

电子系统中有限力程杂质散射势问题的解析框架 *

喻益湘^{1†} 车晓梅¹

1) (北京理工大学, 物理学院, 北京 100081)

在凝聚态物理无序系统的理论研究中, 点状杂质散射势模型因其零力程特性, 不仅在物理上只能描述安德森局域化的绝缘态, 而且在二维及三维情形下的自能微扰计算时会导致非物理的紫外发散问题. 为了克服这一困难并提供更具物理真实性的描述, 通常需要引入人为的动量截断或退化为唯象的近似, 这限制了对谱函数等核心物理量进行精确全动量解析表述的可能性. 本文引入了具有有限力程 a 的高斯型杂质散射势. 在弱无序极限下, 通过将动量空间积分化为 Weierstrass 微分算符的技巧, 系统地推导了二维和三维电子系统中自能, 谱函数的完全解析表达式. 研究结果表明, 高斯势的指数衰减特性为系统提供了天然的正则化截断, 不仅消除了高维下的发散, 还揭示了散射几率对电子动量的强烈选择性. 本文给出的解析结果为理解无序掺杂系统中的输运动力学提供了统一且无发散的论框架.

关键词: 自能, 谱函数, 紫外发散, 玻恩近似

PACS: 05.30.Fk, 11.25.Db, 05.40.-a, 03.65.Nk

1 引言

无序系统中电子的输运与激发特性一直是凝聚态物理研究的核心课题之一. 在真实的固体材料、半导体异质结以及近年来兴起的冷原子光学晶格中, 杂质或随机势场的存在会显著改变电子的量子态, 诱导如安德森局域化 (Anderson localization)^[1,2]、准粒子寿命缩短以及能带边缘展宽等丰富的物理现象. 在理论处理无序散射问题时, 最简单且被广泛采用的模型是 δ 函数势 (或称点散射模型), 比如近年来研究反常霍尔效应的一些工作就采用了这种模型^[3-6]. 其假设杂质散射的力程为零, 表现为杂质与电子以同等的概

† 通信作者. E-mail: yyx@bit.edu.cn (通信作者)

* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 12104042).

率交换任意大小和方向的动量。尽管 δ 势在处理一维系统或某些定性输运问题时展现了极大的便利性,但在高维系统 ($d \geq 2$) 的定量解析推导中,存在致命的理论缺陷。首先,点散射模型忽略了杂质势的空间结构和作用范围,无法准确描述半导体中具有空间扩展特性的杂质,而且各向同性的散射会使系统趋向于安德森局域化,这种模型天然不适合用来模拟电子输运系统。其次,在量子场论的微扰展开中,由于 δ 势缺乏高动量截断,计算自能 (self-energy) 和谱函数 (spectral function) 时会遭遇严重的紫外发散 (ultraviolet divergence) 问题。在二维情形下,自能表现为对数发散;而在三维情形下则呈线性发散,这使得研究者不得不手动引入非物理的硬截断,或者退化为唯象的近似处理,比如随机化杂质的散射势强度,把重要的散射势二阶矩或三阶矩参数化成常数^[7,8],严重限制了理论预测的精确度。为了克服上述困难,引入具有有限力程的散射模型势显得尤为重要,比如二维中的 Thomas-Fermi 屏蔽势^[9],三维中的 Yukawa 屏蔽势^[10,11],但是这些短程势在自能解析计算中往往很难处理。因此,本文采用高斯型杂质散射势 $V(r) \sim e^{-r^2/2a^2}$ 来描述这类平滑无序场。在物理上,它对应于经过屏蔽后的杂质势,其力程 a 为系统提供了一个自然的物理尺度,使得小角度散射成为主导,避免了安德森局域化;在数学上,其傅里叶变换在动量空间仍然具有高斯函数衰减特性,能够充当天然的重整化算符,从而在根源上消除了高维积分的发散问题。然而,长期以来,由于卷积积分的复杂性,关于高斯势在全动量空间下的解析谱函数研究相对较少,多数工作仍依赖于数值模拟或放弃散射势的显式表达进行唯象讨论。本文旨在建立一个处理多维系统高斯杂质散射的统一解析框架。我们将展示,利用微扰论中的 wigwam 图技术,配合 Weierstrass 算符化的微分处理方法,可以绕开复杂的动量空间积分,直接获得二维和三维系统中谱函数与准粒子寿命的解析表达式。本文的工作不仅在数学上实现了对紫外发散的优雅重整化,更在物理上揭示了散射势的有限力程如何通过增强前向散射来修正传统的 Drude 输运图像。这为深入理解半导体器件中的电输运和热输运过程以及冷原子系统中的无序效应提供了严谨的理论支撑。

2 杂质散射势中无相互作用粒子模型

考虑一个处于 d 维空间 ($d = 2, 3$) 中的电子系统,忽略电子间相互作用,假设系统中存在随机分布的静止无磁性杂质,系统的总 Hamiltonian 在实空间表示为:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \int d^d \mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu + \sum_i^{N_i} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right) \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中,化学势 μ (零温无杂质散射时, μ 即费米能) 由电子密度控制,即考虑巨正则系综。 N_i 标识杂质数量,最终应取热力学极限,而只保持杂质的密度 $n_i = \frac{N_i}{V}$ 为一个宏观均匀的定值,由于考虑杂质是无磁性的,因

此可以先忽略电子的自旋自由度. 另外, 杂质与电子之间的相互作用为弹性散射, 即只有动量转移而没有能量交换. 虽然这里只考虑了最简单的非相对论性的且无自旋轨道耦合的粒子, 色散关系为 $\xi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu$, 但是并不难将本文对杂质散射势的处理的一般方法推广到更复杂的物理系统. 对单个杂质散射势进行傅立叶变换得到

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)}. \quad (2)$$

因此, 在动量空间重新写 Hamiltonian 为

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_i^{N_i} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}}. \quad (3)$$

显然, 对于杂质的任何一种分布构型 (即给定集合 $\{\mathbf{R}_i\}$) 都会使系统失去空间平移对称性, 从而难以进行任何有效的解析处理, 因此需要引入涵盖所有可能构型的系综统计平均, 即杂质自平均 (impurity self-averaging) ^[12], 以恢复系统的平移对称性. 杂质自平均有一定的适用条件, 即系统不能出现安德森局域化 ^[1,2], 另外我们要把杂质散射项当作微扰处理, 故一并将这些物理参数的限制条件列出如下: (1) 低浓度极限: 杂质浓度远低于电子密度, 即 $\frac{n_i}{n_e} \ll 1$; (2) 有限力程要求: 散射势的力程 a 应大于电子平均间距 (用 $\frac{1}{k_F}$ 描述), 即 $ak_F > 1$; (3) 弱散射条件: 满足 $V_0 \frac{ma^2}{\hbar^2} \ll 1$, 其中 V_0 是散射势 $V(\mathbf{r})$ 的特征强度. 特别地, 由于在一维系统中任意弱散射均会诱导安德森局域化, 导致杂质自平均近似失效, 故本文仅讨论二维与三维情形. 杂质自平均的等效结果就是从每颗杂质粒子转移到电子系统的总动量为零, 以及每颗杂质会贡献一个平均因子 n_i .

3 玻恩近似与 wigwam 图

本文采用虚时格林函数方法进行推导, 在计算谱函数或者其它物理量关联函数时再解析延拓到推迟/超前格林函数, 这里单粒子全格林函数定义为 $G(\tau, \mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \rangle_H$, 这里 $\langle \dots \rangle_H$ 表示在哈密顿量为 H (方程 3) 的系综中进行统计平均, 后文 $\langle \dots \rangle_{H_0}$ 同理. 由于平移对称性, 格林函数在动量空间只有对角分量 $G(\tau, \mathbf{k})$. 当没有散射杂质时, 自由粒子的格林函数 $G_0(\tau, \mathbf{k}) = -\langle T_\tau c_{\mathbf{k}}(\tau) c_{\mathbf{k}}^\dagger(0) \rangle_{H_0}$, 将其变换到 Matsubara 频率空间得到 $G_{0\mathbf{k}}(i\omega_n) = (i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}})^{-1}$, 这里 $\omega_n = (2n+1)\pi k_B T$, 其中 n 为整数. 全格林函数 $G_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ 与自由粒子格林函数 $G_{0\mathbf{k}}(i\omega_n)$ 之间可以通过戴森方程 (Dyson equation) 相关联, 即

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = \text{---} \text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \quad (4)$$

$$= G_{0\mathbf{k}}(i\omega_n) + G_{0\mathbf{k}}(i\omega_n)\Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)G_{\mathbf{k}}(i\omega_n), \quad (5)$$

这里, 细的和粗的实线分别表示 $G_{0\mathbf{k}}$ 和 $G_{\mathbf{k}}$, 阴影三角形是不可约自能 $\Sigma_{\mathbf{k}}$, 容易解得,

$$G_{\mathbf{k}}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n)}. \quad (6)$$

在微扰理论中, 所有不可约的杂质散射图的总和就构成了自能, 由于这些图样 (除一阶项外) 形似棚屋, 因此在学术上常被称为 wigwam 图. 在弱无序极限下, 由于交叉图的动量求和空间远小于非交叉图, 我们仅保留非交叉 wigwam 图进行求和:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\mathbf{k}}(i\omega_n) &= \text{[Diagram: A shaded triangle with two vertices on a horizontal line and one above it, representing the first-order self-energy term.]} = \text{[Diagram: A dashed triangle with two vertices on a horizontal line and one above it, representing the second-order self-energy term.]} + \text{[Diagram: A dashed triangle with two vertices on a horizontal line and one above it, representing the third-order self-energy term.]} + \dots \\ &= n_i u_0 + n_i \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q}} u_{-\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} G_{0\mathbf{k}+\mathbf{q}} + n_i \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} u_{-\mathbf{q}_2} u_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1} u_{\mathbf{q}_1} G_{0\mathbf{k}+\mathbf{q}_2} G_{0\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

一阶微扰项为一个不依赖于动量和能量的常数 $\Sigma_{\mathbf{k}}^{(1)}(i\omega_n) = n_i u_0$, 它无法将格林函数 $G_{\mathbf{k}}(i\omega_n)$ 的极点移出实轴, 因此是平庸的, 也可以将其吸收进化学势中. 而最重要的非平庸项是二阶项 $\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(i\omega_n)$, 如果保留到这一阶, 则被称为第一波恩近似 (First Born Approximation).

对于一般的散射势函数 $V(\mathbf{r})$, 自能的解析推导是一件非常困难的事, 人们自然地想到计算起来很方便的 δ 函数势^[3-6], 它的傅立叶变换是一个常数, $u_{\mathbf{q}} \equiv u_0$, 这就相当于对于交换任何动量的散射事件都是同等的贡献, 这会带来两个问题, 1) 物理层面: 这种零力程的点散射不是小角度散射, 而是各向同性的, 背向散射和前向散射同样强烈, 它们之间的干涉会阻止电子波包的扩散, 从而导致安德森局域化^[1,2], 使系统变成绝缘体, 这无法用来描述低浓度掺杂时金属的电输运行为; 2) 数学层面: 采用杂质自平均近似计算自能的二阶及高阶修正时会遇到紫外发散的问题. 我们可以简单分析这种动量积分不收敛的行为, 对于非相对论性的粒子, 在大动量时 $G_{\mathbf{k}} \sim \frac{1}{k^2}$, 而自能的二阶修正是对其作动量积分, 因此在三维系统, $\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(i\omega_n)$ 呈线性发散, 而在二维系统中则是对数发散的, 对于相对性粒子则紫外发散行为更为严重. 而有限力程的散射势则给动量积分提供了一个物理截断, 才能更好地描述掺杂系统的金属态. 有限力程势的数学形式有很多种, 比如二维中的 Thomas-Fermi 屏蔽势^[9], 三维中的 Yukawa 屏蔽势^[10,11] 等, 但是这些函数形式对于自能的计算完全无法给出解析结果, 最终需要求助于数值积分, 这限制了对谱函数, 动量弛豫时间等核心物理量进行精确全动量解析全能量表述的可能性. 另外, 也有很多工作就干脆完全放弃散射势的显式表达, 而采用强度遵循特殊随机分布的噪声杂质散射的近似, 然后只参数化散射势的平均二阶矩 $\langle V^2 \rangle$, 三阶矩 $\langle V^3 \rangle$

(因为三阶微扰项对反常霍尔效应中的 skew-scattering 贡献至关重要) 为两个常数^[7,8], 也有的工作把散射势的二阶矩设定为 δ 关联函数^[13], 这些唯象的处理虽然也避开了紫外发散的问题, 方便了某些物理量的近似, 但也同样丢掉了自能对动量能量的依赖关系, 而且满足这样参数要求的随机分布往往也无法写出分布函数 (常见的高斯分布只有非零二阶矩, 其三阶矩为零), 因此甚至无法进行蒙特卡洛模拟.

4 高斯型杂质散射势

本文采用高斯函数形式的杂质散射势, 既引入了有限力程解决紫外发散和安德森局域化的问题, 又利用了高斯函数在数学上的天然优势得到解析的结果. 在动量空间高斯势相较于洛伦兹线形的 Yukawa 短程势衰减更快, 而在实空间当力程趋近零时又退化为 δ 势, 因此它也非常适合用来模拟杂散势. 以 V_0 为峰值, a 为展宽的散射势函数写作:

$$V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-\frac{r^2}{2a^2}}, \quad (8)$$

它的傅立叶分量为

$$u_{\mathbf{q}} = (2\pi a^2)^{\frac{d}{2}} V_0 e^{-\frac{a^2 q^2}{2}}, \quad (9)$$

从这里可以看到每次散射事件交换的动量 $\mathbf{q}$ 的大小被限制在 $\frac{1}{a}$ 的量级以内, 天然地为动量积分提供了物理截断. 一个有效的短程散射势总是需要 V_0 和 a 两个参数来刻画, 而且力程 a 不能太小, 应大于电子的费米波长 (即电子的平均间距, 这里 $\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = \frac{h}{\sqrt{2m\mu}}$).

将 $u_{\mathbf{q}}$ 代入方程 7 中, 得到高斯函数与格林函数作卷积的形式, 看起来似乎仍然难以计算, 但注意到, $G_{0\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 其实可以由 $G_{0\mathbf{k}}$ 平移动量 $\mathbf{q}$ 得到, 因此可以将其表达为 $G_{0\mathbf{k}+\mathbf{q}} = e^{\mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}} G_{0\mathbf{k}}$, 而对 $\mathbf{q}$ 的求和又可以变成高斯积分 $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-a^2 q^2 + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}} = \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{-a^2 q^2 + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}} = \left(\frac{1}{2a\sqrt{\pi}}\right)^d e^{\frac{\nabla_{\mathbf{k}}^2}{4a^2}}$. 这样我们就把原本的卷积积分变成了微分形式, 完成了对费米子内线的动量求和, 重新写自能如下:

$$\Sigma_{\mathbf{k}} = n_i \left(\sqrt{2\pi} a \right)^d \left[V_0 + \frac{V_0^2}{2^{\frac{d}{2}}} e^{\frac{\nabla_{\mathbf{k}}^2}{4a^2}} G_{0\mathbf{k}} + \frac{V_0^3}{3^{\frac{d}{2}}} e^{\frac{1}{3a^2} \nabla_1 \cdot \nabla_2} \left(e^{\frac{1}{3a^2} \nabla_2^2} G_{0\mathbf{k}} \right)_2 \left(e^{\frac{1}{3a^2} \nabla_1^2} G_{0\mathbf{k}} \right)_1 + \dots \right], \quad (10)$$

此处出现的算符 $e^{\frac{\nabla_{\mathbf{k}}^2}{4a^2}}$ 即为 Weierstrass 算符^[14], 它有良好的数学性质, 能让尖锐的陡峭的函数变得平滑, 常被用于信号处理中去除毛刺噪声, 即高斯滤波 (Gaussian filter)^[15], 也用于对影像的高斯模糊 (Gaussian blur)^[16] 处理, 图 1 是一维的 Weierstrass 算符作用在双曲线 $\frac{1}{k-k_0}$ 上的示意图, 可以看到函数的尖峰被压制变得平滑, 函数在 $k = k_0$ 的极点也变成变换后函数的零点, 其它维度的 Weierstrass 算符作用也是如此, 比如二维圆和三维球面上的双曲线函数. 当然, 对于自能的三阶及以上的修正项还会出现一些混合

Weierstrass 算符 $e^{\frac{1}{3a^2}\nabla_1\cdot\nabla_2}$, 这里下标 $i = 1, 2$ 表示作用在从右边算起的第 i 个因子, 这种混合项可以通过微分算符的组合来处理:

$$e^{\alpha^2\nabla_1\cdot\nabla_2} = e^{\frac{\alpha^2}{2}(\nabla_1+\nabla_2)^2 - \frac{\alpha^2}{2}\nabla_1^2 - \frac{\alpha^2}{2}\nabla_2^2} = e^{\frac{\alpha^2}{2}\nabla^2 - \frac{\alpha^2}{2}\nabla_1^2 - \frac{\alpha^2}{2}\nabla_2^2}, \quad (11)$$

从而可以将自能表达成

$$\Sigma_{\mathbf{k}} = n_i \left(\sqrt{2\pi}a \right)^d \left[V_0 + \frac{V_0^2}{2^{\frac{d}{2}}} e^{\frac{\nabla^2}{4a^2}} G_{0\mathbf{k}} + \frac{V_0^3}{3^{\frac{d}{2}}} e^{\frac{\nabla^2}{6a^2}} \left(e^{\frac{\nabla^2}{6a^2}} G_{0\mathbf{k}} \right)^2 + \dots \right]. \quad (12)$$

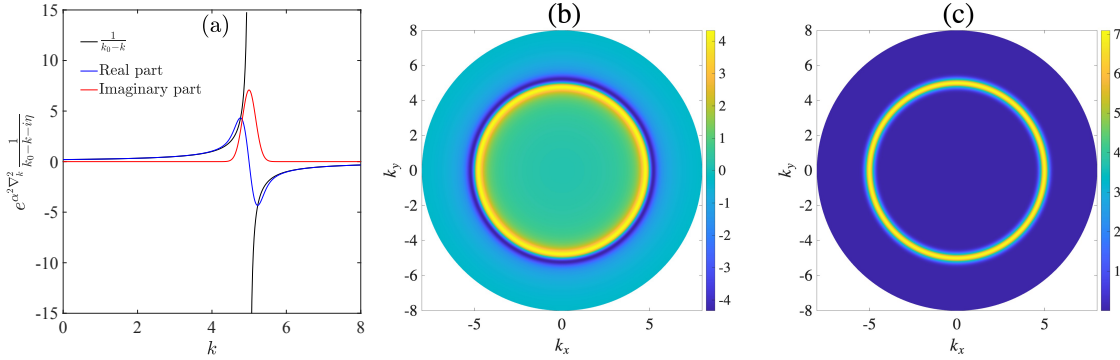


图 1 $d = 2$ 维, Weierstrass 算符 $e^{\alpha^2\nabla^2}$ 作用在函数 $\frac{1}{k_0-k-i\eta}$ 上的示意图 (取参数 $\alpha = 1/8$ 以及 $k_0 = 5$): (a) 黑色实线为双曲线 $\frac{1}{k_0-k}$ 作为参考, 蓝色实线为 $e^{\alpha^2\nabla^2} \frac{1}{k_0-k-i\eta}$ 的实部, 可以看到双曲线的上下尖峰都被 Weierstrass 算符压制到非常小, 在 $k = k_0$ 处的极点也变成了零点. 红色实线为 $e^{\alpha^2\nabla^2} \frac{1}{k_0-k-i\eta}$ 的虚部; (b) 实部在二维极坐标中的分布图; (c) 虚部在二维极坐标中的分布图.

Fig. 1. Schematic diagram of the $d = 2$ dimensional Weierstrass operator $e^{\alpha^2\nabla^2}$ acting on the function $\frac{1}{k_0-k-i\eta}$ (with parameters $\alpha = 1/8$ and $k_0 = 5$): (a) The black solid line represents the hyperbola $\frac{1}{k_0-k}$ for reference. The blue solid line denotes the real part of $e^{\alpha^2\nabla^2} \frac{1}{k_0-k-i\eta}$ as a function of $|\mathbf{k}|$. It can be observed that the upper and lower peaks of the hyperbola are significantly suppressed by the Weierstrass operator, and the pole at $k = k_0$ is transformed into a zero point. The red solid line shows its imaginary part. (b) Distribution of the real part in 2D polar coordinates of $\mathbf{k}$ space. (c) Distribution of the imaginary part in 2D polar coordinates of $\mathbf{k}$ space.

Weierstrass 算符作用在一个函数上可以转换一个积分运算:

$$e^{\alpha^2\nabla^2} f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(4\pi\alpha^2)^{d/2}} \int d^d\mathbf{k}' f(\mathbf{k}') e^{-\frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')^2}{4\alpha^2}}. \quad (13)$$

对于一般的函数, 这种积分仍然只能数值计算, 但是有一些特殊的函数, 比如 δ 函数就有简单的解析结果,

对于二维情形, 容易计算得到,

$$e^{\alpha^2 \nabla^2} \delta(k - k_0) = \frac{k_0}{2\alpha^2} e^{-\frac{k^2 + k_0^2}{4\alpha^2}} I_0\left(\frac{kk_0}{2\alpha^2}\right), \quad (14)$$

这里 $\delta(k - k_0)$ 相当于半径为 k_0 的二维圆上的 δ 函数, $I_0(x) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{x \cos \theta}$ 是 0 阶第一类修正贝塞尔函数, 当 $x \rightarrow \infty$ 时, $I_0(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}$. 对于三维情形, $\delta(k - k_0)$ 相当于半径为 k_0 的三维球面上的 δ 函数, 不难得到,

$$e^{\alpha^2 \nabla^2} \delta(k - k_0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha^2}} \frac{k_0}{k} \left[e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\alpha^2}} - e^{-\frac{(k+k_0)^2}{4\alpha^2}} \right], \quad (15)$$

这里可以比较清晰地看到在小 k_0 时, 同时会有前向散射 (方程 15 第一项) 和背向散射 (方程 15 第二项) 的贡献, 而大 k_0 时, 背向散射会被抑制, 前向散射成为主导, 在二维也有相同行为, 只是隐藏在了 I_0 函数中.

回到自能的计算, 我们先将虚时格林函数 $G_{0\mathbf{k}}(i\omega_n)$ 解析延拓为推迟格林函数 $G_{0\mathbf{k}}^R(\omega)$, 即作 $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ 替换, η 为无限小正数, 并将其分解成实部和虚部,

$$G_{0\mathbf{k}}^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \xi_k + i\eta} = P\left(\frac{1}{\omega - \xi_k}\right) - i\pi\delta(\omega - \xi_k), \quad (16)$$

实部是其柯西主值部分, 虚部是一个 δ 函数, 这里已经将 $\Sigma^{(1)}$ 吸收进化学势中. 我们首先计算其极点位置

$$\omega - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - \mu - n_i(2\pi a^2)^{d/2} V_0 = 0, \quad (17)$$

解得 $k_0(\omega)$ 后 (对于更复杂的色散关系, 可能存在多个根, 则需要将各个根的贡献求和), 可以在 $k = k_0$ 附近的小区间内将格林函数近似为

$$G_{0\mathbf{k}}^R(\omega) \approx \frac{1}{\left|\frac{\partial \xi_{k_0}}{\partial k_0}\right|} \left[P\left(\frac{1}{k_0 - k}\right) - i\pi\delta(k - k_0) \right], \quad (18)$$

实部部分正是一个渐近线为 $k = k_0$ 的双曲线, 根据图 1, 其值会被 Weierstrass 算符抹平到非常接近于零, 且由于前置因子 $n_i V_0^2$ 存在, 在微扰论的意义下, 其对格林函数实部的贡献可以忽略. 而虚部正比于 $\delta(k - k_0)$, Weierstrass 算符对其作用见方程 14 与 15, 只需要让 $\alpha = \frac{1}{2a}$ 即可, 所以最终算得二维自能为

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega) \approx -i \frac{2n_i \pi^2 a^4 m V_0^2}{\hbar^2} e^{-a^2(k^2 + k_0^2)} I_0(2a^2 k k_0), \quad (19)$$

而三维的结果为

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^{(2)}(\omega) \approx -i \frac{n_i \pi^2 a^4 m V_0^2}{\hbar^2} \frac{1}{k} \left[e^{-a^2(k-k_0)^2} - e^{-a^2(k+k_0)^2} \right]. \quad (20)$$

自能虚部的出现表明格林函数的极点移出了实轴, 对应于具有有限寿命的准粒子激发这里实际上意味着电子无法长久地处于某个动量态, 经过一定时间总是会被杂质散射到其它动量态, 所以这里的准粒子寿命就对应于动量弛豫时间. 这在解释金属中的输运机制的 Drude 理论^[12,17,18]中至关重要, 有了弛豫时间, 可以计算电子迁移率, 电导率, 热导率, 修正有磁场时的霍尔系数, 以及解释有自旋轨道耦合系统的反常霍尔现象等等.

在凝聚态物理中, 谱函数是直观表述体系的激发谱权重分布的核心物理量. 通过谱函数, 我们就可以判断在一个给定的能量 ω 和动量 $\mathbf{k}$ 下, 是否存在可以容纳粒子的状态, 以及这些状态的“寿命”有多长, 通过上面得到的格林函数, 可以计算谱函数如下,

$$A_{\mathbf{k}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}}^R(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)}{[\omega - \xi_{\mathbf{k}} - \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)]^2 + [\text{Im} \Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)]^2}, \quad (21)$$

实验中可以通过角分辨光电子谱 (Angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) 来测量它^[19–21].

图 2 中利用我们计算出的自能修正的解析表达式, 描绘了二维和三维中的谱函数, 高斯势模型清晰地展示了随能量升高, 背向散射贡献逐渐被抑制, 前向散射占主导的物理演化过程.

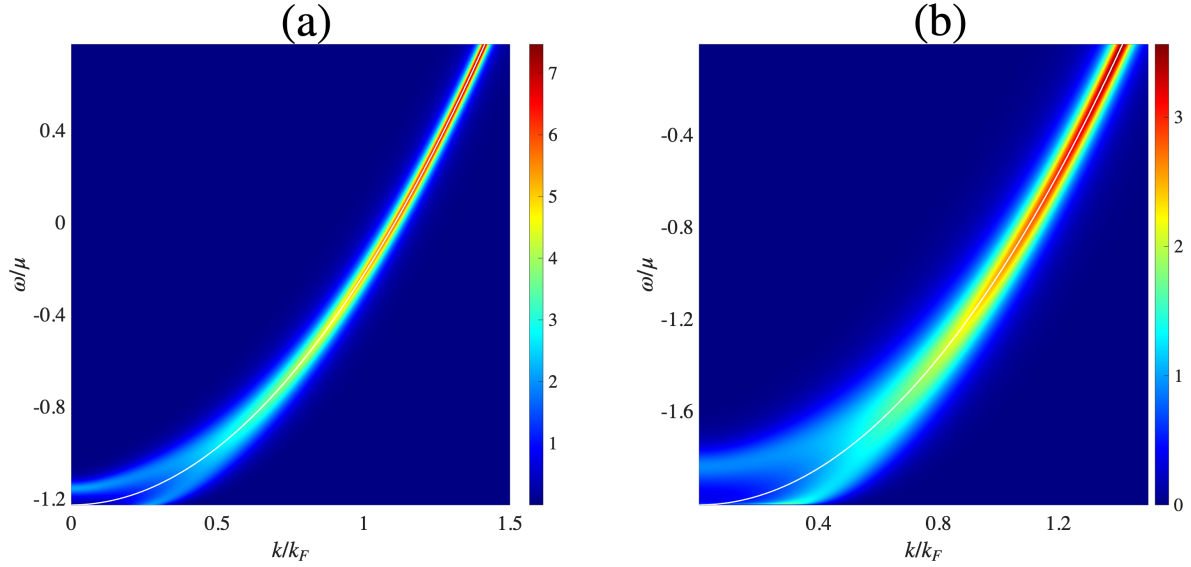


图 2 谱函数 $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ 作为 $(|\mathbf{k}|, \omega)$ 的函数 (单位为 $\frac{1}{\mu}$)，白色实线为色散关系 $k = k_0(\omega)$ 作为参考，参数： $\frac{n_i}{n_e} = 0.01$, $\frac{V_0}{\mu} = 0.1$, (a) 二维系统: $ak_F = 6$. (b) 三维系统: $ak_F = 4$. 在 $k_0 < 0.5k_F$ 的区域可以看到前向散射和后向散射的共存，而随着能量 ω 增长，后向散射被抑制，谱线变得尖锐。

Fig. 2. Spectral functions $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ (in units of $\frac{1}{\mu}$) as functions of $(|\mathbf{k}|, \omega)$. The white solid line represents the dispersion relation $k = k_0(\omega)$ as a reference line. Parameters: $\frac{n_i}{n_e} = 0.01$, $\frac{V_0}{\mu} = 0.1$, (a) In two-dimensional system: $ak_F = 6$. (b) In three-dimensional system: $ak_F = 4$. In the region of $k_0 < 0.5k_F$, forwardscattering and backscattering coexist. As the energy ω increases, backscattering is suppressed, and the spectral lines become sharper.

5 结 论

本文系统地研究了在二维与三维电子系统中，引入具有有限力程的高斯型杂质散射势对单粒子激发特性的影响。通过采用虚时格林函数方法与第一玻恩近似，我们得到了自能 $\Sigma_{\mathbf{k}}(\omega)$ 和谱函数 $A_{\mathbf{k}}(\omega)$ 的全动量解析表达式。克服了紫外发散问题：研究发现，高斯散射势在动量空间天然的指数级衰减特性为自能积分提供了物理上合理的截断。相比于传统的 δ 函数势模型，高斯势成功消除了二维系统中的对数发散和三维系统中的线性发散，使得谱函数在全动量空间具有解析完备性。本文对解析求解谱函数进行了技术创新，利用 Weierstrass 算符的数学特性，将原本难以处理的动量空间卷积积分转化为了微分运算。这一方法不仅简化了推导过程，还揭示了高斯滤波效应如何通过平滑格林函数的极点，从而修正了自能的实部与虚部。本文揭示了散射特性的维度与动量依赖性，解析解表明，自能的虚部（即准粒子寿命或动量弛豫时间）表现出

显著的非局部效应. 随着能量逐渐升高, 电子谱线的展宽迅速收窄, 这与角分辨光电发射谱实验中观测的一致 [20,21], 同时背向散射被抑制, 而小角度散射或前向散射称为主导, 也符合散射相关实验的观测结果 [22,23]. 本文的创新之处在于, 在保证数学严谨性的前提下, 避开了其它相关工作中唯象参数带来的自能对能量动量依赖性缺失. 我们通过引入有限力程 a , 为理解从类点散射到平滑无序场的演化提供了统一的框架. 这对于利用 Drude 理论精确描述低浓度掺杂金属的电输运性质具有重要的理论指导意义. 此外, 本文引入的高斯型的杂散势也可以应用于其它更复杂色散关系的系统中, 比如有自旋轨道耦合, 有磁场, 甚至有电子之间相互作用的系统, 也可以推广到晶格的 Bloch 能带系统中. 本文虽然只通过自能修正计算了谱函数的能量动量依赖关系, 但 Weierstrass 变换的技术也可以用来简化计算更高阶的自能修正, 以及系统对电磁场响应函数中的顶点修正. 刻画有效散射势的两个参数: 强度 V_0 和力程 a 在不同维度系统中对于一些核心物理量比如谱密度的影响应该是普适的, 最终我们应该可以抛开散射势的具体形式, 而关心物理量的修正项对这两个参数的依赖关系即可, 这对于全面解析研究电子系统中的杂质散射问题具有启发意义.

致谢

本文的所有的费曼图都是采用 TikZ-Feynman [24] 的 L^AT_EX 包进行绘制, 语法简洁明了, 点线面样式丰富, 布局美观, 特此感谢.

参考文献

- [1] Anderson P W, et al. 1958 *Physical review* **109** 1492
- [2] Khan N A, Jan M, Shah M, Sajid M, Mateen M, Ali M 2026 *Journal of Low Temperature Physics* **222** 51
- [3] Sinitsyn N 2008 *Journal of Physics: Condensed Matter* **20** 023201
- [4] Onoda S, Sugimoto N, Nagaosa N 2006 *Progress of theoretical physics* **116** 61
- [5] Onoda S, Sugimoto N, Nagaosa N 2008 *Physical Review B* **77** 165103
- [6] Inoue J i, Kato T, Ishikawa Y, Itoh H, Bauer G E, Molenkamp L W 2006 *Physical review letters* **97** 046604

- [7] Crépieux A, Bruno P 2001 *Physical Review B* **64** 014416
- [8] Nunner T S, Sinitsyn N, Borunda M F, Dugaev V, Kovalev A, Abanov A, Timm C, Jungwirth T, Inoue J i, MacDonald A, et al. 2007 *Physical Review B* **76** 235312
- [9] Zhang J X, Chen W 2024 *Physical Review B* **110** 035105
- [10] Sano N 2025 *Physical Review B* **111** 125413
- [11] Billah A, Yoder P D 2026 *AIP Advances* **16** 045003
- [12] Bruus H, Flensberg K 2016 *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford university press)
- [13] Sinitsyn N, Hill J, Min H, Sinova J, MacDonald A 2006 *Physical review letters* **97** 106804
- [14] Zemanian A H 1967 *SIAM Journal on Applied Mathematics* **15** 1088
- [15] Whitehouse D J 2013 *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **469**
- [16] Flusser J, Farokhi S, Höschl C, Suk T, Zitova B, Pedone M 2015 *IEEE transactions on Image Processing* **25** 790
- [17] Mahan G D 2013 *Many-particle physics* (Springer Science & Business Media)
- [18] Ashcroft N, Mermin N 2022 *Solid State Physics* (Cengage Learning)
- [19] Lv B, Qian T, Ding H 2019 *Nature Reviews Physics* **1** 609
- [20] Valla T, Fedorov A, Johnson P, Wells B, Hulbert S, Li Q, Gu G, Koshizuka N 1999 *Science* **285** 2110
- [21] Hengsberger M, Purdie D, Segovia P, Garnier M, Baer Y 1999 *Physical review letters* **83** 592
- [22] Harrang J, Higgins R, Goodall R, Jay P, Laviron M, Delescluse P 1985 *Physical Review B* **32** 8126
- [23] Coleridge P 1991 *Physical Review B* **44** 3793
- [24] Ellis J P 2017 *Computer Physics Communications* **210** 103

Analytical Framework for Finite-Range Impurity Scattering Potentials in Electronic Systems*

YU Yixiang^{1)†} CHE Xiaomei¹⁾

¹⁾ (*School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing, 100081, China*)

Abstract

The transport and excitation characteristics of electrons in disordered systems represent a fundamental theme in condensed matter physics. In realistic materials such as semiconductor heterostructures and ultracold atomic lattices, the presence of impurities significantly alters electronic quantum states, leading to phenomena like Anderson localization and spectral line broadening. Traditionally, the zero-range δ -function potential (point-scatterer model) has been widely adopted due to its simplicity. However, this model suffers from severe theoretical deficiencies in higher dimensions ($d \geq 2$), most notably the pathological ultraviolet (UV) divergence in self-energy and spectral function calculations. To circumvent these issues, researchers often resort to non-physical hard cutoffs or phenomenological parameterization, which compromises theoretical precision. This study aims to establish a unified analytical framework using a Gaussian-type impurity potential $V(r) \sim e^{-r^2/2a^2}$ to describe smooth disordered fields. By introducing a finite range a , we provide a natural physical scale that regularizes the UV behavior and suppresses Anderson localization through dominant forward scattering.

We employ the imaginary-time Green's function formalism within the framework of the first Born approximation. To address the mathematical complexity of convolution integrals in momentum space, we introduce a novel analytical technique based on the Weierstrass operator. By transforming the integral equations into a differential form, we bypass the traditional difficulties associated with momentum-space

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No.12104042)

† Corresponding author. E-mail: yyx@bit.edu.cn

integration. The diagrammatic technique involving non-crossing wigwam diagrams is utilized to derive the self-energy $\Sigma_k(\omega)$ and the spectral function $A_k(\omega)$ for both two-dimensional (2D) and three-dimensional (3D) systems.

Our results provide closed-form analytical expressions for the self-energy and spectral function across the entire momentum space. (1) Resolution of UV Divergence: We demonstrate that the exponential decay of the Gaussian potential in momentum space acts as a natural renormalization operator. This successfully eliminates the logarithmic divergence in 2D and the linear divergence in 3D that plague the δ -function model, ensuring the analytical completeness of the spectral theory. (2) Operator-based Regularization: The application of the Weierstrass operator reveals a “Gaussian filtering effect” that smooths the poles of the Green’s function, effectively regularizing both the real and imaginary parts of the self-energy. (3) Momentum and Dimensional Dependency: The derived analytical solutions reveal a significant non-local effect in the quasiparticle lifetime (or momentum relaxation time). In the high-energy (large momentum) limit, the spectral broadening decreases rapidly, indicating a transition to a “forward-scattering dominated” regime. This behavior is highly consistent with experimental observations in doped semiconductor transport.

This work provides a rigorous theoretical foundation for understanding electron transport and disorder effects. By incorporating the correlation length a , we bridge the gap between point-scattering and smooth disorder fields, offering a unified framework for refining the Drude transport picture. Furthermore, the Weierstrass transformation technique developed herein is versatile; it can be extended to systems with spin-orbit coupling, magnetic fields, or electron-electron interactions, and can simplify the calculation of higher-order self-energies and vertex corrections in response functions. The universal dependence of physical corrections on the potential strength V_0 and range a suggests a generalized approach to impurity scattering problems, paving the way for future research in complex lattice systems and Bloch energy bands.

Keywords: Self-energy, Spectral function, Ultraviolet divergence, Born approximation