

Piezo-electric-polaron II (有限温度の場合)

東大教養・基礎科学科 岡本 謙 一

(8月5日受理)

§ 1. 序

有限温度のピエゾポーロン問題に於いて、最近 Porsch¹⁾ は未知の方法ではあるが、グリーン関数を用いて中間結合理論から期待される結果を得た。我々は単純に Lee-Lcw-Pines の方法を有限温度に拡張することにより、Porsch と同一の結果を得た。これはオプティカルポーロン問題で T.Yo-²⁾kota が用いた方法を適用したものである。

§ 2. 有限温度のピエゾポーロン

L-L-P の結果³⁾ より2度カノニカル変換した後のハミルトニアンは次の形で与えられる。ここで運動量の単位として $m v_s$, エネルギーの単位として $m v_s^2$ を用いた。m は電子のバンド質量, v_s は平均化された音速である。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \frac{1}{2} (P - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}})^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_{\mathbf{q}} \\ & + \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^2 \left(q - P\mathbf{q} + \frac{q^2}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} f_{\mathbf{q}}^2 \right)^2 \\ & + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \left(q + \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}'}^2 \right) \\ & + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ (q f_{\mathbf{q}} - P \cdot \mathbf{q} f_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}'}^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}} \\ & + \frac{1}{2} q^2 f_{\mathbf{q}}) + \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} (q f_{\mathbf{q}} - P \cdot \mathbf{q} f_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}} \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}'}^2 \\ & - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}} + \frac{1}{2} q^2 f_{\mathbf{q}}) \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}'}^+ b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'}') \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}'} (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'}^+ + b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}'} + 2 b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'}') \end{aligned} \quad (3)$$

フォノン系の演算子 $b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}$ の固有値を $N_{\mathbf{q}}$ とおく。上のハミルトニアンに対角部分のみを取る。対角部分を $E(\mathbf{P}\{N_{\mathbf{q}}\})$ と書けば、それは (4) で与えられる。ここで $f_{\mathbf{q}}$ は有限温度であるゆえ自由エネルギー $F_{\mathbf{P}}$ を極小とするように決める変分変数である。又 $\mathbf{P}$ は全運動量である。

$$\begin{aligned} E(\mathbf{P}, \{N_{\mathbf{q}}\}) = & \frac{1}{2} (\mathbf{P} - \sum \mathbf{q} N_{\mathbf{q}})^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_{\mathbf{q}} \\ & + \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^2 \left(\mathbf{q} - \mathbf{P} \cdot \mathbf{q} + \frac{q^2}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} f_{\mathbf{q}}^2 \right)^2 \\ & + \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} \left(\mathbf{q} + \mathbf{q} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' f_{\mathbf{q}'}^2 \right) + \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^2 q^2 N_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで T. Yokota と同様ポーラロンの運動量 $\mathbf{K}_{\mathbf{P}}$ の一定のもののみを考える。つまり全運動量 $\mathbf{P}$ より free-phonon の運動量 $\sum N_{\mathbf{q}} \mathbf{q}$ をさしひいた $\mathbf{K}_{\mathbf{P}} = \mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} \mathbf{q}$ を fix して考える。

カノニカル分布の一般論より自由エネルギー $F_{\mathbf{P}}$ は (5) で与えられる。 $Z_{\mathbf{P}}$ はカノニカルな状態和である。(6) の指数部分の肩に於いて、無次元化の形より $m v_s^2$ をかけてエネルギー単位にもどした。

$$F_{\mathbf{P}} = -K_B T \ln Z_{\mathbf{P}} \quad (5)$$

$$Z_{\mathbf{P}} = \sum_{\{N_{\mathbf{q}}\}} \exp \left\{ -\frac{m v_s^2}{K_B T} E(\mathbf{P}, \{N_{\mathbf{q}}\}) \right\} \delta(\mathbf{P} - \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} \mathbf{q} - \mathbf{K}_{\mathbf{P}}) \quad (6)$$

$Z_{\mathbf{P}}$ は (4) の $E(\mathbf{P}\{N_{\mathbf{q}}\})$ を用いて (7) のように変形される。

$$\begin{aligned} Z_{\mathbf{P}} = & \exp \left\{ -\frac{m v_s^2}{K_B T} \left(\frac{1}{2} K_{\mathbf{P}}^2 - \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}^2 \mathbf{q} \cdot \mathbf{K}_{\mathbf{P}} - \left(\frac{4\pi\alpha}{V}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2}{q^{1/2}} f_{\mathbf{q}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} \left(\sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} f_{\mathbf{q}}^2 \right)^2 + \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} f_{\mathbf{q}}^2 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{q^2}{2} f_{\mathbf{q}}^2 \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\times \sum_{\{N_q\}} \exp \left\{ -\frac{m v_s^2}{K_B T} \sum_q (q + q^2 f_q^2) N_q \right\} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\{N_q\}} \exp \left\{ -\frac{m v_s^2}{K_B T} \sum_q (q + q^2 f_q^2) N_q \right\} \\ &= \prod_q \left[\frac{\exp \left\{ \frac{m v_s^2}{K_B T} (q + q^2 f_q^2) \right\}}{\exp \left\{ \frac{m v_s^2}{K_B T} (q + q^2 f_q^2) \right\} - 1} \right] \end{aligned} \quad \text{であるゆえ, 自由エネルギー}$$

ギ-は次の (8) で与えられる。

$$\begin{aligned} F_P = m v_s^2 & \left(\frac{K_P^2}{2} - \sum_q f_q^2 q \cdot K_P - \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \sum_q \frac{2}{q^{1/2}} f_q + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \left(\sum_q q f_q^2 \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_q q^2 f_q^2 + \sum_q q (f_q^2 - 1) \right) + \\ & K_B T \sum_q \ell_n \left(\exp \left\{ \frac{m v_s^2}{K_B T} (q + q^2 f_q^2) \right\} - 1 \right) \end{aligned} \quad (8)$$

$\partial F_P / \partial f_q = 0$ の条件より f_q を決めると, (9) で与えられる。(9) 式中の $\bar{N}_q$, η は (10), (11) で与えられる。

$$f_q = \frac{\left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right)^{1/2} \frac{1}{q^{1/2}}}{(\eta-1) K_P \cdot q + q + \frac{q^2}{2} (2\bar{N}_q + 1)} \quad (9)$$

$$\bar{N}_q = \frac{1}{\exp \left\{ \frac{m v_s^2}{K_B T} (q + q^2 f_q^2) \right\} - 1} \quad (10)$$

$$\eta K_P^2 = \sum_q \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right) \frac{1}{q} \frac{q \cdot K_P}{\left\{ (\eta-1) K_P \cdot q + q + \frac{q^2}{2} (2\bar{N}_q + 1) \right\}^2} \quad (11)$$

$\bar{N}_q$ は電子が 1 個あるため，格子振動の振動数がふえる効果をあらわしているが， f_q^2 は $\frac{1}{V}$ のオーダーであるゆえ無視され， $\bar{N}_q$ は通常のプランク分布と考えてよい。

$E_P = F_P - T \frac{\partial F_P}{\partial T}$ よりフォノン系のエネルギーを無視して E_P は次の式で与えられる。

$$E'_P = E_P / m v_s^2$$

$$= \frac{1}{2} (1-\eta^2) K_P^2 - \left(\frac{4\pi\alpha}{V} \right) \sum_q \frac{1}{q} \frac{1}{q + \frac{q^2}{2} (2\bar{N}_q + 1) + (\eta-1) K_P q} \quad (12)$$

(11)，(12) は無次元化の形で Porsch と一致する。

$\bar{N}_q \sim \frac{r}{q}$ ， $r = \frac{K_B T}{m v_s^2}$ としてフォノンの分布関数に高温近似を用いると（ピエゾの時には $m v_s^2 \simeq 0.1^\circ K$ ゆえヘリウム温度でも許される）(11)，(12) は K_P の小さい領域において (11)'，(12)' と変形される。

$$\eta(1-\eta)^2 = \frac{\alpha}{\pi K_P^3} \left[(q_m + 2r + 2) \ell_n \left| \frac{q_m + 2r + 2 - 2(1-\eta) K_P}{q_m + 2r + 2 + 2(1-\eta) K_P} \right| - (2r + 2) \ell_n \left| \frac{2r + 2 - 2(1-\eta) K_P}{2r + 2 + 2(1-\eta) K_P} \right| \right] \quad (11)'$$

$$E'_P = \frac{1}{2} (1-\eta^2) K_P^2 - \frac{\alpha}{\pi K_P (1-\eta)} \left[(q_m + 2r + 2) \times \ell_n \left| \frac{q_m + 2r + 2 + 2(1-\eta) K_P}{q_m + 2r + 2 - 2(1-\eta) K_P} \right| - 2(r+1) \ell_n \left| \frac{r+1 + (1-\eta) K_P}{r+1 - (1-\eta) K_P} \right| + 2(1-\eta) K_P \ell_n \left| \frac{(q_m + 2r + 2)^2 - 4(1-\eta)^2 K_P^2}{(2r+2)^2 - 4(1-\eta)^2 K_P^2} \right| \right] \quad (12)'$$

(12)' を K_P の 2 次まで展開して, 十分小さな K_P に対して polaron mass を求めると (13), (14) で与えられる。

$$E_P'(K_P) = -\frac{4\alpha}{\pi} \ell_n \left| \frac{q_m + 2 + 2r}{2 + 2r} \right| + \frac{K_P^2}{2m^*} \quad (13)$$

$$m^* = m \left[1 + \frac{4\alpha}{3\pi} \left\{ \frac{1}{(1+r)^2} - \frac{1}{(1+r+q_m/2)^2} \right\} \right] \quad (14)$$

polaron mass の band mass よりのずれは, (14) の形から小さいことがわかる。我々は (11)', (12)' を数値的に解いて, この有限温度の分散関係を Osaka⁴⁾ の結果と比較しようとしている。

reference

- 1) Phys. Letters Vol 30A No7 (1969)
- 2) T. Yokota 物性論研究 69号 (1953)
- 3) G. Whitfield et al, Phys. Rev. 165 (1968) 993
K. Okamoto thesis unpublished (1970)
- 4) Y. Osaka J.P.S.J. 19 (1964) 2346