

## 励起子絶縁体の励起子とプラズモン

京大理 佐々田 友平

(5月20日受理)

### § 1 序

絶縁体における集団励起状態として励起子が存在することはよく知られている。ところが最近幾人かの人々によって、小さなエネルギーバンドギャップをもつ絶縁体は励起子形成に対して不安定となり、新しい基底状態は、励起子を仮想的に形成することによって可能となることが認識された。<sup>1)</sup>新しい系は、超電導体と類似のエネルギースペクトルを持つが、基本群（粒子空孔対）の全電荷が零であることから超電導体ではなく絶縁体で Excitonic Insulator<sup>2) 3)</sup>（励起子絶縁体）と呼ばれる。現在までこの絶縁体の輸送係数の計算、不純物効果など<sup>4)</sup>理論的研究が進められているが、未だこの型の絶縁体は実験的に発見されていない。

最近 Kohn は金属-絶縁体の遷移いわゆる Mott 遷移<sup>5)</sup>の特性を excitonic phase（励起子相）の概念を導入して議論した。彼によると絶縁体から金属への移行は、二次相転移とそれに伴う励起子相が、バンドギャップを狭くすると次々と生じるという構造をもつということである。この議論は、励起子相においても励起子（正常相におけるそれとは別種の）が存在し、そのバンドギャップが減少すると、その系は正常相-励起子相遷移と同様に励起子形成に対して不安定となるという推察に基づいているように思われる。励起子絶縁体の集団励起モードとして excitonic phonon 及びプラズモンが既に知られているが、<sup>2) 6)</sup>励起子の存在は調べられていない。従って励起子絶縁体の集団励起モードとしての励起子を研究することは興味がある。これがこの論文の目的である。

正常絶縁体における励起子不安定性の問題の主な困難さは、誘電常数はバンドギャップが減少するといかに変化するかという点にある。吾々はこの困難さを避けるためにバンドギャップの変化によって誘電常数がほとんど変化しない絶縁体を取り上げる。まず励起子絶縁体の基底状態をハートリ・フォック近似で決め、次に励起状態を調べるために励起子絶縁体のモデルハミルトニアンを

佐々田友平

RPAを使って作る。そしてそのハミルトニアンを対角化し分散関係を与える。その結果励起子絶縁体のバンドギャップの中に励起子が、高エネルギー側にプラズモンが現われることが示される。

## § 2 励起子絶縁体のモデルハミルトニアン

吾々は、立方結晶絶縁体の多電子系を考え、それは、電子間相互作用のないときには、縮退のない、同じ対称性をもつ価電子帯と伝導電子帯が直接バンドギャップによって分離された two bands から成るとする。簡単のためにスピン自由度は考えない。このとき系のハミルトニアンは次のようになる。

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^a a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^b b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \rho(\mathbf{q}) \rho(-\mathbf{q}) \quad (2.1)$$

ここで  $a_{\mathbf{k}}^+$ ,  $b_{\mathbf{k}}^+$  は夫々価電子帯 (a 帯) 波数ベクトル  $\mathbf{k}$ , 伝導電子帯 (b 帯) 波数ベクトル  $\mathbf{k}$  の電子の生成演算子で,  $\epsilon_{\mathbf{k}}^a$ ,  $\epsilon_{\mathbf{k}}^b$  は夫々 a 帯, b 帯のエネルギーである。  $\rho(\mathbf{q})$  は電子密度演算子の  $\mathbf{q}$  成分であるが, 小さな  $\mathbf{q}$  の極限に話を限るとバンド内電子密度となる (バンド間電子密度演算子は対称性から零になるから, 誘電常数はバンドギャップの変化によってほとんど変わらないことになる)。

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{k}}. \quad (2.2)$$

$$v(\mathbf{q}) = 4\pi e^2 / q^2 \quad (2.3)$$

さて正常絶縁体の基底状態が励起子形成に対して不安定になるとき, 新しい基底状態は, 通常行なわれるように正常絶縁体の基底状態  $\Psi_0$  をユニタリ変換することによって発見される。

$$\Psi = e^{i(S^*+S)} \Psi_0 \equiv U \Psi_0 \quad (2.4)$$

ここで  $S$  は変形をおこす generator である。吾々はいま電子空孔対の運動量を零に限って

$$S = i \sum_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \quad (2.5)$$

とえらぶ。 $\theta_{\mathbf{k}}$  は系のエネルギーが極小になるようにきめるべき変分パラメーターである。

このとき新しい演算子が次のように定義される。

$$\alpha_{\mathbf{k}} = U^\dagger a_{\mathbf{k}} U = a_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad (2.6)$$

$$\beta_{\mathbf{k}} = U^\dagger b_{\mathbf{k}} U = a_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} \quad (2.7)$$

新しい基底状態に関してハミルトニアン $H$ の期待値をとり、それを $\theta_{\mathbf{k}}$  で変分し、極小化すると次の結果をえる。

$$\cos \theta_{\mathbf{k}} = \left[ \frac{1}{2} (1 + (\xi_{\mathbf{k}}/E_{\mathbf{k}})) \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

ここで

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left[ (\epsilon_{\mathbf{k}}^b - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \cos^2 \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - (\epsilon_{\mathbf{k}}^a - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \sin^2 \theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \right] \quad (2.9)$$

$$E_{\mathbf{k}}^2 = \xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 \quad (2.10)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} v(\mathbf{k}-\mathbf{k}') (\Delta_{\mathbf{k}'} / 2 [\xi_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2]^{1/2}) \quad (2.11)$$

ギャップ方程式は、超電導理論のそれと同型である。電子間相互作用が長距離域のとき、この積分方程式を一般に解くことはむづかしいが、正常絶縁体のバンドギャップ $G$ が励起子結合エネルギー $E_B$ より小さければ非零の $\Delta$ が存在することがわかる（吾々の系では、位置演算子のバンド間行列要素は零であるから、 $E_B$ は $G$ の変化によって変わらない）。従って $G < E_B$ の場合、新しい相即ち励起子相が出現する。

励起子絶縁体のハミルトニアンは(2.1)を新しい生成消滅演算子で書き直すことによってえられる。

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}}^a \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}}^b \beta_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} (\epsilon_{\mathbf{k}}^b - \epsilon_{\mathbf{k}}^a) \sin 2\theta_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \beta_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \cos(\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}'}) \times \\ & \quad (\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}'} + \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}'}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq 0 \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}'}} v(\mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \cos(\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}'}) \times \\
& \quad (\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}'} + \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}'}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \rho^I(\mathbf{q}) \rho^I(-\mathbf{q}) + \\
& \quad \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \left\{ \rho^I(\mathbf{q}) \rho^{II}(-\mathbf{q}) + \rho^{II}(\mathbf{q}) \rho^I(-\mathbf{q}) \right\} \quad (2.12)
\end{aligned}$$

ここで

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha} = -E_{\mathbf{k}} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^a + \epsilon_{\mathbf{k}}^b}{2}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}}^{\beta} = E_{\mathbf{k}} + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^a + \epsilon_{\mathbf{k}}^b}{2} \quad (2.13)$$

励起子絶縁体では、バンドの歪みを起こす項 ((2.12) の第2項) を無視すれば、つまり  $\Delta_{\mathbf{k}}$  が小さな領域に限れば、上のバンド ( $\beta$ -帯) は下のバンド ( $\alpha$ -帯) から  $[G^2 + 4\Delta_0^2]^{1/2}$  のバンドギャップへだたっている。 $\rho^I(\mathbf{q})$ ,  $\rho^{II}(\mathbf{q})$  は夫々新しい絶縁体でのバンド間、バンド内粒子密度演算子の  $\mathbf{q}$  成分である。

$$\rho^I(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) (\beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} - \alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \quad (2.14)$$

$$\rho^{II}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \cos(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) (\alpha_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \beta_{\mathbf{k}}) \quad (2.15)$$

ここで励起子相の出現により、バンド間荷電密度が誘起したことを言い添えたい。

(2.12) を対角化するための準備として、いま粒子空孔対演算子を導入し、その生成演算子  $d_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{q})$  を

$$d_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{q}) = \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ \alpha_{\mathbf{k}} \quad (2.16)$$

で定義する。

吾々は RPA を採用し、対演算子をボーズ量子化する。<sup>7) 8)</sup>

$$[d_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}), d_{\mathbf{k}'}^+(\mathbf{q}')] \approx \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad (2.17)$$

$$[d_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}), d_{\mathbf{k}'}(\mathbf{q}')] = [d_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{q}), d_{\mathbf{k}'}^+(\mathbf{q}')] = 0 \quad (2.18)$$

励起子絶縁体において、 $\beta$ -帯は  $\alpha$ -帯から有限のギャップによってへだて

られているから、対励起の数は小さい。従って対演算子のボーズ量子化はよい近似である。ギャップが大きい程この近似はよりよくなることは言うまでもない。

先に進む前に (2.12) の最後の項について注意を与える。この項は、励起子絶縁体のバンド内密度とバンド間密度との相関をあらわすが、カノニカル変換によってこの項を除去すると、小さな運動量移行の極限及び RPA で、バンド内密度相関を遮蔽する項があらわれる。<sup>9) 10)</sup>

この注意を考慮に入れ、及び対演算子に対してボーズ型交換関係を採用し、(2.12) のうちで対演算子の二次形式であらわせるものを取り上げると、次の有効ハミルトニアンを得る。

$$\begin{aligned}
 H_M = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha}) d_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) d_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \tilde{v}(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cos^2(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'}) d_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) d_{\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) \\
 & + \frac{1}{2} \sum \left\{ v(\mathbf{q}) \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \sin(\theta_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}'}) \right. \\
 & \left. \times (d_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) + d_{-\mathbf{k}}(-\mathbf{q})) (d_{\mathbf{k}'}^{+}(-\mathbf{q}) + d_{-\mathbf{k}'}(\mathbf{q})) \right\} \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

ここで

$$\tilde{v}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) / \kappa_{\text{inter.}}(\mathbf{q}) \quad (2.20)$$

$\kappa_{\text{inter.}}(\mathbf{q})$  は、excitonic insulator のバンド間誘電常数で、上に述べた注意から次のように与えられる。

$$\begin{aligned}
 \kappa_{\text{inter}}(\mathbf{q}) = & 1 + \text{Real Part of } \lim_{S \rightarrow +0} \left\{ v(\mathbf{q}) \frac{1}{i} \right. \\
 & \left. \times \int_{-\infty}^0 dt \langle [\rho^I(\mathbf{q}, t), \rho^I(-\mathbf{q}, 0)] \rangle_{\text{R.P.A.}} e^{St} \right\} \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

ここで  $\langle [ , ] \rangle_{\text{R.P.A.}}$  は、commutator の基底状態における R.P.A. での期待値をあらわし、 $\rho^I(\mathbf{q}, t)$  は  $\rho^I(\mathbf{q})$  の相互作用表示である、つまり

$$\begin{aligned}
 \rho^I(\mathbf{q}, t) = & \exp \left[ i \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha}) d_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) d_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) t \right] \rho^I(\mathbf{q}) \\
 & \times \exp \left[ -i \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha}) d_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) d_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) t \right] \quad (2.22)
 \end{aligned}$$

佐々田友平

簡単な計算から

$$\kappa_{\text{inter}}(\mathbf{q}) = 1 + 2v(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \sin^2(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) / (\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha}) \quad (2.23)$$

### § 3 モデルハミルトニアンに対角化と集団励起モード

§ 2 で得られたモデルハミルトニアン (2.19) を対角化しよう。そのためにまず (2.19) の初項から 2 項まで (これを  $H_{\text{MO}}$  とおく) を対角化する表示をもとめることにする。その  $H_{\text{MO}}$  の固有モード演算子  $c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q})$  を

$$c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}}^{+}(\mathbf{q}) \quad (3.1)$$

と定義すると、この  $c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q})$  は固有値方程式

$$[H_{\text{MO}}, c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q})] = \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q}) \quad (3.2)$$

を満足する。

ここで  $\omega_{\lambda}(\mathbf{q})$  は  $H_{\text{MO}}$  の固有振動数で、 $\mathbf{q}$  は粒子空孔対の全運動量で、吾々の系では量子数となっている。 $\lambda$  は他の固有状態を示す index である。

従って展開関数  $\phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q})$  は次の方程式を満足する。

$$(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\beta} - \epsilon_{\mathbf{k}}^{\alpha} - \omega_{\lambda}(\mathbf{q})) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{v}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \phi_{\mathbf{k}'}^{\lambda}(\mathbf{q}) \quad (3.3)$$

上の方程式を導くのに、吾々は  $\mathbf{k} - \mathbf{k}' \rightarrow 0$  の極限をとって、 $\cos(\theta_{\mathbf{k}} - \theta_{\mathbf{k}'}) \rightarrow 1$  とした。これは粒子空孔間相互作用への中心場補正を無視する近似である。(3.3) は、Wannier 型励起子方程式に他ならず、粒子空孔対が交換相互作用 ((2.12) の第 4 項) によりエネルギー  $\omega_{\lambda}(\mathbf{q})$  の波束をつくることを示し、スペクトルの詳細は対バンドの構造によって決まる。

さて新しく導入された表示でモデルハミルトニアンを書きなおす。

$$H_{\text{M}} = \sum_{\lambda, \mathbf{q}} \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) c_{\lambda}^{+}(\mathbf{q}) c_{\lambda}(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v(\mathbf{q}) \rho^{\text{I}}(\mathbf{q}) \rho^{\text{I}}(-\mathbf{q}) \quad (3.4)$$

ここで

$$\rho^I(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) (C_{\lambda}^+(\mathbf{q}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda*}(\mathbf{q}) + C_{\lambda}(-\mathbf{q}) \phi_{-\mathbf{k}}^{\lambda}(-\mathbf{q})) \quad (3.6)$$

上で定義された演算子に対する運動方程式を書くと,

$$\left. \begin{aligned} [H_M, C_{\lambda}^+(\mathbf{q})] &= \omega_{\lambda}(\mathbf{q}) C_{\lambda}^+(\mathbf{q}) + v(\mathbf{q}) \rho^I(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) \\ [H_M, C_{\lambda}(-\mathbf{q})] &= -\omega_{\lambda}(\mathbf{q}) C_{\lambda}(-\mathbf{q}) - v(\mathbf{q}) \rho^I(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda*}(\mathbf{q}) \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

ここで吾々は、立方結晶のハミルトニアンが空間反転に対して不変であることから、 $\phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) = \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(-\mathbf{q})$ ,  $\omega_{\lambda}(\mathbf{q}) = \omega_{\lambda}(-\mathbf{q})$ ,  $\theta_{\mathbf{k}} = \theta_{-\mathbf{k}}$  を使った。

式(3.7)は、結合した調和振動子系の運動をあらわす。従って  $H_M$  の固有振動モード演算子  $\eta_{\omega}^+(\mathbf{q})$  は次の形をもつ。

$$\eta_{\omega}^+(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda} U_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) C_{\lambda}^+(\mathbf{q}) + V_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) C_{\lambda}(-\mathbf{q}) \quad (3.8)$$

この  $\eta_{\omega}^+(\mathbf{q})$  は固有値方程式を満足する。

$$[H_M, \eta_{\omega}^+(\mathbf{q})] = \omega \eta_{\omega}^+(\mathbf{q}) \quad (3.9)$$

ここで  $\omega$  は  $H_M$  の固有振動数である。

簡単な計算をして次の式をえる。

$$(\omega - \omega_{\lambda}(\mathbf{q})) U_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) W_{\omega}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda*}(\mathbf{q}) \quad (3.10)$$

$$(\omega + \omega_{\lambda}(\mathbf{q})) V_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) W_{\omega}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) \quad (3.11)$$

ここで

$$W_{\omega}(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) (U_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) - V_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda*}(\mathbf{q})) \quad (3.12)$$

(3.10) の  $U_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q})$ , (3.11) の  $V_{\omega}^{\lambda}(\mathbf{q})$  を (3.12) に代入すると、固有振動数  $\omega$  は次の分散関係を満足することがわかる。

$$1 - v(\mathbf{q}) \sum_{\lambda} \left| \sum_{\mathbf{k}} \sin(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \theta_{\mathbf{k}}) \phi_{\mathbf{k}}^{\lambda}(\mathbf{q}) \right|^2 \left( \frac{1}{\omega - \omega_{\lambda}(\mathbf{q})} - \frac{1}{\omega + \omega_{\lambda}(\mathbf{q})} \right) \equiv \kappa(\omega) = 0 \quad (3.13)$$

佐々田友平

吾々は、(3.13) の左辺が励起子絶縁体の縦型誘電常数に等しいことを、バンド内密度相関まで含めた RPA の範囲で簡単に示すことができる。ところで立方結晶絶縁体では、縦型誘電常数は横型誘電常数に正確に等しいから<sup>11)</sup>、(3.13) の左辺はまた横型（或いは光学的）誘電常数に等しいことになる。よく知られているように光学的誘電常数の零点は系の縦型振動モードを与え、極点は横型振動モードを与える。

励起子絶縁体の誘電常数を図式的に書く (Fig. 1)。

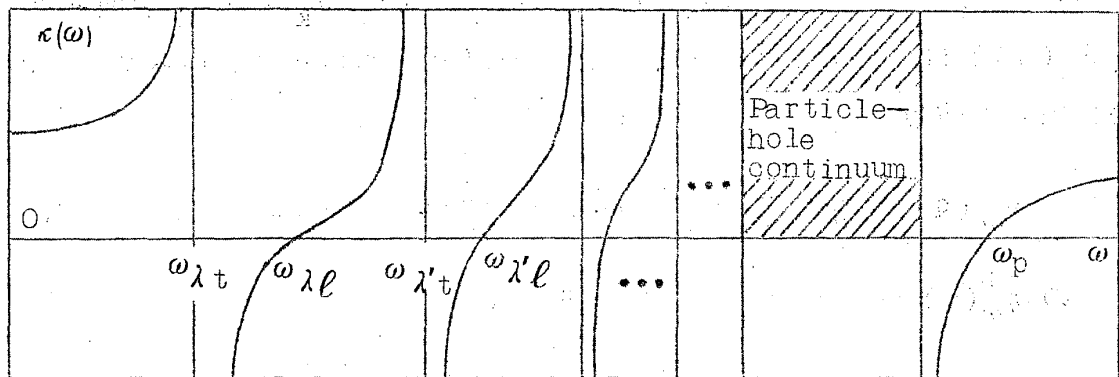


Fig. 1

従って、励起子絶縁体における集団励起モードとして、低エネルギー側に光学的励起子 ( $\omega_{\lambda t}$ ) とそれに随伴する縦型励起子 ( $\omega_{\lambda l}$ ) の列が存在し、高エネルギー側にプラズモンが存在することがわかる。励起子相に存在する励起子とプラズモンは、正常相におけるそれらとは別なものであって、夫々第二の励起子、第二のプラズモンと呼ぶべきものである（ここで扱った型の絶縁体の正常相においては、位置演算子のバンド間行列要素は対称性から零であることから、第一のプラズモンは存在しないけれども）。

#### § 4

前節で吾々は、直接ギャップをもち、対称性の同じ価電子帯と伝導帯とからなる絶縁体の励起子相において、バンドの歪みを無視し、RPAの範囲で第二の励起子（光学的励起子及び縦型励起子）及びプラズモンの存在を知った。バ

ンドの歪みを考慮しても計算は複雑になるが、事情は同じである。

間接ギャップをもつ物質の励起子相においては、一般に第二の励起子と第二のプラズモンが存在する。但し半金属の電子間相互作用が短距離域性であることから、その励起子相においては束縛された粒子空孔対は存在しないことがある。ところでバンドの極点のずれに対応する波数ベクトルの荷電密度が励起子相の基底状態に生じること（並進対称性の破れ）に伴う音響フォノン（電子的な）型モード（excitonic phonon）<sup>2) 6)</sup>の存在が知られているが、このモードは吾々の方法ではあらわれない。

直接バンドギャップをもち、対称性の異なる価電子帯と伝導帯とからなる絶縁体では、励起子相は RPA の範囲では出現しない<sup>1)</sup>。ところがこの近似は、ギャップを狭くしてゆくときどれ程の現実性をもつかはわからない。

#### References

- 1) B. I. Halperin and T. M. Rice, Solid State Physics 21 (1968) 115 ; Rev. Mod. Phys. 40 (1968) 755.
- 2) D. Jérôme, T. M. Rice and W. Kohn, Phys. Rev. 158 (1967) 462.
- 3) J. Zittartz, Phys. Rev. 165 (1968) 605.
- 4) J. Zittartz, Phys. Rev. 164 (1967) 575.
- 5) W. Kohn, Phys. Rev. Letters 19 (1967) 439, 789.
- 6) A. N. Kozlov and L. A. Maksimov, Sovtet Phys. — JETP 21 (1965) 790.
- 7) H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. 33 (1965) 380.
- 8) R. Brout and P. Carruthers, Lectures on the Many-Electron Problem, Chapter 3.
- 9) F. Englert, J. Phys. Chem. Solids 11 (1959) 78.
- 10) O. Akimoto, to be published.
- 11) V. Ambegaokar and W. Kohn, Phys. Rev. 117 (1960) 423.