# Вестник московского университета

№ 5 — 1965

УДК 539.2.011

#### и. п. звягин-

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИАГРАММ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Сформулированы основные правила, позволяющие использовать диаграммы при вычислении кинетических коэффициентов в высших порядках по взаимодействию с рассеивателем. Рассмотрение проведено на примере системы электронов, взаимодействующих с хаотически распределенными примесными центрами. Указан способ преобразования диаграмм при проведении усреднения по положениям примесных центров.

Получившая развитие в последнее время квантовая теория кинетических коэффициентов позволила обосновать кинетическое уравнение без повторного использования гипотезы беспорядочных фаз для слабого взаимодействия с рассеивателем [1, 2]. Полученные общие точные выражения (формулы Кубо [3]) позволяют также находить высшие приближения, описывающие поправки к результату обычного кинетического уравнения. Эти поправки следует, например, принимать во внимание при рассмотрении переноса в газах средней плотности, и вообще, в случае значительной плотности рассеивающих центров. Для нахождения членов высших порядков удобно воспользоваться представлением членов ряда теории возмущений в виде диаграмм.

В работе [4] была развита диаграммная техника для вычисления кинетических величин, использующая модифицированные фейнмановские графики, последовательность интегралов в которых определяется порядком следования точек на сложных контурах на плоскости мнимого времени. Диаграммная техника, получаемая путем аналитического продолжения диаграмм мацубаровской техники с мнимой оси на одну из полуплоскостей комплексного переменного, описана в [5]. В отличие от [4, 5] мы будем изображать в виде диаграммы члены рядов для некоторых операторов, входящих в точное интегральное уравнение для двухчастичной функции Грина. Эти операторы дают в выражения для кинетических коэффициентов вклады, соответствующие в низшем приближении вкладам полевого члена кинетического уравнения и оператора столкновений. Получаемые в импульсном представлении диаграммы имеют более простой вид, результат кинетического уравнения получается непосредственно при учете лишь диаграмм низшего порядка.

Будем рассматривать электронный газ в твердом теле, считая, что основную роль играет рассеяние электронов на случайно расположенных атомах примеси. Гамильтониан такой системы в отсутствие внешних возмущений имеет вид

$$H = \sum_{p} (\varepsilon_{p} - \mu) a_{p}^{+} a_{p} + \sum_{pp'} V(p - p') a_{p}^{+} a_{p'}, \qquad (1)$$

где  $\epsilon_p$  — закон дисперсии электронов в отсутствие примеси (здесь и далее рассматривается лишь одна зона),  $\mu$  — химический потенциал,  $V=(1/\Omega)\int e^{-i(p-p')x}\ V(x)\,dx,\ V(x)=\sum_i v\left(x-R_i\right),\ v\left(x-R_i\right)$  — потенциал,

создаваемый в точке x примесным центром, расположенным в точке  $R_i$ . Будем считать, что V(x) содержит безразмерный малый параметр  $\lambda$ , и воспользуемся теорией возмущений по степеням  $\lambda$ 

Коэффициенты пропорциональности между потоками заряда и энергии и соответствующими обобщенными силами выражаются через двухчастичные запаздывающие антикоммутаторные функции Грина ти-

па 
$$G(p, p', q', q, t) = i\Theta(t) < [a_p^+(t) a_{p'}^+(t), a_{q'}^+ a_q]_+ > \equiv \int_{\mathbb{R}^n} dE \exp(-iEt)$$

G(p, p', q', q, E). В низшем порядке по  $\lambda$  (приближение обычного кинетического уравнения) отличны от нуля лишь G(p, p, q, q, E); величины G(p, p', q, q, E) при  $p \neq p'$  представляют собой функции более высокого порядка по  $\lambda$ . Это позволяет провести последовательные итерации уравнения для G(p, p', q', q, E), в результате которых получаем

$$EG(p, p, q, q, E) = \widetilde{Q}(p, q, E) + \sum_{k} R(p, k, E) G(k, k, q, q, E), \qquad (2)$$

$$d_{pp'} G(p, p', q, q, E) = \widetilde{Q}(p, p', q, q, E) + \sum_{k} R(p, p', k, k, E) G(k, k, q, q, E),$$
(3)

где

$$d_{pp'} = \varepsilon_{p} - \varepsilon_{p'} + E,$$

$$\widetilde{Q}(p, p', q, q, E) = Q(p, p', q, q) + \sum_{\substack{k'k \\ (k' \neq k)}} \frac{V(p, p', k', k)\widetilde{Q}(k, k', q, q, E)}{d_{kk'}}, (4)$$

$$R(p, p', q, q, E) = V(p, p', q, q) + \sum_{\substack{k'k \\ (k \neq k')}} \frac{V(p, p', k', k) R(k, k', q, q, E)}{d_{kk'}}, \quad (5)$$

$$\begin{split} Q\left(p,\,p',\,q',\,q\right) &= -\,(2\pi)^{-1}\,\langle\left[a_{p}^{+}a_{p'},\,\,a_{q'}^{+}a_{q}^{-}\right]_{+}\rangle,\\ V\left(p,\,p',\,q',\,q\right) &= V\left(p'-q'\right)\delta_{q-p} - V\left(q-p\right)\delta_{p'-q'}, \end{split}$$

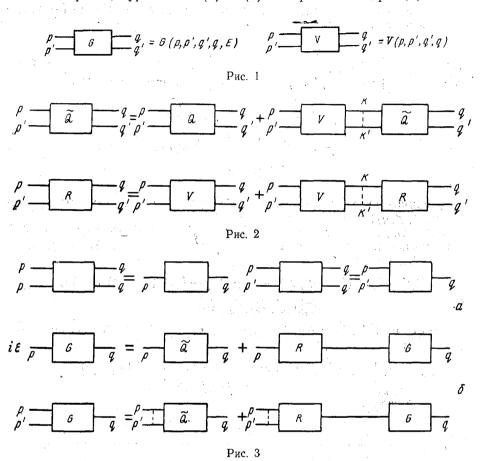
a

$$R(p, k, E) = R(p, p, k, k, E), \ \widetilde{Q}(p, q, E) = \widetilde{Q}(p, p, q, q, E).$$

Таким образом, для получения уравнений, определяющих искомые функции Грина, нужно найти R(p,p',q',q,E) и  $\widetilde{Q}(p,p',q',q,E)$ .

Если изображать функции, зависящие от четырех аргументов, в виде четырехполюсников, как на рис. 1, то уравнения для R(p, p', q', q, E) и  $\widetilde{Q}(p, p', q', q, E)$  можно изобразить схематически так, как это показано

на рис. 2. Пунктирная линия, связывающая сплошные линии с импульсами  $\kappa$  и  $\kappa'$ , соответствует энергетическому знаменателю  $d_{kk'}^{-1} = (\epsilon_k - \epsilon_{k'} + E)^{-1}$ , где E содержит малую мнимую добавку  $i\delta$ ,  $\delta \rightarrow +0$ . Будем считать пунктирные линии направленными от верхней прямой к нижней, это направление определяет порядок следования импульсов k,k'. По индексам внутренних линий проводится суммирование. В обозначениях рис 3,a уравнения (2) и (3) изображены на рис.  $3,\delta$ .



# § 2. Вычисления R(p, q) и $\widetilde{Q}(p, q)$

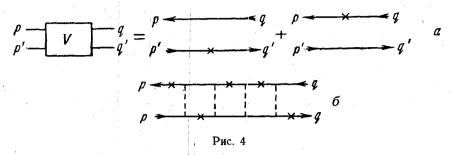
Воспользовавшись определением функции V(p,p',q',q), мы можем получить выражение для членов произвольного порядка по  $\lambda$  через потенциал примеси V(p-q). Сформулируем правила, согласно которым проводится сопоставление диаграмм соответствующих членов ряда теории возмущений для R(p,p',q',q,E).

1. Каждому крестику, расположенному на сплошной линии, соответствует множитель V(p-p'), где p и p' — импульсы линий по обеим сторонам от крестика. Порядок следования p и p' определяется направлением сплошной линии. Общий порядок диаграммы равен полному числу крестиков.

2. Сплошной линии, соединяющей внешние концы диаграммы, соот-

ветствует б-символ Кронекера.

- 3. Қаждой пунктирной линии, идущей от k к k', соответствует энергетический знаменатель  $d_{kk}^{-1}$ . Две пунктирные линии разделены всегда по крайней мере одним крестиком (т. е. не может быть диаграмм, содержащих  $d_{kk}^{-1}$ ).
- 4. По всем внутренним индексам производится суммирование, причем в суммах опускаются члены, соответствующие совпадающим индексам знаменателя.
- 5. Знаж диаграммы определяется множителем  $(-1)^l$ , где l число крестиков на верхней прямой.



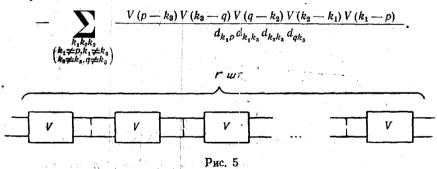
Указанные правила следуют/из вида уравнений и способа изображения V(p, p', q', q), приведенного на рис 4,a.

Типичная диаграмма ряда для R(p,p',q',q) изображена на рис. 4,6. Аналитическое выражение члена, соответствующего этой диаграмме, найдем, если перемножим

$$V(p'-k_3)V(k_3-q')V(q-k_2)V(k_2-k_1)V(k_1-p) \text{ (II. 1)},$$

$$d_{k_1p}^{-1}d_{k_1k_3}^{-1}d_{k_2k_3}^{-1}d_{qk_3}^{-1} \text{ (II. 3)},$$

просуммируем по  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$  ( п. 4) и умножим на  $(-1)^3$  (п. 5). Окончательно получаем



Член перядка r в R(p, k, E) (рис. 5) содержит  $2^r$  различных диаграмм подобных изображенной на рис. 4,6. Для того чтобы найти полный вклад всех диаграмм данного порядка, следует на двух прямых с выделенным направлением расставить крестики всеми возможными способами, но так, чтобы каждый из них был отделен от следующего одной и только одной из r-1 вертикальной линией (п. 3).

При вынислении  $R(\hat{p},k)$  в стационарном случае  $(E=i\delta)$  число диаг-

рамм можно уменьшить вдвое с помощью следующего свойства.

Поворот диаграммы относительно горизонтальной оси на 180° (т. е. перемена местами верхней и нижней прямых) и одновременное измене-

ние направления обхода эквивалентны операции комплексного сопряже-

ния с одновременным изменением знака.

Согласно этому правилу, например, диаграммы на рис. 6,a и 6,b получаются одна из другой комплексным сопряжением с одновременной заменой знака.

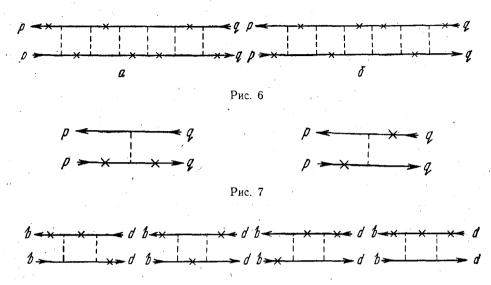


Рис. 8

Для доказательства этого свойства нужно рассмотреть аналитическое выражение члена, соответствующего произвольной диаграмме. При комплексном сопряжении меняется направление обхода и энергетические знаменатели вида  $\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} + i\delta$  переходят в  $\varepsilon_k - \varepsilon_{k'} - i\delta$ . Число энергетических знаменателей в члене порядка r равно r-1, замена знака в каждом из них (т. е. переход к  $\varepsilon_k - \varepsilon_k + i\delta$ ) дает  $(-1)^{r-1}$ . Вновь полученные знаменатели типа  $\varepsilon_k - \varepsilon_k + i\delta = d_{k'k}$ , если по-прежнему считать, что пунктирные линии, направленные сверху вниз, соответствуют измененному положению верхней и нижней прямых. Изменение числа крестиков на верхней прямой равно при этом  $l_1 - l_2 = r - 2l_2$ , где  $l_1$  и  $l_2$  числа крестиков на верхней и нижней прямых соответственно. Вместе с множителем  $(-1)^{r-1}$  это дает нужное изменение знака.

Из доказанного свойства сразу следует, что R(p,k) — мнимая функция, так как диаграммы типа изображенных на рис. 6,a и 6,b можно объединить попарно. При вычислении R(p,k) достаточно рассматривать лишь половину всех диаграмм, а затем брать удвоенную мнимую часть их вклада.

При вычислении R(p, p', q', q) описанная операция сопряжения должна сопровождаться еще и заменой  $p \rightleftharpoons p', q \rightleftharpoons q'$ .

В качестве примера запишем вклад диаграмм порядка  $\lambda^2$  (рис. 7),  $\lambda^3$  (рис. 8) и  $\lambda^4$  (рис. 9) в «столкновительный» член R(p,q)

$$R(p, q) = R^{(2)}(p, q) + R^{(3)}(p, q) + R^{(4)}(p, q) + \dots,$$
 (6)

$$R^{(2)}(p,q) = 2iIm \left\{ \sum_{b'} \frac{|V(p-k')|^2}{d_{pk'}} \delta_{p-q} - \frac{|V(p-q)|^2}{d_{pq}} \right\}, \tag{7}$$

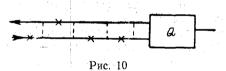
$$R^{(3)}(p,q) = -2iIm \left\{ -\sum_{k'k''} \frac{V(p-k')V(k'-k'')V(k''-p)}{d_{pk'}d_{pk'}} \delta_{p-q} + \right.$$

$$+ \sum_{k'} V(p-k')V(k'-q)V(q-p) \left( \frac{1}{d_{pk'}d_{pq}} + \frac{1}{d_{pk'}d_{qk'}} + \frac{1}{d_{qp}d_{qk'}} \right), \quad (8)$$

$$R^{(4)}(p,q) = -2iIm \left\{ \sum_{k'k'k'''} \frac{V(p-k')V(k'-k'')V(k''-k''')V(k'''-p)}{d_{pk'}d_{pk''}d_{pk''}} \delta_{p-q} - \right.$$

$$-\sum_{k'k''} V(p-k')V(k'-k'')V(k''-q)V(q-p) \left( \frac{1}{d_{pk'}d_{pk''}d_{pk''}} + \frac{1}{d_{pk'}d_{pk''}d_{pk''}} + \frac{1}{d_{pk'}d_{qk''}} + \frac{1}{d_{pk'}d_{qk''}d_{qk''}} + \frac{1}{d_{qk'}d_{qk''}d_{qk''}} + \frac{1}{d_{qk'}d_{qk''}d_{qk''}} + \frac{1}{d_{qk'}d_{qk''}$$

Штрих у суммы означает, что в сумме опущены члены, у которых совпадают индексы хотя бы одного из энергетических знаменателей. Выражения (7)—(9) совпадают с полученными в работе [2] при расчете электропроводности при рассеянии на примеси.



Вычисление  $\widetilde{Q}(p,p,q,q)$  при условии, что Q(p,p',q,q) уже найдено, проводится с помощью такой же техники. Изображая члены для  $\widetilde{Q}(p,p,q,q)$  диаграммами и пользуясь тем, что  $Q^*(p,p',q',q)=$  =Q(p',p,q,q'), нетрудно показать, что  $\widetilde{Q}(p,p,q,q)\in \mathrm{Re}$ . Типичная диаграмма ряда для  $\widetilde{Q}(p,p,q,q)$  изображена на рис. 10. Вычисление же функции Q(p,p',q,q) можно провести, например, путем сведения ее к одночастичной функции Грина.

# ... § 3. Усреднение по положениям примеси

При рассмотрении задач о вычислении кинетических коэффициентов при наличии примеси необходимо провести усреднение по положениям примесных центров. Процедура такого усреднения [2] сводится к заме-

не под знаком суммы величин типа

$$V(p-k_1)V(k_1-k_2)\dots V(k_{r-1}-p)$$

их средними по ансамблю

$$\begin{split} \langle V(p-k_1) V(k_1-k_2) \dots V(k_{r-1}-p) \rangle &= \\ &= \Omega^{-N} \int \prod_{i=1}^{N} dR_i V(p-k_1) V(k_1-k_2) \dots V(k_{r-1}-p). \end{split}$$

Последние имеют следующую структуру:

$$\langle V(p-k_1)V(k_1-k_2)\dots V(k_{r-1}-p)\rangle =$$
  
=  $\frac{N}{\Omega^r}v(p-k_1)v(k_1-k_2)\dots v(k_{r-1}-p) +$ 

$$+\frac{N^2}{\Omega^r}$$
 (все члены, содержащие два совпадающих импульса)  $+$ 

$$+\frac{N^3}{\Omega'}$$
  $\sum$  (все члены с совпадающей тройкой индексов)  $+\dots$  (10)

Здесь  $v(p-k) = \int e^{-i(p-k)x}v(x)\,dx$ , N — число примесных центров. После усреднения, как следует из (10), вместо прежней диаграммы мы получаем несколько. Если в диаграммах, полученных после усреднения, сопоставлять крестикам v(k-k') вместо V(k-k'), как раньше, то первый член в (10) даст диаграмму, имеющую точно такой же вид, как и диаграмма до усреднения. Остальные члены получаются после усреднения из данного, если полагать два, три и т. д. импульса равными (это соответствует учету второго, третьего и т. д. членов в (10)). Будем изображать совпадающие импульсы с помощью сплошных линий, считая, что таким линиям сопоставляются д-символы Кронекера. Тогда набор всех диаграмм, получающихся в результате усреднения, можно получить, соединяя сплошными линиями участки прямых между крестиками всеми возможными способами. Нельзя, однако, соединять а) участки, уже соединенные пунктирными линиями, так как член, соответствующий совпадающим индексам энергетического знаменателя, в сумме отсутствует, б) соседние участки, разделенные лишь одним крестиком, поскольку  $v(k)\mid_{k=0}=0$  (условие нейтральности). Кроме обычных множителей (см. § 2) член, соответствующий диаграммам, полученным в результате усреднения, содержит множители  $\Omega^{-\hat{r}}$ , где r — порядок диаграммы,  $N^{s+1}$ , где s — число соединительных сплошных линий. В каждом члене остается еще сумма по r-s-1 импульсам, дающая при переходе к интегрированию множитель  $\left[\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\right]^{r-s-1}$ . Все эти множители дают следующий множитель, определяющий зависимость от концентрации примесных

центров:

$$N^{s+1}\Omega^{r-s-1}\Omega^{-r} = (N/\Omega)^{s+1} = n^{s+1}$$
.

Таким образом, диаграмма пропорциональна s+1-й степени концентрации примесных центров, тде s — число соединительных линий.

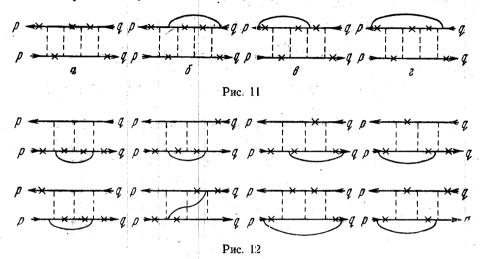
Из диаграммы рис. 4,6, например, после усреднения получается четыре диаграммы, изображенные на рис. 11. Диаграмма рис. 11, lpha пропорциональна n, диаграммы рис. 11,6,8,2, содержат  $n^2$ . Аналитическое выражение члена, отвечающего, например, диаграмме рис. 11,6, есть

$$-\frac{N^{2}}{\Omega^{5}} \sum_{\substack{kk'\\ (k \neq k')}} \frac{v(p-k') v(k'-q) v(q-p) |v(q-k'')|^{2}}{d_{qp} d_{qk'} d_{k''k'} d_{qk'}}.$$

Из рис. 7 и 8 видно, что в диаграммах ряда для R(p,q) порядка  $\lambda^2$  и  $\lambda^3$  нельзя провести ни одной соединительной линии, эти диаграммы

пропорциональны n и число их при усреднении не меняется.

К диаграммам четвертого порядка (рис. 9) после усреднения добавится еще ряд диаграмм, пропорциональных  $n^2$  (рис. 12) и описывающих одновременное рассеяние на двух примесных центрах.



Результат обычного кинетического уравнения получается из уравнения (рис. 12a) в низшем приближении по  $\lambda$  Для R(p,k) в этом приближении следует взять диаграммы рис. 7, а  $\widetilde{Q}(p,k)$  положить равным Q(p,k). Днаграммы рис. 8, 9, 11 дают поправки высших порядков к члену столкновений кинетического уравнения.

### Выводы

Описанная техника позволяет легко вычислять кинетические коэффициенты при рассеянии на примеси в высших порядках теории возмущений. Фактически с выражениями типа (4) и (5) приходится иметь дело всегда при расчете явлений переноса в системе, содержащей примесные центры. Так, выражения такого вида возникают в уравнении для первой неравновесной матрицы плотности, записанного для гамильтониана (7) при учете внешнего возмущения.

На случай упругого рассеяния электронов на фононах описанная техника переносится без существенных изменений (рассеяние можно считать упругим при высоких температурах, если пренебречь эффектами, связанными с неравновесностью фононного распределения). Потенциал V(p-p') в этом случае есть потенциал взаимодействия электронов с фононами. Для V(p-p') имеем [6]

$$V(p-p')=v(p-p')\cdot q_{p-p'},$$

где v(p-p') — матричный элемент потенциала электрон-фононного рассеяния, а  $q_{p-p'}$  — нормальная координата, соответствующая импуль-

су p-p'. Нормальные координаты  $q_{p-p'}$  при этом рассматриваются классически. Они распределены случайным образом, и можно, например,  $q_{b-b}^2$ , заменить средним значением  $\langle q_{b-b}^2 \rangle$ .

В заключение выражаю искреннюю благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за многочисленные полезные обсуждения при выполнении

данной работы.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Van Hove L. Physica, 21, 517, 1955. 2. Kohn W., Luttinger J. M. Phys. Rev., 108, 590, 1957. 3. Kubo R. J. Phys. Soc. Japan, 12, 570, 1957; Kubo R., Yokota M., Nakajima S., J. Phys. Soc. Japan, 12, 1203, 1957; Зубарев Д. Н. ДАН СССР, 140. 92, 1961.

4. Константинов О. В., Перель В. И. ЖЭТФ, **39**, 197, 1960. 5. Дзялошинский И. Е. ЖЭТФ, **42**, 1126, 1962. 6. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. М., ИЛ, 1956.

Поступила в редакцию 19. 5 1964 г.

Кафедра полупроводников