

A Closed Form Solution for the Hopping Rate of Charged Particles in Metals

京大基研 山田 耕作

§1. はじめに

Andersonの直交定理¹⁾の一般化²⁾の応用の1つとして³⁾金属中の荷電粒子の運動⁴⁾を検討してきた。荷電粒子がsite間をtransferするmatrix element J が電子雲の重なり積分によって、次の J にreduceされるというのが主な結論であった。

$$\tilde{J} = J \left(\frac{\Delta_c}{D} \right)^K, \quad (1)$$

$$K = \frac{1}{8\pi^2} \text{Tr} \left[\log \hat{S}_f(0) \hat{S}_i^{-1}(0) \right]^2 \quad (2)$$

ここで D は伝導電子帯の幅, Δ_c は温度によるFermi面のボケせ, 荷電粒子があるsiteに滞在するlife timeなどによって決まるcutoff parameterである。 $\hat{S}_f(0)$ と $\hat{S}_i(0)$ は夫々, final, initial stateでのS-matrixのFermi面での値である。

もし、各siteでs対称の電子雲のみによって遮蔽されるとすると K は³⁾

$$K = 2 \left\{ \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \frac{\sqrt{1-\chi} \tan \delta}{\sqrt{1+\chi \tan^2 \delta}} \right\}^2, \quad (|\delta| \leq \pi/2) \quad (3)$$

で与えられる。ここで δ は荷電粒子を遮蔽するs対称の電子のFermi面でのPhase shiftである。 χ は $\delta^2(k_F a)$ であり、 δ_0 はspherical Bessel 関数、 a はsites間の距離である。

ここでは軟X線の吸収、放出端の異常を議論したNozières-Dominicis⁵⁾の理論を有限温度、two sitesの問題に応用し、直接荷電粒子のhopping rateを計算する。結果として K に対する(3)式を含んで、(1)の効果が入ったhopping rateを得ることを示す。

§2. hopping rate の計算

荷電粒子 (μ^+ や proton など) がその電荷を遮蔽する伝導電子雲を伴って、あるsite 1 から隣りのsite 2 へ移る確率を計算する。そのhopping rate ν は $\hbar=1$ として

$$\begin{aligned} \nu &= 2\pi \sum_f |\langle f | H_T | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \\ &= 2\tilde{J}_0^2 \text{Re} \int_0^\infty dt \langle e^{iH_i t} e^{-iH_f t} \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

によって与えられる。ここで

$$H_T = \tilde{J}_0 (a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) \quad (5)$$

であり、始状態、例えば site 1 にいた荷電粒子が $\tilde{J}_0$ という matrix element で site 2 にトンネルする項を表わす。 $a_i^\dagger$ (a_i) は i site の荷電粒子の生成 (消滅) 演算子である。さらに (4) 式の N_i , N_f は荷電粒子が site 1, 2 に trap されている時にそれぞれ対応する伝導電子の Hamiltonian である。具体的に書くと次のようになる。

$$N_i = \sum_{k,n} \epsilon_k c_{kn}^\dagger c_{kn} + \frac{V_0}{N} \sum_{k,k',n} c_{kn}^\dagger c_{k'n}, \quad (6)$$

$$N_f = N_i + N', \quad (7)$$

$$N' = V_2 - V_1 = \frac{V_0}{N} \sum_{k,k',n} \left(e^{i(k-k') \cdot \vec{R}} - 1 \right) c_{kn}^\dagger c_{k'n}, \quad (8)$$

$$V_i = \frac{V_0}{N} \sum_{k,k',n} e^{i(k-k') \cdot \vec{R}_i} c_{kn}^\dagger c_{k'n}. \quad (9)$$

ここで (8) では $\vec{R}_1 = 0$, $\vec{R}_2 = \vec{a}$ とおいた。また、簡単のために大々の site で s - d 軌道の伝導電子雲のみによって遮蔽されるとした。 ($V_0 < 0$)。 $c_{kn}^\dagger$ (c_{kn}) は波数 k , energy ϵ_k , spin n をもつ伝導電子の生成 (消滅) 演算子である。 (4) 式は $t=0$ に site 1 から site 2 に荷電粒子がトンネルし、その t 秒後の伝導電子系の状態と始状態の N_i で運動した伝導電子系の状態との重なり積分を求めたことに相当している。この間、終状態では伝導電子雲が時間と共に site 1 から 2 に移っていくことになる。最終的には始状態に直交してしまうものである。

以上の Hamiltonian は近藤⁵⁾によって議論されたものと同じである。近藤は V_0 に関する擾動として最強発散項のみを計算したが、ここでは Nozières-Dominicks の理論を拡張してやると用いた形で hopping rate が求まり、 K に関しては厳密な表式が自動的に導出されることを示す。⁷⁾ (8) 式の N' を擾動として、相互作用表示を用いると

$$\begin{aligned} N'(t) &= e^{iN_i t} N' e^{-iN_i t} \\ &= V_0 \sum_n \left\{ c_{2n}^\dagger c_{1n}(t) - c_{1n}^\dagger(t) c_{2n}(t) \right\} \end{aligned} \quad (10)$$

となる。ただし、

$$c_{1n}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik \cdot \vec{R}_1} c_{kn}^\dagger, \quad c_{2n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik \cdot \vec{R}_2} c_{kn}, \quad (11)$$

である。

準備として始状態 (unperturbed state) での伝導電子の Green 関数を

$$G_{kk'}(t-t') = i \langle T_C c_k(t) c_{k'}^\dagger(t') \rangle, \quad (12)$$

site 表示で

$$G_{ij}(t-t') = i \langle T_C c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle \quad (13)$$

と定義する。終状態での Green 関数 $G_{kk'}(t, t')$ を相互作用表示で

$$\begin{aligned} G_{kk'}(t, t') &= i \langle\langle T_C c_k(t) c_{k'}^\dagger(t') \rangle\rangle \\ &= i \langle T_C c_k(t) c_{k'}^\dagger(t') \exp(-i \int_{t_1}^t \mathcal{H}(\tau) d\tau) \rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

site 表示で

$$G_{ij}(t, t') = i \langle\langle T_C c_i(t) c_j^\dagger(t') \rangle\rangle \quad (15)$$

と表わす。式(14)の被積分関数

$$\langle e^{iN_1 t} e^{-iN_2 t'} \rangle = \langle T_C \exp[-i \int_{t_1}^t \mathcal{H}(\tau) d\tau] \rangle, \quad (16)$$

は coupling parameter g をかけて得られる次の式

$$e^{G_g(t)} \equiv \langle T_C \exp[-i \int_{t_1}^t g \mathcal{H}(\tau) d\tau] \rangle, \quad (17)$$

$$G_g(t) \Big|_{g=1} = V_0 \int_0^1 dg \int_{t_1}^t [G_{22}^g(\tau, \tau') - G_{11}^g(\tau, \tau')] d\tau \quad (18)$$

を用いて Green 関数から求めることができる。一体内問題であるから、Dyson 方程式は次のように閉じた形で与えられる。

$$\begin{aligned} \varphi_{11}(\tau, \tau') &= G_{11}(\tau - \tau') - g V_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{12}(\tau - \tau'') \varphi_{21}(\tau'', \tau') \\ &\quad + g V_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{11}(\tau - \tau'') \varphi_{11}(\tau'', \tau'), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{21}(\tau, \tau') &= G_{21}(\tau - \tau') - g V_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{22}(\tau - \tau'') \varphi_{21}(\tau'', \tau') \\ &\quad + g V_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{21}(\tau - \tau'') \varphi_{11}(\tau'', \tau'), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{12}(\tau, \tau') &= G_{12}(\tau - \tau') - gV_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{12}(\tau - \tau'') \varphi_{22}(\tau'', \tau') \\ &\quad + gV_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{11}(\tau - \tau'') \varphi_{12}(\tau'', \tau') \end{aligned} \quad (21)$$

and

$$\begin{aligned} \varphi_{22}(\tau, \tau') &= G_{22}(\tau - \tau') - gV_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{22}(\tau - \tau'') \varphi_{22}(\tau'', \tau') \\ &\quad + gV_0 \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' G_{21}(\tau - \tau'') \varphi_{12}(\tau'', \tau'). \end{aligned} \quad (22)$$

ここで通常の Dyson 方程式と異なる重要な点は、擾動の働く時間が $(-\infty, \infty)$ では守り、 (t_1, τ) の有限の間に限られている点である。

これらの連立積分方程式は有限温度における長時間で正しい漸近形⁸⁾を用いて解くことができる。例えば $G_{11}(\tau - \tau')$ の漸近形は

$$G_{11}(\tau - \tau') = \pi T \rho \cos^2 \delta \left[P \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} - \pi \tan \delta \cdot \delta \{ \sinh \pi T (\tau - \tau') \} \right], \quad (23)$$

であり、最後の項は Dirac の δ 関数を含んでいる。P は主値を表わし ρ は伝導帯の Fermi 面での状態密度であり、 $\tan \delta = -\pi \rho V_0$ である。さらに

$$G_{12}(\tau - \tau') = G_{21}(\tau - \tau') = f_0 G_{11}(\tau - \tau') \quad , \quad f_0 = f_0(k_F a) \quad (24)$$

$$G_{22}(\tau - \tau') = G_{22}^0(\tau - \tau') + f_0^2 \{ G_{11}(\tau - \tau') - G_{11}^0(\tau - \tau') \} \quad , \quad (25)$$

ただし、 $G_{22}^0(\tau - \tau') = G_{11}^0(\tau - \tau')$ は $V_0 = 0$ の free な状態での Green 関数である。 $G_{22}(\tau - \tau')$ の漸近形は

$$\begin{aligned} G_{22}(\tau - \tau') &= (1 - f_0^2 \sin^2 \delta) \pi T \rho P \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} \\ &\quad - \pi^2 T \rho f_0^2 \sin \delta \cos \delta \cdot \delta [\sinh \pi T (\tau - \tau')]. \end{aligned} \quad (26)$$

である。(23) ~ (26) を (17), (20) 式に代入すると次の連立方程式を得る。

$$\hat{C} \underline{\Psi} = \hat{A} + g \rho V_0 \pi T \int_{t_1}^{\tau} d\tau'' P \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau'')} \hat{B}_1 \underline{\Psi} \quad , \quad (27)$$

$$\underline{\Psi} = \begin{bmatrix} \varphi_{11} \\ \varphi_{21} \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$\hat{A} = \pi T \rho \left\{ \cos^2 \delta \rho \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} - \pi \sin \delta \cos \delta \cdot \delta [\sinh \pi T (\tau - \tau')] \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\rho} \end{pmatrix}, \quad (29)$$

$$\hat{B}_1 = \begin{bmatrix} \cos^2 \delta & -\frac{1}{\rho} \cos^2 \delta \\ \frac{1}{\rho} \cos^2 \delta & -1 + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \delta \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\hat{C} = \begin{bmatrix} 1 - g \sin^2 \delta & g \frac{1}{\rho} \sin^2 \delta \\ -g \frac{1}{\rho} \sin^2 \delta & 1 + g \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \delta \end{bmatrix}. \quad (31)$$

さらに $\bar{\Psi}' = \hat{C} \bar{\Psi}$ とおくと

$$\bar{\Psi}' = \hat{A} + \pi T g \rho V_0 \int_{t_1}^t d\tau' \rho \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} \hat{B} \bar{\Psi}'. \quad (32)$$

$\tau = \tau'$ の $\hat{B} = \hat{B}_1 \hat{C}^{-1}$ である。 $\hat{B}$ を対角化する Unitary 変換を用いて (32) 式は

$$\bar{\Psi}'' = \hat{U} \bar{\Psi}' = \hat{U} \hat{A} + \pi T g \rho V_0 \hat{\Lambda} \int_{t_1}^t d\tau' \rho \frac{1}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} \bar{\Psi}'' \quad (33)$$

となる。ただし、 $\hat{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix} = \hat{U} \hat{B} \hat{U}^{-1}$ とおくと、(34)

固有値 $\lambda_{\pm}$ は

$$\lambda_{\pm} = \hat{\lambda}_{\pm} / [1 + (1-g) \tan^2 \delta + g x \tan^2 \delta],$$

$$\hat{\lambda}^2 + (1-g)(1-x) \tan^2 \delta \cdot \hat{\lambda} - (1-x) [1 + \tan^2 \delta - g(1-x) \tan^2 \delta] = 0, \quad (35)$$

である。 $g=1$ で $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{1-x} / \sqrt{1+x \tan^2 \delta}$. (36)

対角化した (33) に singular integral equation の方法を用いて解を求めることができる。解は一般の g では複雑であるが、 $g=1$ として

$$\begin{aligned} \varphi_{11} = & \frac{1}{2} \rho \cos^2 \delta \left\{ \frac{\chi^+(\tau)}{\chi^+(\tau')} [1 + (1-x) \tan^2 \delta + \lambda (1 + (1+x) \tan^2 \delta)] \right. \\ & + \frac{\chi^+(\tau')}{\chi^+(\tau)} [1 + (1-x) \tan^2 \delta - \lambda (1 + (1+x) \tan^2 \delta)] \left. \right\} \rho \frac{\pi T}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} \\ & - \pi \rho x \sin \delta \cos \delta \cdot \pi T \delta [\sinh \pi T (\tau - \tau')], \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{21} = & \frac{1}{2} \rho \cos^2 \delta \left\{ \frac{\chi^+(\tau)}{\chi^+(\tau')} (1 + \lambda \tan^2 \delta) + \frac{\chi^+(\tau')}{\chi^+(\tau)} (1 - \lambda \tan^2 \delta) \right\} \rho \frac{\pi T}{\sinh \pi T (\tau - \tau')} \\ & - \frac{1}{2} \pi \rho \sin \delta \cos \delta \cdot \pi T \delta [\sinh \pi T (\tau - \tau')], \end{aligned} \quad (38)$$

とす。

$$\therefore \tau \lambda = \lambda_+, \tan \delta = \lambda \tan \delta \quad (39)$$

$$\frac{\chi^+(\tau)}{\chi^+(\tau')} = \left[\frac{\sinh \pi T(t-\tau)}{\sinh \pi T(\tau-t_1)} \cdot \frac{\sinh \pi T(\tau'-t_1)}{\sinh \pi T(t-\tau')} \right]^{\frac{\delta}{\pi}} \quad \text{である.} \quad (40)$$

同様にして φ_2, φ_2 も求め(7)の形で), (18)式を用いて(16)の重なり積分を求める.

$$\begin{aligned} C(t) &= V_0 \int_0^t dg \int_0^t d\tau \{ \varphi_{22}^g(\tau, \tau') - \varphi_{11}^g(\tau, \tau') \} \\ &= \log \left[\frac{\pi T}{iD \sinh \pi T t} \right] \int_0^t dg \left[2 \frac{d\tau_+}{dg} \frac{\tau_+}{\pi^2} + 2 \frac{d\tau_-}{dg} \frac{\tau_-}{\pi^2} \right] \\ &= \frac{2\gamma^2}{\pi^2} \log \left[\frac{\pi T}{iD \sinh \pi T t} \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

$$e^{C(t)} = \left[\frac{\pi T}{iD \sinh \pi T t} \right]^{2K} \xrightarrow{t \gg T^{-1}} \left(\frac{\pi T}{D} \right)^{2K} e^{-2\pi K t} \quad (42)$$

$$\therefore K = \frac{\gamma^2}{\pi^2} = \left[\frac{1}{\pi} \tan^{-1} \frac{\sqrt{1-x} \tan \delta}{\sqrt{1+x \tan^2 \delta}} \right]^2 \quad \text{であり,} \quad (43)$$

これは電子のスピン⁹⁾の縮退を入れて(3)式そのものになる。($K = 2\gamma^2/\pi^2$).

結局 hopping rate ν は

$$\nu = 2J_0^2 \operatorname{Re} \int_0^\infty dt \left(\frac{\pi T}{iD \sinh \pi T t} \right)^{2K} = \frac{J_0^2}{\sqrt{\pi} D} \left(\frac{\pi T}{D} \right)^{2K-1} \Gamma(K) / \Gamma(\frac{1}{2} + K) \quad (44)$$

で与えられる. Γ はガンマ関数である. この結果は K に対する表⁹⁾は異なるが近藤により得られたものに一致する.⁶⁾ また, Macroscopic Quantum tunneling でも同様の表式が得られている¹⁰⁾ 現実の系では格子のひずみも伴っており, J_0 として

$J_0 = J_0 e^{-S(t)}$ と格子のひずみの重なり積分で reduce されたものを用いることができる.

§3. まとめと議論

(1) Negizawa と Abrahams は軟X線の Raman 散乱をしを Ref. 9) で議論している. その際, 2つの sites もX線が異なる時刻に励起すると Dyson 方程式が解けなかった. 同時刻であれば解けることを示している. 我々の問題では site 1 を出た荷電粒子が同時刻にそのまま site 2 に飛び込む, つまり V_1 が消えると同時に V_2 が生じる実が解ける上では重要である.

(2) 得られた重なり積分(42)は $t \gg T^{-1}$ では

$(\frac{\pi T}{D})^{2K} e^{-2\pi K T t}$ に比例する。この結果は δ が電子雲の重なり積分 $(\frac{\pi T}{D})^K$ で reduce され、(42) は荷電粒子と電子との相互作用によって $\exp(-2\pi K T t)$ で damp することを示している。

(3) ここでは各 site で s 状態の電子のみで遮蔽されるとしたが、複数の対称性の電子雲で遮蔽された場合もこの方法で、次元数は高くなるが可能そうに見える。今後の課題である。

(4) band 的な拡散の場合も同じ πK で与えられることを Kagan-Klinger の方法や Kubo formula を使って示すことができる。")

参考文献

- 1) P. W. Anderson, Phys. Rev. Letters 18 (1967), 1049; Phys. Rev. 164 (1967), 352.
- 2) K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 68 (1982), 1504.
- 3) K. Yamada, A. Sakurai and M. Takeshige; Prog. Theor. Phys. 70 (1983), 73.
- 4) J. Kondo, Physica, 84B (1976), 40; 207.
- 5) P. Nozières and C. T. de Dominicis, Phys. Rev. 178 (1969), 1097.
- 6) J. Kondo, Physica, 125B (1984), 279; 126B (1984), 377.
- 7) K. Yamada, A. Sakurai and S. Miyazima, Prog. Theor. Phys. 73 (1985), 1342.
- 8) G. Yurak and P. W. Anderson, Phys. Rev. B1 (1970), 1522.
R. A. Ferrell, Phys. Rev. 186 (1969), 399.
- 9) P. Nozières and E. Abrahams, Phys. Rev. B10 (1974), 3099.
- 10) S. Chakravarty and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. 52 (1984), 5.
- 11) K. Yamada, Prog. Theor. Phys. 72 (1984), 195.
K. Yamada, A. Sakurai, S. Miyazima and Hae Sun Hwang, Prog. Theor. Phys. に投稿中.