ブロッホ・グリューナイゼン(Bloch-Grüneisen)の式 (非弾性散乱):
非弾性散乱も含む場合にはフォノンの時間変化も考えるので、弾性散乱時の(15)式は、

$$\overrightarrow{u_n}(t) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}} \overrightarrow{A_{\vec{q}}} e^{i\left(\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}-\omega t\right)} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}} \left(\overrightarrow{A_{\vec{q}}} e^{i\omega t}\right) e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}} \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}, \qquad (27)$$

となる。振幅の中に時間依存性も含めて関数$\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)$とする。ただし、$\overrightarrow{u_n}(t)$は実数なので$q=0$を除いて、

$$\left(\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}\right)^* = \overrightarrow{A_{-\vec{q}}}(t) e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}, \qquad \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)^* = \overrightarrow{A_{-\vec{q}}}(t), \qquad (28)$$

が成り立つ。また、

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N} \overrightarrow{u_n}(t) e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\overrightarrow{q'}} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t) e^{i\overrightarrow{q'}\cdot\overrightarrow{R_n}} e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}} = \frac{1}{N}\sum_{\overrightarrow{q'}}\sum_{n=1}^{N} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t) e^{i\left(\overrightarrow{q'}-\vec{q}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}} = \sum_{\overrightarrow{q'}} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t) \delta_{\overrightarrow{q'},\vec{q}} = \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t), \qquad (29)$$

の関係がある。バネ定数をKとしたフォノンのハミルトニアン Hに(27)式を代入すると、

$$H = \frac{M}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{d\overrightarrow{u_n}(t)}{dt}\right)^2 + \frac{\mathrm{K}}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(\overrightarrow{u_{n+1}}(t) - \overrightarrow{u_n}(t)\right)^2$$

$$= \frac{M}{2N}\sum_{n=1}^{N}\left(\sum_{\vec{q}} \frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt} e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}\right)^2 + \frac{\mathrm{K}}{2N}\sum_{n=1}^{N}\left(\sum_{\vec{q}} \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_{n+1}}} - \sum_{\vec{q}} \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}\right)^2$$

$$= \frac{M}{2N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\vec{q}}\sum_{\overrightarrow{q'}} \frac{d\overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t)^*}{dt} \cdot \frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt} e^{i\left(\vec{q}-\overrightarrow{q'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}}$$

$$+ \frac{\mathrm{K}}{2N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\vec{q}}\sum_{\overrightarrow{q'}} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t)^* \left(e^{-i\overrightarrow{q'}\cdot\overrightarrow{R_{n+1}}} - e^{-i\overrightarrow{q'}\cdot\overrightarrow{R_n}}\right) \cdot \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) \left(e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_{n+1}}} - e^{i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}\right)$$

$$= \frac{M}{2}\sum_{\vec{q}}\sum_{\overrightarrow{q'}} \frac{d\overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t)^*}{dt} \cdot \frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt} \delta_{\vec{q},\overrightarrow{q'}}$$

$$+ \frac{\mathrm{K}}{2N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\vec{q}}\sum_{\overrightarrow{q'}} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t)^* \cdot \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) e^{i\left(\vec{q}-\overrightarrow{q'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}} \left(e^{i\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)} - 1\right)\left(e^{-i\overrightarrow{q'}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)} - 1\right)$$

$$= \frac{M}{2}\sum_{\vec{q}} \frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)^*}{dt} \cdot \frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt} + \frac{\mathrm{K}}{2}\sum_{\vec{q}}\sum_{\overrightarrow{q'}} \overrightarrow{A_{\overrightarrow{q'}}}(t)^* \cdot \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) \delta_{\vec{q},\overrightarrow{q'}} \left(e^{i\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)} - 1\right)\left(e^{-i\overrightarrow{q'}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)} - 1\right)$$

$$= \frac{M}{2}\sum_{\vec{q}} \left|\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right|^2 + \frac{\mathrm{K}}{2}\sum_{\vec{q}} \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)^* \cdot \overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t) \left(2 - e^{i\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)} - e^{-i\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}}-\overrightarrow{R_n}\right)}\right)$$

$$= \frac{M}{2}\sum_{\vec{q}} \left|\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right|^2 + \sum_{\vec{q}} \left|\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)\right|^2 \mathrm{K}\left[1 - \cos\left\{\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}} - \overrightarrow{R_n}\right)\right\}\right]$$

$$= \frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}} \left|M\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right|^2 + \frac{M}{2}\sum_{\vec{q}} \left|\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)\right|^2 \frac{4\mathrm{K}}{M} \sin^2\frac{\vec{q}\cdot\left(\overrightarrow{R_{n+1}} - \overrightarrow{R_n}\right)}{2}$$

$$\equiv \frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}}\left|M\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right|^2+\frac{M}{2}\sum_{\vec{q}}\omega_{\vec{q}}{}^2\left|\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)\right|^2=\frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}}\left\{\left(M\omega_{\vec{q}}\right)^2\left|\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)\right|^2+\left|M\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right|^2\right\}$$

$$=\frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}}\left\{\left(M\omega_{\vec{q}}\right)^2\overrightarrow{A_{-\vec{q}}}(t)\cdot\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)+M^2\frac{d\overrightarrow{A_{-\vec{q}}}(t)}{dt}\cdot\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right\},\qquad(30)$$

となる。$\omega_{\vec{q}}$は第 8 回目の(8.5)式で導出された分散関係である。振幅$\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)$の共役運動量$\overrightarrow{P_{\vec{q}}}(t)$は、ラグランジアン$L$から、

$$\overrightarrow{P_{\vec{q}}}=\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}\right)}=M\frac{d\overrightarrow{A_{\vec{q}}}(t)}{dt}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{m=1}^{N}\left(M\frac{d\overrightarrow{u_m}(t)}{dt}\right)e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_m}},\quad(31)$$

となる。(30)式を振幅の演算子を$\widehat{A_{\vec{q}}}$、その共役運動量の演算子を$\widehat{P_{\vec{q}}}$として、
ハミルトン演算子$\widehat{H}$に変換すると、

$$\widehat{H}=\frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}}\left\{\left(M\omega_{\vec{q}}\right)^2\widehat{A_{-\vec{q}}}\widehat{A_{\vec{q}}}+\widehat{P_{-\vec{q}}}\widehat{P_{\vec{q}}}\right\},\qquad(32)$$

となる。「第二量子化」により変位$\widehat{u_n}$とその共役運動量$\widehat{M\dot{u}_m}^\dagger$の演算子の交換関係は$\left[\widehat{u_n},\widehat{M\dot{u}_m}^\dagger\right]=i\hbar\delta_{n,m}$なので、

$\widehat{A_{\vec{q}}}$と$\widehat{P_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger$の交換関係は(29),(31)式より、

$$\left[\widehat{A_{\vec{q}}},\widehat{P_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger\right]=\left(\widehat{A_{\vec{q}}}\widehat{P_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger-\widehat{P_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger\widehat{A_{\vec{q}}}\right)=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}\left[\widehat{u_n},\widehat{M\dot{u}_m}^\dagger\right]e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}e^{i\overrightarrow{q'}\cdot\overrightarrow{R_m}}=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N}i\hbar\delta_{n,m}e^{-i\vec{q}\cdot\overrightarrow{R_n}}e^{i\overrightarrow{q'}\cdot\overrightarrow{R_m}}$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}i\hbar e^{i\left(\overrightarrow{q'}-\vec{q}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}}=i\hbar\delta_{\overrightarrow{q'},\vec{q}},\qquad(33)$$

となる。さらに、ここで新た生成消滅演算子を、

$$\widehat{a_{\vec{q}}}\equiv\frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}}\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}+i\widehat{P_{\vec{q}}}\right),$$

$$\widehat{a_{\vec{q}}}^\dagger\equiv\frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}}\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}+i\widehat{P_{\vec{q}}}\right)^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}}\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}^\dagger-i\widehat{P_{\vec{q}}}^\dagger\right)=\frac{1}{\sqrt{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}}\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{-\vec{q}}}-i\widehat{P_{-\vec{q}}}\right),\quad(34)$$

と定義すると、$\widehat{a_{\vec{q}}}$と$\widehat{a_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger$の交換関係は(33)式より、

$$\left[\widehat{a_{\vec{q}}},\widehat{a_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger\right]=\frac{1}{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}\left\{\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}+i\widehat{P_{\vec{q}}}\right)\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}-i\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}\right)-\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}-i\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}\right)\left(M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}+i\widehat{P_{\vec{q}}}\right)\right\}$$

$$=\frac{M\omega_{\vec{q}}}{2M\hbar\omega_{\vec{q}}}\left\{M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}-\widehat{A_{\vec{q}}}i\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}+i\widehat{P_{\vec{q}}}\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}+\frac{\widehat{P_{\vec{q}}}\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}}{M\omega_{\vec{q}}}-M\omega_{\vec{q}}\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}\widehat{A_{\vec{q}}}-\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}}i\widehat{P_{\vec{q}}}+i\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}\widehat{A_{\vec{q}}}\right.$$

$$\left.-\frac{\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}\widehat{P_{\vec{q}}}}{M\omega_{\vec{q}}}\right\}=\frac{-i}{2\hbar}\left(\left[\widehat{A_{\vec{q}}},\widehat{P_{-\overrightarrow{q'}}}\right]+\left[\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}},\widehat{P_{\vec{q}}}\right]\right)=\frac{-i}{2\hbar}\left(\left[\widehat{A_{\vec{q}}},\widehat{P_{\overrightarrow{q'}}}^\dagger\right]+\left[\widehat{A_{-\overrightarrow{q'}}},\widehat{P_{-\vec{q}}}^\dagger\right]\right)$$

$$=\frac{-i}{2\hbar}\left(i\hbar\delta_{\vec{q},\overrightarrow{q'}}+i\hbar\delta_{-\overrightarrow{q'},-\vec{q}}\right)=\delta_{\vec{q},\overrightarrow{q'}},\qquad(35)$$

が成り立つ。また(34)式から、

$$\widehat{A_{\vec{q}}}=\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}}}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^\dagger\right),\qquad\widehat{P_{\vec{q}}}=-i\sqrt{\frac{M\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}-\widehat{a_{-\vec{q}}}^\dagger\right),\qquad(36)$$

となるので、(32)式は、

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\sum_{\vec{q}}\left\{\frac{M\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}\left(\widehat{a_{-\vec{q}}}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\right)\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right)-\frac{M\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}\left(\widehat{a_{-\vec{q}}}-\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\right)\left(\widehat{a_{\vec{q}}}-\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right)\right\}$$

$$=\sum_{\vec{q}}\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{4}\left\{\widehat{a_{-\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}-\widehat{a_{-\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}-\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right\}$$

$$=\sum_{\vec{q}}\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}\left(\widehat{a_{-\vec{q}}}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}\right)=\sum_{\vec{q}}\frac{\hbar\omega_{\vec{q}}}{2}\left(\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{-\vec{q}}}+\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+1\right)=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\frac{1}{2}\right), \qquad (37)$$

となる。最後の変形は和の中に$\vec{q}$が含まれていれば$-\vec{q}$も含まれているので和の順番を入れ替えることを用いた。また$\omega_{\vec{q}}=\omega_{-\vec{q}}$を使った。また、波数$\vec{q}$のフォノンが$n_{\vec{q}}$個ある状態を$|n_{\vec{q}}\rangle$として、これに(37)式のハミルトン演算子を作用させると、そのエネルギーは(8.21)式で表されるので、

$$\hat{H}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\frac{1}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(n_q+\frac{1}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle, \quad (38)$$

となるはずであるが、(35)式を使うと、

$$\hat{H}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\frac{1}{2}\right)\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}+\frac{\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left\{\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+1\right)+\frac{\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}}{2}\right\}|n_{\vec{q}}\rangle$$

$$=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\frac{3}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\left(n_{\vec{q}}+\frac{3}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(n_{\vec{q}}+\frac{3}{2}\right)\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle, \quad (39)$$

となりフォノン数が 1 個増えるので、Cを定数として、

$$\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=C|n_{\vec{q}}+1\rangle, \quad (40)$$

が成り立ち、$|n_{\vec{q}}\rangle$が規格化されているとすると、

$$\langle n_{\vec{q}}|\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger *}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=\langle n_{\vec{q}}|\widehat{a_{\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=\langle n_{\vec{q}}|\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+1|n_{\vec{q}}\rangle=n_{\vec{q}}+1=C^2,$$

$$C=\sqrt{n_{\vec{q}}+1}, \qquad \widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}|n_{\vec{q}}\rangle=\sqrt{n_{\vec{q}}+1}|n_{\vec{q}}+1\rangle, \quad (41)$$

となる。全く同様に、

$$\hat{H}\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}+\frac{1}{2}\right)\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left\{\left(\widehat{a_{\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}-1\right)+\frac{1}{2}\right\}\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}-\frac{\widehat{a_{\vec{q}}}}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle$$

$$=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}n_{\vec{q}}-\frac{\widehat{a_{\vec{q}}}}{2}\right)|n_{\vec{q}}\rangle=\sum_{\vec{q}}\hbar\omega_{\vec{q}}\left(n_{\vec{q}}-\frac{1}{2}\right)\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle, \quad (42)$$

となりフォノン数が 1 個減るので、Dを定数として、

$$\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=D|n_{\vec{q}}-1\rangle, \quad (43)$$

が成り立ち、

$$\langle n_{\vec{q}}|\widehat{a_{\vec{q}}}^{*}\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=\langle n_{\vec{q}}|\widehat{a_{\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=n_{\vec{q}}=D^2,$$

$$D=\sqrt{n_{\vec{q}}}, \quad \widehat{a_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}\rangle=\sqrt{n_{\vec{q}}}|n_{\vec{q}}-1\rangle, \quad (44)$$

となる。また、(27)式と(36)式から、変位$\widehat{u_n}$の演算子は、

$$\widehat{u_n}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}}\widehat{A_{\vec{q}}}e^{i\vec{q}\cdot\vec{R_n}}=\sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\vec{q}}}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right)e^{i\vec{q}\cdot\vec{R_n}}, \qquad (45)$$

となる。一方で、電子はフェルミ粒子なので、波数$\vec{k}$の軌道に$m_{\vec{k}}$個の電子が入った状態を$|m_{\vec{k}}\rangle$とすると、(スピン自由度を除いて)$m_{\vec{k}}$は 0 か 1 の値しか取れず、その生成消滅演算子$\widehat{c_{\vec{k}'}}^{\dagger},\widehat{c_{\vec{k}}}$は、

$$\widehat{c_{\vec{k}'}}^{\dagger}|m_{\vec{k}}\rangle=\sqrt{1-m_{\vec{k}}}(-1)^l|m_{\vec{k}}+1\rangle, \qquad (46)$$

$$\widehat{c_{\vec{k}}}|m_{\vec{k}}\rangle=\sqrt{m_{\vec{k}}}(-1)^l|m_{\vec{k}}-1\rangle, \qquad (47)$$

となる。l は軌道の「置換の符号」である。また、弾性散乱の(16)式は、

$$\Delta U(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N} \left\{ U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n} - \overrightarrow{u_n}\right) - U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \right\} \cong -\sum_{n=1}^{N} \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right), \qquad (48)$$

となるので、電子格子相互作用のハミルトニアンは、(12.4)式の電子のブロッホ関数ψを用いて、

$$\psi_{\vec{k}}\left(\vec{r} + \vec{R}\right) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

$$H_{e-ph} = \sum_{\vec{k}} \sum_{\overrightarrow{k'}} \iiint d\vec{r}\, \psi_{\vec{k}}{}^{*}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \psi_{\overrightarrow{k'}}(\vec{r}) = -\sum_{\vec{k}} \sum_{\overrightarrow{k'}} \sum_{n=1}^{N} \iiint d\vec{r}\, \psi_{\overrightarrow{k'}}{}^{*}(\vec{r}) \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$= -\sum_{\vec{k}} \sum_{\overrightarrow{k'}} \sum_{n=1}^{N} e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}} \iiint d\vec{r}\, \psi_{\overrightarrow{k'}}{}^{*}\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \psi_k\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right), \qquad (49)$$

となるが、もしブロッホ関数ψが単なる平面波であったら、 (18)式を用いて(49)式の右辺の積分は

$$\iiint d\vec{r}\, \psi_{\overrightarrow{k'}}{}^{*}\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \psi_k\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) = \iiint d\vec{r}\, e^{-i\overrightarrow{k'}\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) e^{i\vec{k}\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)}$$

$$= \iiint d\vec{r}\, e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \overrightarrow{u_n} \cdot \vec{\nabla} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \left(u_{n,x} \frac{\partial}{\partial x} + u_{n,y} \frac{\partial}{\partial y} + u_{n,z} \frac{\partial}{\partial z} \right) U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} u_{n,x} \frac{\partial U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right)}{\partial x}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} u_{n,y} \frac{\partial U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right)}{\partial y}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} u_{n,z} \frac{\partial U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right)}{\partial z}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz\, u_{n,x} \left\{ \left[e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \right]_{x=-\infty}^{x=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \frac{\partial}{\partial x} e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{n,y} \left\{ \left[e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \right]_{y=-\infty}^{y=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dy U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \frac{\partial}{\partial y} e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy\, u_{n,z} \left\{ \left[e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \right]_{z=-\infty}^{z=\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dz U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) \frac{\partial}{\partial z} e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$= -i(k_x - k_x{}') u_{n,x} \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$- i\left(k_y - k_y{}'\right) u_{n,y} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dy U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$- i(k_z - k_z{}') u_{n,z} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dz U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} \right\}$$

$$= -i\left(\vec{k} - \overrightarrow{k'}\right) \cdot \overrightarrow{u_n} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)}$$

$$= -i\left(\vec{k} - \overrightarrow{k'}\right) \cdot \overrightarrow{u_n} \iiint d\vec{r}\, e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\left(\vec{r}-\overrightarrow{R_n}\right)} U_0\left(\vec{r} - \overrightarrow{R_n}\right) = -i\left(\vec{k} - \overrightarrow{k'}\right) \cdot \overrightarrow{u_n} \frac{\overline{U_{atom}}}{N}, \qquad (50)$$

となる。ここで上式の変形では、$U_0(\vec{r})$が最近接原子に至るまでにはほとんど零になることを用いた。従って、近似的に(49)式は、

$$H_{e-ph} \cong \sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\sum_{n=1}^{N} e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}} i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\overrightarrow{u_n}\cdot\frac{\overline{U_{atom}}}{N} = i\frac{\overline{U_{atom}}}{N}\sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\sum_{n=1}^{N}\overrightarrow{u_n}e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}}, \qquad (51)$$

となる。上式には、$\vec{k}-\overrightarrow{k'}(=\vec{q})$と$\overrightarrow{u_n}$の内積があるので、縦波のフォノンだけが電子格子相互作用に寄与する。$\widehat{c_{\overrightarrow{k'}}}^{\dagger}, \widehat{c_{\vec{k}}}$を電子の生成消滅演算子として、(51)式を第二量子化してハミルトン演算子$\widehat{H_{e-ph}}$に変換すると、(45)式を使って、

$$\widehat{H_{e-ph}} = i\frac{\overline{U_{atom}}}{N}\sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\widehat{c_{\overrightarrow{k'}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\sum_{n=1}^{N}\widehat{u_n}e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}}$$

$$= i\frac{\overline{U_{atom}}}{N}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\widehat{c_{\overrightarrow{k'}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\sum_{n=1}^{N}\sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{1}{\omega_{\vec{q}}}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right)e^{i\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}+\vec{q}\right)\cdot\overrightarrow{R_n}}$$

$$= i\overline{U_{atom}}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\left(\vec{k}-\overrightarrow{k'}\right)\widehat{c_{\overrightarrow{k'}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{1}{\omega_{\vec{q}}}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right)\delta_{\overrightarrow{k'},\vec{k}+\vec{q}}$$

$$= i\overline{U_{atom}}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{1}{\omega_{\vec{q}}}}(-\vec{q})\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\left(\widehat{a_{\vec{q}}}+\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right), \qquad (52)$$

となる。通常過程では$\delta_{\overrightarrow{k'},\vec{k}+\vec{q}}$だが、ウムクラップ過程の場合は$\delta_{\overrightarrow{k'},\vec{k}+\vec{q}+\overrightarrow{G_g}}$, ($\overrightarrow{G_g}$は逆格子ベクトル)とする。

従って、弾性散乱の(8)式の$\Delta U_{\overrightarrow{k'},\vec{k}}$は、

$$\sum_{\vec{k}}\sum_{\overrightarrow{k'}}\Delta U_{\overrightarrow{k'},\vec{k}} = \sum_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}}\Delta U_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}} \equiv \left\langle fin.\left|\widehat{H_{e-ph}}\right|ini.\right\rangle$$

$$= -i\overline{U_{atom}}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM}}\sum_{\vec{k}}\sum_{\vec{q}}\sqrt{\frac{1}{\omega_{\vec{q}}}}\vec{q}\left(\left\langle fin.\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{\vec{q}}}\right|ini.\right\rangle+\left\langle fin.\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right|ini.\right\rangle\right), \qquad (53)$$

となる。右辺第一項は、波数$\vec{q}$のフォノンが吸収されて、電子の波数が$\vec{k}$から$\vec{k}+\vec{q}$になるので、(44),(46)(47)式より、

$$ini.\rangle = \left|m_{\vec{k}+\vec{q}}, m_{\vec{k}};\ n_{\vec{q}}\right\rangle, \quad \langle fin. = \left\langle n_{\vec{q}}-1; m_{\vec{k}+\vec{q}}+1, m_{\vec{k}}-1,\right.$$

$$\left\langle fin.\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{\vec{q}}}\right|ini.\right\rangle = \left\langle n_{\vec{q}}-1; m_{\vec{k}+\vec{q}}+1, m_{\vec{k}}-1\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{\vec{q}}}\right|m_{\vec{k}+\vec{q}}, m_{\vec{k}};\ n_{\vec{q}}\right\rangle = (-1)^{?}\sqrt{\left(1-m_{\vec{k}+\vec{q}}\right)m_{\vec{k}}n_{\vec{q}}}$$

$$= \sqrt{\left(1-m_{\vec{k}+\vec{q}}\right)m_{\vec{k}}n_{\vec{q}}} = \sqrt{n_{\vec{q}}}, \quad (54)$$

となる。$(-1)^{?}$はマヨラナ位相に関係した量だが、後で二乗する時に消えてしまうので気にしない。また、散乱が起きるために$m_{\vec{k}}=1, m_{\vec{k}+\vec{q}}=0$,とした。一方で右辺第二項は、波数$-\vec{q}$のフォノンが生成されて、電子の波数が$\vec{k}$から$\vec{k}+\vec{q}$になるので、(41),(46)(47)式より、

$$ini.\rangle = \left|m_{\vec{k}+\vec{q}}, m_{\vec{k}};\ n_{-\vec{q}}\right\rangle, \quad \langle fin. = \left\langle n_{-\vec{q}}+1; m_{\vec{k}+\vec{q}}+1, m_{\vec{k}}-1,\right.$$

$$\left\langle fin.\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{-\vec{q}}}^{\dagger}\right|ini.\right\rangle = \left\langle n_{-\vec{q}}+1; m_{\vec{k}+\vec{q}}+1, m_{\vec{k}}-1\left|\widehat{c_{\vec{k}+\vec{q}}}^{\dagger}\widehat{c_{\vec{k}}}\widehat{a_{\vec{q}}}\right|m_{\vec{k}+\vec{q}}, m_{\vec{k}};\ n_{-\vec{q}}\right\rangle$$

$$= (-1)^{?}\sqrt{\left(1-m_{\vec{k}+\vec{q}}\right)m_{\vec{k}}\left(n_{-\vec{q}}+1\right)} = \sqrt{\left(1-m_{\vec{k}+\vec{q}}\right)m_{\vec{k}}\left(n_{-\vec{q}}+1\right)} = \sqrt{n_{-\vec{q}}+1}, \quad (55)$$

となる。従って、(53)式は、

$$\Delta U_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}} = -i\overline{U_{atom}}\sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\vec{q}}}}\vec{q}\left(\sqrt{n_{\vec{q}}}+\sqrt{n_{-\vec{q}}+1}\right) \equiv \Delta U^{(1)}+\Delta U^{(2)}, \quad (56)$$

となる。よって、フェルミの黄金則より弾性散乱の(7)式は

$$\begin{aligned} P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}} &= \frac{2\pi}{\hbar}\left\{\left|\Delta U^{(1)}\right|^2\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+\left|\Delta U^{(2)}\right|^2\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{-\vec{q}}\right)\right\} \\ &= \frac{\pi\overline{U_{atom}}^2}{NM\omega_{\vec{q}}}|\vec{q}|^2\left\{n_{\vec{q}}\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+\left(n_{-\vec{q}}+1\right)\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{-\vec{q}}\right)\right\} \\ &= \frac{\pi\overline{U_{atom}}^2}{NM\omega_{\vec{q}}}|\vec{q}|^2\left\{n_{\vec{q}}\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+\left(n_{\vec{q}}+1\right)\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\} \\ &\equiv P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}+P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(2)}, \quad (57) \end{aligned}$$

となる。途中で$\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}$, $n_{\vec{q}} = n_{-\vec{q}}$,を使った。また、下記の波数の置き換えをすると、

$$\overrightarrow{q'} \equiv -\vec{q}, \qquad \overrightarrow{k'} \equiv \vec{k}+\vec{q} = \vec{k}-\overrightarrow{q'},$$

$$\begin{aligned} P_{\overrightarrow{k'},\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}} &= \frac{\pi\overline{U_{atom}}^2}{NM\omega_{-\overrightarrow{q'}}}\left|-\overrightarrow{q'}\right|^2\left\{n_{-\overrightarrow{q'}}\delta\left(\epsilon_{\overrightarrow{k'}}-\epsilon_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}-\hbar\omega_{-\overrightarrow{q'}}\right)+\left(n_{-\overrightarrow{q'}}+1\right)\delta\left(\epsilon_{\overrightarrow{k'}}-\epsilon_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}+\hbar\omega_{-\overrightarrow{q'}}\right)\right\} \\ &= \frac{\pi\overline{U_{atom}}^2}{NM\omega_{\overrightarrow{q'}}}\left|\overrightarrow{q'}\right|^2\left\{n_{\overrightarrow{q'}}\delta\left(\epsilon_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}-\epsilon_{\overrightarrow{k'}}+\hbar\omega_{\overrightarrow{q'}}\right)+\left(n_{\overrightarrow{q'}}+1\right)\delta\left(\epsilon_{\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}-\epsilon_{\overrightarrow{k'}}-\hbar\omega_{\overrightarrow{q'}}\right)\right\} \\ &\equiv P_{\overrightarrow{k'},\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}{}^{(2)}+P_{\overrightarrow{k'},\overrightarrow{k'}+\overrightarrow{q'}}{}^{(1)}, \qquad (58) \end{aligned}$$

となる。途中で$\delta(x) = \delta(-x)$を用いた。一方、平衡状態ではフォノンを吸収して$\vec{k}$から$\vec{k}+\vec{q}$へ遷移する確率と、フォノンを放出して$\vec{k}+\vec{q}$から$\vec{k}$へ戻る確率は等しいので、

$$f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)} = \left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(1)}, \qquad (59a)$$

$$\left[f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}n_{\vec{q}}-\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\left(n_{\vec{q}}+1\right)\right]\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right) = 0,$$

$$\left[f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}n_{\vec{q}}-\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\left(n_{\vec{q}}+1\right)\right]P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)} = 0, \qquad (59b)$$

が成り立つ。同様にフォノンを放出して$\vec{k}$から$\vec{k}+\vec{q}$へ遷移する確率と、フォノンを吸収して$\vec{k}+\vec{q}$から$\vec{k}$へ戻る確率も等しいので、

$$f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(2)} = \left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}, \qquad (59c)$$

$$\left[f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}\left(n_{\vec{q}}+1\right)-\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)n_{\vec{q}}\right]\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right) = 0,$$

$$\left[f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right\}\left(n_{\vec{q}}+1\right)-\left\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\right\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)n_{\vec{q}}\right]P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)} = 0, \qquad (59d)$$

が成り立つ。(59b)と(59d)は、$P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}, P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}$(の中に含まれる$\delta$関数)が零でない場合はその係数が零になるという意味である。従って、$\overrightarrow{k'}$の積分を$\vec{q}$の積分に変換して2次の微小量を無視すると弾性散乱の(9)式は、

$$(2\pi)^3 \frac{\partial f(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial t}\Bigg]_{scatt.} = \iiint d\vec{q}\{1-f(\vec{r},\vec{k},t)\}f(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}} - \iiint d\vec{q}f(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}$$

$$= \iiint d\vec{q}\{1-g(\vec{r},\vec{k},t)-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}\{g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)+f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}$$

$$- \iiint d\vec{q}\{g(\vec{r},\vec{k},t)+f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}\{1-g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}$$

$$\cong \iiint d\vec{q}\left[-g(\vec{r},\vec{k},t)f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)+\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right]\left(P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(1)}+P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}\right)$$

$$- \iiint d\vec{q}\left[g(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}-f_0(\vec{r},\vec{k},t)g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right]\left(P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}+P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(2)}\right)$$

$$= \iiint d\vec{q}\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}f_0(\vec{r},\vec{k},t)\left\{-\frac{g(\vec{r},\vec{k},t)}{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)}+\frac{g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}$$

$$- \iiint d\vec{q}\left[g(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}-f_0(\vec{r},\vec{k},t)g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right]P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}$$

$$+ \iiint d\vec{q}\left[-g(\vec{r},\vec{k},t)f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)+\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\right]P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}$$

$$- \iiint d\vec{q}\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\left\{\frac{g(\vec{r},\vec{k},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}-\frac{g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}\right\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}$$

$$= \iiint d\vec{q}\left\{-\frac{\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}g(\vec{r},\vec{k},t)}{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)}+\frac{f_0(\vec{r},\vec{k},t)g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}$$

$$+ \iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)g(\vec{r},\vec{k},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}+\frac{\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}\right\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}$$

$$= \iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)(n_{\vec{q}}+1)g(\vec{r},\vec{k},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)n_{\vec{q}}}+\frac{f_0(\vec{r},\vec{k},t)g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}$$

$$+ \iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)g(\vec{r},\vec{k},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}+\frac{f_0(\vec{r},\vec{k},t)(n_{\vec{q}}+1)g(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)n_{\vec{q}}}\right\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}, \qquad (60)$$

となる。途中で(59)式を使った。またフェルミ分布関数のエネルギー微分は、

$$\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} = \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\vec{k}}}\frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}+1} = -\frac{1}{k_BT}\frac{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}}{\left(e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}+1\right)^2} = -\frac{1}{k_BT}f_0(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}, \quad (61)$$

となるので(5)式から、

$$g(\vec{r},\vec{k},t) = e\tau_{ph}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial \epsilon_{\vec{k}}}\vec{E}\cdot\vec{v_{\vec{k}}} = \frac{e\hbar\tau_{ph}\vec{E}\cdot\vec{k}}{m_e}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial \epsilon_{\vec{k}}} = -\frac{e\hbar\tau_{ph}\vec{E}\cdot\vec{k}}{m_ek_BT}f_0(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}, \quad (62)$$

となり、(60)式は、

$$\left.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial t}\right]_{scatt.} = \frac{e\hbar\tau_{ph}\vec{E}}{(2\pi)^3 m_e}$$

$$\cdot\left[\iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)(n_{\vec{q}}+1)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)n_{\vec{q}}}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\vec{k}-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k},t)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}}{k_BT}(\vec{k}+\vec{q})\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}\right.$$

$$\left.+\iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\vec{k}-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k},t)(n_{\vec{q}}+1)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}}{k_BTn_{\vec{q}}}(\vec{k}+\vec{q})\right\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}\right]$$

$$=\frac{e\hbar\tau_{ph}\vec{E}}{(2\pi)^3 m_e}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}$$

$$\cdot\left[\iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)(n_{\vec{q}}+1)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)n_{\vec{q}}}\vec{k}+\frac{\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}}{\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}}(\vec{k}+\vec{q})\right\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}\right.$$

$$\left.+\iiint d\vec{q}\left\{-\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\vec{k}+\frac{(n_{\vec{q}}+1)\{1-f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)\}}{\{1-f_0(\vec{r},\vec{k},t)\}n_{\vec{q}}}(\vec{k}+\vec{q})\right\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}\right]$$

$$=\frac{e\hbar\tau_{ph}\vec{E}}{(2\pi)^3 m_e}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}$$

$$\cdot\left[\iiint d\vec{q}\,\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)(n_{\vec{q}}+1)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)n_{\vec{q}}}\{-\vec{k}+(\vec{k}+\vec{q})\}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}\right.$$

$$\left.+\iiint d\vec{q}\,\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\{-\vec{k}+(\vec{k}+\vec{q})\}P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}\right]$$

$$=\frac{e\hbar\tau_{ph}}{(2\pi)^3 m_e}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\left[\iiint d\vec{q}(\vec{E}\cdot\vec{q})\frac{f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\left\{\frac{(n_{\vec{q}}+1)}{n_{\vec{q}}}P_{\vec{k}+\vec{q},\vec{k}}{}^{(1)}+P_{\vec{k},\vec{k}+\vec{q}}{}^{(2)}\right\}\right]$$

$$=\frac{e\hbar\tau_{ph}\pi\overline{U_{atom}}^2}{(2\pi)^3 NMm_e}\frac{\partial f_0(\vec{r},\vec{k},t)}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\left[\iiint d\vec{q}\,\frac{|\vec{q}|^2(\vec{E}\cdot\vec{q})f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{\omega_{\vec{q}}f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\left\{(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right.\right.$$

$$\left.\left.+n_{\vec{q}}\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}\right],\quad(63)$$

となる。途中で(57) (58) (59)式を使った。上式の δ 関数の部分は、$\vec{k}$と$\vec{q}$のなす角を θ とすると、

$$\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}\pm\hbar\omega_{\vec{q}}\right)=\delta\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k}+\vec{q})^2-\frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m}\pm\hbar\omega_{\vec{q}}\right)=\delta\left(\frac{\hbar^2}{m}|\vec{k}||\vec{q}|\cos\theta+\frac{\hbar^2|\vec{q}|^2}{2m}\pm\hbar\omega_{\vec{q}}\right)$$

$$=\delta\left(\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}\pm\hbar\omega_{\vec{q}}\right),\quad(64)$$

となる。ここで、$\vec{k}$方向を z 方向に取り、$\vec{E}$方向をz方向から x 方向へθ_Eだけ傾いた方向とすると、

$$\vec{E}=|\vec{E}|(\sin\theta_E,0,\cos\theta_E),\qquad\vec{q}=|\vec{q}|(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta),$$

$$\vec{E}\cdot\vec{q}=|\vec{E}||\vec{q}|(\sin\theta_E\sin\theta\cos\varphi+\cos\theta_E\cos\theta),\quad(65)$$

となるので、(63)式の積分部分は、

$$
\iiint d\vec{q}\frac{|\vec{q}|^2(\vec{E}\cdot\vec{q})f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{\omega_{\vec{q}}f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\left\{(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+n_{\vec{q}}\delta\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}-\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}
$$

$$
=\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\int_0^{\pi}d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi|\vec{q}|^2\sin\theta\frac{|\vec{q}|^3|\vec{E}|f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{\omega_{\vec{q}}f_0(\vec{r},\vec{k},t)}(\sin\theta_E\sin\theta\cos\varphi
$$

$$
+\cos\theta_E\cos\theta)\left\{(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+n_{\vec{q}}\delta\left(\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}
$$

$$
=2\pi\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta\frac{|\vec{q}|^5|\vec{E}|f_0(\vec{r},\vec{k}+\vec{q},t)}{\omega_{\vec{q}}f_0(\vec{r},\vec{k},t)}\cos\theta_E\cos\theta\left\{(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}\right.\right.
$$

$$
\left.\left.-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)+n_{\vec{q}}\delta\left(\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\},\quad (66)
$$

となる。$|\overrightarrow{q_m}|$は第一ブリルアンゾーンの半径程度の大きさである。これ以降はフェルミ分布関数f_0の変数をエネルギーに変更する。$n_{\vec{q}}$にプランクの分布関数を代入して、 θを下記で定義された新たな変数 s へ変換すると、

$$
\left(s\equiv\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\cos\theta,\qquad ds=-\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}\sin\theta\,d\theta\right)
$$

$$
-2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\int_{\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}}^{-\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}}ds\frac{|\vec{q}|^3f_0\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}\right)}{\omega_{\vec{q}}f_0(\epsilon_{\vec{k}})}s\left\{(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(s+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right.
$$

$$
\left.+n_{\vec{q}}\delta\left(s+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}
$$

$$
=2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\int_{-\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}}^{\frac{2\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|}}ds\frac{|\vec{q}|^3}{\omega_{\vec{q}}f_0(\epsilon_{\vec{k}})}\left\{sf_0\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}\right)(n_{\vec{q}}+1)\delta\left(s+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right.
$$

$$
\left.+sf_0\left(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}\right)n_{\vec{q}}\delta\left(s+\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}
$$

$$
=2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3}{\omega_{\vec{q}}f_0(\epsilon_{\vec{k}})}\left\{f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar\omega_{\vec{q}})(n_{\vec{q}}+1)\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right.
$$

$$
\left.+f_0(\epsilon_{\vec{k}}-\hbar\omega_{\vec{q}})n_{\vec{q}}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}-\hbar\omega_{\vec{q}}\right)\right\}
$$

$$
=2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_0^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^2}{v_pf_0(\epsilon_{\vec{k}})}\left\{\frac{f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{\left(1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}\right)}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar v_p|\vec{q}|\right)\right.
$$

$$
\left.+\frac{f_0(\epsilon_{\vec{k}}-\hbar v_p|\vec{q}|)}{\left(e^{-\frac{\hbar v_p(-|\vec{q}|)}{k_BT}}-1\right)}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}-\hbar v_p|\vec{q}|\right)\right\},\quad (67)
$$

となる。縦波の音響フォノンでは$|\vec{q}|$と$\omega_{\vec{q}}$がほぼ比例するので、フォノン速度をv_pとして$\omega_{\vec{q}} \cong v_p|\vec{q}|$とした。また、$|\vec{q}| > 0$なので、

$$e^{-\frac{\hbar v_p(-|\vec{q}|)}{k_B T}} \geq 1, \quad e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}} < 1, \quad (68)$$

が成り立ち、(67)式の第一項と第二項を一緒にして、

$$2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^2 f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{v_p f_0(\epsilon_{\vec{k}})\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}+\hbar v_p|\vec{q}|\right), \quad (69)$$

となる。 (69)式を(63)式に代入して(6)式を使うと、

$$\frac{-e\hbar}{m_e}\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}|\vec{E}||\vec{k}|\cos\theta_E$$

$$= \frac{e\hbar\tau_{ph}\pi\overline{U_{atom}}^2}{(2\pi)^3 NMm_e}\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\left[2\pi|\vec{E}|\cos\theta_E\left(\frac{|\vec{k}|}{2\epsilon_{\vec{k}}}\right)^2\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^2 f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{v_p f_0(\epsilon_{\vec{k}})\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|^2}{|\vec{k}|^2}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\hbar v_p|\vec{q}|\right)\right],$$

$$\frac{1}{\tau_{ph}}\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}} = \frac{-\overline{U_{atom}}^2}{16\pi NM\epsilon_{\vec{k}}^2}|\vec{k}|\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\left[\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3 f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{v_p f_0(\epsilon_{\vec{k}})\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|^2}+\hbar v_p\right)\right], \quad (70)$$

となる。上式の両辺を$\epsilon_{\vec{k}}$で積分すると、$\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})/\partial\epsilon_{\vec{k}}$が大きな値を持つのはフェルミエネルギー近傍なので、右辺はフェルミ分布関数以外を積分の外に出すと、

$$\frac{1}{\tau_{ph}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}d\epsilon_{\vec{k}} = -\int_{-\infty}^{\infty}d\epsilon_{\vec{k}}\frac{\overline{U_{atom}}^2}{16\pi NM\epsilon_{\vec{k}}^2}|\vec{k}|\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\left[\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3 f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{v_p f_0(\epsilon_{\vec{k}})\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{\epsilon_{\vec{k}}|\vec{q}|}{|\vec{k}|^2}+\hbar v_p\right)\right],$$

$$\frac{1}{\tau_{ph}}\left[f_0(\epsilon_{\vec{k}})\right]_{-\infty}^{\infty} \cong \frac{-\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{k_F}|}{16\pi NME_F^2}\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3}{v_p\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{E_F|\vec{q}|}{|\overrightarrow{k_F}|^2}+\hbar v_p\right)\int_{-\infty}^{\infty}d\epsilon_{\vec{k}}\frac{\partial f_0(\epsilon_{\vec{k}})}{\partial\epsilon_{\vec{k}}}\frac{f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)}{f_0(\epsilon_{\vec{k}})},$$

$$\frac{1}{\tau_{ph}}\left(\frac{1}{e^{\frac{\infty-E_F}{k_B T}}+1}-\frac{1}{e^{\frac{-\infty-E_F}{k_B T}}+1}\right)$$

$$= \frac{\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{k_F}|}{16\pi NME_F^2}\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3}{v_p\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{E_F|\vec{q}|}{|\overrightarrow{k_F}|^2}+\hbar v_p\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_B T}\{1-f_0(\epsilon_{\vec{k}})\}f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|),$$

$$\frac{1}{\tau_{ph}} = -\frac{\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{k_F}|}{16\pi NME_F^2}\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|} d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3}{v_p\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_B T}}\right|}\left(-\frac{E_F|\vec{q}|}{|\overrightarrow{k_F}|^2}+\hbar v_p\right)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_B T}\{1-f_0(\epsilon_{\vec{k}})\}f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|), \quad (71)$$

となる。上式のエネルギー積分部分は、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_BT}\{1-f_0(\epsilon_{\vec{k}})\}f_0(\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_BT}\left(1-\frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}+1}\right)\frac{1}{e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|-E_F}{k_BT}}+1}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_BT}\frac{1}{\left(e^{-\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}+1\right)\left(e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}+\hbar v_p|\vec{q}|-E_F}{k_BT}}+1\right)}=\int_0^{\infty}\frac{ds}{s(s^{-1}+1)\left(se^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}+1\right)}$$

$$=\int_0^{\infty}\frac{ds}{(s+1)\left(se^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}+1\right)}=\int_0^{\infty}\frac{ds}{1-e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\left(\frac{1}{s+1}-\frac{1}{s+e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\right)$$

$$=\frac{1}{1-e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\left[\log(s+1)-\log\left(s+e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}\right)\right]_0^{\infty}=\frac{1}{1-e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\left[\log\left(\frac{s+1}{s+e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\right)\right]_0^{\infty}$$

$$=\frac{-1}{1-e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\log\left(\frac{1}{e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}}\right)=\frac{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}{e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}-1},\quad (72)$$

$$\left(s\equiv e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}},\quad ds=e^{\frac{\epsilon_{\vec{k}}-E_F}{k_BT}}\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_BT}=s\frac{d\epsilon_{\vec{k}}}{k_BT}\right)$$

となるので、(71)式は、

$$\frac{1}{\tau_{ph}}=-\frac{\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{k_F}|}{16\pi NME_F^2}\int_{-|\overrightarrow{q_m}|}^{|\overrightarrow{q_m}|}d|\vec{q}|\frac{|\vec{q}|^3}{v_p\left|1-e^{-\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}\right|}\left(-\frac{E_F|\vec{q}|}{|\overrightarrow{k_F}|^2}+\hbar v_p\right)\frac{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}{e^{\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT}}-1}$$

$$=-\frac{\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{k_F}|}{16\pi NME_F^2}\int_{-\frac{\hbar v_p|\overrightarrow{q_m}|}{k_BT}}^{\frac{\hbar v_p|\overrightarrow{q_m}|}{k_BT}}\frac{dx}{v_p}\left(\frac{k_BT}{\hbar v_p}\right)^3\left(-\left(\frac{k_BT}{\hbar v_p}\right)^2\frac{E_Fx^5}{|\overrightarrow{k_F}|^2}+k_BTx^4\right)\frac{1}{|1-e^{-x}|(e^x-1)},\quad (73)$$

$$\left(x\equiv\frac{\hbar v_p|\vec{q}|}{k_BT},\quad dx=\frac{\hbar v_pd|\vec{q}|}{k_BT}\right)$$

となるが、

$$\frac{x^4}{|1-e^{-x}|(e^x-1)}:\text{奇関数},\qquad \frac{x^5}{|1-e^{-x}|(e^x-1)}:\text{偶関数},\quad (74)$$

なので、$x>0$の領域で偶関数部分を積分して 2 倍すると、

$$\frac{1}{\tau_{ph}}=\frac{\overline{U_{atom}}^2}{8\pi NM|\overrightarrow{k_F}|E_Fv_p}\left(\frac{k_BT}{\hbar v_p}\right)^5\int_0^{\frac{\hbar v_p|\overrightarrow{q_m}|}{k_BT}}dx\frac{x^5}{(1-e^{-x})(e^x-1)},\quad (75)$$

となる。$\hbar\omega_{\vec{q}}>k_B\theta_D$の範囲にある高振動数のフォノンによる散乱は急激に減少するので、$\hbar v_p|\overrightarrow{q_m}|=\hbar\omega_{\overrightarrow{q_m}}=k_B\theta_D$とすると、

$$\frac{1}{\tau_{ph}}=\frac{\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{q_m}|^5}{8\pi NM|\overrightarrow{k_F}|E_Fv_p}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5\int_0^{\frac{\theta_D}{T}}dx\frac{x^5}{(1-e^{-x})(e^x-1)},\quad (76)$$

$$\rho_{ph}=\frac{m_e}{n_ee^2\tau_{ph}}=\frac{m_e\overline{U_{atom}}^2|\overrightarrow{q_m}|^5}{8\pi n_ee^2NM|\overrightarrow{k_F}|E_Fv_p}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^5\int_0^{\frac{\theta_D}{T}}dx\frac{x^5}{(1-e^{-x})(e^x-1)},\quad (77)$$

となる。