

不純物散乱における T-Matrix

永井佑紀

平成 21 年 2 月 17 日

不純物散乱における T-Matrix と Green 関数に関するノート。単一不純物の場合と、無数の不純物の場合について考える。self-consistent T-matrix approximation がどのような近似なのかについて調べた。

1 単一不純物の場合

$x = 0$ に一つだけデルタ関数型ポテンシャル $V(x)$:

$$V(x) = V_0 \delta(x) \quad (1)$$

があるとする。このときの Green 関数を考える。なお、 x は D 次元の空間座標を表すことにする。ポテンシャルのあるときの Dyson 方程式は一般に

$$G(x, x') = G_0(x, x') + \int dx_1 G_0(x, x_1) V(x_1) G(x_1, x') \quad (2)$$

と書ける。この式にデルタ関数型ポテンシャルを代入し、フーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \int \frac{dp}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'}{(2\pi)^D} G(p, p') e^{ipx - ip'x'} &= \int \frac{dp}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'}{(2\pi)^D} G_0(p) \delta_{p, p'} \\ &+ \int \frac{dp}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'}{(2\pi)^D} \int dx_1 \delta_{pp'} G_0(p) e^{ip(x-x_1)} \\ &\times \int \frac{dk}{(2\pi)^D} e^{ikx_1} V_0 \int \frac{dp''}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'''}{(2\pi)^D} e^{ip''x_1 - ip'''x'} G(p'', p''') \quad (3) \end{aligned}$$

となり、

$$G(p, p') = G_0(p) \delta_{p, p'} + \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(p) V_0 G(p - k, p') \quad (4)$$

$$= G_0(p) \delta_{p, p'} + G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G(k, p') \quad (5)$$

が得られる¹。この式を逐次代入して展開して整理すると

$$G(p, p') = G_0(p) \delta_{p, p'} + G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) \delta_{k, p'} + G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 \int \frac{dk'}{(2\pi)^D} G_0(k - k') \delta_{k - k', p'} + \dots \quad (6)$$

$$= G_0(p) \delta_{p, p'} + G_0(p) V_0 G_0(p') + G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 G_0(p') + \dots \quad (7)$$

$$= G_0(p) \delta_{p, p'} + G_0(p) \left(V_0 + V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 + \dots \right) G_0(p') \quad (8)$$

¹最後の式は、 k がダミーインデックスであることを用いた。

となり、T-Matrix:

$$T \equiv V_0 + V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 + \dots \quad (9)$$

$$= V_0 + V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) T \quad (10)$$

$$= V_0 + V_0 G_0(x, x) T \quad (11)$$

を導入すれば

$$G(p, p') = G_0(p) \delta_{p, p'} + G_0(p) T G_0(p') \quad (12)$$

と書ける。この式が単一不純物が存在する場合の T-Matrix による表式である。

2 無数の不純物の場合

不純物が無数にランダムに存在する系を考える。このときのポテンシャル $V(x)$ は、不純物の場所を x_i として

$$V(x) = V_0 \sum_i \delta(x - x_i) \quad (13)$$

と書ける。

2.1 一次

V_0 の展開の一次は

$$G(x, x')^{(1)} = \int dx_1 G_0(x, x_1) V_0 \sum_i \delta(x_1 - x_i) G_0(x_1, x') \quad (14)$$

となる。これをフーリエ変換すると

$$\begin{aligned} \int \frac{dp}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'}{(2\pi)^D} G(p, p')^{(1)} e^{ipx - ip'x'} &= + \int \frac{dp}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'}{(2\pi)^D} \int dx_1 \delta_{pp'} G_0(p) e^{ip(x-x_1)} \sum_i \int \frac{dk}{(2\pi)^D} e^{-ikx_i} \\ &\quad \times e^{ikx_1} V_0 \int \frac{dp''}{(2\pi)^D} \int \frac{dp'''}{(2\pi)^D} e^{ip''x_1 - ip'''x'} G_0(p'', p''') \end{aligned} \quad (15)$$

$$G(p, p')^{(1)} = \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(p) V_0 G_0(p-k) \delta_{p-k, p'} \sum_i e^{-ikx_i} \quad (16)$$

となる。ここで、不純物平均:

$$\langle \sum_i e^{-ikx_i} \rangle_{av} = n_{imp} \delta_{k,0} \quad (17)$$

を取る。これは、無数の和をとったことに対応している。無数の不純物がある場合、平面波は $k=0$ の成分以外はキャンセルしあって消えてしまう。この不純物平均を用いると、Green 関数は

$$G(p)^{(1)} = n_{imp} G_0(p) V_0 G_0(p) \quad (18)$$

となる。故に、一次の項の効果だけを取り込んだ無限級数²は

$$G(p) = G_0(p) + n_{imp} G_0(p) V_0 G_0(p) + n_{imp} G_0(p) V_0 G_0(p) n_{imp} V_0 G_0(p) + \dots \quad (19)$$

$$= G_0(p) + n_{imp} G_0(p) V_0 G(p) \quad (20)$$

となる。よって、

$$G(p, \omega_n) = \frac{1}{G_0(p, \omega_n)^{-1} - n_{imp} V_0} \quad (21)$$

が得られる。これは、エネルギーがポテンシャルの分だけシフトしたことに対応しており、原点がずれただけであるため、何も面白い結果は生まない。

²自己エネルギーとしてポテンシャルの一次の効果を取り込んだ。

2.2 二次

次に、ポテンシャルの二次の効果を考えよう。展開の二次は

$$G(x, x')^{(2)} = \int dx_1 G_0(x, x_1) V_0 \sum_i \delta(x_1 - x_i) \int dx_2 G_0(x_1, x_2) V_0 \sum_j \delta(x_2 - x_j) G_0(x_2, x') \quad (22)$$

である。これをフーリエ変換すると

$$G(p, p')^{(2)} = G_0(p) \int \frac{dk}{(2\pi)^D} V_0 G_0(p - k) \int \frac{dk'}{(2\pi)^D} V_0 G_0(p - k - k') \delta_{p-k-k', p'} \sum_{i,j} e^{-ikx_i - ik'x_j} \quad (23)$$

となる。この計算を行うには、ポテンシャルの不純物平均をとる必要がある。二次の不純物平均は

$$\left\langle \sum_{i,j} e^{-ikx_i - ik'x_j} \right\rangle_{\text{av}} = \left\langle \sum_{i=j} e^{-i(k+k')x_j} + \sum_{i \neq j} e^{-ikx_i - ik'x_j} \right\rangle_{\text{av}} \quad (24)$$

という二つの項にわけることができる。よって、

$$\left\langle \sum_{i,j} e^{-ikx_i - ik'x_j} \right\rangle_{\text{av}} = n_{\text{imp}} \delta_{k+k', 0} + n_{\text{imp}}(n_{\text{imp}} - 1) \delta_{k, 0} \delta_{k', 0} \quad (25)$$

となる。ここで、第二項に $n_{\text{imp}}(n_{\text{imp}} - 1)$ が出てきたのは、項の数が全部で n_{imp}^2 個あり、そのうち n_{imp} 個が $i = j$ を満たすからである。いま、不純物の数 n_{imp} が非常に多い ($> 10^{10}$) とすると、

$$\left\langle \sum_{i,j} e^{-ikx_i - ik'x_j} \right\rangle_{\text{av}} \sim n_{\text{imp}} \delta_{k+k', 0} + n_{\text{imp}}^2 \delta_{k, 0} \delta_{k', 0} \quad (26)$$

としてもよい。このとき、Green 関数の二次は

$$G(p, p')^{(2)} = n_{\text{imp}} G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(p - k) V_0 G_0(p) + n_{\text{imp}}^2 G_0(p) V_0 G_0(p) V_0 G_0(p) \quad (27)$$

$$= n_{\text{imp}} G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 G_0(p) + n_{\text{imp}}^2 G_0(p) V_0 G_0(p) V_0 G_0(p) \quad (28)$$

となる。この式の第二項は、実は一次の項をもう一回繰り返したものと等しいので、一次の項の無限級数の式 (20) に既に取り込まれている。よって、新しい項は第一項のみである。この新しい項は、二次の impurity 散乱においてトータルの運動量が保存する $k + k' = 0$ プロセスのみが存在することを意味している。この新しい項を

$$G(p, p')^{(2)'} \equiv n_{\text{imp}} G_0(p) V_0 \int \frac{dk}{(2\pi)^D} G_0(k) V_0 G_0(p) \quad (29)$$

$$= n_{\text{imp}} G_0(p) V_0 G_0(x, x) V_0 G_0(p) \quad (30)$$

と定義しておく。この二次の項と先ほどの一次の項からなる無限級数による Green 関数は

$$G(p) = G_0(p) + n_{\text{imp}} G_0(p) (V_0 + V_0 G_0(x, x) V_0) G(p) \quad (31)$$

となる。

2.3 n 次

以上の展開から、 n 次の展開の形を予想することができる。詳細は参考文献にゆずる³。 n 次の展開には、 $n - 1$ 次までの展開のすべての組み合わせが含まれているはずである。また、二次の展開から予想されるように、 n 次の展開に出てくる n 個の積分変数 k_1, \dots, k_n に関する和がゼロになる (散乱に関連する運動量が保存する):

$$\sum_i k_i = 0 \quad (32)$$

³Mahan 本の p.244 あたり

プロセスのみが存在しているはずだろう。従って、 $n-1$ 次の項による無限級数の式に現れない n 次で初めて出てくる項は、

$$G(p, p')^{(n)'} = \int \frac{dk_1}{(2\pi)^D} G_0(p) V_0 \int \frac{dk_2}{(2\pi)^D} G_0(p - k_1) V_0 \int \frac{dk_3}{(2\pi)^D} G_0(p - k_1 - k_2) V_0 \int \frac{dk_4}{(2\pi)^D} G_0(p - k_1 - k_2 - k_3) V_0 \\ \times \cdots \times \int \frac{dk_n}{(2\pi)^D} G_0 \left(p - \sum_{i'}^n k_{i'} \right) \delta_{(p - \sum_{i'}^n k_{i'}, p') n_{\text{imp}} \delta_{\sum_i k_i, 0}} \quad (33)$$

$$= n_{\text{imp}} G_0(p) \int \frac{dk_1}{(2\pi)^D} G_0(k_1) V_0 \int \frac{dk_2}{(2\pi)^D} G_0(k_2) V_0 \int \frac{dk_3}{(2\pi)^D} G_0(k_3) V_0 \\ \times \cdots \times \int \frac{dk_{n-1}}{(2\pi)^D} G_0(k_{n-1}) V_0 G_0(p) \quad (34)$$

$$= n_{\text{imp}} G_0(p) V_0 G_0(x, x) V_0 \times \cdots \times G_0(x, x) V_0 G_0(p) \quad (35)$$

と書けるはずである。

よって、今回考えたプロセスすべてを含んだ Green 関数は

$$G(p, p') = G_0(p) \delta_{p, p'} + n_{\text{imp}} G_0(p) (V_0 + V_0 G_0(x, x) V_0 + \cdots) G(p, p') \quad (36)$$

$$= G_0(p) \delta_{p, p'} + n_{\text{imp}} G_0(p) T G(p, p') \quad (37)$$

$$T \equiv V_0 + V_0 G_0(x, x) T \quad (38)$$

となる。この Green 関数は、 n_{imp} と V_0 に関する展開をそれぞれ無限次まで取り込んだものになっている。これが T-matrix approximation である。以上から、この近似に置ける自己エネルギー $\Sigma(\omega_n)$ は

$$\Sigma(\omega_n) = n_{\text{imp}} T(\omega_n) \quad (39)$$

である。

2.4 近似の条件

この近似に関しては、一つ注意すべきことがある。ここで考えている Green 関数が可能なすべてのプロセスを足し上げてできたものではない、ということである。実はさりげなく近似を行っている。この近似は不純物平均の三次以降の項を見ればわかる。たとえば、不純物平均の三次 (V_0 の三次) の項は

$$\left\langle \sum_{i, i', i''} e^{-ikx_i} e^{-ik'x_{i'}} e^{-ik''x_{i''}} \right\rangle_{\text{av}} \quad (40)$$

と書けるが、この項は

$$\left\langle \sum_{i, i', i''} e^{-ik_1 x_i} e^{-ik_2 x_{i'}} e^{-ik_3 x_{i''}} \right\rangle_{\text{av}} = n_{\text{imp}} \delta_{k_1+k_2+k_3, 0} + n_{\text{imp}} (n_{\text{imp}} - 1) [\delta_{k_1, 0} \delta_{k_2+k_3, 0} + \delta_{k_2, 0} \delta_{k_3+k_1, 0} + \delta_{k_3, 0} \delta_{k_1+k_2, 0}] \\ + n_{\text{imp}} (n_{\text{imp}} - 1) (n_{\text{imp}} - 2) \delta_{k_1, 0} \delta_{k_2, 0} \delta_{k_3, 0} \quad (41)$$

と計算できる。 n_{imp} が大きいとすれば、

$$\left\langle \sum_{i, i', i''} e^{-ik_1 x_i} e^{-ik_2 x_{i'}} e^{-ik_3 x_{i''}} \right\rangle_{\text{av}} = n_{\text{imp}} \delta_{k_1+k_2+k_3, 0} + n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1, 0} \delta_{k_2+k_3, 0} + \delta_{k_2, 0} \delta_{k_3+k_1, 0} + \delta_{k_3, 0} \delta_{k_1+k_2, 0}] \\ + n_{\text{imp}}^3 \delta_{k_1, 0} \delta_{k_2, 0} \delta_{k_3, 0} \quad (42)$$

になる。この三次の項のうち、前節で得られた Green 関数に取り入れられているのは

$$\left\langle \sum_{i, i', i''} e^{-ik_1 x_i} e^{-ik_2 x_{i'}} e^{-ik_3 x_{i''}} \right\rangle_{\text{av}} = n_{\text{imp}} \delta_{k_1+k_2+k_3, 0} + n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1, 0} \delta_{k_2+k_3, 0} + \delta_{k_3, 0} \delta_{k_1+k_2, 0}] \\ + n_{\text{imp}}^3 \delta_{k_1, 0} \delta_{k_2, 0} \delta_{k_3, 0} \quad (43)$$

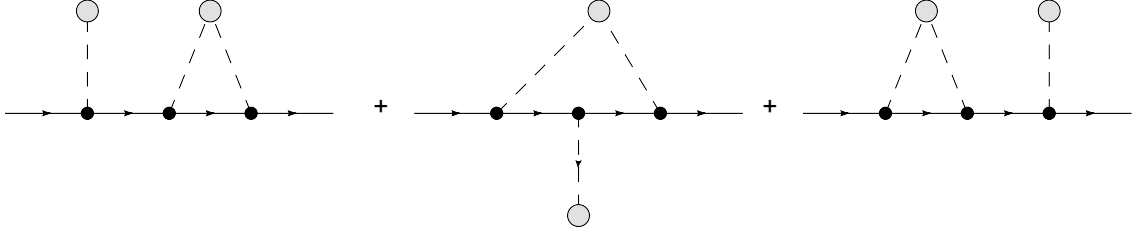


図 1: V_0 の三次の摂動のうち、 n_{imp} の二次に比例する項。灰色の丸では接続している相互作用線が運ぶ運動量の和がゼロになる。

である。ダイアグラムで描くと図 1 になり、これら三つのうち真ん中の項を無視したことに対応する。 n_{imp} の一次に比例する項が V_0 の三次摂動になって初めて出てきた項で、 n_{imp} の三次に比例する項は V_0 の一次摂動が三回繰り返された項である。どちらも上の近似で取り入れられている。

次に、四次の項を見る。四次の項はさらにたくさんの項からなる。それら全部を書き下すと⁴

$$\begin{aligned}
\langle \sum_{i,i',i'',i'''} e^{-ik_1x_i - ik_2x_{i'} - ik_3x_{i''} - ik_4x_{i'''}} \rangle_{\text{av}} &= n_{\text{imp}} \delta_{k_1+k_2+k_3+k_4,0} \\
&+ n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1,0} \delta_{k_2+k_3+k_4,0} + \delta_{k_2,0} \delta_{k_1+k_3+k_4,0} + \delta_{k_3,0} \delta_{k_1+k_2+k_4,0} + \delta_{k_4,0} \delta_{k_1+k_2+k_3,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1+k_2,0} \delta_{k_3+k_4,0} + \delta_{k_1+k_3,0} \delta_{k_2+k_4,0} + \delta_{k_1+k_4,0} \delta_{k_2+k_3,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^3 [\delta_{k_1,0} \delta_{k_2,0} \delta_{k_3+k_4,0} + \delta_{k_1,0} \delta_{k_3,0} \delta_{k_2+k_4,0} + \delta_{k_1,0} \delta_{k_4,0} \delta_{k_2+k_3,0} \\
&+ \delta_{k_2,0} \delta_{k_3,0} \delta_{k_1+k_4,0} + \delta_{k_2,0} \delta_{k_4,0} \delta_{k_1+k_3,0} + \delta_{k_3,0} \delta_{k_4,0} \delta_{k_1+k_2,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^4 \delta_{k_1,0} \delta_{k_2,0} \delta_{k_3,0} \delta_{k_4,0}
\end{aligned} \tag{44}$$

となる。これらの項のうち、上の近似で取り入れられている項は

$$\begin{aligned}
\langle \sum_{i,i',i'',i'''} e^{-ik_1x_i - ik_2x_{i'} - ik_3x_{i''} - ik_4x_{i'''}} \rangle_{\text{av}} &= n_{\text{imp}} \delta_{k_1+k_2+k_3+k_4,0} \\
&+ n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1,0} \delta_{k_2+k_3+k_4,0} + \delta_{k_4,0} \delta_{k_1+k_2+k_3,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^2 [\delta_{k_1+k_2,0} \delta_{k_3+k_4,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^3 [\delta_{k_1,0} \delta_{k_2,0} \delta_{k_3+k_4,0} + \delta_{k_1,0} \delta_{k_4,0} \delta_{k_2+k_3,0} \\
&+ \delta_{k_3,0} \delta_{k_4,0} \delta_{k_1+k_2,0}] \\
&+ n_{\text{imp}}^4 \delta_{k_1,0} \delta_{k_2,0} \delta_{k_3,0} \delta_{k_4,0}
\end{aligned} \tag{45}$$

である。取り入れていない項は、ダイアグラムで見ると、図 2 の真ん中と右である⁵。

三次と四次の項を見ると、取り入れなかった項が二種類に分けられることがわかる。一つは、四次の図 2 の真ん中のダイアグラムで示されるようなプロセスである。灰色の丸は同じ不純物上での散乱を表しているの、相互作用線が交差しているということは「ある不純物 1 に散乱されて運動量を失い、さらに他の不純物 2 に散乱されて運動量を失い、また不純物 1 に散乱され最初の運動量をもらい、最後に不純物 2 にまた散乱され合計の運動量を回復する」というプロセスを表している。これは、実空間において不純物同士がとても近い場合には考慮すべきプロセスである。もう一つは、四次の図 2 の右のダイアグラムで示されるようなプロセスである。これは、「ある不純物 1 に散乱されて運動量を失い、次に他の不純物 2 に散乱されるが運動量変化はなく、最後に不純物 1 に散乱されて最初の運動量をもらう」というプロセスである。

以上から、上の T-Matrix approximation では、不純物はそれなりにたくさんあるが、不純物同士の距離が十分離れている場合、に妥当な近似であることがわかる。

⁴ n_{imp} は大きいものとしておく。

⁵ n_{imp} の二次の項のうち、相互作用線が二本ずつあるものを選んだ。

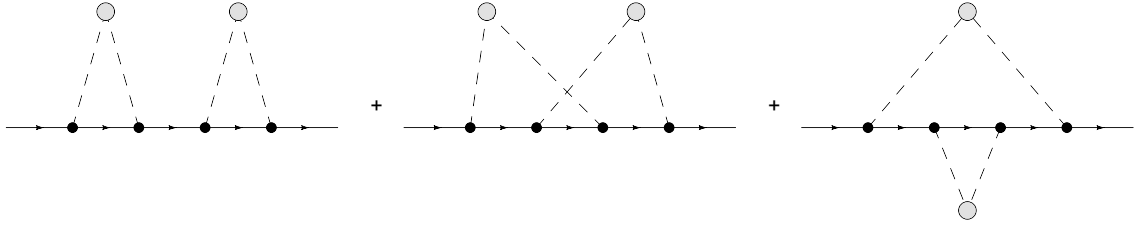


図 2: V_0 の四次の摂動のうち、 n_{imp} の二次に比例する項でかつ相互作用線が二本ずつ伸びているダイアグラム。灰色の丸では接続している相互作用線が運ぶ運動量の和がゼロになる。

3 Self-consistent T-matrix approximation

最後に、Self-consistent T-matrix approximation について考える。この近似は、図 1 の真ん中や図 2 の右のダイアグラムを考慮する近似である。これらのダイアグラムは、 V_0 の二次のダイアグラムの真ん中の G_0 (図 3 左のダイアグラムの真ん中の線) にサブダイアグラムを付け加えたものと解釈することができる。さらに、相互作用中の G_0 の中に入れ子状に無限にサブダイアグラムを付け加えていくことが可能である。もし、考えられうるすべての高次の項が G_0 に付け加えられたとすれば、それは G_0 を G に置き換えていることに他ならない (図 3 の右のダイアグラムを参照。)。故に、このタイプのダイアグラムをすべて考慮した T-Matrix は

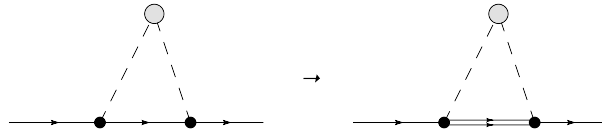


図 3: V_0 の二次の摂動。

$$T = V_0 + V_0 G(x, x) T \quad (46)$$

となる。これは、前節の T-Matrix の $G_0(x, x)$ を $G(x, x)$ に置き換えたものである。Green 関数は

$$G(p) = \frac{1}{G_0(p) - n_{\text{imp}} T} \quad (47)$$

であるから、Green 関数を計算する為には、T-Matrix の表式と上式を自己無撞着に計算して T と G を決めなくてはならない。したがって、self-consistent T-matrix approximation と呼ばれる。この近似は、準粒子のダンピングを考慮したことにも対応しており、平均自由行程を定義することができるようになっている。

この近似においても、四次の図 2 の真ん中のダイアグラムで示されるようなプロセスは考慮されていないので、「不純物同士が実空間で近くにありすぎない」必要がある。いま、ランダムに分布させている系を考えているので、不純物の密度が極端に大きすぎないというのが近似の適用条件である。

参考文献

G. D. Mahan: Many-Particle Physics, Plenum Press, New York and London, 1981