underline{G}_{0L} (1 + \underline{\Sigma} \underline{G}_S) + (1 + \underline{G}_S \underline{\Sigma}) \underline{G}_{0L} \underline{\Sigma} \underline{G}_L \quad (42)$$

となる。

先ず $\underline{G}_S$ について考察する。 G_S^{++} と G_S^{--} の満たすべき方程式は

$$G_S^{++} = G_0^r + G_0^r \lambda V_+ G_S^{++} \quad (43)$$

$$G_S^{--} = -G_0^a + G_0^a \lambda V_- G_S^{--} \quad (44)$$

である。ここで、 V_+ は、ポテンシャル中の時刻を常に t だけシフトすることを表わし、(45) 式参照)、 V_- はその必要はないが、区別の為添字 $-$ を付けておいた。(43), (44) 式から、 G_S^{++} と G_S^{--} は、 G_0^r と G_0^a の性質を保ち、 G_S^{++} は $\delta(t-t')$ に、 G_S^{--} は $\delta(t'-t)$ に比例していることが解る。従って、 $G(t)$ には寄与しないことになるが、 $\underline{G}_L$ の方程式には必要なので、解いておく。

(43) 式を露わな積分方程式として書くと、

$$G_S^{++}(t, t') = G_0^r(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 G_0^r(t-t_1) \lambda V(t_1+t) G_S^{++}(t_1, t') \quad (45)$$

となるが、前述の通り、 $G_0^r(t-t_1)$ が短い時間内に減衰するから、 $V(t_1+t)$ を $V(t+t)$ で置きかえる。この近似のもとで、 G_S^{++} は次の様に "スペクトル表示" で書くことができる。

$$G_S^{++}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \cdot \frac{g_0^r(\varepsilon) e^{-i\varepsilon(t-t')}}{1 - \lambda V(t+t) g_0^r(\varepsilon)} \quad (46)$$

ここで、 $g_0^r(\varepsilon)$ は $G_0^r(t-t')$ のフーリエ変換で

$$g_0^r(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon - \omega + i0^+} \quad (47)$$

で与えられる。 G_S^{--} は、 $V(t+t)$ を $V(t)$ で置きかえ、 t と t' を入れかえ、その複素共役をとればよい。また、非対角項は、

$$G_S^{-+} = (1 + \lambda V G_S^{--}) (G_0^r - G_0^a) (1 + \lambda V_+ G_S^{++}) \quad (48)$$

$$G_S^{+-} = 0 \quad (49)$$

となり、上と同様な近似をすれば、やはり“スペクトル表示”で書くことができる。

次に G_L であるが、非対角項を消去すると、対角項 $G_L^{\sigma\sigma}$ ($\sigma=\pm$) に対する方程式

$$G_L^{\sigma\sigma} = S^{\sigma} + K^{\sigma} G_L^{\sigma\sigma} \quad (50)$$

が得られるが、ここでは $\sigma=+$ に対してのみ考察し、 $\sigma=-$ に対しては結果のみ示す。
 S^+ , K^+ の“スペクトル表示”は、次の様になる。

$$S^+(t, t') = i \int_{-\infty}^0 d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon) [1 - \lambda V(t') g_0^r(\varepsilon)] e^{-i\varepsilon(t-t')}}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(\varepsilon)] [1 - \lambda V(t') g_0^g(\varepsilon)] [1 - \lambda V(t'+\tau) g_0^r(\varepsilon)]} \quad (51)$$

$$K^+(t, t') = i \int_{-\infty}^0 d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon) \lambda [V(t+\tau) - V(t')] e^{-i\varepsilon(t-t')}}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(\varepsilon)] [1 - \lambda V(t') g_0^g(\varepsilon)]} \quad (52)$$

ここで、長時間の振舞いを調べる為に、(51), (52) 式を長時間の漸近形でおきかえる。

$$S^+(t, t') \approx - \frac{\rho(0) [1 - \lambda V(t') g_0^r(0)]}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(0)] [1 - \lambda V(t') g_0^g(0)] [1 - \lambda V(t'+\tau) g_0^r(0)] [t - t' + i\eta]} \quad (53)$$

$$K^+(t, t') \approx - \frac{\rho(0) \lambda [V(t+\tau) - V(t')]}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(0)] [1 - \lambda V(t') g_0^g(0)] (t - t' + i\eta)} \quad (54)$$

η は正の微小量である。

$$\varphi(t, t') = \frac{\lambda [V(t+\tau) - V(t')]}{1 - V(t') g_0^g(0)} G_L^{++}(t, t') \quad (55)$$

とおく。 φ に対する方程式は、

$$\varphi(t, t') = - \frac{[1 - e^{-2i\Delta_\lambda(t)}] f(t')}{2\pi i (t - t' + i\eta)} + [1 - e^{-2i\Delta_\lambda(t)}] \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt_1}{2\pi i} \frac{\varphi(t_1, t')}{t_1 - t + i\eta} \quad (56)$$

となる。ただし、 $f(t')$ は(53)式で t' のみによる項を一括しておいたものである。

また、 $\Delta_\lambda(t)$ は各瞬間における位相のずれ

$$\delta_\lambda(\varepsilon, t) = \text{Im} \ln [1 - \lambda V(t) g_0^r(\varepsilon)] \quad (57)$$

を用いて

$$\Delta_\lambda(t) = \delta_\lambda(0, t+\tau) - \delta_\lambda(0, t) \quad (58)$$

で与えられる。

(56) 式は Muskhelishvili の方法を適用できる形をしている。 $\varphi^\pm(t, t')$ を

$$\Phi^\pm(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt_1}{2\pi i} \frac{\varphi(t_1, t')}{t_1 - t \mp i\eta} \quad (59)$$

と定義すると、(56)式は

$$e^{-2i\Delta_\lambda(t)} \Phi^+ - \Phi^- = - \frac{[1 - e^{-2i\Delta_\lambda(t)}] f(t')}{2\pi i (t - t' + i\eta)} \quad (60)$$

となり、その解は

$$\Phi^\pm(t, t') = \frac{X^\pm(t)}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left(\frac{1}{X^-(t_1)} - \frac{1}{X^+(t_1)} \right) \frac{f(t')}{(t_1 - t' + i\eta)(t_1 - t \mp i0^+)} \quad (61)$$

で与えられる。ここで、 0^+ は η より小さな正の微小量と取る。 $X^\pm(t)$ は

$$\ln X^\pm(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt_1}{\pi} \frac{\Delta_\lambda(t_1)}{t_1 - t \mp i0^+} \quad (62)$$

である。

$X^\pm$ の解析性を用いると、(61)式は積分で表て G_L^{++} は

$$G_L^{++}(t, t') = \frac{P(0)}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(0)][1 - \lambda V(t+\tau) g_0^s(0)](t - t' + i\eta)} \cdot \frac{X^+(t)}{X^+(t')} \quad (63)$$

となる。 G_L^- について同様に解けば、(63)式右边で $\tau \rightarrow 0$, $X^+ \rightarrow X^-$ と変更した式が得られる。

次に同時刻の極限をとるが、先ず η^- に比例する項は、長時間の漸近形が、(63)式を与える "スペクトル表示" の同時刻極限をとると、

$$G_{RS}^{++}(t, t) = \int_{-\infty}^0 dE \frac{P(E)}{[1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(E)][1 - \lambda V(t+\tau) g_0^s(E)]} \quad (64)$$

となり、同様にして得られた $G_{RS}^{--}(t, t)$ と一緒にして $C_{RS}(\tau)$ を求めると、

$$C_{RS}(\tau) = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^0 \int_{-\infty}^{\infty} dt [\delta(E, t+\tau) - \delta(E, t)] = i\tau \Delta E \quad (65)$$

が得られる。ここで ΔE は $t = \infty$ と $t = -\infty$ におけるエネルギーの差、即ち、緩和エネルギーで、従って $C_{RS}(\tau)$ は緩和シフトの項を与える。

次に、 $V(t+\tau)$ と $X^\pm(t')$ を $t=0$ のまわりで展開し、 $\eta = 0$ とおくと、

$$G_{LD}^{++}(t, t) = - \frac{P(0)}{2 [1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(0)][1 - \lambda V(t+\tau) g_0^s(0)]} \left[\frac{d}{dt} \{ \ln X^+(t) + \ln X^-(t) \} - 2i [\delta_\lambda(0, t+\tau) + \delta_\lambda(0, t)] \right] - \frac{\lambda g_0^r(0)}{1 - \lambda V(t+\tau) g_0^r(0)} \dot{V}(t+\tau) \quad (66)$$

となり、 $G_{LD}^{--}(t, t)$ の同様な式と合わせて $C_{LD}(\tau)$ を求めると、

$$C_{ID}(\tau) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \, \omega |\delta(\omega)|^2 (1 - e^{-i\omega\tau}) \quad (67)$$

が得られる⁶⁾。ここで $\delta(\omega)$ は

$$\delta(\omega) = \int_{-\infty}^\infty dt \, e^{i\omega t} \delta(0, t) \quad (68)$$

である。

ここで、 δ の時間変化が階段関数であるとすると ($\delta(0, t) = \delta \theta(t)$)、(67) 式にバンド中 D の程度で減衰する項 $e^{-\omega D}$ をつけて積分し、

$$C_{ID}(\tau) = \frac{\delta^2}{\pi^2} \ln(1 + i\tau D) \quad (69)$$

が得られ、 $\Pi(\tau)$ は

$$\Pi(\tau) = \frac{e^{-i\tau \Delta E}}{(1 + i\tau D)^{\delta^2/\pi^2}} \quad (70)$$

となり、Nozières + de Dominicis によって得られた長時間の振舞が再現される。

ここで得られる結論は、まず、電子系による Debye-Waller 因子は

$$P_0 = e^{-w} \quad (71)$$

$$w = \frac{2}{\pi^2} \int_0^\infty d\omega \, \omega |\delta(\omega)|^2 \quad (72)$$

で与えられ、 $\delta(0, t)$ が $\delta(t/\tau)$ の形、即ち、時間のスケール τ をもつ関数形であるとすると、 w は τ に依存せず、従って、イオンが遅く運動する限り、その速さには依存しないことである。

次に、失う平均のエネルギーは

$$\bar{E} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty dt \, \dot{\delta}(t)^2 \quad (73)$$

となり、マサツ体数⁷⁾の計算から得られる結果を再現する。

最後に、電子-正孔励起によるエネルギー損失は、以上見て来た様に、フェルミ面での位相のずれにより記述でき、フリーデルの総和則と合わせて考えると、位相のずれには制限が加えられるから、あまり大きくはなり得ないと思われる。一方、格子振動へのエネルギー散逸は、その様な制限はないが、イオンと結晶の格子を作る原子の質量の比が、大切なパラメーターとしてはいるので、軽いイオンの散乱には、電子正孔励起への散逸が主になる場合もあると思われる。これは、Debye-Waller 因子の同位元素によるずれ等を詳しく調べてみればわかると思われる。

参考文献

- 1) P. W. Anderson, Phys. Rev. 124, (1961) 41 ; D. M. Newns, Phys. Rev. 178 (1969) 1123
- 2) A. Blandin, A. Nourtier and D. Hone, J. Physique 37 (1976) 369
- 3) R. Brako and D. M. Newns, J. Phys. C 14 (1981) 3065
- 4) L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20 (1965) 1018 ; 及び文献 2)
- 5) K. Makoshi, J. Phys. C 16 (1983) 3617
- 6) 文献 3) 及び K. Schönhammer and O. Gunnarsson Phys. Rev. B 22 (1980) 1629 で、この節の結果は得られている
- 7) A. Nourtier, J. Physique 38 (1977) 479 ; A. Yoshimori and J. L. Motchane, J. Phys. Soc. Japan 51 (1982) 1826