ХФТИ 84-4

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ
ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ АТОМНОЙ ЭНЕРГИИ СССР

ЦЕНТРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ИНФОРМАЦИИ И ТЕХНИКО-ЭКОНОМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ПО АТОМНОЙ НАУКЕ И ТЕХНИКЕ

А.П.Ивашин, В.Д.Цуканов

О РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ИНТЕГРАЛОВ СТОЛКНОВЕНИЙ В КВАНТОВОЙ МОДЕЛИ ЛОРЕНЦА

Москва–1984

УДК 536-I2:539.2

ИВАШИН А.П., ЦУКАНОВ В.Д. О регуляризации интегралов столкновений в квантовой модели Лоренца: Препринт ХФТИ 84-4, М.: ЦНИИатоминформ, I984. - I3 с.

Получено замкнутое уравнение для интеграла столкновений в квантовой модели Лоренца. В разложении по плотности выделены расходящиеся диаграммы. Указана процедура устранения расходимостей и получены регуляризованные выражения для интеграла столкновений в двумерном случае.

Рис. I, список лит. - 5 назв.

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассматривается вопрос о вириальном разложении интеграла столкновений в квантовой модели Лоренца, описывающей ансамбль легких невзаимодействующих частиц, движущихся в поле случайно расположенных неподвижных рассеивающих центров. Хорошо известно, что вириальные разложения коэффициентов переноса классических систем содержат расходящиеся члены, регуляризация которых приводит к логарифмической зависимости от плотности (см. обзор [I]). В квантовом случае аномальное поведение коэффициента самодиффузии для модели Лоренца рассматривалось в [2]. Мы будем изучать вопрос об этих расходимостях на уровне кинетических уравнений.

Во втором и третьем разделах настоящей работы в методе сокращенного описания получено замкнутое уравнение для интеграла столкновений и указана процедура его решения в терминах связных частей многопримесных резольвент на основе уравнений многочастичного рассеяния.

В четвертом разделе анализируется интеграл столкновений второго приближения и выделяются расходящиеся в двумерном случае диаграммы.

В пятом разделе рассмотрены элементы скелетной диаграммной техники и получено выражение для операторов рассеяния.

Процедура устранения расходимостей, а также регуляризованное выражение для интеграла столкновений в двумерном случае приведены в шестом разделе.

2. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ

Функция распределения $F_N \equiv F_N(x_1 \ldots x_N)$ частицы, движущейся в поле N случайно распределенных в пространстве примесей с координатами $x_1 \ldots x_N$, удовлетворяет уравнению Лиувилля:

$$\frac{\partial F_N}{\partial t} = i[F_N, H_N], \quad H_N = H_0 + V_N, \quad V_N = \sum_{i=1}^{N} V(x_i), \qquad (I)$$

где H_0 – оператор кинетической энергии частицы; $V(x_i)$ – оператор взаимодействия с примесью, находящейся в точке x_i.

В термодинамическом пределе состояние такой системы описывается с помощью функций распределения

$$f_s(x_1 \dots x_s) = \lim_{N, v \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{dy_i}{v} F_{N+S}(x_1 \dots x_s y_1 \dots y_N), \qquad n = \frac{N}{v}, \quad (2)$$

где $v = e^d$ –"объем"; ℓ – линейные размеры; d – размерность системы; n – плотность примесей. Для операторов f_s из (1), (2) можно получить обычную цепочку уравнений Боголюбова. Предполагая, что имеет место упрощенный этап эволюции [3], когда зависимость операторов f_s от времени определяется через посредство зависимости от времени функций распределения $\overset{\circ}{f} = f$, для оператора $f_{s\tau} \equiv e^{iH_0\tau} f_s e^{-iH_0\tau}$ из (1), (2) получаем

$$\frac{\partial f_{s\tau}}{\partial \tau} = \lim_{N, v \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{dy_i}{v} e^{iH_0\tau} \left\{ i[F_{N+S}, V_{N+S}] - L \frac{\partial}{\partial f} F_{N+S} \right\} e^{-iH_0\tau}, \quad (3)$$

где

$$L \equiv \dot{f} = in \int dx \, [f_1(x), V(x)],$$

n – плотность примесей. Операция $L \frac{\partial}{\partial f}$ применяется только к укороченным функциям распределения и, следовательно, в (3) выполняется только после предельного перехода $N, v \to \infty$. В (3) и ниже аргументы $x_1 \dots x_s, y_1 \dots y_N$ явно не выписываются.

Интегрируя (3) по τ в пределах от $-\infty$ до 0 с учетом эргодического условия

$$e^{iH_0\tau} f_s e^{-iH_0\tau} \xrightarrow[\tau \to -\infty]{} f, \quad (4)$$

находим

$$f_s = f + \int_{-\infty}^{0} d\tau \, e^{\eta\tau} e^{iH_0\tau} \lim \int \prod \frac{dy_i}{v} \left\{ i[F_{N+S}, V_{N+S}] - L \frac{\partial}{\partial f} F_{N+S} \right\} e^{-iH_0\tau}, \quad \eta \to +0 \quad (5)$$

Параметр η необходимо устремить к нулю после термодинамического предельного перехода. Эргодическое условие (4) выписано для случая, когда распределение примесей в пространстве является однородным и корреляция между ними отсутствует. Коммутируя (5) с H_0, находим

$$\lim_{N, v \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{dy_i}{v} \left\{ i[H_{N+S}, F_{N+S}] + L \frac{\partial F_{N+S}}{\partial f} + \eta F_{N+S} \right\} = \eta f. \quad (6)$$

Формулы (5), (6) в терминах укороченных функций распределения зависят от f_{s+1} и поэтому являются эквивалентными цепочками уравнений. Для формального решения цепочки (6) введем оператор

$$f_s(\tau)=\lim_{N,\mathcal{V}\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{\mathcal{V}}\, e^{\tau\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)} e^{iH_{N+s}\tau}\, F_{N+s}\cdot e^{-iH_{N+s}\tau}.$$

Тогда

$$\frac{\partial f_s(\tau)}{\partial\tau}=e^{\tau\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)}\lim_{N,\mathcal{V}\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{\mathcal{V}}\, e^{iH_{N+s}\tau}\Big\{i\left[H_{N+s},F_{N+s}\right]+$$
$$+L\frac{\partial F_{N+s}}{\partial f}+\eta F_{N+s}\Big\}e^{-iH_{N+s}\tau}. \tag{7}$$

Несмотря на наличие операторов эволюции под знаком усреднения, выражение

$$i\left[H_{N+s},F_{N+s}\right]+L\frac{\partial F_{N+s}}{\partial f}+\eta F_{N+s} \tag{8}$$

в (7) можно, в соответствии с (6), заменить на ηf. Действительно, операторы эволюции можно всегда представить в виде разложения по связным группам. Так как каждый член такого разложения содержит лишь конечное число примесных переменных, то в термодинамическом пределе выражение (8) в (7) будет содержать бесконечное число переменных интегрирования, не входящих в связные группы операторов эволюции. Поэтому выражение (8), в силу уравнения (6), справедливого при произвольном S, можно в формуле (7) заменить на ηf. Тогда, интегрируя (7) по τ в пределах от $-\infty$ до 0, получаем

$$f_s=\eta\int_{-\infty}^{0}d\tau\, e^{\tau\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)}\lim_{N,\mathcal{V}\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{\mathcal{V}}\, e^{iH_{N+s}\tau} f e^{-iH_{N+s}\tau},$$

или, в силу унитарности операторов эволюции,

$$f_s=\eta\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)^{-1}f+\eta\int_{-\infty}^{0}d\tau\, e^{\tau\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)}\lim_{N,\mathcal{V}\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{\mathcal{V}}\, e^{iH_{N+s}\tau}\left[f,e^{-iH_{N+s}\tau}\right].$$

Положив здесь $S=0$, найдем уравнение для интеграла столкновений

$$L=\eta\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)\int_{-\infty}^{0}d\tau\, e^{\tau\left(\eta+L\frac{\partial}{\partial f}\right)}\lim_{N,\mathcal{V}\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{\mathcal{V}}\, e^{iH_N\tau}\left[f,e^{-iH_N\tau}\right] \tag{9}$$

Наконец, это уравнение удобно переписать в терминах многопримесных резольвент $R^{(N)}(\omega)=(\omega-H_N)^{-1}$. После очевидных преобразований найдем

$$\mathcal{L}=\hbar\left(\hbar+L\frac{\partial}{\partial f}\right)\exp\left\{L\frac{\partial}{\partial f}\frac{\partial}{\partial \hbar}\right\}(2\pi)^{-1}\int dE\; S(E)\,, \tag{I0}$$

$$S(E)=\lim_{N,V\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dy_i}{V}\,R^{(N)}\!\left(E+\frac{i\hbar}{2}\right)\left[f,\,R^{(N)}\!\left(E-\frac{i\hbar}{2}\right)\right] \tag{II}$$

Операцию $\frac{\partial}{\partial \hbar}$ в этом уравнении применяем только к оператору $S(E)$, не затрагивая L. Подчеркнем, что "интеграл столкновений", определяемый уравнением (I0), зависит от $\hbar$. Истинный же интеграл столкновений находится в результате предельного перехода $\hbar\to+0$ после решения уравнения (I0) относительно $\mathcal{L}(\hbar)$.

3. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ ЧЕРЕЗ СВЯЗНЫЕ ЧАСТИ МНОГОПРИМЕСНЫХ РЕЗОЛЬВЕНТ

Операторы $C^{(\ell)}(x_1\ldots x_\ell)$, последовательно определяемые цепочкой соотношений

$$R^{(N)}(x_1\ldots x_N)=R^{(0)}+\sum_{i=1}^{N}C^{(1)}(x_i)+\sum_{i<j}C^{(2)}(x_i,x_j)+\ldots+C^{(N)}(x_1\ldots x_N),$$

являются связными частями операторов $R^{(\ell)}(x_1\ldots x_\ell)$. Подставляя это выражение в формулу (II), находим

$$S(E)=\lim_{N,V\to\infty}\sum_{j\ell s}\frac{\binom{s}{N}\binom{\ell-s}{N-s}\binom{j-\ell}{N-\ell}}{V^{\ell+j+s}}\int dy_1\ldots dy_s\,dx_{s+1}\ldots dx_\ell\,dz_{s+1}\ldots dz_j\,\times$$

$$\times C^{(\ell)}\!\left(\left(E+\frac{i\hbar}{2}\right);y_1\ldots y_s\,x_{s+1}\ldots x_\ell\right)\left[f,\,C^{(j)}\!\left(E-\frac{i\hbar}{2};\,y_1\ldots y_s\,z_{s+1}\ldots z_j\right)\right]=$$

$$=\sum_{s\ell j}\frac{n^{j+\ell+s}}{s!\,\ell!\,j!}\int dx_1\ldots dx_s\,dy_1\ldots dy_\ell\,dz_1\ldots dz_j\;C^{(\ell+s)}\!\left(E+\frac{i\hbar}{2};\,x_1\ldots x_s\,y_1\ldots y_\ell\right)\times$$

$$\times\left[f,\,C^{(j+s)}\!\left(E-\frac{i\hbar}{2};\,x_1\ldots x_s\,z_1\ldots z_j\right)\right]. \tag{I2}$$

Сходимость последнего интеграла обеспечивается тем, что корреляционные операторы $C^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell)$ обращаются в нуль, когда любой из аргументов $x_1 \dots x_\ell$ стремится к бесконечности.

Формулу (I2) необходимо дополнить уравнениями для операторов C_ℓ. Связные части многочастичных резольвент удовлетворяют уравнениям Вайнберга [4], которые применительно к рассматриваемой модели имеют вид

$$C^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} C^{(\ell-1)}(x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell)\, V(x_i)\, R^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell) \,. \tag{I3}$$

Из этих уравнений целесообразно исключить оператор взаимодействия V. Определяя операторы рассеяния $T^{(\ell)}(x_i, x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell)$ формулой

$$T^{(\ell)}(x_i, x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell) R^{(0)} = V(x_i)\, R^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell), \quad R \equiv R^{(0)}, \tag{I4}$$

переписываем (I3) в виде

$$C^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} C^{(\ell-1)}(x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell)\, T^{(\ell)}(x_i, x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell)\, R^{(0)} . \tag{I5}$$

Используя тождество

$$R^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell) = R^{(1)}(x_i) \Big\{ 1 + \sum_{j \neq i} V(x_j)\, R^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell) \Big\},$$

из (I4) получаем уравнения для операторов $T^{(\ell)}(x_i; x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell)$:

$$T^{(\ell)}(x_i; x_1 \dots x_{i-1}, x_{i+1} \dots x_\ell) = T(x_i) \Big\{ 1 + R \sum_{j \neq i} T^{(\ell)}(x_j; x_1 \dots x_{j-1}, x_{j+1} \dots x_\ell) \Big\}, \tag{I6}$$

где $T(x)$ – однопримесный оператор рассеяния, удовлетворяющий уравнению

$$T(x) = V(x)\big(1 + R\, T(x)\big). \tag{I7}$$

Уравнения (I5), (I6) определяют операторы $C^{(\ell)}(x_1 \dots x_\ell)$ в терминах однопримесного оператора рассеяния $T(x)$. В частности

$$C^{(1)}(x) = R\, T(x) R, \quad C^{(2)}(x_1, x_2) = \big(1 + R T(x_1)\big) R\, T(x_2) R\, T(x_1) \big(1 - R T(x_2) R T(x_1)\big)^{-1} R + {} + x_1 \rightleftarrows x_2 \,. \tag{I8}$$

Таким образом, вычисление интеграла столкновений сводится к решению системы уравнений (I0), (I2), (I5), (I6).

4. О РАСХОДИМОСТЯХ В ИНТЕГРАЛЕ СТОЛКНОВЕНИЙ

При вычислении интеграла столкновений отдельные члены могут содержать сингулярные произведения обобщенных функций

$$\left(E+\frac{i\gamma}{2}-\varepsilon_1\right)^{-\ell_1}\left(E-\frac{i\gamma}{2}-\varepsilon_1\right)^{-\ell_1'}\cdots\left(E+\frac{i\gamma}{2}-\varepsilon_k\right)^{-\ell_k}\left(E-\frac{i\gamma}{2}-\varepsilon_k\right)^{-\ell_k'},$$

где $\varepsilon_1\neq\varepsilon_2\neq\ldots\neq\varepsilon_k$, а $\ell_1', \ell_1, \ldots, \ell_k, \ell_k'$ – целые числа, которые с учетом фактора (см. (I0))

$$\gamma\left(\gamma+L\frac{\partial}{\partial f}\right)e^{L\frac{\partial}{\partial f}\frac{\partial}{\partial \gamma}}$$

расходятся при $\gamma\to+0$. Это обычные секулярные члены, расходимость которых не связана с размерностью системы d и которые должны сокращаться в каждом порядке по плотности. Помимо этого некоторые интегралы по импульсам могут расходиться при $\gamma\to+0$. Эти расходимости существенно связаны с размерностью системы. Так, при $d=2$ такие расходимости возникают начиная со второго, а при $d=3$ – с третьего порядка по плотности. В линейном приближении интеграл столкновений

$$L_p^{(1)}=2\pi n\vartheta\sum_1\left|T_{p1}^{(+)}(\varepsilon_p)\right|^2\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_1)(f_1-f_p)$$

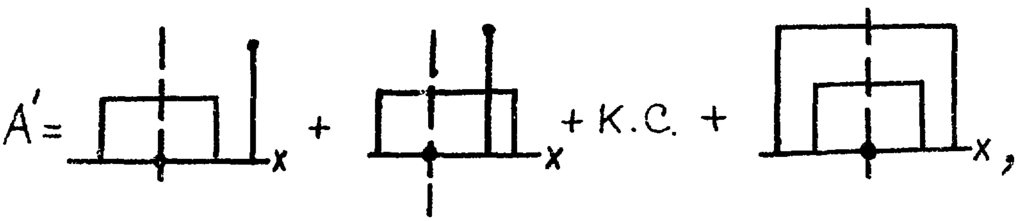
существует при произвольной размерности и его вычисление не сопровождается появлением секулярных членов.

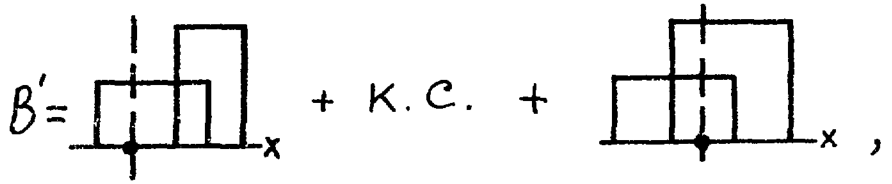
Второе приближение, согласно (I0) и (I2), находится из формулы

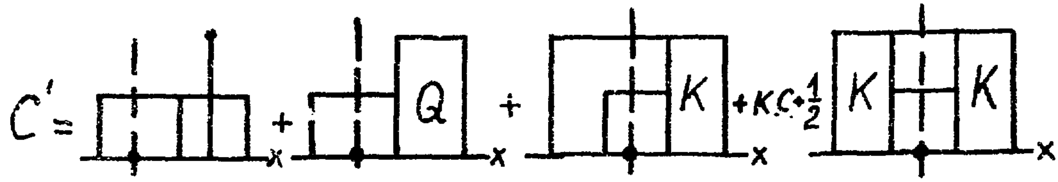
$$L_p^{(2)}=\lim_{\gamma\to0}\left\{-\frac{1}{2}L^{(1)}\frac{\partial L_p^{(1)}}{\partial f}-\frac{\partial L^{(1)}(\gamma)}{\partial\gamma}\frac{\partial L_p^{(1)}}{\partial f}+\frac{n^2\gamma^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dE\;S_p^{(2)}(E)\right\}, \qquad (I9)$$

где $S^{(2)}(E)$ – коэффициент при n^2 в формуле (I2), который, в соответствии с (I8), можно представить в виде суммы трех групп диаграмм:

$$S^{(2)}(E)=(A-A')+(B-B')+(C-C').$$







На этих диаграммах вертикальными сплошными линиями обозначены одно-примесные операторы рассеяния $T(x)$, зависимость которых от координат примесей определяется формулой

$$T(x) = e^{-i\hat{p}x} T(0) e^{i\hat{p}x} \equiv e^{-i\hat{p}x} T e^{i\hat{p}x},$$

где $\hat{p}$ – оператор импульса электрона. Операторы рассеяния, соединенные одной горизонтальной линией, относятся к одной примеси. Предполагается, что по координатам примесей проводится интегрирование. С отрезками нижней горизонтальной линии сопоставляются свободные электронные резольвенты $R(E \pm \frac{i\xi}{2})$. Все диаграммы разделены пунктирной линией на левые и правые части. В левых частях операторы T и R зависят от $E + \frac{i}{2}\xi$, а в правых – от $E - \frac{i}{2}\xi$. Крестом на электронной линии обозначено положение электронной функции распределения. В диаграммах А, В, С оператор f будет находиться внутри диаграмм между соответствующими левыми и правыми частями. Двухпримесные операторы Q и K даются формулами

$$Q(x,x_1) = \{1+T(x_1)R\}\{1-T(x_2)RT(x_1)R\}^{-1} T(x_2)RT(x_1)RT(x_2)RT(x_1) + x_1 \rightleftarrows x_2,$$

$$K(x,x_2) = \{T(x_1)RT(x_2)RT(x_1) + x_1 \rightleftarrows x_2\} + Q(x,x_2).$$

В силу пространственной однородности операторы $S(E)$, а следовательно, и L, A, B, C диагональны в p-представлении. В группу $A-A'$ объединены диаграммы, матричные элементы которых под знаком суммы по импульсам I,2 содержат произведения знаменателей вида

$$|E-\varepsilon_p+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2}(E-\varepsilon_p+\tfrac{i}{2}\hbar)^{-1}|E-\varepsilon_1+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2},$$

$$|E-\varepsilon_p+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2}|E-\varepsilon_1+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2}|E-\varepsilon_p+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2}.$$

Эти произведения с учетом множителя $\hbar$ в (I9) расходятся при $\hbar\to+0$ как $\frac{1}{\hbar}$. Учитывая, что согласно (I7)

$$\mathrm{Im}\, T_{11}(E-\tfrac{i}{2}\hbar)=\frac{\hbar}{2}\sum_2 |T_{12}(E-\tfrac{i}{2}\hbar)|^2|E-\varepsilon_2+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2},$$

можно показать, что расходящаяся часть асимптотики диаграмм A_p-A_p' сокращается с первым слагаемым в формуле (I9).

Группа диаграмм B не содержит секулярных членов. Замечая, что

$$\hbar|E-\varepsilon+\tfrac{i}{2}\hbar|^{-2}\xrightarrow[\hbar\to+0]{}2\pi\delta(E-\varepsilon)+O(\hbar),$$

после интегрирования по координатам примесей получаем

$$\frac{\hbar^2}{2\pi}\int dE\{B_p(E)-B_p'(E)\}\xrightarrow[\hbar\to+0]{}2\pi v^2\sum_{123}\{T^{(+)}_{p1}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{12}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{23}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{3p}(\varepsilon_p)\times$$

$$\times\delta_{p+2,1+3}(\varepsilon_p-\varepsilon_2-\tfrac{i}{2}\hbar)^{-1}(\varepsilon_p-\varepsilon_3-\tfrac{i}{2}\hbar)^{-1}+\text{к.с.}+T^{(+)}_{p2}(\varepsilon_p)\,T^{(+)}_{21}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{13}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{3p}(\varepsilon_p)\times$$

$$\times\delta_{p+1,2+3}(\varepsilon_p-\varepsilon_2+\tfrac{i}{2}\hbar)^{-1}(\varepsilon_p-\varepsilon_3-\tfrac{i}{2}\hbar)^{-1}\}(f_1-f_p)\,\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_1). \qquad (20)$$

Линейные замены $3-p=q$ в первом слагаемом и $2-p=-q$ во втором приводят это выражение к виду

$$\frac{\hbar^2}{2\pi}\int dE\{B_p(E)-B_p'(E)\}\xrightarrow[\hbar\to+0]{}\frac{m^2v^4}{(2\pi)^{2d-1}}\int d\vec q\int d\vec q\,'\{\varphi(pqq')(\vec q\vec q\,'+\frac{q^2}{2}+\frac{im\hbar}{2})^{-1}\times$$

$$\times(\vec q\vec p+\frac{q^2}{2}+\frac{im\hbar}{2})^{-1}+\text{к.с.}-\psi(pqq')(\vec q\vec q\,'+\frac{q^2}{2}+\frac{im\hbar}{2})^{-1}\times$$

$$\times\left(\vec{q}\vec{p}-\frac{q^2}{2}+\frac{im\hbar}{2}\right)^{-1}\Big\}\cdot\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{q'})(f_{q'}-f_p), \qquad (21)$$

где

$$\varphi(pqq') = T^{(+)}_{p,q'}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{q',q+q'}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{q+q',q+p}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{q+p,p}(\varepsilon_p),$$

$$\psi(pqq') = T^{(+)}_{p,p-q}(\varepsilon_p)\,T^{(+)}_{p-q,q'}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{q',q+q'}(\varepsilon_p)\,T^{(-)}_{q+q',p}(\varepsilon_p).$$

Подчеркнем, что $T_{12}\sim\frac{1}{\vartheta}$ и $\vartheta\equiv\ell^d$. Интегралы (21) сходятся в трехмерном случае при $\hbar\to+0$ и расходятся в двумерном как $\ln\hbar$ (см.(III)*

Диаграммы $C_p - C_p'$ не содержат секулярных членов и, кроме того, соображения размерности показывают, что их вклад остается конечным как в трехмерном, так и в двумерном случае. **

5. МАССОВЫЙ ОПЕРАТОР

Для дальнейшего изложения полезно ввести в рассмотрение элементы скелетной диаграммной техники. В качестве объектов, обобщающих операторы $C^{(s)}(x_1\ldots x_s)$, введем в рассмотрение модифицированные операторы $\bar{C}^{(s)}(x_1\ldots x_s)$ с помощью формулы

$$\bar{C}^{(s)}(x_1\ldots x_s)=\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{n^\ell}{\ell!}\int dy_1\ldots dy_\ell\, C^{(\ell+s)}(x_1\ldots x_s y_1\ldots y_\ell),\quad s\geq 0. \qquad (22)$$

Из уравнений для операторов $\bar{C}^{(s)}(x_1\ldots x_s)$, которые можно получить из (15), разложив предварительно операторы рассеяния $T^{(\ell+1)}(x, y_1,\ldots y_\ell)$ по связным группам T :

---

* Наличие q^2 в знаменателях подынтегральных выражений (21) не сказывается на асимптотике расходящихся членов, так как в этом случае при интегрировании по q существенна область $|q|\sim 0$.

** Первый член в диаграммах C, C' содержит знаменатель $(\varepsilon_p-\varepsilon_2+\frac{i}{2}\hbar)^{-2}$. Его вклад в интеграл столкновений L_p остается конечным при $\hbar\to+0$. Однако под знаком суммы $\sum\phi_p L_p$ расходится как $\ln\hbar$ при $d = 2$.

$$T(x,y_1\ldots y_\ell)=T(x)+\sum_{i=1}^{\ell}\tilde{T}(xy_i)+\sum_{i<j}\tilde{T}(xy_iy_j)+\ldots+\tilde{T}(xy_1\ldots y_\ell), \qquad (23)$$

выпишем только уравнение для $\bar{C}^{(0)}\equiv\bar{R}$:

$$\bar{R}=R+n\sum_{s=0}^{\infty}\frac{n^s}{s!}\int dy\,dy_1\ldots dy_s\,\bar{C}^{(s)}(y_1\ldots y_s)\,\tilde{T}^{(s+1)}(yy_1\ldots y_s)R. \qquad (24)$$

Операторы $\tilde{T}$, согласно (16) и (23), удовлетворяют уравнению

$$\tilde{T}^{(\ell+1)}(y,x_1\ldots x_\ell)=T(y)R\sum_{i=1}^{\ell}\Big\{\tilde{T}^{(\ell+1)}(x_i,yx_1\ldots x_{i-1}x_{i+1}\ldots x_\ell)+$$

$$+\tilde{T}^{(\ell)}(x_i,x_1\ldots x_{i-1}x_{i+1}\ldots x_\ell)\Big\}.$$

Анализ ряда теории возмущения показывает, что операторы $\bar{C}^{(s)}(x_1\ldots x_s)$ могут быть представлены в виде

$$\bar{C}^{(s)}(x_1\ldots x_s)=\bar{R}\,\bar{T}^{(s)}(x_1\ldots x_s)\bar{R},\quad s\geqslant 1, \qquad (25)$$

где $\bar{T}^{(s)}(x_1\ldots x_s)$ – сумма всех связных многопримесных диаграмм без внешних электронных линий, в которых выполнено интегрирование по положению всех примесей за исключением примесей с координатами $x_1\ldots x_s$ и в которых пересечением одной лишь электронной линии нельзя выделить часть, независящую по крайней мере от одной из переменных $x_1\ldots x_s$.

Из (24), (25) находим следующее выражение для оператора:

$$\bar{R}(\omega)=(\omega-H_0-\Sigma(\omega))^{-1},$$

где массовый оператор $\Sigma(\omega)$ определяется формулой

$$\Sigma(\omega)=n\int dy\,T(y)+n\sum_{s=1}^{\infty}\frac{n^s}{s!}\int dy\,dy_1\ldots dy_s\,\bar{T}^{(s)}(y_1\ldots y_s)\bar{R}\,\tilde{T}^{(s+1)}(y,y_1\ldots y_s). \qquad (26)$$

В теории возмущений по степеням плотности легко убедиться, что массовый оператор Σ есть сумма всех связных многопримесных диаграмм без внешних электронных линий, в которых выполнено интегрирование по положению примесей и которые нельзя разделить на две части пересечением одной лишь электронной линии.

Заметим, наконец, что оператор $\bar{R}$, определяемый формулой (22), при $S=0$ может быть записан также в виде

$$\bar{R}(\omega)=\lim_{N,v\to\infty}\int\prod_{i=1}^{N}\frac{dx_i}{v}\left(\omega-H_N(x_1\dots x_N)\right)^{-1}.$$

Отсюда, в частности, следует, что

$$\operatorname{sign} \mathcal{J}m\,\bar{R}_p\left(E+\frac{i}{2}\zeta\right)=-\operatorname{sign}\zeta .$$

С другой стороны, так как знаки мнимых частей операторов $\bar{R}_p(\omega)$ и $\Sigma_p(\omega)$ совпадают, то

$$\mathcal{J}m\,\Sigma_p\left(E\mp\frac{i}{2}\zeta\right)\gtrless 0,\quad \zeta>0. \tag{27}$$

6. УСТРАНЕНИЕ РАСХОДИМОСТИ.

Для того, чтобы получить конечное выражение для интеграла столкновений, выполним суммирование тех членов в выражении для L, которые модифицируют электронные резольвенты в диаграммах B, B'. Это соответствует замене энергетических знаменателей $(E-\varepsilon_1\pm i\zeta)^{-1}$ их регуляризованным выражением

$$\left(E\pm\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_1\right)^{-1}\longrightarrow\left(E\pm\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_1-\Sigma_1\left(E\pm\frac{i}{2}\zeta\right)\right)^{-1}. \tag{28}$$

Тогда регуляризованные знаменатели первой из диаграмм B, B' с учетом множителя ζ^2 в (19) примут вид

$$\zeta\left|E+\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_p-\Sigma_p\left(E+\frac{i}{2}\zeta\right)\right|^{-2}\zeta\left|E+\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_1-\Sigma_1\left(E+\frac{i}{2}\zeta\right)\right|^{-2}\times$$

$$\times\left(E-\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_2-\Sigma_2\left(E-\frac{i}{2}\zeta\right)\right)^{-1}\cdot\left(E-\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_3-\Sigma_3\left(E-\frac{i\zeta}{2}\right)\right)^{-1}. \tag{29}$$

Выполним теперь в этом выражении селекцию членов, которые ответственны за регуляризацию интеграла столкновений. Так как $\mathcal{J}m\Sigma\neq 0$, то выражение

$$\zeta\left|E+\frac{i}{2}\zeta-\varepsilon_1-\Sigma_1\left(E+\frac{i}{2}\zeta\right)\right|^{-2} \tag{30}$$

следует понимать лишь в смысле ряда по $\mathcal{J}m\Sigma$, поскольку в противном случае оно стремится к нулю при $\zeta\to+0$. Разложение формулы (30) по $\mathcal{J}m\Sigma$ наряду с конечными содержит также и секулярные члены по $\frac{1}{\zeta}$, которые в интеграле столкновений сокращаются с секулярными членами, обусловленными другими диаграммами. При этом, так как $Jm\Sigma \sim n$, все конечные члены, за исключением $\delta(E-\varepsilon_1)$, приводят в (29) лишь к поправкам по плотности. Вопрос же о сокращении секулярных членов, содержащихся в (29), может быть рассмотрен лишь при вычислении интеграла столкновений начиная с третьего приближения.

Замечая, что $Re\Sigma^{(+)}(E) = Re\Sigma^{(-)}(E)$, и пренебрегая $Jm\Sigma$ в выражениях, порождающих энергетические δ-функции (30), перепишем (29) в виде

$$\delta(E-\tilde{\varepsilon}_p(E))\,\delta(E-\tilde{\varepsilon}_1(E))\left(\tilde{\varepsilon}_p(E)-\tilde{\varepsilon}_2(E)-i\,Jm\Sigma_2^{(-)}(E)-\frac{i}{2}\gamma\right)^{-1}\times$$

$$\times\left(\tilde{\varepsilon}_p(E)-\tilde{\varepsilon}_3(E)-i\,Jm\Sigma_3^{(-)}(E)-\frac{i}{2}\gamma\right)^{-1}, \qquad (31)$$

$$\tilde{\varepsilon}_p(E) = \varepsilon_p + Re\Sigma_p^{(+)}(E).$$

Если учесть $\delta_{p+2,1+3}$ в (20), то можно убедиться, что оба знаменателя в (31) при $Jm\Sigma = 0$ обращаются в нуль, когда $p_3 \to p$. Отсюда вытекает, что формула (20), регуляризованная с помощью (31), при $Jm\Sigma = 0$ снова может быть приведена к виду (21). Таким образом, учет $Re\Sigma$ не устраняет расходимостей, а может привести лишь к поправкам по плотности в расходящихся членах. Следовательно, для регуляризации расходящихся членов необходимо учесть мнимую часть массового оператора в резольвентах, которые приводят к расходимостям. Действительно, согласно (27) $Jm\Sigma^{(-)}(E) > 0$. Поэтому $Jm\Sigma^{(-)}(E)$ в интеграле (21) выполняет функцию γ и обеспечивает сходимость интеграла (21) при $\gamma \to +0$. Используя (21), (26), (31), (III), получаем регуляризованное выражение для интеграла столкновений второго приближения при $d = 2$:

$$L_p^{(2)} \overset{d=2}{=} \frac{m^3 n^2}{2\pi p^2}\,\ln(n z_0^d)\,\left|M_p^{(+)}(\pi)\right|^2\left\{2\,Re\,M_p^{(+)2}(0)-\left|M_p^{(+)}(0)\right|^2\right\}(f_{-p}-f_p),$$

где $M_p^{(\pm)}(\theta) \equiv v\,T_{pq}^{(\pm)}(\varepsilon_p)\big|_{|q|=|p|}$ – амплитуда рассеяния; θ – угол между векторами $\vec{p}$ и $\vec{q}$; z_0 – величина порядка радиуса взаимодействия.

В трехмерном случае выражение $\gamma^2/2\pi\int dE\; S^{(2)}(E)$ остается конечным при $\gamma \to +0$ (П 2), а логарифмические члены появляются в третьем порядке по плотности. Расчет интеграла столкновений $L_p^{(3)}$ в трехмерном случае будет выполнен в следующей работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Следуя анализу, изложенному в [5], приведем асимптотические выражения для интеграла

$$J_p(\xi) = \int d\vec{q}\, d\vec{q}\,' (\vec{q}\vec{q}\,' + i\xi)^{-1} (\vec{q}\vec{p} + i\xi)^{-1} \chi(\vec{p}, \vec{q}\,', \vec{q})$$

при $\xi \to 0$ в двумерном и трехмерном случаях:

$$J_p(\xi) \simeq \frac{(2\pi)^2}{p} \ln\xi \int dq' \chi(\vec{p}, \vec{q}\,', 0) \Big|_{\widehat{\vec{p}, \vec{q}\,'} = \pi}, \quad d=2, \qquad (\text{П1})$$

$$J_p(\xi) \simeq J_p(0) - \frac{1}{p}(2\pi)^3 \xi \ln\xi \int\limits_0^\infty dq' \left(1 + \frac{q'}{p}\right) \chi(\vec{p}, \vec{q}\,', 0) \Big|_{\widehat{\vec{p}, \vec{q}\,'} = \pi}, \quad d=3. \qquad (\text{П2})$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dorfman J.R. Advances and challenges in the kinetic theory of gases. - Physica, 1981, vol.106 A, p.77-100.
2. Hoogeveen W., Tjon J.A. Anomalous transport properties of the quantum Lorentz gas. - Physica, 1982, vol.115 A, p.101-123.
3. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. - М.: Гостехиздат, 1946.
4. Weinberg S. Systematic solution of multiparticle scattering problems. - Phys. Rev., 1964, vol.133, p.232-256.
5. Gervois A., Pomeau J. Logarithmic divergence in the virial expansion of transport coefficients of hard spheres. - Phys. Rev., 1974, vol.A 9, p.2196-2213.

Анатолий Петрович Ивашин, Виктор Денисович Цуканов

О РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ИНТЕГРАЛОВ СТОЛКНОВЕНИЙ
В КВАНТОВОЙ МОДЕЛИ ЛОРЕНЦА

Редактор, корректор Е.И.Титова

Подписано в печать 16.01.84. Т-04136. Формат 60x84/16.
Офсетн. печ. 1,0 усл.п.л. 0,8 уч.-изд.л. Тираж 195. Заказ 136.
Индекс 3624

Отпечатано в Харьковском ордена Ленина и ордена Октябрьской Революции физико-техническом институте.
310108, Харьков, ул. Академическая, 1

12 коп.

Индекс 3624

Препринт, 1984, 1-13.