

## Bruus, Chap 14 Interacting Electron Gas.

We know the GS energy of Jellium model using 2<sup>nd</sup> perturbation theory. This chapter will derive the GS energy again via Green's Function.

Yukawa-potential, for small  $\alpha \rightarrow 0$

$$W(r-r') = \frac{e_0^2}{|r-r'|} e^{-\alpha|r-r'|}$$

$$W_g = \frac{4\pi e_0^2}{q^2 + \alpha^2}$$

to ensure finite integrals  $W_g \neq \infty$  for a substitution of pure long-range coloumb potential.

However, when  $\alpha \rightarrow 0$ , 2<sup>nd</sup> perturbation also gives :

$$E^{(2)} = \int dq \cdot q^2 \cdot \frac{1}{(q^2 + \alpha^2)^2} \cdot \frac{1}{(k_1+q)^2 - (k_2+q)^2} \cdot \sum_{k_1} \Omega(k_1+q, k_1)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \alpha \ln \alpha \sim \infty$$

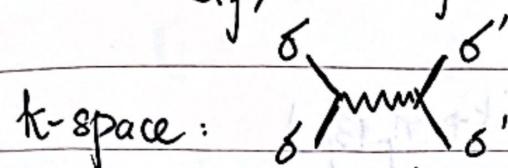
积分系数;  $U^2$ ;  $\propto \frac{1}{q}$ ;  $\langle G_S \rangle_{2\text{pertu}} \propto q$

Later Green's Function shows Yukawa potential  $\alpha$  can become independent after a renormalization of pure coloumb potential which  $\alpha \rightarrow 0$  makes NO INFINITY.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \rightarrow G_1 \xrightarrow{\text{Mastbaum}} \sum \delta_{ij} (k, i, j)$$

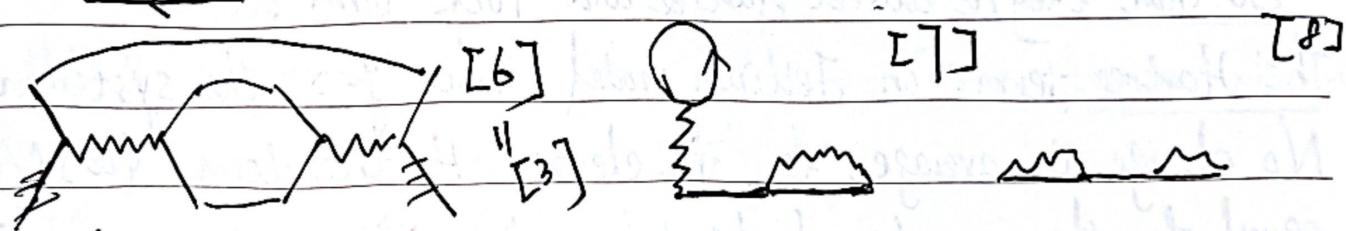
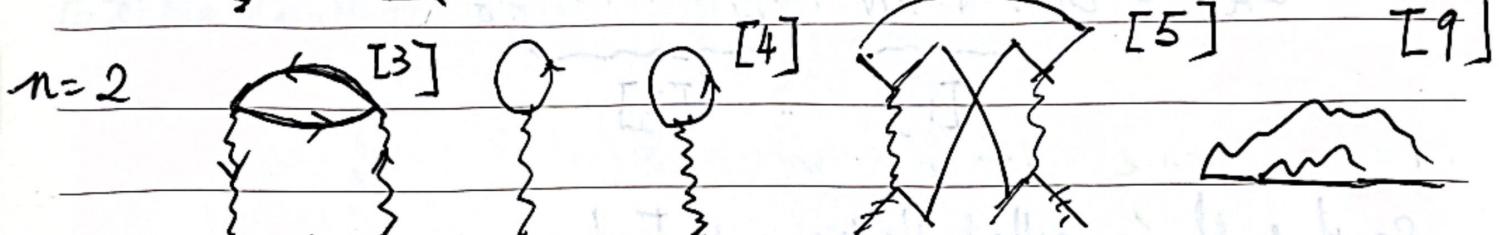
We write out the self-energy of this  $V$  interaction.

$$\mathcal{H}(V) : \sum_{ij} W(n_i n_j) \quad \text{No spin freedom.}$$

in  $k$ -space: 

in Hubbard Model  $\delta = -\delta'$ . Now  $\delta$  can be equal to  $\delta'$

so we shall consider more graphs   $\sum \delta$



Among these graphs, [1], ie Hartree self-energy. Also there are diagrams that can be cut into two pieces by cutting a single fermion line. [4][7][8] which  $[4] = G[1]^2$ ;  $[7] = G[1][2]$

$$\Sigma = [1] + G[1]\bar{G}_1 + G[2]\bar{G}_1 + G[1][2]G + \textcircled{Q}[2]$$

All contributes to the  $\Sigma^{(1)}$  term. We shall not include [4][7][8], others are called the irreducible graphs.

[Different. Connected. Irreducible] Graphs.

[1]  is the Hartree term.  $n_F(\vec{p})$ .

$$\Rightarrow \sum_{\text{Hartree}}(k, ik_n) = \int dp n_F(\vec{p}) = \frac{N}{V}$$

[2]  is the Fock term.

$$\sum_{\text{Fock}}(k, ik_n) = - \int dp W(k-p) n_F(\vec{p}).$$

in Hartree-Fock MF approximation

$$H_{MF} = H_0 + V = \sum_{k\delta} E_{HF} C_k^* C_\delta$$

$$E_{HF} = E_k + V_{(0)} N + \sum_{k'} \underbrace{V(k-k')} \underbrace{n_{k'\delta}}$$

[1]

[2]

So that they're called Hartree and Fock term.

The Hartree term. in Jellium model. when  $q=0$ . the system is No charge in average, ie. the electron Hartree term  $V(0)N$  is equal to the positive background  $-V(0)N$ . which cancels [1].

Q: In high density limit, which diagram among these remaining graphs are most important?

$$\sum^{(n)} = \int_{\pi_n} W^{(n)} G^{(2n-1)} \quad \text{we just assume } k, \text{ All Near Fermi Energy } k_F.$$

$$W^{(n)} \propto k_F^{-2n}$$

$$G^{2n-1} \propto \left( \frac{1}{ik - E_F} \right)^{2n-1} = k^{-2(2n-1)}$$

$$k_F^{-2n-2(2n-1)} = k_F^{-4n+2}$$

$$\text{和分: } (k_F)^{5n} \times (k_F)^{-4n+2} = (k_F)^{n+2}$$

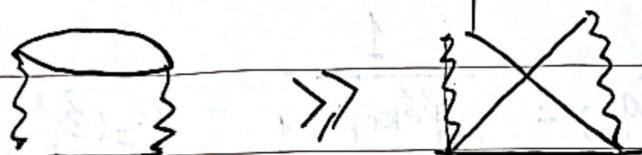
$\sum^{(n+1)}$  相较  $\sum^{(n)}$  大  $k_F$  量级, 从公式:

$$r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a_0 k_F} \quad r_s: \text{电子气电子平均间隙}$$

$$k_F \ll 1 \Rightarrow \sum^{(n+1)} \ll \sum^{(n)}$$

这说明. 计算一阶二阶自能足矣.

自能的发散情况如何? 比如  $n=2$  有  $W(q)W(q)$  项. 会以  $q^{-4}$  发散当  $q \rightarrow 0$ ; 另有  $W(q)W(q-p)$  项在  $q \rightarrow 0$  且  $p \rightarrow 0$  处以  $q^{-4}$  发散. 显然后者能留数末点远小于前者, 即:



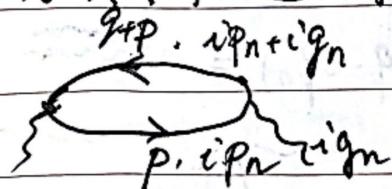
$W(q)W(q) \quad W(q)W(q-p)$

考虑发散奇点最多的图, 为一个 Random Phase Approximation

$$\sum_{\sigma}^{\text{RPA}} (1_F) \approx \text{[diagram]} + \text{[diagram]} + \text{[diagram]} + \dots$$

其中前几项最重要, 但是无穷项末和是否有通项?

Calculate:  $\int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} q_F p$



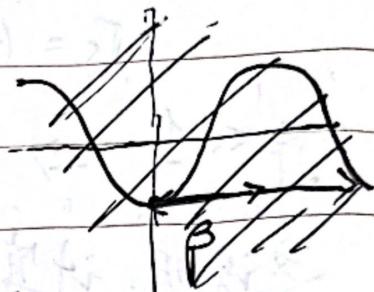
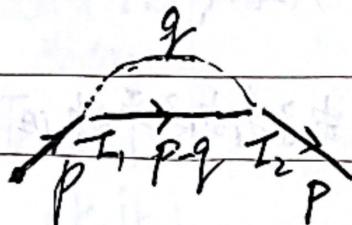
$$= \sum_{P_n} G_C^{(0)}(q, i p_n + i q_n) G_C^{(0)}(p, i p_n) \quad P_n: \text{Fermion Summation.}$$

$$= \sum_{P_n} \frac{1}{i p_n + i q_n - \frac{2}{3} p + q} \cdot \frac{1}{i p_n - \frac{2}{3} p} \cdot \frac{2}{\beta}$$

integral

$$\Rightarrow \chi_0(q, i q_n) = \frac{2}{\beta} \sum_{i p_n} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{i p_n + i q_n - \frac{2}{3} p + q} \cdot \frac{1}{i p_n - \frac{2}{3} p}$$

求和,  $(q \cdot iq_n)$  为玻色求和. 关键是  $G(q, \omega) = \pm G(q, \omega + \beta)$   
若取负为费米求和, 取正为玻色求和. 此例中,



此线可倒置. 即  $G(q^\omega) = G(-q^\omega)$ . 偶函数.

对应.  $\langle C_q(\omega) C_{q'}^*(\omega') \rangle \approx \langle \ell(q) \rangle$  关键是  
 $q$  是如何分布的? 是如  $\omega=0$  比如. 同费米不相容吗? 应.

$q = P_1 - P_2$  大量  $P$ . 同一个  $q$  上分布可大量简并.  $P_1: n_F; P_2: n_F$   
 $P_1 - P_2: n_B \Rightarrow q: \text{Boson}.$

$$\text{Using: } n_F(\beta_{k+q} - iq_n) = \frac{1}{e^{\beta_{k+q}} + 1} = n_F(\beta_{k+q})$$

$q_n: \text{Boson.}$

此求和得到:

$$X_0(q) = 2 \int_{iq_n} \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\beta_p) - n_F(\beta_{p+q})}{vq_n + \beta_p - \beta_{p+q}}$$

$$\text{另外: } \text{今 } W^{RPA}(q \cdot iq_n) = \text{~~~~~}$$

$$= \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \text{~~~~~} + \dots$$

$$= \text{~~~~~} + \text{~~~~~} \times \text{~~~~~}$$

$$\Rightarrow W^{RPA}(q \cdot iq_n) = \frac{\text{~~~~~}}{1 - \text{~~~~~}}$$

$$= \frac{-W(q)}{1 - W(q)X_0(q \cdot iq_n)} \quad X_0 \text{ 已得到} \quad W_q = \frac{4\pi e^2}{q^2 + a^2}$$

when  $a \rightarrow 0$

$$W^{RPA}(q \cdot iq_n) = \frac{4\pi e^2}{q^2 - 4\pi e^2 X_0(q \cdot iq_n)}$$

观察  $W^{RPA}(q \cdot iq_n)$  与  $W_q$  区别。相互作用电子气与  $\text{U}$  作用物理量包括在  $X_0(q \cdot iq_n)$  中了。 $a \rightarrow 0$  无影响。当  $q \rightarrow 0$  时，且  $iq_n = 0 + iq$ ， $W^{RPA}$  类似 Yukawa 势能。 $W^{RPA}(q=0) = 4\pi e^2 / (q^2 + k_s^2)$ ， $k_s$  为 Thomas-Fermi 屏蔽波数。 $k_s^2 = -4\pi e^2 X_0(0,0)$

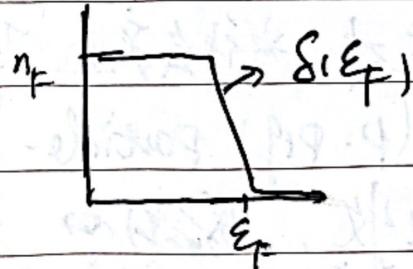
代入  $X_0(q \cdot iq_n)$  形式得到  $X_0(q=0) \xrightarrow{q \rightarrow 0}$

$$= 2 \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \frac{(\delta_{p+q} - \delta_p) \frac{\partial n_F}{\partial p}}{\delta_{p+q} - \delta_p} \approx -\frac{1}{\pi} (\delta_{\epsilon_F})$$

$$\text{即 } W^{RPA}(q=0, 0) = \frac{1}{\pi} (\delta_{\epsilon_F}) \quad k_s^2 = \frac{4}{\pi} \frac{k_F}{a_0}$$

$$= \int dp \cdot \frac{d\delta_p}{d\delta_p} \cdot \frac{\partial n_F}{\partial \delta_p} = \int d\delta_p \left( \frac{\partial n_F}{\partial \delta_p} \right) \cdot \frac{dp}{d\delta_p} \quad \text{when } k_B T \ll \epsilon_F$$

$$= \left. \left( \frac{dp}{d\delta_p} \right) \right|_{\epsilon = \epsilon_F}$$



态密度 即费米面态密度。

从图看出，这就是  $W(q)$ ：~ 被 ( $\text{U} + \text{U}$ ) 作用  $\textcircled{1}$  重叠化的结果： $\frac{1}{q^2} \sim \frac{1}{q^2 + X_0}$ ，自能，即 (onsite  $\text{U}$  +  $\text{U}$ ) 共同作用下的等效每个电子感受到的“势能”。

-般情况下，积出  $d\mu$  定义  $\lambda = \cos\theta$   $X = \frac{q}{2k_F}$   $X_0 = \frac{w}{4\varepsilon_F}$

$$\int \frac{d\mu}{(2\pi)^3} = \int_{R^+} \frac{d\mu}{4\pi^2} p^2 \int_{-1}^1 dx$$

$$\beta_{pq} - \beta_p = \frac{1}{2m} (q^2 - 2pq\lambda)$$

$$\Rightarrow I_m X_0(q, w + iy) = \int_0^{k_F} \frac{dp}{2\pi} p^2 \int_{-1}^1 dx [\gamma_F(\beta_{pq}) - \gamma_F(\beta_p)] \delta(\beta_{pq} - \beta_p - w)$$

$$I_m X_0^R(q, w) = -d(\varepsilon_F) \times \begin{cases} \frac{\pi}{8x} [1 - \frac{(X_0 - x)^2}{x}] & |x - x^2| < X_0 < x + x^2 \\ \frac{\pi}{2} \frac{X_0}{x} & 0 < X_0 < x - x^2 \\ 0 & \text{other } X_0 \geq 0 \end{cases}$$

我们看到之前  $q \rightarrow 0$  即阴阳势抵消情况，而  $X_0$  体系则产生极化。而  $X_0$  即描述极化强度，关注  $X_0 = \int \langle C_{pq}^+(z) C_{pq}(0) \rangle X \langle C_p(z) C_p(0) \rangle$  描述在  $z=0$  产生  $p$  电子与  $p+q$  空穴，电子-空穴对，在  $z=0$  消灭此对。中间  $z \sim 0$  中电子  $p$  与空穴  $p+q$  ( $q \neq 0$ ) 时对应了体系的极化。而  $I_m X_0$  虚部描述耗散，即  $0$  时刻在产生的电子空穴对，为什么产生，即  $z=0$  时刻提供了能量。比如光子  $q$ ，激发  $(p, p+q)$  particle-hole 对，这份能量在  $0 \sim 0$  中逐渐被电子气吸收， $\xrightarrow{\text{吸收}} \text{产生了 } \delta(\beta_{pq} - \beta_p - w)$  几个吸收峰，以及吸收速度（峰的展宽，即  $I_m X_0$ ，即：能量耗散的速度）。( $I_m X_0$  描述峰展宽； $\text{Re } X_0$  描述峰位置)

Calculate Ground State Energy, perturbation theory.

$$H_\lambda = H_0 - \mu N + \lambda W$$

$$\Omega(\lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr}[e^{-\beta(H_0 - \mu N + \lambda W)}] \quad \text{Tr over interaction basis } |\lambda\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Omega(\lambda)}{\partial \lambda} = -\frac{1}{\beta} \frac{\text{Tr}[-\beta W e^{-\beta(H_0 - \mu N + \lambda W)}]}{\text{Tr}[e^{-\beta(H_0 - \mu N + \lambda W)}]} = \langle \lambda W \rangle_\lambda$$

$$\Rightarrow \Omega(1) - \Omega(0) = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda W \rangle_\lambda$$

$\Omega(\lambda)$  实际上就是亥姆霍兹自由能  $F = U - TS - \mu N = T \ln Z$

当  $T \rightarrow 0$ ,  $F = U - \mu N$  全是基态, 内能即基态能量  $\Omega(\lambda=0)$  即  $H_0$  基态能量去.  $\Omega(\lambda=1)$  即  $H$  基态能量所求值.  $dS = \frac{1}{T}(dU - \lambda d\mu)$

$$F = U - TS = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} - T K (\ln Z - \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}) = \frac{1}{\beta} K \ln Z - \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$= -KT \ln Z \text{ 比算 } U \text{ 简单. 不用 } (\partial \beta).$$

$$\Rightarrow E = E_0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda W \rangle_\lambda \quad \text{其中 } \langle \lambda W \rangle_\lambda = -\frac{1}{\beta} \frac{\text{Tr}[-\beta W e^{-\beta H}]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}$$

Calculate  $\langle \lambda W \rangle_\lambda$  已知:

$$\textcircled{1} \text{ 海森堡方程: } H = \sum_y \epsilon_y a_y^\dagger a_y + \frac{1}{2} \sum_{y,y'} q \sqrt{q} a_{y,q}^\dagger a_{y,q}^\dagger a_{y',q} a_{y',q}$$

$$\dot{a}_y(t) = i[H, a_y(t)]$$

$$= -i \epsilon_y a_y(t) + \frac{i}{2} \sum_{y,y'} q \left[ a_{y,q}^\dagger(t) a_{y',q}^\dagger(t), a_{y',q} \right] a_{y,(t)} a_{y,(t)}$$

$$\textcircled{2} -\partial_I G(y_I, y_I') = \delta_{(I-I')} \delta_{yy'} + \langle T_I \{ [H, G_I] C_I, C_{I'}^\dagger \} \rangle$$

equations of motion.

$$\Rightarrow -\partial_I G_I(k, I) = \delta(I) + \langle T_I [H_\lambda, C_{k\delta}] (I) \times C_{k\delta}^\dagger \rangle_\lambda$$

$$-\partial_z - \partial_z g_\sigma^\lambda(k, z) = \delta(z) + 3_k g_\sigma^\lambda(k, z) - 2 \sum_{k' q} \frac{1}{2} W(q) \times \\ \left\langle T_z C_{k' q'(z)} C_{k' q'(z)} C_{k' q'(z)} C_{k' q'(z)}^+ \right\rangle \rightarrow$$

令  $T \rightarrow 0 = -\eta$  后面一项就是  $\langle \lambda w \rangle_\lambda$

$$\text{而 } \partial_z g_\sigma^\lambda(k, z) = \partial_z \frac{1}{\beta} \sum_{ikn} g_\sigma^\lambda(k, ikn) e^{iknz} = \frac{1}{\beta} \sum_{ikn} (ikn) g_\sigma^\lambda(k, ikn) \\ \times e^{iknz}.$$

$$\text{并且 } \delta(z) = \frac{1}{\beta} \sum_{ikn} e^{iknz}$$

$$\text{原式即: } \frac{1}{\beta} \sum_{ikn} (ikn - 3_k) g_\sigma^\lambda(k, ikn) e^{iknz} = \frac{1}{\beta} \sum_{ikn} e^{iknz} + 2 \langle \lambda w \rangle_\lambda$$

$$\text{利用: } (ikn - 3_k) g_\sigma^\lambda(k, ikn) - 1$$

$$= (ikn - 3_k) g_\sigma^\lambda(k, ikn) - (g_\sigma^\lambda(k, ikn))^{-1} (g_\sigma^\lambda(k, ikn))$$

$$\text{其中: } [g_\sigma^\lambda(k, ikn)]^{-1} = ikn - 3_k - \sum_\sigma^\lambda(k, ikn).$$

$$\text{即: } \sum_\sigma^\lambda(k, ikn) g_\sigma^\lambda(k, ikn)$$

$$\Rightarrow \langle \lambda w \rangle_\lambda = \frac{1}{2\beta V} \sum_{ikn} \sum_{k'} g_\sigma^\lambda(k, ikn) \sum_\sigma^\lambda(k, ikn) e^{iknz}$$

其中: RPA 方法计算过自能, 做  $\eta = 2$  近似

$$\sum_\sigma^\lambda = W_{RPA} + \begin{matrix} \text{1阶余下自能, 2阶余下自能} \\ [2] + [5] + [9] \end{matrix}$$

$$g_\sigma^\lambda \approx \underbrace{g(0)}_{\text{基态}} + \underbrace{\sum_\sigma^\lambda}_{g(0)} \cdot \sum_\sigma^\lambda$$

方法: 计算 frequency summation, 得到  $\langle \lambda w \rangle_\lambda$ , 而,

$$E = E_0 + \lim_{T \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda w \rangle_\lambda$$

最终得到了基态能量  $\log(k_S)$  正比.  $k_S = \frac{1}{T_{\text{Thomas-Fermi}}} \text{ R}^2$ .

# Electronic properties of interacting electron gas.

the Coulomb potential, as discussed above, will be screened. Also the  $\varphi_{ext}$  external potential will be screened similarly. that is, electrons may not feel  $\varphi_{ext}$  directly.

关键的物理量有(电导  $\delta$ , 极化率  $\chi$ ) 外均  $\varphi_{ext}$ , 诱导电荷密度  $\rho_{ind}$ , 回顾之前做法, 涨落-耗散定理描述的就是:

$$I_m(G^R_{yy}(w)) = -f(w)(-i) G^>_{yy}(w).$$

or: 经典角度.  $E(q) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \frac{\rho_{ind}(q)}{\varphi_{tot}(q)}$

or: 电子动. 离子不动  $E(q, w) = 1 + i \frac{4\pi \delta(q, w)}{w}$

因为:

$$E \cdot \varphi_{tot} = \varphi_{ext}. \quad \varphi_{tot} = \varphi_{ext} + \varphi_{ind}. \quad \varphi_{ind} = \int \rho_{ind}(r) V(r)$$

电导性质因此可由外均  $\varphi_{ext}$  引导出  $\rho_{ind}$  产生  $\delta(q, w)$  or  $E(q)$  改变来判定, 或者之前 Lindhard formula 用线性响应给出电导 or  $\rho_{ind}/\varphi_{tot}$  一般之形式.

$$E(q, w) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \cdot 2e^2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{f_{k+q/2} - f_{k-q/2}}{3_{k+q/2}^2 - 3_{k-q/2}^2 + w + i_0^+}$$

三 总之这是基于 Linear Response, ~~更高级的~~? 至少我们

知道:  $\rho_{ind}(q, w) = \frac{1}{e^2} W(q) [-e \rho_{ind}(q, w)]$

Kubo formula 能够给出:

$$-e \rho_{ind}(q, w) = (-e^2) C_{pp}^R(q, -q, w) \varphi_{ext}(q, w).$$

回顾:  $J = \delta E \sim \varphi = \chi E$

$\delta: C_{pp}$  流-流  $\Rightarrow$  电荷-电荷关联函数

$\phi_{ext} \rightarrow \phi_{ind} \rightarrow \phi_{tot}$

$$\phi_{ind}/\phi_{tot} = \epsilon$$

C 描述就是响应.  $E_{ext} \cdot C = J_{ind}$   $\phi_{ext} \cdot C = \phi_{ind}$

由三给出:

$$\phi_{ind} = W(q) \cdot X^R(q \cdot w) \cdot \phi_{ext}(q \cdot w)$$

$$X^R(q \cdot t - t') = C_{pp}^R(qt, qt') = -i\Theta(t-t') \frac{1}{V} \langle [p(qt), p(-q, t')] \rangle_{\hat{H}}$$

$\hat{H}: H_0 + W$  但忽略  $H' = \int dr [-e p(r)] \phi_{ext}(r)$  作用  
无外场作用之 Basis

因此 得到: , 因为  $\phi_{tot} = \epsilon \phi_{ext}$

$$\phi_{tot} = [1 + W(q) X^R(q \cdot w)] \phi_{ext}(q \cdot w)$$

$$E(q \cdot w) = \frac{1}{1 + W(q) X^R(q \cdot w)}$$

这就是我们要解的电学性质.

$$\text{计算: } X(q \cdot I) = -\frac{1}{V} \langle T_I \langle \ell(q \cdot I) \ell(-q \cdot 0) \rangle \rangle_{\hat{H}}$$

$$= \frac{1}{V} \left[ -\langle \ell_{q=0} \rangle_{\hat{H}} \langle \ell_{q=0} \rangle_{\hat{H}} + \sum_{q \neq 0} \sum_{pk\sigma} \langle T_I C_{p\sigma}^{(I)} C_{k\sigma} C_{p\sigma}^+ C_{k\sigma}^+ \rangle_{\hat{H}} \right]$$

Connected Graphs.

电中性:  $\langle \ell_{q=0} \rangle_{\hat{H}} = 0$  (Jellium  $q=0$ )

$$X(q \cdot I) \sim \langle T_I C_{p\sigma(I)}^+ C_{p\sigma(I)} C_{k\sigma} C_{k\sigma}^+ \rangle_{\hat{H}}$$

画图:

$$\begin{array}{c} + \\ \cdot P \\ - \\ K \end{array}$$

outside  $\mathcal{G}^{(0)}(k)$   $\delta = \delta' \bar{\gamma}_5$ .

$$\begin{array}{c} + \\ \cdot K' \\ - \\ P+q \\ + \\ K+q \end{array}$$

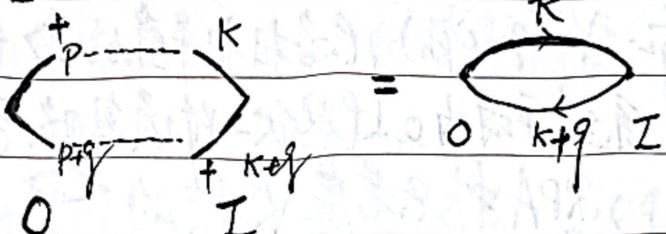
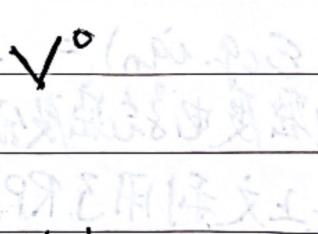
双粒子 Green's Function:  $\langle \rangle_{\hat{H}} \Rightarrow |\rangle_{\hat{H}} = | \text{particle 1, particle 2} \rangle_{\hat{H}}$ 

1阶  $C_P^+ C_{P+q} C_K^- C_{K+q}^+$

2阶  $\frac{C_P^+ C_{P+q}}{1} \frac{C_K^- C_{K+q}^+}{2}$

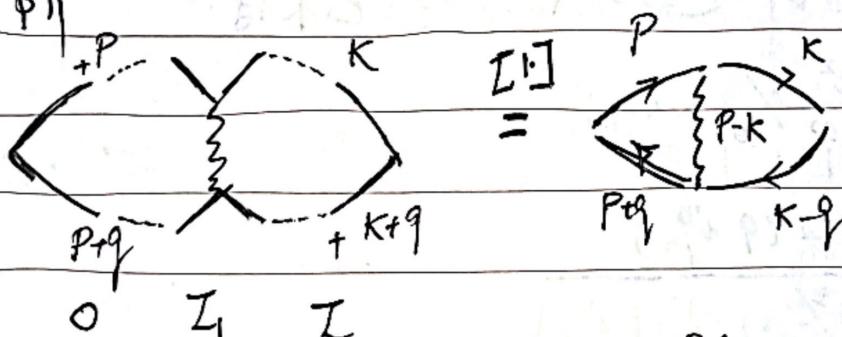
$\hat{1} \hat{V} \hat{2}$

3阶  $\hat{1} \hat{V}(1) \hat{V}(2) \hat{2}$

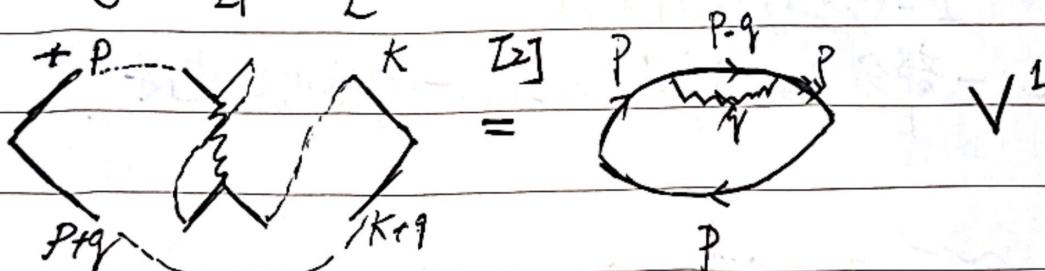
1阶:   $=$  

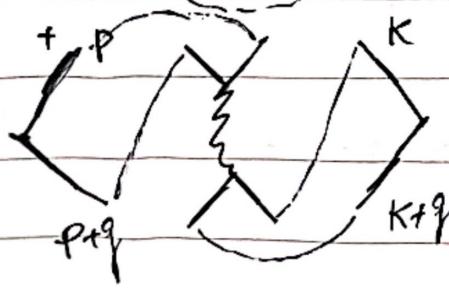
这就是  $\ell q$  代替 Boson 类型图. 会回来. 不像单粒子单箭头  $\leftarrow \rightarrow$ 

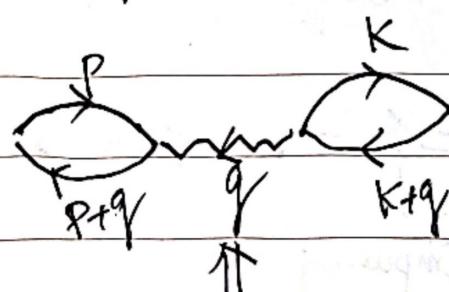
2阶



$O \quad I_1 \quad I_2$







Not irreducible  $= [V^0]^2 N_q$

DATE  
定义  $\chi^{irr}$  为所有 irreducible graphs.

则有

$$\chi = \langle \square \rangle$$

亦有:  $\chi = \chi^{irr} + \chi_{\text{non-irr}}^{irr} + \chi_{\text{non-irr}}^{irr} \chi_{\text{non-irr}}^{irr} \chi^{irr}$

irreducible: 一刀切, 不用  $\chi^{irr}$  和所有切的一刀组成

$$\Rightarrow -X(\vec{q}) = \frac{-X^{irr}(\vec{q})}{1 - W(\vec{q}) X^{irr}(\vec{q})}$$

$E$ - $X$  系数(上页)

$$\Rightarrow E(q, iq_n) = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \cdot \chi^{irr}(q, iq_n), \quad \text{各相干叠加} \gg P^{(2)}$$

高密度电流密度分布无序, 系综平均为 0. (起伏二阶项忽略, 可用 RPA)

在上文利用了 RPA 方法, RPA 中, 只考虑  $V^0$  阶的

$V^{(1)}$  阶  $\text{O}_\infty = [V^0]^2$  重复, 而  $\square$ .  $\square$  因据之前的讨论又远小于  $\text{O}_\infty$ , 故皆不计.  $\Leftrightarrow = X_0(q, iq_n)$  已求得.

$$E_{\text{RPA}}^{(q, iq_n)} = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \cdot X_0(q, iq_n).$$

$$\phi_{\text{tot}}^{\text{RPA}}(q, iq_n) = \frac{\phi_{\text{ext}}(q, iq_n)}{1 - (e^2/\epsilon_0 q^2) \cdot X_0(q, iq_n)}$$

总共 tot 两部分, 一部分  $\phi_{\text{ext}}$  作用 screen, 一部分内部电子间自行 screen:

$$W^{\text{RPA}}(q, iq_n) = \text{O}_\infty = \text{O}_{\text{int}} + \text{O}_{\text{ext}} + \dots$$

$$U^{\text{RPA}}(q) = \bullet - \star = \bullet - \star = \text{O}_\infty - \star + \dots$$

外向

impurity  
outside.

计算: Calculate out  $\epsilon^{RPA}(q, iq_n)$ .

when  $k_B T \ll \epsilon_F$ ;  $q \ll k_F$ ;  $V_F q \ll \omega$ . 算出  $X_0$ , Fermi 球

$$\epsilon^{RPA}(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega} \left[ 1 + \frac{3}{5} \left( \frac{q V_F}{\omega} \right)^2 \right]$$

where  $V_F = k_F/m$ ;  $3\pi^2 n = k_F^3$   $\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}}$

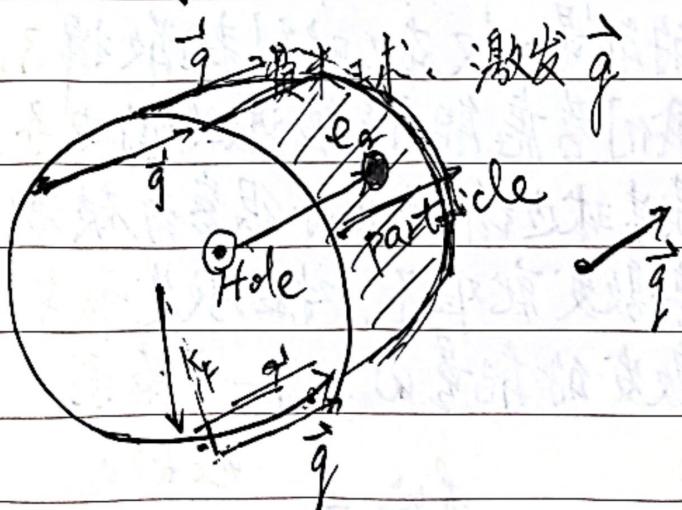
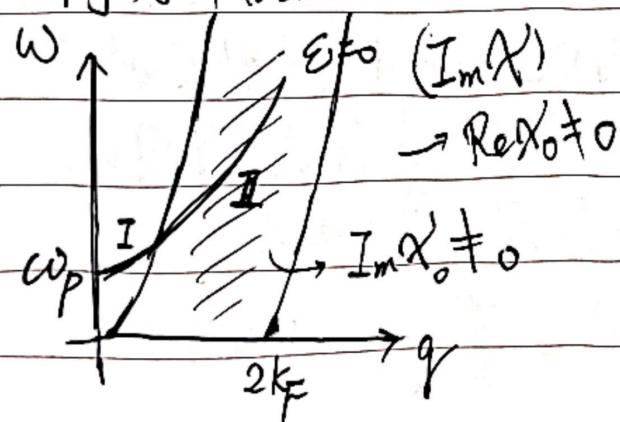
$\epsilon^{RPA}(q, \omega)$ :  $\omega$ : 外场振动角频率. 实际上  $\omega > \omega_p$ ,  $\omega_p$  称等离子体频率.  
大于之金属变得透明,  $\omega \approx 10^{16}$  Hz. 紫外谱线,  
 $\omega$  大, 外场如实际振动.;  $q$  小, 长波, 整体受到  $+A$  与  $-A$  的外场.  
局部不见外场差异;  $T$  小, 仅等离激发.

Plasma oscillation: when  $\epsilon(q, \omega) = 0$ .

$$\omega(q) \approx \omega_p + \frac{3}{10} \frac{V_F^2}{\omega_p} q^2 \quad (Im \epsilon = 0)$$

when  $\omega$  很大,  $\epsilon$  中  $Im X = 0$ . 无耗散 为一种集体振荡.  $\epsilon = 0$ .  
透明 ( $\omega(q) > \omega_p$ ) 时即如此会发生. 此时,

何为 Plasmon?

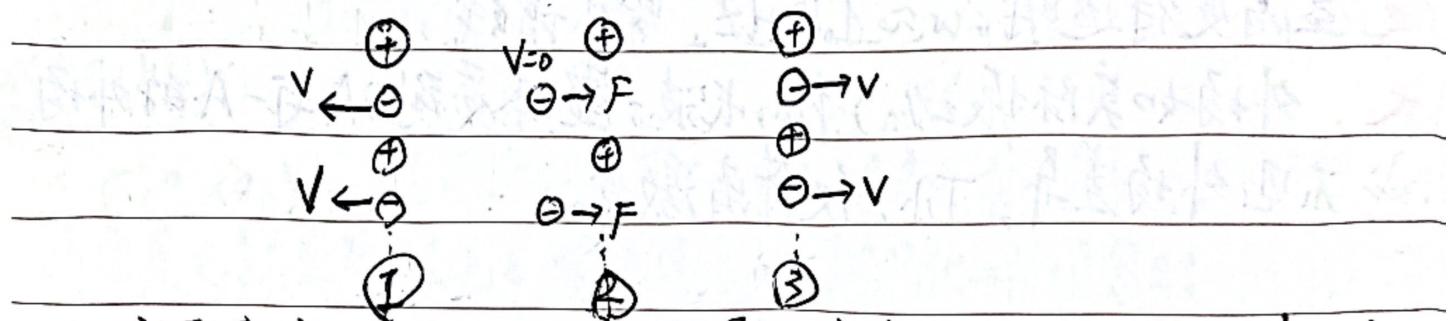


物理: 相互作用电子是如何激发的?

A: 导离激发, 工区中有集体振荡.

相互作用电子气由电子-e. 电子-离子相互作用以及阳极组在电子-离子相互作用中，离子看作外均  $\phi_{ext}$  激发电子， $\phi_{ext} = \epsilon$  电子-离子作用结果是即使离子均匀分布， $\phi_{ext} = 0$ ，如果  $\epsilon = 0$   $\phi_{tot}$  还能存在。说明电子能够通过虚作用自发地激发（比如涨落），产生一个本征的激发模式。上文已经求解出了  $\psi(q, \omega)$  的解， $\omega = \omega_p + \lambda q^2$  为此模式的色散关系。

经典来看，此激发如图：

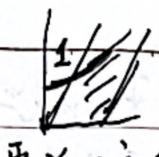


就是受到扰动的电子有了能量  $V$  在离子周围能够做简谐运动的过程，有特征频率  $\omega_p$ 。

从费米球上看，激发虚过程产生电子-空穴对，通过给出激发  $q$ ，使系统产生粒子-空穴对的极化  $\chi_0 = \langle C_{p,q}^+(z) C_{p,q}(0) \rangle - \langle C_p(z) C_p^+(0) \rangle$  并在工时刻消失（上图 2~3 过程）。涨落带来的能量  $V$  又在工时刻耗散掉了，重新被电子气所吸收。我们考虑能够被激发的电子，对应激发电量  $q$ ，如上面的图，费米球边缘的电子很容易被激发而中心的电子对于给定的  $q$  要激发就难了，对应激发形成了上页图中的包络面，而因此激发的能量  $\omega$  也有一个范围  $(\omega_0 + \omega_q)$  向最大激发。

$$\omega_q = \frac{\hbar^2 k^2 q^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{m} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{q}^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{q})$$

$$\omega_q \in \left[ \frac{1}{2m} q^2 - V_F q, \frac{1}{2m} q^2 + V_F q \right] \text{(近似)}$$

这个  $\omega_q$  范围就是上页左图  阴影区域，计算  $I_m X_0$ ，此区域中有  $I_m X_0 \neq 0$ 。我们同时要关注能够被激发本征模式  $\omega_q$ :  $\omega_q = \omega_p + Aq^2$  为圆中的线，那么等离激元激发  $I_m X_0 \neq 0$ 。耗散使得此过程无法持续，而被电子气重新吸收。

仅仅有这么一小段  $I_m X_0 = 0$ ，这说明一旦某个热涨落使得振荡开始，它就不会停止了，一直会振荡下去。从费米球角度看  $I_m X_0 \neq 0$  范围真正有电子被激发到了费米球外，产生  $e_g, e_d$  激发的电子波与空穴密度分布，这是激发态不稳定终会落回来。而  $I_m X_0 = 0$  此小段“激发”会全在费米球内，你就看作改变费米球形状变化或是电子重排，没有激发态。因此时以日计，每当有热涨落引发就停不下来，终所有电子都会参与这一振荡的过程，称为集体振荡。

此结论类似电动力学。 $\omega < \omega_q$ ，入射电磁波被金属衰减；入射频率  $\omega > \omega_q$ ，金属“变透明”，而现在知道  $\omega$  更大甚至能量足以把金属打上激发态，那自然会衰减，称为 Landau damping。

Plasmon 就是抗拒粒子空穴激发而去做粒子空穴重排的极化过程。

## Chapter 15. Brus. Fermi-Liquid

所谓准粒子基于绝热近似，要求其弛豫时间  $\tau_0 = e^{-\gamma}$  变化极为缓慢  $\gamma \gg \Gamma^{-1}$  与弛豫时间，即电子受散射的平均时间间隔，在相当长的范围不会发生。即处于原本的离散态而且其能量要远小于体系能量以避开热激发，亦

$$\Gamma^{-1} \ll \gamma \ll k_B T$$

在此情况下才可将相互作用看作无相互作用的准粒子激发，计算准粒子，计算其受散射平均时长，可以利用 fermi-golden-rule 以及 conductivity 经典定义：

-: Drude Model:  $v = 0$ .

$$-(-e)E + \frac{mv}{\tau} = 0 \Rightarrow \sigma = \frac{ne^2}{m}$$

-: Fermi-Golden Rule. scattering velocity defined as :

$$T_{KK'} = 2\pi / \langle K | V | K' \rangle | \int dr e^{i(K-K')r} U(r) |^2 \delta(\vec{z}_{K'} - \vec{z}_K)$$

$$V = \sum_i U(r - R_i) \quad i: \text{impurity positions.}$$

得到散射振幅， $n_{\text{imp}}$ : number of impurities.

$$T_{KK'} = 2\pi \frac{n_{\text{imp}}}{VV} \left| \int dr e^{i(K-K')r} U(r) \right|^2 \delta(\vec{z}_{K'} - \vec{z}_K)$$

$$= \frac{n_{\text{imp}}}{V} W_{KK'}$$

三. 粒子数守恒  $n_K$  变化 = 走去  $K'$  的 + 从  $K'$  来的。

$$(\partial_t n_K) = - \frac{n_{\text{imp}}}{V} \sum_{K'} [n_K^*(1-n_{K'}) W_{KK'} - n_{K'}^*(1-n_{K'}) W_{K'K}]$$

$$\Rightarrow (\partial_t n_K) + \vec{k} \cdot \nabla_K n_K + V_K \nabla_r n_K = - \frac{n_{\text{imp}}}{V} \sum_{K'} W_{KK'} (n_K - n_{K'})$$

$[ne^{i\omega t}]$  中线性响应.  $T \rightarrow 0$ . 得到.

$$-c\omega n_k + eE_F \hat{F} \delta(k_F - k) = -n^{imp}/\sqrt{\sum_{k'} W_{kk'} (n_{k'} - n_k)}.$$

定义  $n_k$  的试探解.

$$n_k^{(w)} = \frac{1}{c\omega - \frac{1}{T}} eE_F \hat{F} \delta(k_F - k).$$

类似  $(in)(Im n)$  寿命为虚部. 代入原方程:

$$T^{-1} = \frac{n^{imp}}{\sqrt{\sum_{k' \neq k_F} W_{kk'} (1 - \cos \theta_{kk'})}}$$

利用  $\vec{j} = \vec{e} \vec{E} = -\frac{2e}{V} \sum n_k v_k$  得到:  $k_F^3 / 3\pi^2 \propto N$ .

$$\delta = \delta_0 \frac{1}{1 - i\omega T} \quad \delta_0 = \frac{ne^2}{m}$$

因此我们看到电阻  $\rho \propto T^{-1} \propto [n^{imp}]^\frac{1}{2}$ :  $\sum W_{kk'} (1 - \cos \theta_{kk'})$

电阻( $T$ 小)正比  $T^5$ :  $n \propto T^3$  声子模型  $T^5 \propto T^2 \times T^3 = T^5$

高温正比  $T^2$ :  $n \propto T$ , 后面  $\propto T$   $T \cdot T = T^2$  电阻结论可由此推.

因此也可以见到. 低温下,  $T \propto \frac{1}{2}$   $T \rightarrow 0$  几乎无穷寿命.

Actually

$$T^{-1} \propto [d(\varepsilon_F)]^3 \cdot |W|^2 \cdot \frac{3k_B^2}{2}$$

$\delta_K \sim k_B T$  at 小  $T$

从公式  $T^{-1} = \sum W_{kk'} (1 - \cos \theta_{kk'})$  也可以看出.

对  $k$  求和.

$$T^2$$

准粒子

散射概率多少?

$$Y_h = |\langle \text{准粒子} | W | k_e, k_h \rangle|^2$$

$$\text{积分: } \sum_{k_1, k_2, k_3} d\varepsilon_{e_1} d\varepsilon_{e_2} d\varepsilon_{e_3} = [d(\varepsilon_F)]^3 \int d\varepsilon_{e_1} d\varepsilon_{e_2} d\varepsilon_{e_3} \downarrow \text{能守}$$

积分梯度变换出

$$\varepsilon_{e_1} + \varepsilon_{e_2} + \varepsilon_{e_3} = \varepsilon \quad \delta\text{-function}$$

$$= |T d(\varepsilon_F)|^3 \varepsilon^2$$

$$= \int \varepsilon d\varepsilon \int \varepsilon d\varepsilon$$

因此看到准粒子寿命工有  $\Gamma^{-1} \propto [d(\epsilon_F)]^3$  (积分要求)  $\times \epsilon^2$  (能量)  
 现在我们求准粒子的 Green's Function. 若其和自由费米子 Green's Function  $G^{(0)}$  类似, 准粒子近似则是有效的。

$$G_{c(k\sigma, \omega)}^{R(0)} = \frac{1}{\omega - \beta_K + i\gamma} \quad i\omega \rightarrow \omega + i\gamma$$

$$G_{c(k\sigma, \omega)}^R = \frac{1}{\omega - \beta_K - \Sigma_{c(k\sigma, \omega)}^R} \quad (i\gamma) \text{ 归入自能}$$

$$= \frac{1}{\omega - [\beta_K + \operatorname{Re} \Sigma_{c(k\sigma, \omega)}^R] - i[\operatorname{Im} \Sigma_{c(k\sigma, \omega)}^R]}$$

谱激发  $A(k, \omega)$

$$A(k, \omega) = 2\pi Z \delta(\omega - \beta_K) + A'(k, \omega)$$

$Z$  为准粒子权重  $\int A(k, \omega) d\omega = 1 - Z$   $\delta$ -function 为自由粒子激发, 而  $A'$  多体激发有展宽. 自能虚部代表了准粒子的寿命. 定义.

$$\Gamma_K^{-1} = -2Z \operatorname{Im} \Sigma_{c(k, \omega)}^R \quad \text{峰展宽工} \quad \operatorname{Im} \Sigma \rightarrow 0$$

即  $G^R \rightarrow G^{(0)}$  在重叠化质量之

准粒子质量被重叠化: 即准粒子合适.

$$\beta_K^{\sim} = \beta_K + \operatorname{Re} \Sigma(k\omega) \text{ 由: } \beta = \frac{k^2}{2m}$$

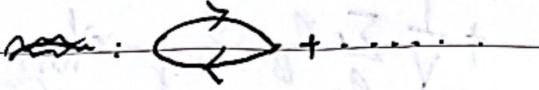
可定义:

$$\frac{m}{m^*} = Z \left( 1 + \frac{m}{k_F} \partial_k \operatorname{Re} \Sigma(k_0) \Big|_{K=k_F} \right)$$

若  $\operatorname{Im} \Sigma \rightarrow 0$ :

$$G_1 = \frac{1}{\omega - \beta_K + i\gamma} \underset{\gamma \rightarrow 0}{\approx} G^{(0)} \quad \beta_K \rightarrow \beta_K^{\sim}$$

现在就要表明:  $I_m \Sigma$  会衰减到零, 引出一个重整化质量 ( $R \Sigma$ ) 之后的准粒子图景. 高密度下仍可用 RPA 近似: (见上一章)

RPA:  $\frac{W}{g^{(0)}} = -\frac{W(q)}{1 - \chi_0 W(q)} \cdot g^{(0)}$  

Def:  $E_{RPA}^{(q, i\omega_n)} = 1 - W(q) \chi_0(q, i\omega_n).$

$$\sum_6^{RPA} c(k, \epsilon k_n) = -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \frac{1}{V} \sum_q \frac{W(q)}{E_{RPA}^{(q, i\omega_n)}} G_C^{(0)}(k+q, \epsilon k_n + i\omega_n)$$

从费曼图 RPA 近似中可以摘出上述自能形式

对  $\omega_n$  做 frequency summation.  $\omega_n$ : Boson.

$$G_C^{(0)}(k+q, \epsilon k_n + i\omega_n) = \frac{1}{ik_n + i\omega_n - \beta_{k+q}} \quad Z_1 = \beta_{k+q} - ik_n.$$

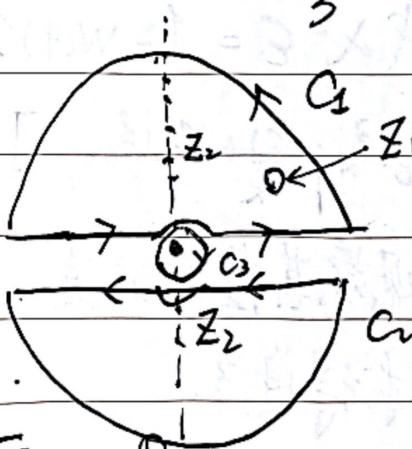
$$n_B(z) \text{ 引入.} \quad Z_2 = i\omega_n$$

$$E_{RPA} = 1 - W(q) \chi_0(q, z) = 0 \quad Z_3 = \text{Real Number.}$$

Contour: 避开实轴:

$$C = C_1 + C_2 + C_3 \text{ 包}$$

其中有:



$$\int C_1 f(z) dz + C_2 f(z) dz = 0 \text{ contour } \bar{\beta}^m.$$

$$\Rightarrow \int C = \int C_1 \text{ 实轴} + C_2 \text{ 实轴} + C_3 = \underset{z=z_1, z_2}{\text{Res}} = \text{Res}_{z=z_2}.$$

$$\text{Res}_{z=z_2} = \sum_6^{RPA} \text{ 已知.}$$

$$\Rightarrow \sum_6^{RPA} = \int \text{ 实轴积分} - \underset{z=z_1}{\text{Res}}$$

$$f(z) = n_B(z) f(i\omega_n)$$

$$= -\frac{1}{V} \sum_q \int_R \frac{dw}{2\pi i} n_B(w) \cdot \frac{W(q)}{\epsilon_{RPA}(q, w)} g^{(w)}_{(k+q, \delta, ik_n + w - ij)}$$

$$+ \frac{1}{V} \sum_q n_B(\beta_{k+q} - ik_n) \frac{W(q)}{\epsilon_{RPA}(q, \beta_{k+q} - ik_n)}$$

取虚部，第一项虚部在：

1

$$ik_n + w - \beta_{k+q}$$

取推迟自能  $ik_n \rightarrow \epsilon + ij$ , 取推迟自能虚部

$$I_m \sum_{RPA}^R c(k, \epsilon) =$$

Math:  $g^{(w)} \rightarrow \delta(\epsilon + w - \beta_{k+q})$  干掉  $dw$  积分.  $n_B(\beta_{k+q} - ik_n) = -n_F(\beta_{k+q})$

$$[\epsilon_{RPA}(q, w + ij)]^\star = \epsilon_{RPA}(q, w - ij)$$

$$\Rightarrow I_m \sum_{RPA}^R c(k, \epsilon) = \frac{1}{V} \sum_q [n_B(\beta_{k+q} - \epsilon) + n_F(\beta_{k+q})] \times I_m \left[ \frac{W(q)}{\epsilon_{RPA}(q, \beta_{k+q} - \epsilon + ij)} \right]$$

利用  $\epsilon_{RPA}$  定义代入  $\epsilon = 1 - W(q) X_0$

$$I_m \sum_{RPA}^R c(k, \epsilon) = \frac{1}{V} \sum_q [n_B(\beta_{k+q} - \epsilon) + n_F(\beta_{k+q})] \times \left[ \frac{W(q)}{\epsilon_{RPA}(q, \beta_{k+q} - \beta_k)} \right]^2 I_m [X_0^R \beta_{k+q} - \beta_k]$$

在这里取  $\epsilon = \beta_k$  观察其虚部的值.

$X_0$ : ↗ 已经求得过了:

$$I_m X_0^R (\beta_{k+q} - \beta_k) = -\frac{2\pi}{V} \sum_{k'} [n_F(\beta_{k'}) - n_F(\beta_{k+q})] \delta(\beta_{k'} - \beta_{k+q} + \beta_{k+q} - \beta_k)$$

最终得到自能虚部也即准粒子寿命倒数形式：在  $\beta_K$  处。

$$\mathcal{I}_K^{-1} = -2 I_m \sum_{RPA}^R (\mathbf{k} \delta \beta_K)$$

$$= -\frac{4\pi}{V^2} \sum_{q K'} \left[ n_B(\beta_{K+q} - \beta_K) + n_F(\beta_{K+q}) \right] \times \left[ n_F(\beta_{K'}) - n_F(\beta_{K'+q}) \right] \\ \times \left| \frac{W(q)}{\epsilon_{RPA}^{R(q)}(\beta_{K+q} - \beta_K)} \right|^2 \delta(\beta_K - \beta_{K+q} - \beta_{K+q} + \beta_K)$$

准粒子  $K$  与各种  $K'$  相撞，每个  $K'$  与它能交换各种动量  $q$ 。此式即能发生所有散射之集大成，受粒子占据数（密度）与交换振幅  $|W(q)|^2$  影响，共同决定发生的时间间隔。

$$T \rightarrow 0 \quad n_F(\epsilon) = \begin{cases} 0 & \text{above fermi surface.} \\ 1 & \text{below fermi surface} \end{cases}$$

上式又等于

$$-n_F(\beta_K) [1 - n_F(\beta_{K+q})] [1 - n_F(\beta_{K-q})] - [1 - n_F(\beta_{K'})] n_F(\beta_{K+q}) n_F(\beta_{K'-q}).$$

Scatter-out term  $T \neq 0$ , non-zero for  $\beta_K > 0$

Scattering in term. non-zero for  $\beta_K < 0$

when  $\beta_K \approx \beta_{K+q}$  弱相互作用散射弱。 $\mathcal{I}^{-1}$  与上文结论相同。

$\mathcal{I}^{-1} = I_m \propto T \rightarrow 0 \quad T \rightarrow \infty$  准粒子准确 Actually. when  $T \rightarrow 0$ .

$$\mathcal{I}_K^{-1} = \frac{\sqrt{3} T^2}{128} W_p \cdot \left( \frac{\beta_K}{\epsilon_F} \right)^2$$

总之：

$$\mathcal{I}_K^{-1} \propto (\beta_K)^2$$

What's the physical properties of a system.

distributed impurities

## Chapter 12 . 如何处理随机分布的杂质体系

### Chapter 16 Brueus: impurity; disorder

杂质随机地分布在体系中，它的势能写作：

$$H = H_0 + V(r)$$

$$V(r) = \sum_{j=1}^{N_{\text{imp}}} U(r - P_j) \quad P_j \text{ is rand number}$$

电子-杂质耦合作为微扰项：

定义

$$U_q \rightarrow U(r - P_j) = \frac{1}{V} \sum_q e^{-iq \cdot P_j} U_q e^{iq \cdot r}$$

$$\Rightarrow G_{k_b k_a}^{(n)} = \left( \sum_{j_1}^{N_{\text{imp}}} \sum_{j_n}^{N_{\text{imp}}} \right) \cdot \frac{1}{V^n} \sum_{k_1 \dots k_{n-1}} e^{-i(c k_b - k_{n-1}) \cdot P_{j_n} + \dots + c k_r - k_a \cdot P_j}$$

$$\cdot G_{k_b}^{(0)} U_{k_b - k_{n-1}} G_{k_{n-1}}^{(0)} \dots U_{k_r - k_a} G_{k_a}^{(0)} \quad (\text{I})$$

杂质自平均 Self-Average

杂质自平均是对杂质位置做平均，ie:

$$\frac{1}{V} \langle G_{k_b k_a} \rangle_{\text{imp}} = \delta_{k_b k_a} \bar{G}_{k_a} \stackrel{\text{①}}{=} \frac{\delta_{k_b k_a}}{N_{\text{system}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{system}}} G_{k_a}^{(\text{system } i)}$$

$$\stackrel{\text{②}}{=} \frac{1}{V} \int dP_1 \frac{1}{V} dP_2 \dots \frac{1}{V} \int dP_{\text{imp}} G_{k_a} \delta_{k_b k_a}$$

对②等号，这就是位置平均  $\bar{V}(r) = \int V(r, P_i) dP_i \cdot \frac{1}{V}$

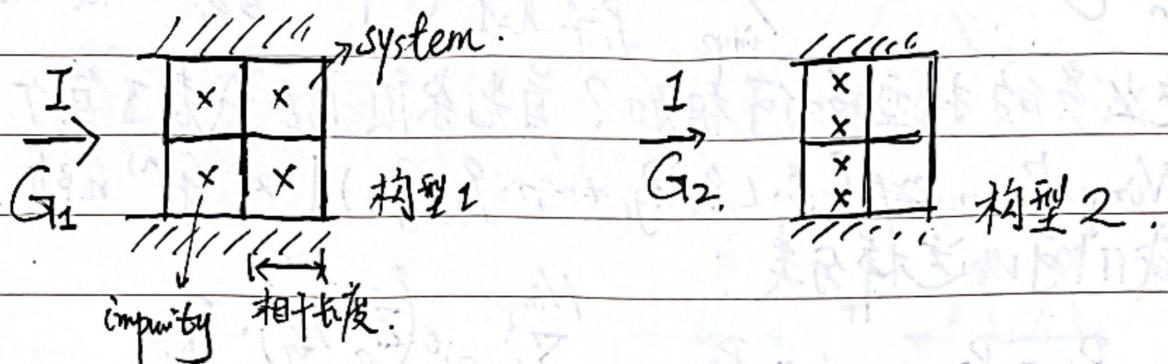
对①等号，我们要问 Green's Function 物理特性是否可做平均，eg:  $\bar{G} = \frac{1}{2} G(P_{\text{构型1}}) + \frac{1}{2} G(P_{\text{构型2}})$  是否代表了两者某种平均的时间演化？ie:  $\bar{G}$  物理特性是否具有可加性？

# ※ 相干长度外 Green's Function 有可加性

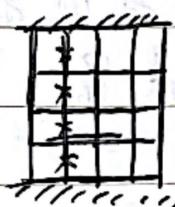
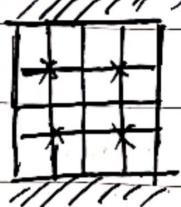
DATE

NOTES

我们知道，物理量空间尺度上有相干特性。随量子涨落（温度）变化。电子在巡游时，受散射而改变相位。在低温时，系统中声子少、电—声耦合少，散射少，相干长度长。此时，杂质自平均不适用。因为 P构型1与 P构型2 杂质之间小于一个相干长度，它们相关。G波有可加性。此时，比如两构型为：



$(G_1 + G_2) \frac{1}{2} = (4 \times 1\text{个格子1个} + 2 \times 1\text{个格子2个}) \times \frac{1}{2}$  有随杂质位置的量子涨落。对应公式(I)，则是  $G^{(n)}$  (代表电导) 高涨落  $\curvearrowright$  电导。而高温时，由于声子数目增长，相干长度减小，此时适用杂质自平均。 $G^{(n)}$  平滑  $\curvearrowright$  电导 ( $T = 4.1K$  可以适用)



所谓可加性，就是指系统被分为无关的 system (格子) 格子间因为超越相干长度无关而可加，而格子内做自平均。我们希望格子内平均不会改变格子格林函数性质，即希望杂质在每个格子分布类似的，不会出现全分布在某一个格子情况 (量子涨落所幸)。因为温度上升相干长度减小，格子数目变多这种情况越不可能发生，因为数学上中心极限定理保证划分越多偏离分布越小概率。此时，等号①成立，我们计算每个格子中情公式(I)再相加即 Green's Function 相加的结果。

计算每个 system 中 Green's Function, 由于自相似与计算整体数学上无差异。

$$\left\langle e^{i \sum_{q_i} q_i \cdot P_{hi}} \right\rangle_{imp} = \delta_0, \sum_{q_i} q_i \cdot P_{hi}$$

$$\left\langle \sum_{j_1 \dots j_n} e^{i \sum_{l=1}^n q_{j_l} \cdot P_{j_l}} \right\rangle_{imp} = \sum_{P=1}^n \prod_{h=1}^n \pi(N_{imp}, \delta_{0, q_h})$$

这么多的构型如何相加？首先杂质  $P_{jL}$  代表了每个  $P_j$  要加  $N_{imp}$  次,  $\exp[i \cdot (q_1 \cdot P_{j_1} + \dots + q_n \cdot P_{j_n})]$  对  $G^{(n)}$  为  $n$  阶。

我们可以这样分类:

$$\textcircled{1}: P_{j_1} = P_{j_2} = \dots = P_{j_n} \quad \sum_{h_1}^{N_{imp}} e^{i \left( \sum_{q_h} q_{j_1} \right) \cdot P_{h_1}}$$

$$\textcircled{2}: P_{j_1} = \dots = P_{j_{n-1}} \neq P_{j_n} \text{ 有 } n-1 \text{ 种, } \sum_{h_1}^{N_{imp}} \sum_{h_2}^{N_{imp}} e^{i \left( \sum_{q_{h_1}} P_{h_1} \right) \cdot P_{h_2}} e^{i \left( \sum_{q_{h_2}} P_{h_2} \right) \cdot P_{j_n}}$$

+ ... + ...

① 代表了只有一个杂质散射; ② 有两个, 以此相加 ...

$$\langle G^{(n)} \rangle_{\text{imp}}^{\text{(1)}} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{h_1}^{N_{imp}} e^{i A \cdot P_{h_1}} \cdot G^{(0)}_{K_b} U_{K_b - K_{n-1}} G^{(0)}_{K_{n-1}} U_{K_{n-1} - K_{n-2}} G^{(0)}_{K_{n-2}} \dots U_{K_1 - K_0}$$

$$\langle G^{(n)} \rangle_{\text{imp}}^{\text{(1)}} \Rightarrow A = \delta_0, \sum_{q_i} q_i \cdot P_{hi} = 0 \quad e^{i A \cdot P_{hi}} = 1 \Rightarrow N_{imp}.$$

$$\langle G^{(n)} \rangle_{\text{imp}}^{\text{(2)}} = \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} G^{(0)}_{K_b} \cdot U_{K_b - K_{n-1}} G^{(0)}_{K_{n-1}} \dots U_{K_1 - K_0} G^{(0)}_{K_0}$$

$$\langle G^{(1)} \rangle_{\text{imp}} =$$

$$n=1 +$$

$$A = q_1 \cdot P_{h_1} + q_2 \cdot P_{h_2} = 0$$

$$\Rightarrow q_1 = -q_2$$

$$+ \quad$$

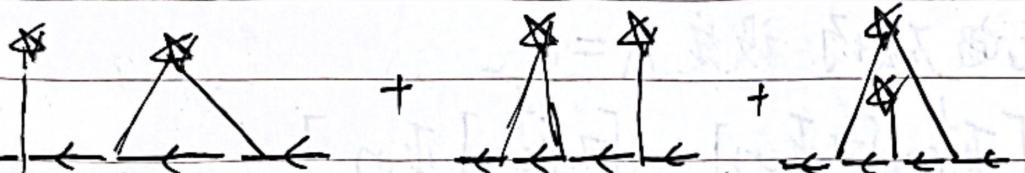
$$q_1 + q_2 + q_3 = 0$$

同理， $\langle G^2 \rangle_{imp}$  应有如下形式：

A horizontal line with two points labeled  $P_1$  and  $P_2$ . Arrows point from both points towards the left side of the line.

$$q_1 \cdot p_{t_1} + q_2 \cdot p_{t_2} = 0$$

$$n=2$$



$$n=3$$

我们同样取 irreducible graphs. 类似 RPA 方法求出级数求和的通项, 此通项称 Born Approximation.

$$\text{II} = \text{I} + \text{II}_1 + \text{II}_2$$

1st-Born Approximation

$$g_{k}^{IBA}(ikn) = -\frac{1}{ckn - \beta_k - \sum_k cikn}$$

$$\sum_K L_{BA}(ik_n) = \frac{n_{imp}}{V} \sum_{K'} |U_{K-K'}|^2 \cdot \frac{1}{ik_n - \beta_{K'}}$$

如何用 Green's Function 求得电导？

电导即流-流关联函数:

$$\delta \frac{d\beta}{dr}(r, r', w) = \frac{ie^2}{\omega^2} \Pi_{2\beta}^R(r, r', w) + \frac{ie^2 n(r)}{\omega m} \delta(r - r') \delta \alpha \beta$$

$$\Pi_{\alpha \beta}^R(r,r';t-t') = C_{f_0^R(r) f_0^{\beta}(r')}^R (r-r') = -i \Theta(t-t') \left\langle \hat{f}_0^R(r,t), \hat{f}_0^{\beta}(r',t') \right\rangle_0$$

Fourier.

$$\overline{J}_{xx}(\tilde{q}) = -\frac{1}{\sqrt{\beta}} \langle J_x(\tilde{q}) J_x(-\tilde{q}) \rangle$$

$$\tilde{q} = (q, iq_n) \text{ 4-vector}$$

DATE

$| \rangle$  指的是无  $\nabla(t)$  外电磁场,  $H = H_0 + H_{\text{imp}} \Leftrightarrow \hat{H}_0$  为  $| \rangle$  Basis  $| \rangle$  就是  $| H \rangle$  basis 仍要算相互作用 Basis, 不过可以算直流电导.

$$\text{Re}\delta_{2p} = -e^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} I_m \Pi_{qp}^R(q, \omega)$$

现在, 无电磁场. 设定  $A = 0$

$$J = \frac{1}{im} [\Psi^\dagger(r) [\nabla \Psi(r)] - [\nabla \Psi^\dagger(r)] \Psi(r)]$$

$$\Psi^\dagger(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-ik \cdot r} a_{\mathbf{k}}^\dagger$$

$$\Rightarrow J(r) = \frac{\hbar}{mv} \sum_{kq} (k + \frac{1}{2}q) e^{iq \cdot r} a_{k\sigma}^\dagger a_{k+q,\sigma}$$

$$\Rightarrow J_x(\tilde{q}) = \int_0^\beta d\tau e^{i\tilde{q}_n \tau} \frac{1}{2m} \frac{1}{V} \sum_{k\delta} (2k + q) C_{k\delta}^+(I) C_{k+q,\delta}(I)$$

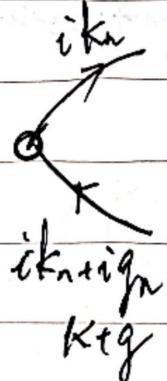
$$\text{由于 } \int e^{i\tilde{q}_n \tau} e^{-ik_n \tau} e^{-ik_n \tau} C_{k\delta}^+(k) C_{k+q,\delta}(k+q) d\tau dk dq$$

$$\Rightarrow (k_n \tilde{q}_n + k_n + \tilde{q}_n) = 0 \Rightarrow \tilde{q} = q_n$$

$$= \frac{1}{2m} \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n} \frac{1}{V} \sum_{k\delta} (2k + q) C_{k\delta}^+(ik_n) C_{k+q,\delta}(ik_n + i\tilde{q}_n)$$

$$= \frac{1}{2m\beta V} \sum_{\tilde{k}} \sum_{\delta} (2k_x + q_x) C_{\tilde{k}\delta}^+(\tilde{k}) C_{\delta}^-(\tilde{k} + \tilde{q})$$

$$J_x(\tilde{q}) =$$

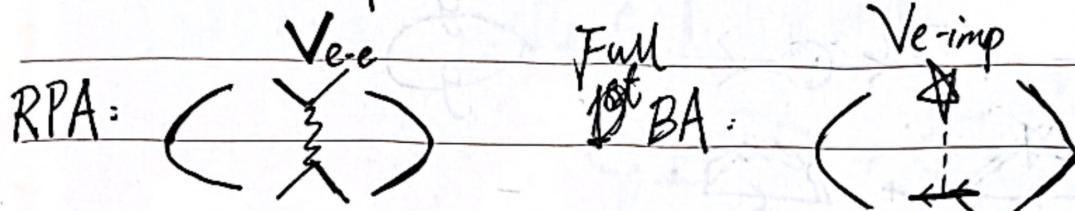


calculate:  $\langle J_x(\vec{q}) J_x(-\vec{q}) \rangle$

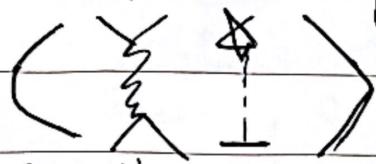
$H = H_0 + \text{electron-impurity} + \text{electron-electron}$

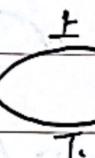
For electron-electron, we use RPA for interactive electron gas.

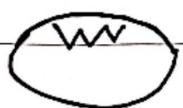
For electron-impurity, we use 1st BA



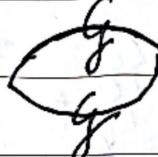
RPA + BA  $(V_{e-e} + V_{e-imp})(V_{e-e} + V_{e-imp}) \times \dots$



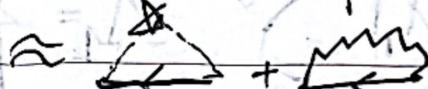
如果用  $G$  代替  $G^{(0)}$  可以忽略  "上"与"下"中的细节, 只要画上、下的连线. 即: e.g.



included in



$\Sigma$ : irreducible self-energy

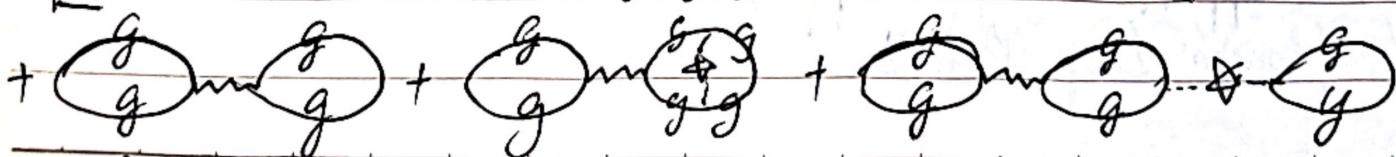
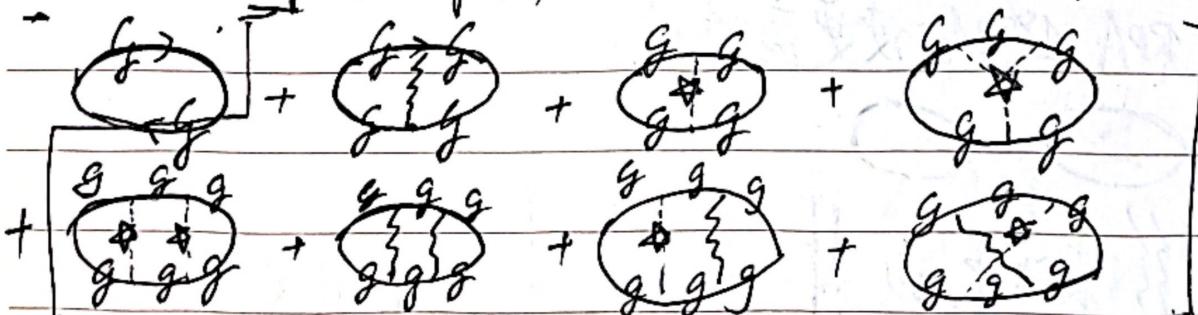


$G$  为单体 Green's Function, 为:

$$G = \cancel{\leftarrow} = \leftarrow + \leftarrow \circlearrowleft = G^{(0)} + G \Sigma G$$

 included in  $G$

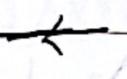
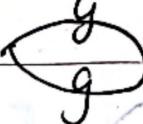
即:  $\langle J_x(\vec{q}) J_x(-\vec{q}) \rangle$  图示. 仅上下连线.



现在我们有了图示，写出它的通项：

RPA认为：  <<  因极点远不如后者。

$$\sum^{\text{RPA}} = \text{---} + \text{---} \text{O} \text{---} + \text{---} \text{O} \text{---} \text{O} \text{---}$$

对于  $g =$    

$$\text{---} = \text{---} + \text{---}$$

$1^{\text{st}} \text{BA} : \text{---} + \text{---}$

$\text{--- RPA} : \text{---} + \text{---}$

现在对于全图，把中间部分全部记作  $\Lambda$

$$\begin{aligned} g &= \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} \\ &\quad + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \end{aligned}$$

之前，用  $\text{---}$  替代  $g^{(0)}$  使图只能上、下连线

现在，用 RPA  $1^{\text{st}} \text{BA}$  使更高阶项：

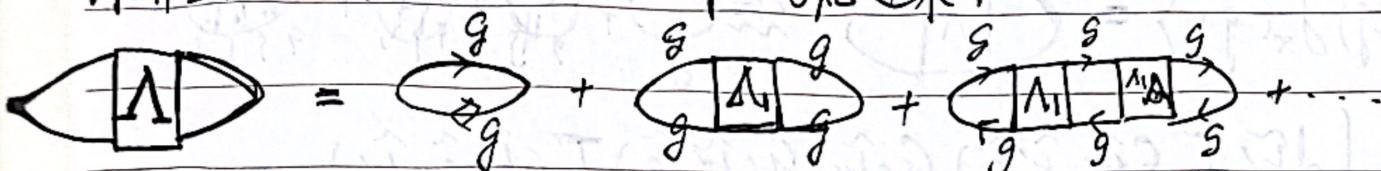


收入  $\text{---}$  表达中，以  $\text{---}$  替代  $\text{---}$  取消更多的 fermion Loop 的出现。

$\Delta_{1,0}$  中为什么没有 ? 现在 irreducible graph 升级为.

irreducible line-crossing graph. 即上.下各切一次不能分作两张图. 这实际上是一阶图  $(\frac{1}{2})^2$  平方.

计算  $I$  时, 要把 reducible Graphs 考虑进来.



这样图如: 也被概入.

$$= \begin{matrix} g \\ g \\ \times \end{matrix} \left( \hat{I} + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix} \right) + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix} \hat{g}_1 + \dots \right)$$

$$= \begin{matrix} g \\ g \\ \times \end{matrix} \quad \text{而} \quad \begin{matrix} k, ik \\ ik+q, q \\ \text{ik+q.n. } k+q. \end{matrix}$$

$$= - \int d\vec{k} G(k+q, ik+q_n) G(k, ik_n) \cdot \underbrace{\frac{1}{2m}(2k_x + q_x)}_{\substack{\longleftarrow \\ \rightarrow}} \cdot \underbrace{I_x^{(k+q, ik+q_n)}}_{(k, ik_n; k+q, ik+q_n)}$$

其中:  $I_x^{(\tilde{k}+q, \tilde{k})}$  or  $I_x^{(k+q, ik_n+q_n; k, ik_n)}$

$$\Delta = 0 + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix} + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix}$$

$$= 0 + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix} \times (0 + \dots)$$

$$= 0 + \begin{matrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_1 \end{matrix} \quad \text{而} \quad \begin{matrix} k \\ k+q \\ \text{q} \\ k+q+q' \end{matrix}$$

故:

$$I_x^{(\tilde{k}+q, \tilde{k})} = I_{ox}^{(\tilde{k}+q, \tilde{k})} + \int \Delta_1^{(\tilde{k}, \tilde{q}, \tilde{q}')} G(\tilde{k}+q') G(\tilde{k}+q')$$

$$\frac{1}{2m}(k_x + q_x) \quad dq' \quad \times I_x^{(\tilde{k}+q'+q, \tilde{k}+q')}$$

对  $\Lambda_1$ , 再应用 1st BA 与 RPA; 并有图示

$$\Lambda_1 \approx \text{图} + \text{图} \quad \text{图}$$

图论给出结论. [综上所述] 反散射项保留了下式

$$\langle \tilde{f}_x(q) \tilde{f}_x(\hat{q}) \rangle = \text{图} \approx \text{图} + \text{图} + \text{图} + \text{图}$$

$$= - \int d\tilde{K}' I_{ox}^c(\tilde{K}', \tilde{K}; \hat{q}) G(\tilde{K}') G(\tilde{K} + \hat{q}) I_x^c(\tilde{K}; \hat{q}, \tilde{K}')$$

其中:  $I_{ox}^c = \frac{1}{im}(2k_x + q_x)$   $\tilde{K}, \hat{q} \approx (k, ik_n), (q, iq_n)$ .

$$G = G^{(0)} + G^{(0)} \sum G; \sum = \text{图} + \text{图}$$

$$\text{图} = \text{图} + \text{图} \quad \{ \} = \text{图} + \text{图}$$

$$\text{图}: U_q; \text{图}: V_q; \text{图}: X^{(0)} = \sum_p G^{(0)}_{cp+q} G^{(0)}_{cp}$$

$$\text{其中: } I_x^c(\tilde{K} + \hat{q}, \tilde{K}') = I_{ox}^c(\tilde{K}, \tilde{K}; \hat{q}) + \int d\hat{q}' \Lambda(\tilde{K}, \hat{q}, \hat{q}') \times$$

$$G(\tilde{K} + \hat{q}) G(\tilde{K} + \hat{q} + \hat{q}') \times I_x^c(\tilde{K} + \hat{q} + \hat{q}', \tilde{K}' + \hat{q}')$$

$$\text{其中: } \Lambda(\tilde{K}, \hat{q}, \hat{q}') = \text{图} + \text{图} \equiv \tilde{W}(\hat{q}')$$

而  $\tilde{W}(\hat{q}')$  易求:

$$\tilde{W}(\hat{q}') = W^{RPA}(q') + n_{imp} \frac{U(q)U(1-q)}{\epsilon_{RPA}^{RPA}, \epsilon_{(q, 0)}^{RPA}} \delta_{q, 0}$$

$$W^{RPA}(q') = \frac{\text{图}}{1 - \Omega_m} \quad \epsilon_{(q, 0)}^{RPA} = 1 - \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2} \chi^{(0)}_{cq, 0}$$

Finish the calculation using the results above; calculate  $\Pi_{xx}$ .  
 $g=0$ , 电中性 e-e, 阳极, 负质 system. separate  $\tilde{F}$ :

$$\Pi_{xx}(0, i\eta_n) = -\frac{1}{\beta V} \sum_{ikn} \sum_K I_{ox}^{(k, k)} G(k, ik_n) G(k, ik_n + i\eta_n) I_x^{(k, k; ik_n + i\eta_n, ik_n)}$$

summation. ( $ik_n$ ) 1

① 极点:  $G(k, ik_n) = \frac{1}{z - \bar{z}_k - \sum_{l \neq k} ik_l}$

$$\sum_{l \neq k} (ik_l) = \underbrace{\text{triangle}}_{\leftarrow} + \underbrace{\text{wavy}}_{\leftarrow} = G^{(0)}(k, ik_n) \cdot \tilde{W}(k)$$

$$z = ik_n$$

$$G(z) = \frac{1}{z - \bar{z}_k - \frac{1}{z - \bar{z}_k} \cdot \tilde{W}(k)}$$

极点位于:

$$(z - \bar{z}_k)^2 = \tilde{W}(k) \text{ 而 } \tilde{W}(k) \in \mathbb{R} \Rightarrow \tilde{W}(k) \in \mathbb{R} > 0$$

$$\Rightarrow z = \pm [\tilde{W}(k)]^{1/2} + \bar{z}_k. z \in \mathbb{R} \text{ 极点在实轴上.}$$

② 极点  $G(k, ik_n + i\eta_n)$  只是做平移, 极点在  $\text{Im} = i\eta_n$  上.

$$C: \int_C \overline{\left[ \int_{\text{Line1}} n_F \cdot \Pi_{xx} + \int_{\text{Line2}} n_F \cdot \Pi_{xx} \right]} = \int \text{大圆} = 0.$$

$$\int_C = \underset{\text{极点, inner}}{\text{Res}} = \underset{n_F(z)}{\text{Res}} = \text{原函数.}$$

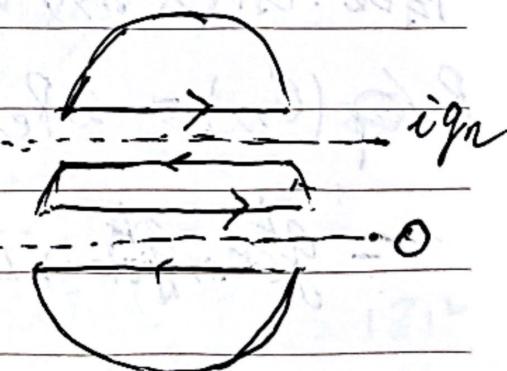
$$\text{即原式: } \int_{\text{Line1}} n_F \cdot \Pi_{xx} + \int_{\text{Line2}} n_F \Pi_{xx} \quad \text{记 } \Pi_{xx} = f(ik_n, ek_n + i\eta_n).$$

$$= - \int_R \frac{dE}{2\pi i} n_F(E) \cdot [f(E+i\eta, E+i\eta_n)]$$

$$- [f(E-i\eta, E+i\eta_n)] - \int_R \frac{dE}{2\pi i} n_F(E+i\eta_n).$$

$$[f(E+i\eta, E+i\eta_n) = f(E-i\eta, E-i\eta_n)]$$

C:



Retard:  $i\eta_n \rightarrow \omega + i\gamma \quad S_c^R(\omega)$ .

$f^{RR}(a, b)$  a:  $i\eta_n \rightarrow \omega + i\gamma$  b:  $i\eta_n \rightarrow \omega + i\gamma$

$f^{AA}(a, b)$  a:  $i\eta_n \rightarrow \omega - i\gamma$  b:  $i\eta_n \rightarrow \omega - i\gamma$

$$S_c^R(\omega) = \int_R \frac{d\epsilon}{2\pi i} [n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon + \omega)] f^{AR}(\epsilon, \epsilon + \omega)$$

$$= \int_R \frac{d\epsilon}{2\pi i} n_F(\epsilon) \cdot f^{RR}(\epsilon, \epsilon + \omega) - n_F(\epsilon + \omega) f^{AA}(\epsilon, \epsilon + \omega),$$

$$f^{AA}(\omega - i\gamma, \omega - i\gamma) = f^{RR}(\omega + i\gamma, \omega + i\gamma) = f(i\eta_n, i\eta_n)$$

$$\Rightarrow (f^{AA})^* = f^{RR}$$

因此. 当取  $\text{Im } S_c^R(\omega)$ . 展至  $\omega^1$  阶时: (直流电导  $\omega \rightarrow 0$ )

$$I_m S_c^R(\omega) = \omega I_m \int_R \frac{d\epsilon}{2\pi i} - \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} \cdot [f^{AR}(\epsilon, \epsilon) - f^{RR}(\epsilon, \epsilon)]$$

提供  $\omega^1$  提供  $\omega^0$

此半  $\omega^0$  项为零.

且当低温  $T \rightarrow 0$ .  $\partial n_F(\epsilon) / \partial \epsilon \approx \delta(\epsilon)$ .

$$\Rightarrow \text{Im } S_c^R(\omega) \approx \frac{\omega}{2\pi} \text{Re} [f^{AA}(0, 0) - f^{AR}(0, 0)]$$

when  $T \rightarrow 0$ ;  $q = 0$ ;  $\omega \rightarrow 0$

因此. 回代入  $\Pi_{xx}$  式中, 利用  $\text{Re } \delta_{\alpha\beta} = \frac{-e^2}{\omega} \text{Im } \Pi_{\alpha\beta}$

$$\begin{aligned} \text{Re } \delta_{\alpha\beta} (\delta_{xx}) &= 2 \text{Re} \frac{e^2}{2\pi} \frac{1}{V} \sum_K T_{ox}(k, k) [G_{(k, 0)}^A G_{(k, 0)}^R \overbrace{I_x^{RA}}^{G_{(k, 0)}} \\ &\quad - G_{(k, 0)}^A G_{(k, 0)}^A \overbrace{I_x^{AA}}^{(k, k; 0, 0)}] \end{aligned}$$

calculate  $I_x$  : 代入上页  $I_x$  定义式中. 代入  $w(\vec{q})$

$$w(\vec{q}) = \frac{n}{1 - \omega} + n_{imp} \frac{|U_{c\vec{q}}| |U_{-c\vec{q}}|}{E_{RPA}^{c\vec{q}, 0} E_{-c\vec{q}, 0}}$$

前半部分  $w_{RPA}$  先不考虑, 之后讨论中再加入, 首先代入后半:

$$I_x(k, k; ik_n + iq_n, ik_n) = I_{ox}(k, k) +$$

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{q}'} n_{imp} |U_{c\vec{q}'}^{RPA}|^2 G(c\vec{q}', ik_n) G(c\vec{q}', ik_n + iq_n) I_x(c\vec{q}', k, k; ik_n + iq_n, ik_n)$$

定义:  $I(k, \epsilon) = \bar{k} \gamma(k, \epsilon) / m$  用  $k' - k = q$  定义  $k'$ , 本和  $k'$  替  $q$ :

$$\Rightarrow \gamma(k, k, ik_n + iq_n, ik_n) = 1 + \frac{1}{V} \sum_{k'} n_{imp} |U_{c(k'-k)}^{RPA}|^2 G(c\vec{k}', ik_n)$$

$$G(c\vec{k}, ik_n + iq_n) \cdot \frac{\vec{k} \cdot \vec{k}'}{|\vec{k}|^2} \cdot \gamma(c\vec{k}', k', ik_n + iq_n, ik_n)$$

$(\omega + iq)^{\phi}$  ( $\omega - iq$ ) 找到  $\gamma^{RR}$   $\gamma^{AA}$ ;  $\omega \rightarrow 0$   $ik_n \rightarrow \epsilon + iq$

$$\gamma^{Rx}(k, \epsilon) = 1 + \frac{1}{V} \sum_{k'} n_{imp} |U_{c(k'-k)}^{RPA}|^2 G(c\vec{k}, \epsilon) G(c\vec{k}', \epsilon) \frac{k \cdot k'}{|k|^2} \cdot \gamma^{Rx}(c\vec{k}', \epsilon)$$

其中  $X = A$  or  $R$

Calculate  $G(c\vec{k}, \epsilon) G(c\vec{k}, \epsilon) = |G(c\vec{k}, \epsilon)|^2$

$$G(c\vec{k}, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \beta_k \omega - \sum_{k, \epsilon}^R} \quad |Z|^2 = \frac{1}{Im(Z)} \cdot Im Z$$

$$|G(c\vec{k}, \epsilon)|^2 = \frac{1}{Im \sum_{k, \epsilon}^R \frac{1}{\epsilon - \beta_k \omega - \sum_{k, \epsilon}^R}} = \frac{1}{Im \frac{1}{Re Z + i Im Z}} \cdot Im Z$$

$$|G(c\vec{k}, \epsilon)|^2 = \frac{1}{Im(G^{-1})} \cdot Im G^R = \frac{Re Z + Im Z}{Im Z} \cdot Im Z = |Z|^2$$

$$\text{因此: } G^A(k, \epsilon) G^R(k, \omega) = I A(k, \epsilon)$$

$$I^{-1} = -2 \operatorname{Im} \sum_{k, \epsilon}^R \text{寿命 } A(k, \omega) = -2 \operatorname{Im} G^R(k, \omega) \text{ 谱函数}$$

当  $n_{\text{imp}} \rightarrow 0$   $A \rightarrow \delta\text{-function}$  无杂质即自由激发.

$I \rightarrow n_{\text{imp}}^{-1}$  寿命无限长自由粒子.

因此若考虑  $\lim_{n_{\text{imp}} \rightarrow 0}$  时  $\gamma^{RRR}$  为  $n_{\text{imp}} G^R G^A$ .

$$= \sum_{k'} n_{\text{imp}} \cdot n_{\text{imp}}^{-1} \cdot \frac{I}{I} \delta(\epsilon - \beta_k) = \sum_{k'} \delta(\epsilon - \beta_k) \text{ 有限}$$

因此.  $\gamma^{RA} \propto \sum_k n_{\text{imp}} G^R G^A$  为有限值.. 而..

$$\gamma^{RR} \Rightarrow G^R G^R = \frac{(\epsilon - \beta_k)^2 - (\frac{1}{2I})^2}{[(\epsilon - \beta_k)^2 + (\frac{1}{2I})^2]^2} + i(\epsilon - \beta_k) A(k, \epsilon)$$

当  $n_{\text{imp}} \rightarrow 0$   $I^{-1} \rightarrow 0$  简项

前一项  $\propto \frac{1}{(\epsilon - \beta_k)}$  后一项  $(\epsilon - \beta_k) \delta(\epsilon - \beta_k)$   
 $(\epsilon - \beta_k)$  和分有限 和分弦为 0

$\times n_{\text{imp}}$  为 0.

因此  $G^R G^R \rightarrow 0$ . 仅考虑  $G^R G^A$  即可.

把  $G^A G^R$  结论代入  $\operatorname{Re} \delta_{xx}$  与  $I_x$  式子中:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \delta_{xx} &= \operatorname{Re} \frac{2e^2}{V} \cdot \sum_K I_{ox}^{(k, k)} \delta(\beta_k) \frac{I_x^{RA}}{I_0} G^A(k, k; 0, 0) \\ &= R_e 2e^2 \sum_K \left( \frac{k_x}{m} \cdot I_0 \delta(\beta_k) \right) \cdot \left( \frac{k_x}{m} \cdot \gamma_{CK, k; 0, 0}^{RA} \right) \end{aligned}$$

$\beta_k = 0$  即  $\sum_K \frac{k_x^2}{m^2} \delta(\beta_k) \Rightarrow E_k = \mu$  就在 ( $T \rightarrow 0$  费米能级上)

$\Rightarrow K = K_F$  (注意是  $E_k = \mu$  由  $\beta_k = 0$  推出; 并非  $T \rightarrow 0$ )

$$\text{因此. } \operatorname{Re} \delta_{xx} = \frac{e^2}{m} I_0 \gamma_{c(k_F, k_F; 0, 0)}^{RA}$$

$$\text{其中: } k_F^3 = 3\pi^2 n ; I_0 = -2 \operatorname{Im} \sum_{(k, 0)}^R$$

限制: ~~①~~:  $\omega \rightarrow 0, q = 0$ ;  $n_{imp}$  << 系统尺寸密度.

$$\text{calculate: } \gamma_{c(k_F, k_F; 0, 0)}^{RA}$$

$$\gamma_{c(k_F)}^{RA} = 1 + \frac{2\pi}{V} \sum_{k'} n_{imp} |\psi_{c(k-k')}^{RPA}|^2 I_0 \delta(\vec{k}_F) \frac{\frac{k_F \cdot k'}{|k'|^2}}{I_0} \gamma_{c(k')}^{RA}$$

$$\delta(\vec{k}_F) \Rightarrow \vec{k}' = 0 \text{ 同样 } \gamma_{c(k')}^{RA} = \gamma_{c(k_F)}^{RA} \Downarrow 1$$

因此, 求解:

$$\gamma^{RA} = 1 + \left[ \frac{2\pi}{V} \sum_{k'} n_{imp} |\psi_{c(k-k')}^{RPA}|^2 \delta(\vec{k}_F) \frac{k \cdot k'}{|k'|^2} \right] (I_0 \gamma^{RA})$$

$$\text{可求解出 } \gamma^{RA}. \quad \text{~~②~~: } \gamma^{RA} = \frac{I^{tr}}{I_0}$$

$$\gamma^{RA} = \frac{1}{1 - \lambda I_0}, \quad \lambda \propto n_{imp} = I_0^{-1} \text{ 比如为: } |\psi_{c(0)}|^2 \frac{2\pi}{V} = C_0$$

$$\Rightarrow \operatorname{Re} \delta_{xx} = \frac{ne^2}{m} I_0 \frac{1}{1 - C_0 I_0^{-1} I_0} = \frac{ne^2}{m} \left( \frac{I_0}{1 - C_0} \right) = \frac{ne^2}{m} \cdot I_{tr}$$

因此:

$$\sigma = \frac{e^2 n I^{tr}}{m} \quad I_0: \text{自由电子受杂质屏蔽后, 活粒子寿命有变化为 } I^{tr}, \text{ 代入电导结果与半经典.}$$

Drude Model 求解解相同.

当  $n_{imp} \rightarrow 0; T \rightarrow 0$ : 直流电导 ( $\omega, q \rightarrow 0$ ) 限制下

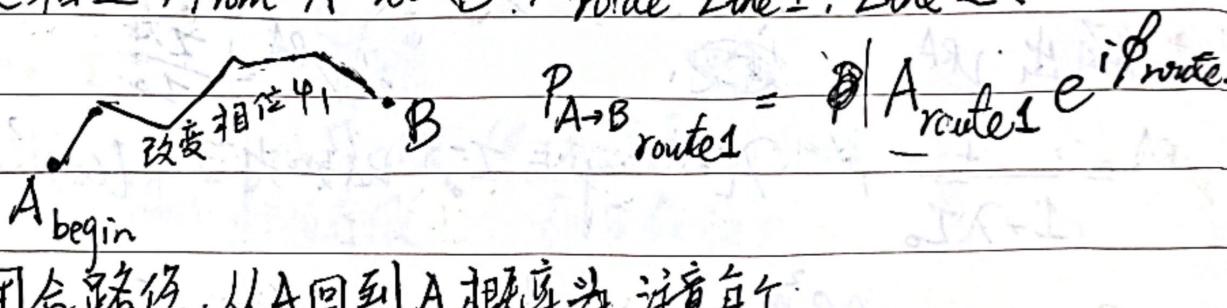
接下来讨论  $W(\vec{q})$  中 W RPA 项对电导的贡献。  
 $W_{RPA}(0, i\omega_n)$ . 在前几章叙述过, 准粒子的质量会被重叠化.  
 Mass Renormalization. 相互作用

$$\gamma = \frac{n e^2 I_{tr}}{m} = \frac{n e^2 I_0}{m(m^*/m)} \quad I_0^* = \frac{m}{m^* \Delta} I_0 \quad \left( \frac{I_0}{\Delta m^*} \right) = I_0^*$$

因此 Drude Model 中为 bare Mass 裸质量, 其重叠化因子被吸收入  $I_{tr}$  中了 (Green Function 计算导致)

## Weak Localization:

唯象: 低温当相干长度甚大, 一个相干长度中电子多次散射改变相位, From A to B. route Line 1, Line 2.



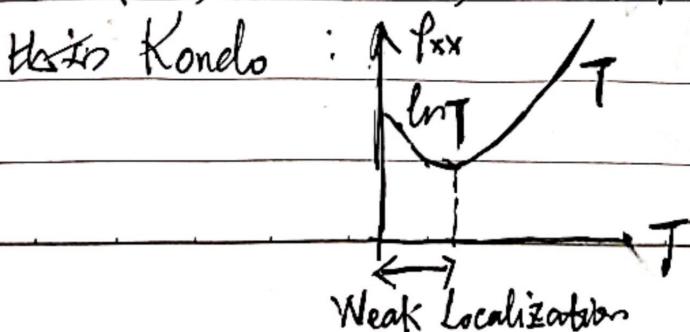
考虑闭合路径, 从 A 回到 A 概率为 注意每个

$$P_{A \rightarrow A} =$$

顺时针路径均有逆时针亦是路径.  
 $A_{\text{route1}} e^{i\phi_1}$  与  $A_{\text{route1}} e^{-i\phi_1}$

要相干叠加.  $P_{A \rightarrow A} = 4 A_{\text{route1}}^2$  而经典仅为  $2 A_{\text{route1}}^2$

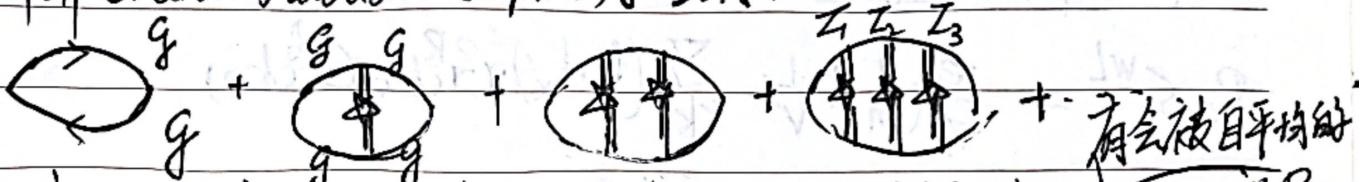
说明量子涨落使电子倾向于保持原位, 不动, 即局域化,  
 而低温多次散射使产生大量相干路径成为可能.



电子自平均：我们回顾该过程，高温下散射过程之所以可行系仅受一次散射，用1BA近似可行，而对 $P_1 = \dots = P_n$  杂质位置完全相同，即 $\bar{G}$ 中散射过程可以用改变相位来描述。

$e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} i=1 \sim n_{imp}$  对每个 $i$ 对电子做自平均  $e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} = e^{i\vec{q} \cdot \vec{0}} = 1$  相位因子必定消失得不到弱局域化。而在低温时，1BA失效出现了 $\bar{G}$ 中更多次散射项  $\bar{\Pi}_{\bar{G}}$ ，注意 $\bar{\Pi}_{\bar{G}}$ 而非  $\bar{\Pi}_G$  使得做平均时会出现与电子位置无关的项而平均下来非零。因此我们计算这些更高阶散射能得到弱局域化对电导的影响，这也是为什么 Kondo Model 中需计算<sup>(3)</sup>至 3 阶散射才能看到  $\ln T$  的修正项。

计算 Green's Function 时，原本为 1BAT.



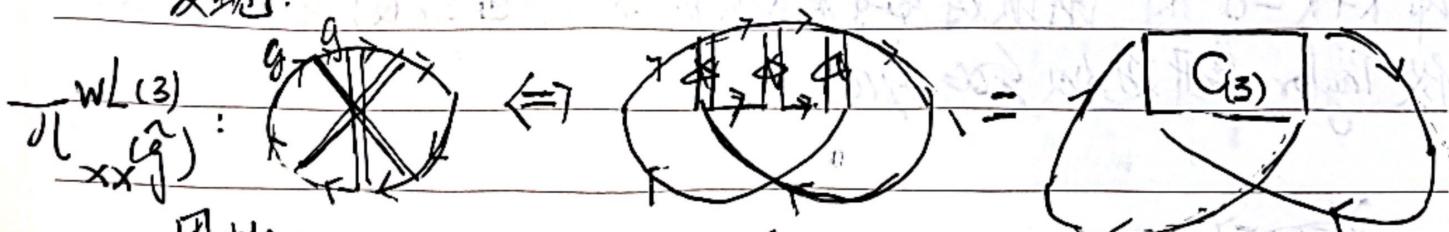
代表了 1 阶散射，因为散射仅在  $(I_1, I_2, I_3)$  时刻发生，引入  $e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_1} \times e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_2} \times e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_3}$  项，现在多重散射中还有出现如下的交叉项。



这一类交叉最猛烈的图称 Maximally crossed diagrams.

我们计算这一类图对电导的贡献：

发现：



因此：

$$\bar{\Pi}_{xx(\bar{G})}^{WL(3)} = \hat{K} \boxed{C} \hat{K} \quad C = \begin{array}{c} \text{Diagram with } \vec{q} \text{ from left to right} \\ \text{Diagram with } \vec{q} \text{ from right to left} \end{array} + \dots$$

与  $\bar{\Pi}_{xx(\bar{G})}$  不同的是  $C$  上下 Green's Function 同向

π.

同样写出  $\Pi$  与  $G$  的通项。

$$\Pi_{xx}^{WL} = -\frac{1}{(2mV)^2} \cdot \int d\tilde{k} d\tilde{k}' (2k_x + q_x) \cdot G(\tilde{k}) G(\tilde{k} + \tilde{q}) \times$$

$$G(\tilde{k}, \tilde{k}', \tilde{q}) G(\tilde{k}') G(\tilde{k}' + \tilde{q}) (2k'_x + q'_x)$$

$$\text{令 } q=0; W_0 = \frac{1}{V} = n_{imp.} |U_0|^2 \text{ 记 } k+k' = Q \quad G(Q, k, \dots)$$

$$G(Q; ik_n + iq_n, ik_n) = \frac{\frac{1}{V} \sum_p W_0 G(Q-p, ik_n + iq_n) G(p, ik_n) W_0}{1 - \frac{1}{V} \sum_p W_0 G(Q-p, ik_n + iq_n) G(p, ik_n)}$$

动量守恒

$$\text{再代入 } G^R G^A (\text{即 } ik_n \rightarrow \omega \pm iq)$$

低温  $T \rightarrow 0$  直流  $\omega \rightarrow 0$

$$\text{Re } \delta_{xx}^{WL} = \frac{e^2}{\pi} \left( \frac{1}{m} \right)^2 \frac{1}{V} \cdot \sum_{kk'} (k_x k'_x) \cdot G^R(k, 0) G^A(k', 0)$$

$$\times G^{AR}(k+k', 0, 0) G^R(k', 0) G^A(k', 0).$$

$$G^{RA}(Q) = \frac{W_0 \zeta(Q)}{1 - \zeta(Q)} \quad \zeta(Q) = \frac{n_{imp}}{V} \sum_p |U_0|^2 G^R(Q-p, 0) G^A(p, 0)$$

$$\text{令 } I_0 = -2 \text{Im} \sum_k R(k, 0) \text{ 展开 } G^R G^A \text{ 为: } -\frac{1}{3p - i/2Z_0}$$

可以验证:  $\zeta(Q=0) = 0$  即  $Q=0$  为  $G^{RA}$  散射点。

即  $k+k=0$  时 此项对电导有最大贡献率。把  $\zeta(Q)$  在  $Q=0$  处做 Taylor 展开近似 (即  $\zeta(Q)$ )

~~Σ~~ →

我们会看到维度  $N_{\text{dim}}$  在其中发挥的作用：

Taylor 展开到  $Q^2$ :  $\frac{\partial G^R(Q-p, 0)}{\partial Q} \Big|_{Q=0} \cdot Q$

$$\begin{aligned} \hat{G}(Q) &= \hat{G}(0) + \frac{n_{\text{imp}}/U_0}{\sqrt{P}} \sum_p \left( -\frac{1}{3_p + i/2I_0} \right)^2 \cdot \left( \frac{\partial^3 G^R}{\partial Q^3} \Big|_{Q=0} \cdot Q \right) \cdot \left( -\frac{1}{3_p - i/2I_0} \right) \\ &\quad + \frac{n_{\text{imp}}/U_0}{\sqrt{P}} \sum_p \left( -\frac{1}{3_p + i/2I_0} \right)^3 \left[ \frac{\partial^3 G^R}{\partial Q^3} \Big|_{Q=0} \cdot Q^2 \right] \left( -\frac{1}{3_p - i/2I_0} \right). \end{aligned}$$

$$\Sigma_p = \int d\vec{z} \cdot \frac{d}{d\vec{z}} d(\epsilon_F)$$

$$\text{原式: } \frac{dp}{d\vec{z}} \cdot \frac{d\vec{z} \cdot \partial^3 G^R}{dQ} \Big|_{Q=0} = d(\epsilon_F) \cdot \frac{d\vec{z} \cdot \partial^3 G^R}{dQ} \Big|_{Q=0} = \frac{dN}{dQ} \Big|_{Q=0} = \frac{V^2}{N_{\text{dim}}}.$$

$N_{\text{dim}}$  的引入系带来不同维度下填充电子能级差异。

做下半平面围道积分,  $I_0 \gg 1$  保留  $I_0^3$  项, 得到:

$$\hat{G}(Q) \approx 1 - D I_0 Q^2 \quad D = \frac{V^2 I_0}{N_{\text{dim}}}$$

将  $\hat{G}(Q)$  结果代入  $\pi^{WL}$  中, 则电导:

$$\sigma^{WL} = \frac{2e^2}{m\pi} \cdot \frac{W_0}{I_0} \cdot \frac{1}{V^2} \sum_{Q \rightarrow 0} \sum_k (-k_x)^2 G^R(k, 0) G^A(k, 0) \frac{1}{D Q^2} G^R(Q-k, 0) G^A(Q+k, 0)$$

计算:

$$\frac{1}{V} \sum_k G^R(k, 0) G^A(k, 0) G^R(-k, 0) G^A(k, 0) k_x^2 G^R = \frac{1}{-\frac{3}{2}k + iy - i/2I_0}$$

取实部  $\text{Re} \sigma = \text{Re}(\dots)$  维度又出现,

$$= d(\epsilon_F) \cdot \frac{k_F^2}{N_{\text{dim}}} \int_R d\vec{z} \cdot \left( \frac{1}{z^2 + (1/2I_0)^2} \right)^2 = \frac{4\pi k_F^2}{N_{\text{dim}}} d(\epsilon_F) \cdot I_0^3$$

$$\vec{k}_x = \frac{1}{\sqrt{3}} \vec{k}_F$$

$$\sigma^{WL} = (\dots) \cdot \frac{1}{N_{\text{dim}}} \stackrel{\Delta}{\underset{D^{-1}}{\sum}} (\dots), \text{这一对 } N_{\text{dim}} \text{ 先消掉. } I_0 \text{ 也消掉了.}$$

$$= (\dots) \left| \sum_{Q>0} \frac{1}{Q^2} \right|^{\star} = \int dQ \frac{1}{Q^2} = \int_{Q>0} dQ \cdot \frac{Q^{N_{\text{dim}}-1}}{Q^2}$$

我们要处理这个无穷问题， $N_{\text{dim}}=1$ ； $N_{\text{dim}}=2$  此积分均发散。我们得到了无穷的电导！

我们必须引入  $\gamma = l_0/l_\phi$

$$g(Q) = e^{-\gamma} C (1 - D I_0 Q^2) \quad \text{代入再算一遍}$$

$l_\phi$  是相干长度。定义  $I_\phi = l_\phi/v_F$ 。

修正电导为：

$$\begin{aligned} -\delta_{xx} &= \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{I_\phi}{D}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{D I_\phi}{C_0^2}} \propto -(I_\phi)^{1/2} & 1D \\ \frac{1}{4D\pi} \ln(1 + \frac{DI_\phi}{l_0^2}) \propto \ln(\frac{I_\phi}{I_0}) & 2D \end{cases} \\ &\quad \frac{1}{2\pi^2 l_0} - \frac{1}{2\pi^3 D \sqrt{D I_\phi}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{D I_\phi}{l_\phi^2 l_0^2}} \propto (I_\phi)^{-1/2} & 3D \end{aligned}$$

$$\delta\delta \propto -\delta_{xx}$$

$e^{-V}$  项引入系引入了实际的体系。之前仅考虑 Hamiltonian, perturbation. 才有关联无穷长。实际上  $g(Q)$  衰减必然与关联长度有关。仅  $l_\phi \rightarrow \infty$  时才有无穷  $g(Q)$  关联。引  $\chi e^{-l_0/l_\phi}$   $l_\phi \rightarrow \infty$   $g(Q) \rightarrow g(Q) = 1 - D I_0 Q^2$

结论是实际体系中

$$1-D \delta\delta^{WL} \propto -(I_\phi)^{1/2}$$

当  $T \rightarrow 0$   $\delta\delta^{WL} \rightarrow -\infty$  完全无导通。说明 1-D 杂质无序排列使得体系完全局域化。

3-D 中:  $\propto (I\phi)^{-1/2}$ . 随  $I\phi \rightarrow 0$ , 出现金属-绝缘体相变  $T \rightarrow 0$ .

$\delta_w L \rightarrow \infty$ . 完全导通; 2-D:  $S_0 \propto \ln I\phi \Leftrightarrow \ln T$  similar to our Kondo result.

### Disordered mesoscopic system.

介观尺度, 电导存在量子涨落; 上文电子自平均可得到宏观尺度中的电导. 此则不可. 对(1 nm) 测量电导: 就考虑两个量子点之间的散射, 用  $S$  矩阵刻画之, 现在就要将  $S$  矩阵对于杂质做平均..

$$S = \begin{pmatrix} T & t' \\ t & T \end{pmatrix} \quad C_{out} = S C_{in}$$

$$G = \frac{2e^2}{h} T_r(t^\dagger t)$$

$$S = U^\dagger U$$

么正矩阵系综平均: 对称性.  $2/(2N)$  时间反演.

$$\langle U_{ab} \rangle = 0 \quad \langle U_{ab}^* U_{cd} \rangle = \frac{1}{M} \delta_{ab} \delta_{cd}.$$

$$\langle U_{aa}^* U_{bb}^* U_{cc} U_{dd} \rangle = \frac{1}{M^2 - 1} ( \dots ) - \frac{1}{M(M^2 - 1)} \dots ,$$

即:

$$\langle G \rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=n+1}^{2N} \langle S_{mn}^* S_{mn} \rangle$$

$$\langle G \rangle_{B \neq 0} = 2e^2 N / h$$

$$\langle G \rangle_{B=0} = \frac{2e^2}{h} \frac{N^2}{2N+1}$$

## Anderson Localization:

一般电导与维度关系  $R = \frac{1}{G} = \frac{V}{I}$   $G \propto \frac{1}{V}$   $= n e V S / V$

1-D:  $\vec{V} = Ed$   $d = L$   $S$  面积 = 1  $G \propto \frac{1}{L}$

2-D  $\vec{V} = Ed$   $d = L$   $S = L$   $G = \text{const}$

3-D  $\vec{V} = Ed$   $d = L$   $S = L^2$   $G \propto L$

实际由上文“弱局域化”讨论要由于量子相干性修正电导，  
引入费曼图，在微扰框架下得到  $G$  在原先基础上的修正。  
从而得到相变的规律。

然而，当 disorder 非常强时，微扰会失效。

REF: Anderson Localization. Looking Forward . Lecture.

Boris Altshuler. Columbia University.

$\gamma = (\partial \eta / \partial u) \cdot D$  = 态密度  $\times$  扩散系数

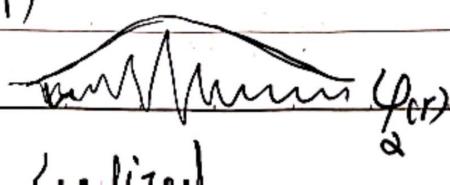
何为局域？从 Elstein 随机行走的想法来看，每个步长可随机向左 or 向右走，终成正态分布。而无限步长后若  $\langle r^2 \rangle \propto t$  or 无限次终回原点，称 Extended；若  $\langle r^2 \rangle \rightarrow \text{const}$ ；有限次因为停点，此行走必局域于某处。

一般 Random ~~Memory~~ Walk without Memory；经典情况 always diffusion  $\Phi_t - D \nabla^2 \Phi = 0$  满足扩散方程  $\Rightarrow \langle r^2 \rangle = D t$

在量子情况下有延展与局域态，满足 Schrödinger Equation.

$$\left( -\frac{\nabla^2}{2m} + U(r) - E_F \right) \Psi_Q(r) = \sum_q \Psi_Q(r)$$

其中随机杂质分布体现为 on-site 的  $U(r)$  是随机势能；  
而波函数  $\Psi(r)$



when   
 localized

Extended.

如果  $|\psi_2(r)|^2 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0(L^{-d})$  为 Extended.

$|\psi_2(r)|^2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0(e^{-r/3})$  为 Localized.

就是要判断  $U(r)$  on-site 与随机的强烈程度  $\xrightarrow{r \rightarrow \infty}$

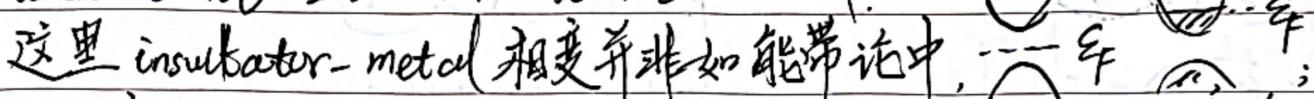
对于  $|\psi_2(r)|^2$  的相变影响.

Write out Hamiltonian.

$$\hat{H} = U_i(\text{on-site energy}) + (-t)(\text{Hopping nearest-neighbor})$$

Random.

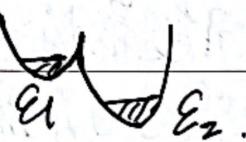
when  $t < t_c$  Insulator  $t > t_c$  Metal.

这里 insulator-metal 相变并非如能带论中，

费米面上有 density of states 金属相变；  $DOS=0$  绝缘无法被激发；  
在此多体强关联中并无能带概念，此时虽然  $DOS \neq 0$ ，但  $\psi_2(r)$  是 Localized 才无关传播出去，为 Mott 多体表达的绝缘；不同于 Mott-Insulator 为 on-site  $U$  极大的局域，现在随机极强，即强 disorder 时亦会有局域态。

对应 Anderson Insulator，此时弱局域化带来的电导减少连在一起，相干长度不仅很难向外传播，甚至走不出去，形成局域态。

2-site Anderson model.



$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & t \\ t & E_2 \end{pmatrix}$$

$E_1 \neq E_2$  为随机势能。

$$\text{Eigenvalue: } E_2 - E_1 = \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + t^2} \approx \begin{cases} t & |E_1 - E_2| \gg t \\ t & |E_1 - E_2| \ll t \end{cases}$$

Eigenfunction:

$$\Psi_{1,2} = \Psi_{1,2} + O\left(\frac{t}{|E_2 - E_1|}\right) \Psi_{2,1}. \quad |E_1 - E_2| \gg t$$

$$\Psi_{1,2} = \Psi_{1,2} \pm \Psi_{2,1}$$

$$|E_1 - E_2| \ll t$$

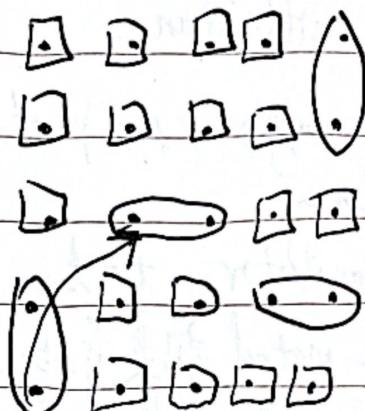
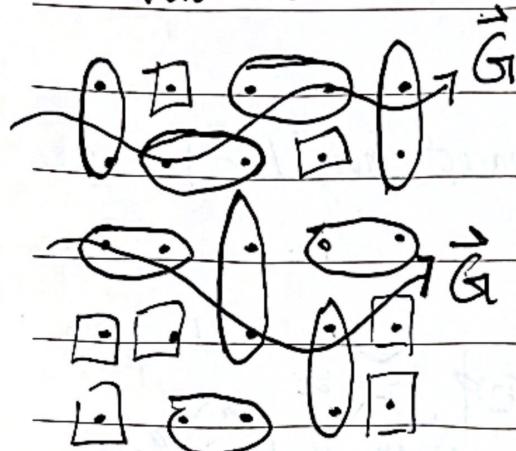
$\Psi_{1,2}$  为单粒子波函数。

从上述结果看出  $\Psi_{1,2} \approx \Psi_{1,2}$  为独立；即当 disorder 强，两粒子无关联，因为原本单粒子的局域态，而  $\Psi_{1,2} \approx \Psi_{1,2}$  可以形成 dimer， $\text{Resonance}$ 。图示为：

$\uparrow$   
Resonance.

Few Disorder

Strong Disorder.

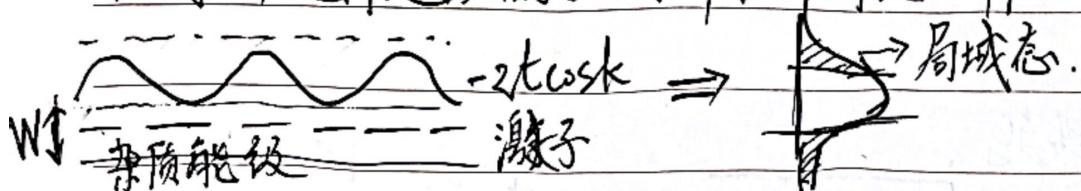


Anderson Metal 存在较多 overlap 的 dimer 电子借此传播。

Anderson Insulator，存在多 on-site 的 dimer，电子无法传播。

并且存在一个点，当 dimer 数量到了一定程度，突然足够支持电子打通，是一个相变  $G_c$ 。（后续）（一阶）。

如果仍然假定可用能带描述，杂质在能带外体现为束缚能级“激子”，越来越多激子与能带耦合体现为带尾的局域态：



在局域态中，比如能量较低时，电子束缚在杂质能级附近，这种偏离  $-2t\cos k$  的耦合之后会以  $(T_m)$  准粒子寿命描述。随着系统越来越无序，杂质能级遍历自由能带，即  $|E_1 - E_2| = W$  可覆盖所有带，使得全部呈局域态，即  $\omega > \omega_c$  在 DOS 中存在中间

的延展态；才 $\omega$ 尽是局域态。

最后，从 Green's Function 来看。 $G_{ii}(t)$  代表了 $t$ 时刻在 $i$ 格点处的粒子。 $t$ 时刻亦在 $i$ 处； $G_{ii}(t) = 0$ ，说明电子走了，否则就是局域态；从自能虚部来看  $I_m \Sigma \propto t^{-1}$ ； $I_m \Sigma = 0$ ，准粒子寿命无限。此时  $i G_{ii}(t) = e^{-i E_0 t}$  ~~延伸无穷延展态局域态~~。

$\uparrow g(E)$ .

Argument I：[局域态出现在带尾]；随无序增加，延展态消失尽是局域态。后半句话从上页图中可知；从能带来看（如果有）DOS 低处能量低的无序部分被填充。无序也是存在一个分布的。无序程度较低时，处于低能量无序部分少 ~~少多少少~~  $\rightarrow$  (较有序)。与之相近电子态少，难以借此通行以导通  $\text{on-site U}^E$  体现为上页局域态，而当无序程度增加时 ~~少多少少~~  $\rightarrow$  (无序)；

$W = |E_2 - E_1|_{\text{typical}}$  变大；处于低能  $\text{on-site U}$  量态分布相近电子态少的范围变大，甚至整个  $\text{on-site U}$  分布范围，处处电子态都是少不足以形成延展态；体系亦尽是局域态。并且，局域态与延展态不能共存，因为共存表示两者能量相同，任意小微扰会使两者混合，不可能是相同能量本征态。因此，Anderson 相变电导应为跳变（整数 Quantum Hall），但是会根据维度的标度理论而修正。

Argument II. Green's Function 确定了相变位置： $(\frac{W}{\omega})$  的值。注意  $e^{-i E_0 t}$  代表局域态，若  $E_0 \rightarrow \infty$ ； $G_{ii}(t) = 0$  才为延展态。虽然  $I_m \Sigma = 0$  就相当于只有  $\Sigma_0$ 。但是此基于束缚模型的