비선형응답이론에 의한 정상상태의 전기전도도 TENSOR이해

오동훈* · 김진원* · 홍성락** · 류재연**

Nonlinear Static Conductivity Tensor Revisited

Dong Hun Oh*, Jin Won Kim*, Sung Rak Hong** and Jai Yon Ryu**

Abstract

Nonlinear static conductivity tensor is reviewed on the basis of the nonlinear response theory.

I. 서 론

계(system)가 외부로부터 자극이나 교란을 받으면 조만간에 응답을 보인다. 일반적으로 반응은 자극과 복잡한 함수관계를 갖게 되지만 해석적인 함수관계를 만족한다고 가정하면

$$\text{반응관측량} = \chi_0 + \chi_1 \cdot (\text{자극}) + \chi_2 \cdot (\text{자극})^2 + \cdots\cdots$$

와 같이 Taylor급수로 전개할 수 있다. 여기서 평형상태의 값 χ_0은 제외하고 χ_1(generalized susceptibility)을 제외한 고차항이 나타나지 않는 특별한 경우만을 고려할 때, 다시말해서 반응관측량이 자극의 크기에 일차적으로 비례할 때 이것을 선형응답이라고 한다.[1] 자극이 매우 미약하고(small perturbation) 또 자극 전달이 극히 조심스럽게 행해지면 선형응답을 실현할 수 있다고 믿을 수 있다. 이러한 선형응답이론은 다전자계의 수송현상 및 기타(자화)를 연구할 때 퍽 유용하게 쓰여지고 있다. 특히 고체내의 사이클로트론 천이나 광 천이에서 선형 전기전도도텐서(electric conductivity tensor)의 형식에 바탕을 둔 이론들이 매우 좋은 평가를 받고 있다.[2-5] 만약 자극의 세기가 큰 경우 Taylor급수 형태로 전개해서 고차항의 효과를 고려하든지 혹은 모든 고차항의 합을 조사할 필요가 있다. 그러나 이러한 방법은 비선형의 본질적인 성질을 해결할 수 있는지 의문시되고 있다.[6-16]

본 이야기는 저온 반도체 계에 몇가지 상호작용을 고려하여 비선형응답이론에 의한 정상상태의 전기전도도텐서 $\sigma(E)$ 즉 자극의 함수로 주어지는 일반화된 감수율 $\chi(E)$를 구하는 방법을 상세히 소개하고 이 분야를 공부하는 초보자들에게 도움을 주는 것을 목적으로 한다.

---

* 자연과학대학 물리학과(대학원)

** 자연과학대학 물리학과

Ⅱ. 계의 설명

시간에 따라 변하는 외부전기장

$$\vec{E}(t) = \vec{E} exp(\epsilon t), \qquad 0 < \epsilon \ll 1 \tag{2.1}$$

이 자극으로 다전자계에 가해지면 계의 전체 Hamiltonian $(H_T(t))$은

$$H_T(t) = H + H_E(t) \tag{2.2}$$

로 주어진다. 여기서 H는 시간에 의존하지 않는 Hamiltonian으로

$$H = H_e + V + H_B = \sum_l h^{(l)} + H_B, \tag{2.3}$$

$$h = h_e + v \tag{2.4}$$

와 같이 쓸 수 있다. 이때 l은 단일전자 지수를 의미하고 h_e는 단일전자 Hamiltonian의 비섭동 부분이며 v는 전자와 배경과의 상호작용 퍼텐셜이다. 전자계가 상호작용하는 배경은 주로 동료 전자들과 불순물에 의한 정전장 및 phonon장인데 대부분 저온 반도체에서는 전자의 밀도가 희박하므로 전자와 전자끼리의 상호작용은 무시되고 불순물과 phonon장의 영향이 지배적이 된다. 그러므로 v는 이러한 두 종류에 의한 효과의 합

$$v = v_{e-i} + v_{e-p}, \tag{2.5}$$

$$v_{e-i} = \sum_{\vec{q}} v(\vec{q}) exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}), \tag{2.6}$$

$$v_{e-p} = \sum_{\vec{q}} (\gamma_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \gamma_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}}^{+}) \tag{2.7}$$

으로 나타낼 수 있고 H_B는 배경 Hamiltonian으로

$$H_B = \sum_{\vec{q}} (b_{\vec{q}}^{+} b_{\vec{q}} + 1/2) \hbar \omega_{\vec{q}} \tag{2.8}$$

과 같이 phonon장만 포함하게 된다. $H_E(t)$는 시간에 의존하는 Hamiltonian으로

$$H_E(t) = \sum_l h_E^{(l)} exp(\epsilon t) = -\vec{R} \cdot \vec{E}(t), \tag{2.9}$$

$$h_E = -e\vec{r} \cdot \vec{E}, \tag{2.10}$$

$$\vec{R} = \sum_l e\vec{r}^{(l)} \tag{2.11}$$

과 같이 주어진다. 여기서 $v(\vec{q})$는 불순물 퍼텐셜의 Fourier변환을 의미하고 $\vec{r}$은 유효질량 m을 가지는 전도전자의 위치벡터이며 $b_{\vec{q}}^{+}(b_{\vec{q}})$는 운동량 $\hbar\vec{q}$와 에너지 $\hbar\omega_{\vec{q}}$를 가지는 phonon의 생성(소멸)연산자이다. 또한 $r_{\vec{q}}$ 〔$\equiv C_{\vec{q}}\, exp(i\vec{q}\cdot\vec{r})$〕는 전자와 phonon의 상호작용 연산자이고 $C_{\vec{q}}$는 Phonon의 종류에 관계된다.

Ⅲ. 밀도 연산자

식 (2.1)과 같이 시간에 따라 변하는 자극이 이 계에 주어지면 밀도연산자 $\rho(t)$의 시간에 대한 변화는 Quantum Liouville방정식(일명 Von Neumann 방정식)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = H_T(t)\rho(t) - \rho(t)H_T(t) \equiv [H_T(t),\rho(t)] \tag{3.1}$$

올 만족한다 〔부록 A참조〕.

계가 $t=-\infty$에서 온도 T를 가진 평형상태에 있다고 가정하면 평형상태의 밀도함수는

$$\begin{aligned}\rho_{eq} &= exp(\alpha\bar{N} - \beta H)/Z \\ &= exp\{\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)\}[S_{even} - S_{odd}]/Z \\ &\equiv \rho_{eB} - \rho_V\end{aligned} \tag{3.2}$$

가 되고 Z는 grand partition함수로

$$\begin{aligned}Z &= T_R\{exp(\alpha\bar{N} - \beta H)\} \\ &= T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]S_{even}\}\end{aligned} \tag{3.3}$$

과 같이 주어진다〔부록 B참고〕. 여기서 $\bar{N}$은 계의 전체 전자수, $\alpha=\beta\zeta$, $\beta=(k_BT)^{-1}$이고 k_B는 Boltzmann상수, ζ는 계의 chemical potential이며 T_R은 다체계의 Trace이다. 또한

$$\rho_{eB} = \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\}} = \rho_e\rho_B, \tag{3.4}$$

$$\rho_e = \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta H_e]}{T_R^e\{exp[\alpha\bar{N} - \beta H_e]\}}, \tag{3.5}$$

$$\rho_B = \frac{exp(-\beta H_B)}{T_R^B\{exp(-\beta H_B)\}}, \tag{3.6}$$

$$\rho_V = exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\{T_R(S_{even}) - S_{even} + S_{odd}\}/Z, \tag{3.7}$$

$$S_{even} \equiv 1 + \sum_{k=1}^{\infty}\int_0^{\beta} d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \cdots \int_0^{\beta_{2k-1}} d\beta_{2k} V(\beta_1)V(\beta_2)\cdots V(\beta_{2k}), \tag{3.8}$$

$$S_{odd} \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\beta} d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \cdots \int_0^{\beta_{2k-2}} d\beta_{2k-1} V(\beta_1)V(\beta_2)\cdots V(\beta_{2k-1}), \quad (3.9)$$

$$V(\beta) \equiv V(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) = exp[\beta(H_e + H_B)]V exp[-\beta(H_e + H_B)] \quad (3.10)$$

이고 T_R^e와 T_R^B는 각각 다전자계 및 배경장의 trace를 의미한다. 식(3.3)에서 배경장의 상태함수에 대한 직교성에 의해 $T_R(S_{odd})=0$조건을 사용했다.[16]

시간에 따라 변하는 외부 자극이 계에 걸리면 밀도연산자 $\rho(t)$가 평형상태의 값 ρ_{eq}로 부터 섭동으로 본다면

$$\rho(t) = \rho_{eq} + \rho_1(t) \quad (3.11)$$

로 나타낼 수 있다. 식(3.1)에 식(2.2), (3.2), (3.11)를 대입하면 다음과 같이 된다.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t) = [H_T(t), \rho_1(t)] + [H_E(t), \rho_{eB}] - [H_E(t), \rho_V] \quad (3.12)$$

여기서 $[H, \rho_{eq}]=0$와 $\frac{\partial}{\partial t}\rho_{eq}=0$ 조건을 사용했다. 식(3.12)의 오른쪽 세번째 항은 전자와 배경장의 상호작용이 외부장에 의해서 변하는 율을 나타낸다. 외부 전기장이 계에 가해지면 에너지는 전자계에 공급되고 이때 전달되는 일율은 전자와 배경장의 상호작용을 통해서 배경장으로 전달된다. 그 결과로 배경장의 들뜸을 야기시킨다. 그러나 반도체와 같은 전자의 밀도가 적은 계에 대해서 배경장이 전자계에 대한 열원이고 또한 배경장이 온도 T를 가진 또 다른 거대한 열원과 접촉되어 있다고 가정하면 우리가 고려하고 있는 배경장은 거의 열적 평형 상태에 놓여 있게 되고 배경장의 온도는 일정하게 유지된다. 다시 말하면 전자계로부터 배경장으로 전달되는 에너지 양은 매우 적어서 배경장의 들뜸효과를 일으키는 식(3.12)의 오른쪽 세번째 항은 무시될 수 있다.[15,16] 이러한 가정은 배경장의 비평형 들뜸효과가 일어나는 금속이나 지극히 큰 외부장이 걸린 계에서는 타당하지 않다. 이러한 효과에 대한 연구는 앞으로의 과제로 남겨 두기로 한다. 따라서 식(3.12)은

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t) = [H_T(t), \rho_1(t)] + [H_E(t), \rho_{eB}] \quad (3.13)$$

이 되고 여기서 $\rho_1(t)$를 구하기 위하여 다음을 정의한다.

$$\rho_{1D}(t) = exp[iH_T(t)t/\hbar]\rho_1(t)exp[-iH_T(t)t/\hbar] \quad (3.14)$$

윗식을 미분하면

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_{1D}(t) = &-exp[iH_T(t)t/\hbar][H_T(t), \rho_1(t)]exp[-iH_T(t)t/\hbar] \\ &+ i\hbar exp[iH_T(t)t/\hbar]\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t)exp[-iH_T(t)t/\hbar] \end{aligned} \quad (3.15)$$

가 되며 이 식에 식(3.13)을 대입하면

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_{1D}(t) = exp[iH_T(t)t/\hbar][H_E(t),\rho_{eB}]exp[-iH_T(t)t/\hbar] \qquad (3.16)$$
$$= [H_{ED}(t),\rho_{eB}]$$

을 얻는다. 여기서

$$H_{ED}(t) = exp[iH_T(t)t/\hbar]H_E(t)exp[-iH_T(t)t/\hbar] \qquad (3.17)$$

이다. 식(3.16)을 적분하면

$$\rho_{1D}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t}[H_{ED}(t_1),\rho_{eB}]dt_1 \qquad (3.18)$$

이 되고 식(3.14)와 식(3.18)로 부터

$$\rho_1(t) = exp[-iH_T(t)t/\hbar]\rho_{1D}(t)exp[iH_T(t)t/\hbar] \qquad (3.19)$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} exp[-iH_T(t)t/\hbar][H_{ED}(t_1),\rho_{eB}]exp[iH_T(t)t/\hbar]dt_1$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} exp[-iH_T(t)(t-t_1)/\hbar][H_E(t_1),\rho_{eB}]exp[iH_T(t)(t-t_1)/\hbar]dt_1$$

를 얻는다. 그러므로 식(2.1)을 고려할 때 정상상태의 밀도연산자 ρ_S는

$$\rho_s = (1/i\hbar)\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{0} dt\ \exp(\epsilon^+ t)exp[iH_T(t)t/\hbar][H_E,\rho_{eB}]exp[-iH_T(t)t/\hbar] \qquad (3.20)$$

과 같이 주어진다. 여기서 $\epsilon^+=\epsilon+s$이고 s는 수렴인자이다.

Ⅳ. 정상상태의 비선형 전기전도도텐서

밀도 연산자 $\rho(t)$를 알면 어떤 물리량의 시간 t에서의 기대치를 다음과 같이 구할 수 있는데 외부 자극이 전기장이므로 여기서는 구하고자 하는 물리량을 전류밀도 $\vec{J}$로 취하기로 한다.

$$<\vec{J}>_t = <\Psi(t)\mid\vec{J}\mid\Psi(t)>$$
$$= \sum_i <\Psi(t)\mid\Psi_i><\Psi_i\mid\vec{J}\mid\Psi(t)>$$
$$= \sum_i <\Psi_i\mid\vec{J}\mid\Psi(t)><\Psi(t)\mid\Psi_i>$$
$$= \sum_i <\Psi_i\mid\vec{J}\rho(t)\mid\Psi_i>$$

$$= T_R(\vec{J}\rho(t)) = T_R(\vec{J}\rho_{eq}) + T_R(\vec{J}\rho_1(t)) \quad (4.1)$$

$$= < \vec{J} >_{eq} + < \Delta\vec{J} >_t \quad (4.2)$$

여기서 $\langle \vec{J} \rangle_{eq} = T_R(\vec{J}\rho_{eq})$는 평형상태의 값이므로 본 이야기에서 제외하기로 한다. 그러면 식 (4.1), (4.2)에서 정상상태의 전류밀도는

$$< \Delta\vec{J} > = T_R(\vec{J}\rho_s) \quad (4.3)$$

이므로 식(2.1), (2.9), (3.20)을 이용하여 윗식을 다시 표현하면

$$< \Delta\vec{J} > = T_R\{\vec{J}\frac{1}{i\hbar}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{0} dt\ \exp(\epsilon^+ t) exp[iH_T(t)t/\hbar][H_E, \rho_{eB}]exp[-iH_T(t)t/\hbar]\}$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{0}^{\infty} dt\ \exp(-\epsilon^+ t)T_R\{[\rho_{eB}, \vec{R}]\vec{J}(t \mid H_T(-t))\}\cdot\vec{E} \quad (4.4)$$

와 같이 쓸 수 있고, 이것의 k-성분은

$$< \Delta J_k > = \frac{1}{i\hbar}\lim_{\epsilon\to0^+}\sum_l\int_{0}^{\infty} dt\ \exp(-\epsilon^+ t)T_R\{[\rho_{eB}, R_l]J_k(t \mid H_T(-t))\}E_l$$

$$\equiv \lim_{\epsilon\to0^+}\sum_l\int_{0}^{\infty} dt\ \exp(-\epsilon^+ t)\phi_{kl}(t \mid H_T(-t))E_l \quad (4.5)$$

가 된다. 여기서 $J_k(t|H_T(-t)) = exp(iH_T(-t)t|\hbar)J_k exp(-iH_T(-t)t|\hbar)$, $k, l = x, y, z$이고 $\phi_{kl}(t|H_T(-t))$는 l방향으로 주어진 외부 전기장에 대해서 k방향으로 전류밀도를 관측하도록 하는 반응함수로써 다음과 같다.

$$\phi_{kl}(t \mid H_T(-t)) = (1/i\hbar)T_R\{[\rho_{eB}, R_l]J_k(t \mid H_T(-t))\} \quad (4.6)$$

Kubo항등식[1]

$$[\rho_{eB}, R_l] = \int_0^{\beta} \rho_{eB}\, exp[\beta_1(H_e + H_B)][R_l, H_e + H_B]exp[-\beta_1(H_e + H_B)]d\beta_1 \quad (4.7)$$

을 사용하면 〔부록 C참조〕 식(4.6)은

$$\phi_{kl}(t \mid H_T(-t)) = \int_0^{\beta} T_R\{\rho_{eB}\, J_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B)J_k(t \mid H_T(-t))\}d\beta_1 \quad (4.8)$$

$$= \int_0^{\beta} < J_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B)J_k(t \mid H_T(-t)) >_{eB}\ d\beta_1 \quad (4.9)$$

로 표현할 수 있다 〔부록 D참고〕. 여기서

$$J_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) = exp[\beta(H_e + H_B)]J_l exp[-\beta(H_e + H_B)] \quad (4.10)$$

이다.

또한 식(4.8)은 다음의 항등식[17]

$$\int_0^\beta d\beta_1 exp(\beta_1 H'_{eB})J_l exp(-\beta_1 H'_{eB}) = e^{\beta H'_{eB}} \frac{\partial}{\partial u_l} e^{-\beta H'_{eB}} \quad (4.11)$$

을 고려하면 〔부록 E참고〕

$$\frac{\partial}{\partial u_l} exp(-\beta H'_{eB})\,|_{u_l=0} = \int_0^\beta d\beta_1 exp[-(\beta-\beta_1)(H_e+H_B)]J_l exp[-\beta_1(H_e+H_B)]$$
$$= \int_0^\beta d\beta_1 exp[-\beta(H_e+H_B)]J_l(-i\hbar\beta_1 \mid H_e+H_B) \quad (4.12)$$

즉

$$\frac{\partial}{\partial u_l}\rho'_{eB}\,|_{u_l=0} = \int_0^\beta d\beta_1 \rho_{eB} J_l(-i\hbar\beta_1 \mid H_e + H_B) \quad (4.13)$$

을 얻는다. 여기서 H'_{eB}는 modified Hamiltonian으로서

$$H'_{eB} = H_e + H_B - \vec{J}\cdot\vec{U} = H'_e + H_B \quad (4.14)$$

이고 $\vec{U}$는 상수 vector이며

$$\rho'_{eB} \equiv \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta H'_{eB}]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta H'_{eB}]\}} = \rho_B \rho'_e \quad (4.15)$$

$$\rho'_e \equiv \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta H'_e]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta H'_e]\}} \quad (4.16)$$

이다. 식(4.13)을 사용하여 식(4.8)을 다시 표현하면

$$\phi_{kl}(t \mid H_T(-t)) = \lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l} T_R\{\rho'_{eB} J_k(t \mid H_T(-t))\} \quad (4.17)$$
$$= \lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l} < T_R^e\{\rho'_e J_k(t \mid H_T(-t))\} >_B \quad (4.18)$$

과 같은 형식이 된다. 여기서 $\langle\cdots\rangle_B$는 배경장에 대한 평균을 나타낸다. 식(4.17)에서 $T_R(\rho'_{eB}X)=T_R^B T_R^e(\rho_B\rho'_e X)=\langle T_R^e(\rho'_e X)\rangle_B$를 사용했다.

그러므로 관계식 $\langle\Delta J_k\rangle/\Omega=\sum_l\sigma_{kl}(E_l)E_l$ [15,16]과 식(4.5), (4.6), (4.8), (4.9), (4.17), (4.18)을 고려하면 정상상태의 비선형 전기전도도텐서 $\sigma_{kl}(E_l)$은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\sigma_{kl}(E_l)=\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)\phi_{kl}(t\mid H_T) \tag{4.19}$$

$$=(1/i\hbar\Omega)\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)T_R\{[\rho_{eB},R_l]J_k(t\mid H_T)\} \tag{4.20}$$

$$=\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)\int_0^\beta T_R\{\rho_{eB}J_l(-i\hbar\beta\mid H_e+H_B)J_k(t\mid H_T)\}d\beta_1 \tag{4.21}$$

$$=\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)\int_0^\beta <J_l(-i\hbar\beta\mid H_e+H_B)J_k(t\mid H_T)>_{eB}d\beta_1 \tag{4.22}$$

$$=\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)\lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l}T_R(\rho'_{eB}J_k(t\mid H_T)) \tag{4.23}$$

$$=\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\int_0^\infty dtexp(-st)\lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l}<T_R^e\{\rho'_e J_k(t\mid H_T)\}>_B \tag{4.24}$$

여기서 Ω는 계의 체적을 나타낸다. 식(4.19)에서 전기전도도텐서는 반응함수의 Laplace변환의 형태임을 알 수 있다. 만약 $\vec{E}\to 0$로 취하면 위의 식들은 정상상태의 선형 전기전도도텐서에 대한 Green-Kubo공식이 된다.

V. 단일 입자 표현

식(4.24)은 다입자 기호(T_R^e, ρ'_e)를 포함하고 있기 때문에 실제의 계산에서는 불편하다. 그런데 만일 H가 단일 입자의 에너지의 합으로 표시될 때는 식(4.24)를 단일 입자 표현으로 간단화시킬 수 있다.[17]

단일 전자 Hamiltonian의 고유함수 $|\nu\rangle$, $|\mu\rangle$의 생성 및 소멸연사자 a^+, a에 대해서

$$\hat{n}_{\nu\mu}\equiv a_\mu^+ a_\nu \tag{5.1}$$

을 정의하면

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}_{\nu\mu}(t\mid H_T')=[\hat{n}_{\nu\mu}(t\mid H_T'),H_T']$$
$$=([h_T',\hat{n}(t\mid H_T')])_{\mu\nu} \tag{5.2}$$

가 성립하며〔부록 F참고〕 여기서

$$\hat{n}_{\nu\mu}(t\mid H_T')=exp[iH_T't/\hbar]\hat{n}_{\nu\mu}exp[-iH_T't/\hbar] \tag{5.3}$$

$$\hat{n}(t\mid H_T')=exp[-ih_T't/\hbar]\hat{n}(0)exp[ih_T't/\hbar] \tag{5.4}$$

$$H_T'=H_e+V+H_E=H_T-H_B \tag{5.5}$$

$$h_T'=h_e+v+h_E \tag{5.6}$$

이며 h_T'는 단일 전자 표현의 Hamiltonian이다.

한편 제 2양자화 형식에서 J_k와 H는 각각 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$J_k=\sum_\mu\sum_\nu<\mu\mid j_k\mid\nu>\hat{n}_{\nu\mu} \tag{5.7}$$

$$H=H_B+\sum_\mu\sum_\nu<\nu\mid h\mid\mu>\hat{n}_{\mu\nu} \tag{5.8}$$

이때 j_k는 단일입자에 대한 전류밀도이고, H_B는 배경장의 Hamiltonian이다. 그러면 식(4.14)의

$$H_{eB}'=H_e+H_B-\vec{J}\cdot\vec{U}=H_e'+H_B$$

는 대각 표현이므로 $H_{eB}'-\zeta\bar{N}$는

$$a_\mu^+=\sum_\alpha a_\alpha^+<\alpha\mid\mu>,\ a_\nu=\sum_{\alpha'}a_{\alpha'}<\nu\mid\alpha'> \tag{5.9}$$

$$H_{eB}'-\zeta\bar{N}=\sum_r<r\mid h_e'-\zeta\mid r>a_r^+a_r+H_B$$
$$=\sum_r(h_{er}'-\zeta)\hat{n}_{rr}+H_B \tag{5.10}$$

$$h_e'\equiv h_e-\vec{j}\cdot\vec{u} \tag{5.11}$$

으로 나타낼 수 있다. 그러므로 식(4.24)의 T_R부분은

$$T_R^e\{\rho_e' J_k(t \mid H_T)\} = exp(iH_B t/\hbar)t_r^e\{j_k(t \mid h_T')\bar{n}\}exp(-iH_B t/\hbar) \quad (5.12)$$

와 같이 쓸 수 있다(부록 G참고). 이때 t_r^e는 단일 전자에 대한 trace이고

$$j_k(t \mid h_T') = exp(ih_T' t/\hbar)j_k exp(-ih_T' t/\hbar) \quad (5.13)$$

$$\bar{n} = [exp\{\beta'(h_e - \vec{j}\cdot\vec{u} - \zeta)\} + 1]^{-1} \quad (5.14)$$

$$\beta' = (k_B T_e)^{-1} \quad (5.15)$$

이다.

한편 식(5.12)를 식(4.24)에 대입하면 정상상태의 비선형 전기전도도텐서 $\sigma_{kl}(E_l)$는 단일 전자의 표현으로 다음과 같이 쓸 수 있다(부록 H참고).

$$\sigma_{kl}(E_l) = \Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\lim_{u_l\to 0}\int_0^\infty dt exp(-st) < exp[iH_B t/\hbar]t_r^e\{\frac{\partial\bar{n}}{\partial u_l}j_k(t \mid h_T')\}exp[-iH_B t/\hbar] >_B \quad (5.16)$$

$$= \Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\lim_{u_l\to 0}\int_0^\infty dt exp(-st) < t_r^e\{\frac{\partial\bar{n}}{\partial u_l}j_k(t \mid h_T)\} >_B \quad (5.17)$$

$$= -i\hbar\Omega^{-1}\lim_{s\to 0^+}\lim_{u_l\to 0} < t_r^e\{\frac{\partial\bar{n}}{\partial u_l}R_F j_k\} >_B \quad (5.18)$$

$$= (-1/\Omega)\lim_{s\to 0^+}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{f(\epsilon_{\lambda_1}) - f(\epsilon_{\lambda_2})}{\epsilon_{\lambda_1} - \epsilon_{\lambda_2}} < \lambda_1 \mid j_l \mid \lambda_2 >< < \lambda_2 \mid \tilde{j}_k(E_l) \mid \lambda_1 > >_B \quad (5.19)$$

여기서

$$h_T = h_e + v + h_E + H_B \quad (5.20)$$

$$R_F = (-i\hbar s - L_T)^{-1} \quad (5.21)$$

$$L_T X = [h_T, X] \quad (5.22)$$

$$\tilde{j}_k(E_l) \equiv \int_0^\infty exp(-st)j_k(t \mid h_T) \quad (5.23)$$

이고 ϵ_λ 는 단일 전자의 Hamiltonian h_e의 에너지 고유치이다.

Ⅵ. 결　론

이상과 같이 다체계의 형성으로부터 출발한 정상상태의 비선형 전기전도도 공식을 상세히 소개해 보았다. 이것이 다체계의 수송현상을 이해하고 이를 응용하고자 하는 사람들에게 유용한 참고가 되기를 바란다.

참고문헌

1. R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn, 12, 570(1957);
R. Kubo, A. Lecture presented at the Theor. Phys. Inst., Univ. of Colorado, (Summer 1958).
2. A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. 23, 999 (1967).
3. A. Lodder and S. Fujita, J. Phys. Soc. Jpn. 25, 774 (1968);
A. Suzuki, S.D. Choi and S. Fujita, J. Phys. Chem. Solids 41, 735 (1980).
4. S.D. Choi and S. Fujita, Solid State Commun. 37, 293 (1981);
S.D. Choi and O.H. Chung, Solid State Commun. 46, 717 (1983).
5. J.Y. Ryu and S.D. Choi, Prog. Theor. Phys. 72, 428 (1984);
J.Y. Ryu, Y.C. Chung and S.D. Choi, Phys. Rev. B32, 7769 (1985);
J.Y. Ryu, S.N. Yi and S.D. Choi, J. Phys. C2, 3515 (1990).
6. K. Tani, Prog. Theor. Phys. 32, 167 (1964).
7. E.M. Conwell, High Field Transport in Semiconductors (Academic, New York, 1967).
8. Physics of Nonlinear Transport in Semiconductors, edited by D.K. Ferry, J.R. Barker, and C. Jacoboni(Plenum, New York, 1980).
9. N. Sawaki, J. Phys. C16, 4611 (1983).
10. Hot-Electron Transport in Semiconductors, edited by L. Reggiani (springer Verlag, Heidelberg, 1985).
11. X.L. Lei and C.S. Ting, Phys. Rev. B35, 3971 (1987).
12. P. Vasilopoulous, M. Charbonneau, and C.M. Vand Vliet, Phys. Rev. B35, 1334 (1987).
13. Hot Carriers in Semiconductors, in Proceedings of the Fifth International Conference, Boston, 1987, edited by J. Shan and G. J. Iafrate [Solid State Electron. 31, 319 (1989)].
14. G.Y. Hu and R. F. O'Connell, Physica A149, 1 (1988).
15. A. Suzuki, Phys. Rev. B40, 5632 (1989).
16. J.Y. Ryu, S.C. Kim, S.Y. Lee and S.D. Choi, J. Kor. Phys. Soc. 23, 440 (1990);
J.Y. Ryu, N.K. Hyun, and J.D. Ko, 제주대학교 기초과학연구, 3, 9, (1990);
J.Y. Ryu and S.D. Choi, Phys. Rev. B44, (1991) in press.
17. S. Fujita, Introduction to Nonequilibrium Quantum Statistical Mechanics, W.B. Saunders, Philadelphia, Chapt.7 (1966).

[부록 A]

$$\rho(t) \equiv |\Psi(t)><\Psi(t)|$$

와 같이 정의될 때

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \frac{\partial|\Psi(t)>}{\partial t}<\Psi(t)| + |\Psi(t)>\frac{\partial<\Psi(t)|}{\partial t} \qquad (A.1)$$

이 되며 Schrödinger방정식

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)> = \frac{1}{i\hbar}H_T(t)|\Psi(t)>$$

$$\frac{\partial}{\partial t}<\Psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}<\Psi(t)|H_T(t)$$

을 식(A.1)에 대입하면

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) &= \frac{1}{i\hbar}H_T(t)|\Psi(t)><\Psi(t) - \frac{1}{i\hbar}|\Psi(t)><\Psi(t)|H_T(t)\\ &= \frac{1}{i\hbar}(H_T(t)\rho(t) - \rho(t)H_T(t))\\ &= \frac{1}{i\hbar}[H_T(t), \rho(t)]\end{aligned}$$

가 된다. 그러므로

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H_T(t), \rho(t)]$$

를 얻는다. 이것은 $\rho(t)$가 만족하는 Quantum Liouville방정식이다.

[부록 B]

A와 B가 상수가 아니고 서로 교환할 수 없는 연산자일 때 일반적으로 성립하는 항등식

$$e^{(A+B)t} = e^{At} + \int_0^t ds e^{A(t-s)}Be^{(A+B)s} \qquad (B.1$$

으로 부터

$$\begin{aligned}e^{-\beta(H_s+H_B+V)} &= e^{-\beta(H_s+H_B)}\{1 + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\int_0^{\beta}d\beta_1\int_0^{\beta_1}d\beta_2\\ &\quad\cdots\int_0^{\beta_{k-1}}d\beta_k V(\beta_1)V(\beta_2)\cdots V(\beta_k)\}\\ &= e^{-\beta(H_s+H_B)}\{S_{even} - S_{odd}\}\end{aligned} \qquad (B.2)$$

$$T_R[e^{-\beta(H_e+H_B+V)}] = T_R[e^{-\beta(H_e+H_B)}S_{even}] \tag{B.3}$$

이 된다 식(B.2)와 식(B.3)으로 부터 식(3.2)의 평형상태의 밀도연산자는 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned}
\rho_{eq} &= \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\{S_{even} - S_{odd}\}}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]S_{even}\}} \\
&\approx \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\}}\{\frac{S_{even} - S_{odd}}{T_R(S_{even})}\} \\
&= \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\}}\{1 - \frac{T_R(S_{even}) - S_{even} + S_{odd}}{T_R(S_{even})}\} \\
&= \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\}} \\
&\quad - \frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]\{T_R(S_{even}) - S_{even} + S_{odd}\}}{T_R\{exp[\alpha\bar{N} - \beta(H_e + H_B)]S_{even}\}} \\
&= \rho_{eB} - \rho_V
\end{aligned} \tag{B.4}$$

[부록 C]

다음의 관계식을 고려하므로서 Kubo항등식을 얻을 수 있다

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\beta_1}\{e^{\beta_1 H_0}[e^{-\beta H_0}, R_l]\} &= \frac{d}{d\beta_1}\{R_l - e^{\beta_1 H_0}R_l e^{-\beta_1 H_0}\} \\
&= -e^{\beta_1 H_0}H_0 R_l e^{-\beta_1 H_0} + e^{\beta_1 H_0}R_l H_0 e^{-\beta_1 H_0} \\
&= e^{\beta_1 H_0}[R_l, H_0]e^{-\beta_1 H_0}
\end{aligned}$$

양변을 적분하면

$$\int_0^\beta \frac{d}{d\beta_1}\{e^{\beta_1 H_0}[e^{-\beta_1 H_0}, R_l]\}d\beta_1 = \int_0^\beta e^{\beta_1 H_0}[R_l, H_0]e^{-\beta_1 H_0}d\beta_1$$

$$e^{\beta H_0}[e^{-\beta H_0}, R_l] = \int_0^\beta e^{\beta_1 H_0}[R_l, H_0]e^{-\beta_1 H_0}d\beta_1$$

$$[e^{-\beta H_0}, R_l] = \int_0^\beta e^{-\beta H_0}e^{\beta_1 H_0}[R_l, H_0]e^{-\beta_1 H_0}d\beta_1$$

위의 관계식을 고려하고 $H_0 = H_e + H_B$라 두면 다음 식과 같은 Kubo 항등식을 얻을 수 있다.

$$[\rho_{eB}, R_l] = \int_0^\beta \rho_{eB}\, exp[\beta_1(H_e + H_B)][R_l, H_e + H_B] exp[-\beta_1(H_e + H_B)] d\beta_1 \tag{C.1}$$

$$= \int_0^\beta \rho_{eB}[R_l(-i\hbar\beta_1 \mid H_e + H_B), H_e + H_B] d\beta_1 \tag{C.2}$$

[부록 D]

다음의 관계식

$$R_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) = exp[\beta(H_e + H_B)] R_l exp[-\beta(H_e + H_B)] \tag{D.1}$$

$$\frac{d}{d\beta} R_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) = i\hbar \frac{d}{dt} R_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) = i\hbar \dot{R}_l(-i\hbar\beta_1 \mid H_e + H_B)$$
$$= exp[\beta(H_e + H_B)][H_e + H_B, R_l] exp[-\beta(H_e + H_B)] \tag{D.2}$$

와

$$R_l = \sum_{l'} e r_l^{(l')}$$

$$\dot{R}_l = \sum_{l'} e \dot{r}_l^{(l')} = polarization\, current = J_l \tag{D.3}$$

및 Kubo항등식을 고려하면 식(4.6)의 반응함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\phi_{kl}(t \mid H_T(-t)) = \int_0^\beta T_R(\rho_{eB} J_l(-i\hbar\beta \mid H_e + H_B) J_k(t \mid H_T(-t)) d\beta_1 \tag{D.4}$$

[부록 E]

함수

$$f(\beta_1, u_l) \equiv e^{\beta_1 H'_{eB}} \frac{\partial}{\partial u_l} e^{-\beta_1 H'_{eB}}$$

를 정의하고 이것을 β_1에 대해서 미분하면

$$\frac{\partial}{\partial\beta_1}f(\beta_1,u_l) = H'_{eB}e^{\beta_1 H'_{eB}}\frac{\partial}{\partial u_l}e^{-\beta_1 H'_{eB}} - e^{\beta_1 H'_{eB}}\frac{\partial}{\partial u_l}(H'_{eB}e^{-\beta_1 H'_{eB}})$$
$$= H'_{eB}e^{\beta_1 H'_{eB}}\frac{\partial}{\partial u_l}e^{-\beta_1 H'_{eB}} - e^{\beta_1 H'_{eB}}(H'_{eB}\frac{\partial}{\partial u_l}e^{-\beta_1 H'_{eB}} + \frac{\partial H'_{eB}}{\partial u_l}e^{-\beta_1 H'_{eB}})$$
$$= e^{\beta_1 H'_{eB}}J_l e^{-\beta_1 H'_{eB}}$$

를 얻는다. 이것을 적분하면 다음과 같은 항등식을 얻을 수 있다.

$$f(\beta,u_l) = \int_0^\beta d\beta_1 e^{\beta_1 H'_{eB}}J_l e^{-\beta_1 H'_{eB}} = e^{\beta_1 H'_{eB}}\frac{\partial}{\partial u_l}e^{-\beta_1 H'_{eB}}$$

[부록 F]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H'_T) = [\hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H'_T), H'_T]$$

$$H'_T = H_T - H_B$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H'_T) = [H'_T, \hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H'_T)]$$
$$= exp(iH'_T t/\hbar)[H'_T, \hat{n}_{\nu\mu}]exp(-iH'_T t/\hbar)$$
$$= exp(iH'_T t/\hbar)[H'_T, a^+_\mu a_\nu]exp(-iH'_T t/\hbar)$$
$$= exp(iH'_T t/\hbar)[H'_T, a^+_\mu a_\nu - a^+_\mu a_\nu H'_T]exp(-iH'_T t/\hbar)$$
$$= exp(iH'_T t/\hbar)(\sum_\alpha\sum_\beta h'_{T\alpha\beta}a^+_\alpha a_\beta a^+_\mu a_\nu - a^+_\alpha a_\beta a^+_\mu a_\nu$$
$$-\sum_\alpha\sum_\beta a^+_\mu a_\nu h'_{T\alpha\beta}a^+_\alpha a_\beta)exp(-iH'_T t/\hbar)$$

α, β와 μ, ν는 독립이므로 $a^+_\mu a_\nu h'_{T\alpha\beta} = h'_{T\alpha\beta}a^+_\mu a_\nu$로 쓸수있다.

$$= exp(iH'_T t/\hbar)(\sum_\alpha\sum_\beta h'_{T\alpha\beta}a^+_\alpha a_\beta a^+_\mu a_\nu$$
$$-\sum_\alpha\sum_\beta h'_{T\alpha\beta}a^+_\mu a_\nu a^+_\alpha a_\beta)exp(-iH'_T t/\hbar)$$

fermion에 대한 anticommulation rule

$\{a_\beta, a_\mu^+\} = a_\beta a_\mu^+ + a_\mu^+ a_\beta = \delta_{\beta\mu}$의 관계를 이용

$= exp(iH_T' t/\hbar)(\sum_\alpha \sum_\beta h'_{T\alpha\beta} a_\alpha^+ (1 - a_\mu^+ a_\beta)\delta_{\beta\mu} a_\nu$

$- \sum_\alpha \sum_\beta h'_{T\alpha\beta} a_\mu^+ (1 - a_\alpha^+ a_\nu)\delta_{\alpha\nu} a_\beta) exp(-iH_T' t/\hbar)$

$(a_\alpha^+ a_\mu^+ a_\mu a_\nu = a_\mu^+ a_\nu^+ a_\nu a_\beta = 0$고려$)$

$= exp(iH_T' t/\hbar)(\sum_\alpha h'_{T\alpha\mu} a_\alpha^+ a_\nu - \sum_\beta h'_{T\nu\beta} a_\mu^+ a_\beta) exp(-iH_T' t/\hbar)$

$= \sum_\alpha (h'_{T\alpha\mu} exp(iH_T' t/\hbar) a_\alpha^+ a_\nu exp(-iH_T' t/\hbar)$

$- h'_{T\nu\alpha} exp(iH_T' t/\hbar) a_\mu^+ a_\alpha exp(-iH_T' t/\hbar))$

$= \sum_\alpha (h'_{T\alpha\mu} exp(iH_T' t/\hbar) \hat{n}_{\nu\alpha} exp(-iH_T' t/\hbar)$

$- h'_{T\nu\alpha} exp(iH_T' t/\hbar) \hat{n}_{\alpha\mu} exp(-iH_T' t/\hbar))$

$= \sum_\alpha (h'_{T\alpha\mu} \hat{n}_{\nu\alpha}(t \mid H_T') - h'_{T\nu\alpha} \hat{n}_{\alpha\mu}(t \mid H_T'))$

$= \sum_\alpha (\hat{n}_{\nu\alpha}(t \mid H_T') h'_{T\alpha\mu} - h'_{T\nu\alpha} \hat{n}_{\alpha\mu}(t \mid H_T'))$

$= \sum_\alpha (< \nu \mid \hat{n}(t \mid H_T') \mid \alpha >< \alpha \mid h_T' \mid \mu >$

$- < \nu \mid h_T' \mid \alpha >< \alpha \mid \hat{n}(t \mid H_T') \mid \mu >)$

$=< \nu \mid \hat{n}(t \mid H_T') h_T' \mid \mu > - < \nu \mid h_T' n(t \mid H_T') \mid \mu >$

$= [\hat{n}(t \mid H_T'), h_T']_{\nu\mu}$

그러므로

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H_T') = [\hat{n}(t \mid H_T'), h_T']_{\nu\mu}$$

혹은

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}(t \mid H_T') = [h_T', \hat{n}(t \mid H_T')]$$

가 되며 이식의 formal solution을 구하면 다음과 같다.

$$\hat{n}(t \mid H_T') = exp(-ih_T' t/\hbar)\hat{n}(0) exp(ih_T' t/\hbar)$$

[부록 G]

$$T_R^e(\rho_e' J_k(t \mid H_T)) = exp(iH_Bt/\hbar)t_r^e\{j_k(t \mid h_e + v + h_E)\bar{n}\}exp(-iH_Bt/\hbar)\text{증명}$$

$$\begin{aligned} T_R^e(\rho_e' J_k(t \mid H_T)) &= T_R^e\{\rho_e' exp[iH_Tt/\hbar]J_k exp[-iH_Tt/\hbar]\} \\ &= exp(iH_Bt/\hbar)T_R^e\{\rho_e' exp[iH_T't/\hbar]J_k exp[-iH_T't/\hbar]\}exp(-iH_Bt/\hbar) \\ &= exp(iH_Bt/\hbar)T_R^e\{\rho_e'(t)J_k\}exp(-iH_Bt/\hbar) \\ &= exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu> T_R^e(\rho_e'(t)n_{\nu\mu})exp(-iH_Bt/\hbar) \\ &= exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu> T_R^e(\rho_e'\hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H_T'))exp(-iH_Bt/\hbar) \end{aligned} \tag{G.1}$$

여기서 $\hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H_T')$ 는 식(5.4)로 부터 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \hat{n}_{\nu\mu}(t \mid H_T') &= <\nu \mid exp(-ih_T't/\hbar)\hat{n}exp(ih_T't/\hbar) \mid \mu> \\ &= \sum_\lambda\sum_k <\nu \mid exp(-ih_T't/\hbar) \mid \lambda><\lambda \mid \hat{n} \mid k><k \mid exp(ih_T't/\hbar) \mid \mu> \\ &= \sum_\lambda\sum_k [exp(-ih_T't/\hbar)]_{\nu\lambda}\hat{n}_{\lambda k}[exp(ih_T't/\hbar)]_{k\mu} \end{aligned}$$

그러므로 식(G.1)은

$$\begin{aligned} & exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu> \sum_\lambda\sum_k [exp(-ih_T't/\hbar)]_{\nu\lambda}T_R^e(\rho_e' n_{\lambda k}) \\ & [exp(ih_T't/\hbar)]_{k\mu}exp(-iH_Bt/\hbar) \qquad (G.2) \\ & = exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu> \sum_\lambda\sum_k [exp(-ih_T't/\hbar)]_{\nu\lambda}(\bar{n})_{\lambda k} \\ & [exp(ih_T't/\hbar)]_{k\mu}exp(-iH_Bt/\hbar) \\ & = exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu> \\ & <\nu \mid exp(-ih_T't/\hbar)\bar{n}exp(ih_T't/\hbar) \mid \mu> exp(-iH_Bt/\hbar) \\ & = exp(iH_Bt/\hbar)\sum_\mu\sum_\nu <\mu \mid j_k \mid \nu><\nu \mid \bar{n}(t \mid h_T') \mid \mu> exp(-iH_Bt/\hbar) \\ & = exp(iH_Bt/\hbar)t_r^e\{j_k\bar{n}(t \mid h_T')\}exp(-iH_Bt/\hbar) \\ & = exp(iH_Bt/\hbar)t_r^e\{j_k(t \mid h_T')\bar{n}\}exp(-iH_Bt/\hbar) \end{aligned}$$

단

$$\bar{n}(t \mid h_T') = exp(-ih_T'/\hbar)\bar{n}exp(ih_T't/\hbar)$$
$$j_k(t \mid h_T') = exp(ih_T't/\hbar)j_k exp(-ih_T't/\hbar)$$

이다.

식(G.2)의 $T_R^e(\rho_e'\hat{n}_{\lambda k}) = (\bar{n})_{\lambda k}$증명

$$T_R^e(\rho_e'\hat{n}_{\lambda k}) = T_R^e(\rho_e' a_k^+ a_\lambda)$$

$a_k^+ = \sum_\alpha a_\alpha^+ < \alpha \mid k >, a_\lambda = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'} < \lambda \mid \alpha' >$ 이므로

$$= \sum_\alpha \sum_{\alpha'} < \lambda \mid \alpha' >< \alpha \mid k > T_R^e(\rho_e' a_\alpha^+ a_{\alpha'}) \qquad (G.3)$$

여기서 $T_R^e(\rho_e' a_\alpha^+ a_{\alpha'})$을 구하기 위해 다음을 계산한다.

$$\begin{aligned} T_R^e(\rho_e' a_\alpha^+ a_{\alpha'}) &= T_R^e\left(\frac{exp[\alpha\bar{N} - \beta H_e']}{T_R^e exp[\alpha\bar{N} - \beta H_e']} a_\alpha^+ a_{\alpha'}\right) \\ &= T_R^e(e^{-\beta H_e'} a_\alpha^+ a_{\alpha'})/T_R^e e^{-\beta H_e'} \\ &= T_R^e(a_{\alpha'} e^{-\beta H_e'} a_\alpha^+)/T_R^e e^{-\beta H_e'} \\ &= T_R^e(e^{\beta H_e'} a_{\alpha'} e^{-\beta H_e'} a_\alpha^+ e^{-\beta H_e'})/T_R^e e^{-\beta H_e'} \end{aligned} \qquad (G.4)$$

여기서 $e^{\beta H_e'} a_\alpha' e^{-\beta H_e'}$ 의 값을 구하고자 한다. 그러면

$a_{\alpha'}(\beta) \equiv e^{\beta H_e'} a_{\alpha'} e^{-\beta H_e'}$라 두면

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\beta} a_{\alpha'}(\beta) &= e^{\beta H_e'}[H_e', a_{\alpha'}]e^{-\beta H_e'} \\ &= e^{\beta H_e'}\{\sum_\alpha (h_e' - \zeta)a_\alpha^+ a_\alpha a_{\alpha'} - \sum_\alpha a_{\alpha'}(h_e' - \zeta)a_\alpha^+ a_\alpha)\}e^{-\beta H_e'} \\ &= e^{\beta H_e'}\{\sum_\alpha (h_e' - \zeta)a_\alpha^+ a_\alpha a_{\alpha'} \\ &\quad - \sum_\alpha (h_e' - \zeta)(1 - a_\alpha^+ a_{\alpha'})\delta_{\alpha\alpha'} a_\alpha\}e^{-\beta H_e'} \\ &= e^{\beta H_e'}(-(h_e' - \zeta)a_{\alpha'})e^{-\beta H_e'} \\ &= (-h_e' + \zeta)a_{\alpha'}(\beta) \end{aligned}$$

가 되어 적분하여 그 해를 구하면

$$a_{\alpha'}(\beta) = a_{\alpha'}e^{-(h'_e-\zeta)\beta} = a^{\beta H'_e}a_{\alpha'}a^{-\beta H'_e} \qquad (G.5)$$

이다. 식 (G.5)를 식(G.4)에 대입하면

$$\begin{aligned}
T_R^e(\rho'_e a_\alpha^+ a_{\alpha'}) &= T_R^e\{e^{-\beta H'_e}a_{\alpha'}a_\alpha^+ e^{-\beta(h'_e-\zeta)}\}/T_R^e(e^{-\beta H'_e}) \\
&= e^{-\beta(h'_e-\zeta)}T_R^e\{e^{-\beta H'_e}(1-a_\alpha^+ a_{\alpha'})\delta_{\alpha\alpha'}\}/T_R^e(e^{-\beta H'_e}) \\
&= e^{-\beta(h'_e-\zeta)}T_R^e\{e^{-\beta H'_e} - e^{-\beta H'_e}a_\alpha^+ a_\alpha\}/T_R^e e^{-\beta H'_e} \\
&= e^{-\beta(h'_e-\zeta)}(1 - \frac{T_R^e e^{-\beta H'_e}a_\alpha^+ a_\alpha}{T_R^e e^{-\beta H'_e}}) \\
&= e^{-\beta(h'_e-\zeta)}(1 - T_R^e(\rho'_e a_\alpha^+ a_{\alpha'})) \qquad (G.6)
\end{aligned}$$

즉

$$T_R^e(\rho'_e a_\alpha^+ a_{\alpha'}) = [1 + exp\{\beta(h'_e - \zeta)\}]^{-1} = f(h'_e) = \bar{n} \qquad (G.7)$$

을 얻는다. 그러므로 식(G.7)을 이용하면 식(G.3)으로 부터 다음 과 같다.

$$T_R^e(\rho'_e a_k^+ a_\lambda) = < \lambda \mid \bar{n} \mid k > = (\bar{n})_{\lambda k}$$

[부록 H]

식 (5.19)증명

$$\lim_{u_l \to 0} t_r^e\{\frac{\partial \bar{n}}{\partial u_l} j_k(t \mid h_T)\}$$

$$= \lim_{u_l \to 0} \sum_{\lambda_1,\lambda_2} < \lambda_1 \mid \frac{\partial \bar{n}}{\partial u_l} \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$\bar{n} = f(\epsilon) = \frac{1}{2\pi i}\int_c \frac{f(z)}{z-\epsilon}dz$$

$$\epsilon = h_e - j_l u_l$$

$$= \lim_{u_l \to 0} \sum_{\lambda_1,\lambda_2} \frac{i}{2\pi}\int_c dz < \lambda_1 \mid f(z)\frac{\partial}{\partial u_l}(\frac{1}{h_e - j_l u_l - z} \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

여기서

$$\lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l}\left(\frac{1}{h_e - j_l u_l - z}\right) = \lim_{u_l\to 0}\frac{\partial}{\partial u_l}\left(\frac{1}{h_e - z} + \frac{1}{h_e - z}j_l u_l\frac{1}{h_e - z} + \cdots\right)$$

$$= \frac{1}{h_e - z}j_l\frac{1}{h_e - z} \text{대입}$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\int_c dz < \lambda_1 \mid f(z)\frac{1}{h_e - z}j_l\frac{1}{h_e - z} \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\int_c dz f(z) < \lambda_1 \mid \frac{1}{h_e - z} \mid \lambda_1 >< \lambda_1 \mid j_l\lambda_2 >$$

$$< \lambda_2 \mid \frac{1}{h_e - z} \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\int_c dz f(z)\left(\frac{1}{\epsilon_{\lambda_1} - z}\right)\left(\frac{1}{\epsilon_{\lambda_2} - z}\right)$$

$$< \lambda_1 \mid j_l \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\int_c dz f(z)\left(\frac{-1}{\epsilon_{\lambda_1} - \epsilon_{\lambda_2}}\right)\left(\frac{1}{\epsilon_{\lambda_1} - z} - \frac{1}{\epsilon_{\lambda_2} - z}\right)$$

$$< \lambda_1 \mid j_l \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\int_c dz f(z)\frac{1}{\epsilon_{\lambda_1} - \epsilon_{\lambda_2}}\left(\frac{1}{z - \epsilon_{\lambda_1}} - \frac{1}{z - \epsilon_{\lambda_2}}\right)$$

$$< \lambda_1 \mid j_l \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$

$$= -\sum_{\lambda_1,\lambda_2}\frac{f(\epsilon_{\lambda_1}) - f(\epsilon_{\lambda_2})}{\epsilon_{\lambda_1} - \epsilon_{\lambda_2}} < \lambda_1 \mid j_l \mid \lambda_2 >< \lambda_2 \mid j_k(t \mid h_T) \mid \lambda_1 >$$