

科学技术简报和经验交流

电子声子系统的温度效应*

郑思明¹⁾ 张志杰²⁾
(复旦大学物理系)

提 要

本文应用由 Matsubara 引进的温度格林函数方法,计算了在有限温度、弱耦合的情况下,电子声子系统中的电子元激发能谱及其衰减。得到了它们的温度效应。

一、引 言

近年来,由于量子场论的方法被广泛地应用到统计物理中,尤其是格林函数方法的采用,使量子统计中的多体问题理论有了很大的进展。В. Л. Бонч-Бруевич^[1] 和 А. Б. Мигдал^[2] 曾应用这种方法研究了绝对零度下电子声子系统的性质。周世勋^[3] 进一步采用含温度的时间格林函数,研究了电子声子系统的温度效应,得到了低温弱耦合条件下的重正化声速、零声的速度及其衰减。

自从 Matsubara^[4] 引进“虚时间”变量的格林函数(以下把这种格林函数简称为M型格林函数)以后,使得含温度的格林函数也能采用费曼图解法来求解。А. А. Абрикосов^[5] 等人进一步建立了M型格林函数的傅利叶展式,使其计算变得更为简便。本文利用文献[5]中提出的方法,在第二节中导出对电子声子系统准确到相互作用常数 g^2 数量级的格林函数的计算公式,并在第三节中应用所得之公式,计算在低温下准确到同一数量级的电子元激发能谱及其衰减对温度的依赖关系。

二、单粒子温度格林函数

我们采用由 Fröhlich^[6] 所引进的电子声子系统的哈密顿函数

$$H = H_0 + H_i,$$

其中

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}}^0 a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger})$$

为系统的自由场能量,式中 $\epsilon_{\mathbf{p}}^0 = p^2$, $\omega_{\mathbf{q}} = cq$ 分别是电子和声子未经重正化的能量, c 为

* 1962年5月14日收到; 1962年12月29日收到修改稿。

1) 现在洛阳农业机械学院。

2) 现在上海工学院。

未重正化声速, $q < q_m$, q_m 是声子的动量最大值。(我们采用 $\hbar = 2m = 1$ 的单位.)

$$H_i = g \int \psi^+(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

为相互作用项, g 是相互作用常数, $\psi(\mathbf{x})$ 和 $\varphi(\mathbf{x})$ 分别表示电子和声子的场算符:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{p}} \left(\frac{1}{V}\right)^{1/2} a_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}},$$

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2V}\right)^{1/2} (b_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^+) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}.$$

令 $G(x_1, x_2)$ 和 $D(x_1, x_2)$ 分别表示 M 型格林函数, 它们的定义依次为

$$G(x_1, x_2) = - \frac{\langle T_{\tau} \{ \tilde{\psi}(x_1) \tilde{\psi}^+(x_2) S(\beta) \} \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0} \quad (2.1)$$

$$D(x_1, x_2) = - \frac{\langle T_{\tau} \{ \tilde{\varphi}(x_1) \tilde{\varphi}^+(x_2) S(\beta) \} \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0} \quad (2.2)$$

其中 $\tilde{\psi}(x)$ 和 $\tilde{\varphi}(x)$ 是“相互作用表象”中的场算符:

$$\tilde{\psi}(x) = e^{\mathcal{E}_0 \tau} \psi(\mathbf{x}) e^{-\mathcal{E}_0 \tau}; \quad \tilde{\varphi}(x) = e^{\mathcal{E}_0 \tau} \varphi(\mathbf{x}) e^{-\mathcal{E}_0 \tau}.$$

记号 $\langle \dots \rangle_0$; $S(\beta)$ 和 \mathcal{E}_0 分别定义为

$$\langle \dots \rangle_0 = \text{Sp} \{ \exp(-\beta \mathcal{E}_0) \dots \};$$

$$S(\beta) = T_{\tau} \exp \left\{ - \int_0^{\beta} H_i(\tau) d\tau \right\}; \quad \mathcal{E}_0 = H_0 - \mu N.$$

而 $H_i(\tau) = e^{\mathcal{E}_0 \tau} H_i e^{-\mathcal{E}_0 \tau}$; $\beta = \frac{1}{kT}$; μ 与 N 分别是系统的化学势及总粒子数.

根据文献 [5] 所得的结果, 利用 $G(x_1, x_2)$ 和 $D(x_1, x_2)$ 的傅利叶换式及级数展式 $G(\mathbf{p}, \omega_n)$ 与 $D(\mathbf{q}, \Omega_m)$, 不难得到它们分别所满足的 Dyson 方程:

$$G(\mathbf{p}, \omega_n) = G^0(\mathbf{p}, \omega_n) + G^0(\mathbf{p}, \omega_n) M(\mathbf{p}, \omega_n) G(\mathbf{p}, \omega_n). \quad (2.3)$$

相应的图形为

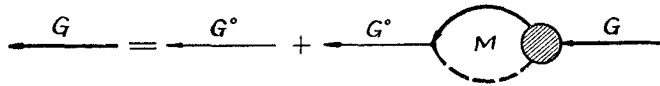


图 1

$$D(\mathbf{q}, \Omega_m) = D^0(\mathbf{q}, \Omega_m) + D^0(\mathbf{q}, \Omega_m) \Pi(\mathbf{q}, \Omega_m) D(\mathbf{q}, \Omega_m) \quad (2.4)$$

(相应的图形如图 2). 式中 $G^0(\mathbf{p}, \omega_n)$ 和 $D^0(\mathbf{q}, \Omega_m)$ 分别是电子和声子的零级 M 型格林

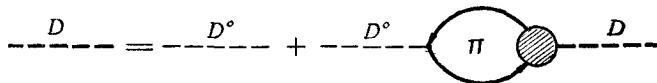


图 2

函数, 而质量算符 $M(\mathbf{p}, \omega_n)$ 和极化算符 $\Pi(\mathbf{q}, \Omega_m)$ 分别满足以下的方程式:

$$\left. \begin{aligned} M(\mathbf{p}, \omega_n) &= -\frac{g^2}{(2\pi)^3\beta} \sum_{\Omega_m} \int d\mathbf{q} \cdot G(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \omega_n - \Omega_m) D(\mathbf{q}, \Omega_m) \times \\ &\quad \times \Gamma(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \omega_n - \Omega_m; \mathbf{q}, \Omega_m), \\ \Pi(\mathbf{q}, \Omega_m) &= -\frac{g^2}{(2\pi)^3\beta} \sum_{\omega_n} \int d\mathbf{p} G(\mathbf{q}-\mathbf{p}, \Omega_m - \omega_n) G(\mathbf{p}, \omega_n) \times \\ &\quad \times \Gamma(\mathbf{q}-\mathbf{p}, \Omega_m - \omega_n; \mathbf{p}, \omega_n), \end{aligned} \right\} (2.5)$$

Γ 为頂角部分, 它对应于所有不可簡約頂角图形之和, 可以写成

$$\Gamma(\mathbf{p}, \omega_n; \mathbf{p}', \omega_n') = 1 + \Lambda(\mathbf{p}, \omega_n; \mathbf{p}', \omega_n').$$

Λ 是以 g^2 为首次的 g^2 的无穷項幂級数; ω_n 与 Ω_m 的取值分别为

$$\omega_n = \frac{2n+1}{\beta} \pi (n = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots); \quad \Omega_m = \frac{2m}{\beta} \pi (m = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots).$$

我們討論电子声子間相互作用較弱的情形, 在(2.5)式中取

$$\Gamma \cong 1,$$

$$G(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \omega_n - \Omega_m) \cong G^0(\mathbf{p}-\mathbf{q}, \omega_n - \Omega_m),$$

$$D(\mathbf{q}, \Omega_m) \cong D^0(\mathbf{q}, \Omega_m),$$

于是在这样的近似处理下(准确到 g^2 数量級), 不难得到

$$\begin{aligned} M(\mathbf{p}, \omega_n) &= \frac{g^2}{2(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \cdot \omega_q \left\{ \frac{1 - n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{i\omega_n + \mu - \omega_q - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{i\omega_n + \mu + \omega_q - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0} \right\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

其中 $n_{\mathbf{p}}$ 和 m_q 分别为 $F-D$ 和 $B-E$ 分布函数:

$$n_{\mathbf{p}} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{p}}^0 - \mu)}}; \quad m_q = \frac{1}{e^{\beta\omega_q} - 1}.$$

有关极化算符的性質, 在文献[3]中已有較詳細的討論, 下面我們只討論質量算符.

我們知道, 与系統的热力学性質有直接联系的是一般的时间格林函数, 如推迟格林函数

$$G^R(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{p}}^0 - M^R(\mathbf{p}, \omega)},$$

式中 $M^R(\mathbf{p}, \omega)$ 与 $M(\mathbf{p}, \omega_n)$ 有如下的关系:

$$M^R(\mathbf{p}, \omega) = M(\mathbf{p}, \omega_n) |_{\omega_n \rightarrow -i\omega + \Delta} \quad (\Delta \rightarrow +0).$$

于是由(2.6)式得

$$M^R(\mathbf{p}, \omega) = \frac{g^2}{2(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \cdot \omega_q \left\{ \frac{1 - n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{\omega - \omega_q - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 + i\Delta} + \frac{n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{\omega + \omega_q - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 + i\Delta} \right\}.$$

注意, 这里我們已把 ω 的原点向左移动了 μ . 令 M_1^R 与 M_2^R 分别为質量算符的实数部分和虛数部分, 且利用熟知的公式

$$\frac{1}{x \pm i\Delta} = \frac{P}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad (\Delta \rightarrow +0),$$

則有

$$M_1^R(\mathbf{p}, \omega) = \frac{g^2}{2(2\pi)^3} P \int d\mathbf{q} \cdot \omega_q \left\{ \frac{1 - n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{\omega - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 - \omega_q} + \frac{n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q}{\omega - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 + \omega_q} \right\}, \quad (2.7)$$

$$M_2^R(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{g^2\pi}{2(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \cdot \omega_q \{ (1 - n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q) \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 - \omega_q) + (n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + m_q) \delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^0 + \omega_q) \}. \quad (2.8)$$

三、元激发能谱及其衰减

根据格林函数的重要性质^[7]知,元激发能谱由方程式

$$\epsilon_{\mathbf{p}} = \epsilon_{\mathbf{p}}^0 + M_1^R(\mathbf{p}, \epsilon_{\mathbf{p}}) \quad (3.1)$$

决定,而衰减是

$$\gamma = \left(\frac{|M_2^R(\mathbf{p}, \omega)|}{1 - \frac{\partial M_1^R(\mathbf{p}, \omega)}{\partial \omega}} \right)_{\omega=\epsilon_{\mathbf{p}}} \quad (3.2)$$

为此,我们对 M_1^R 与 M_2^R 作了计算.

由(2.7)式计算 M_1^R 时,对于被积函数中含有 $n_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}$ 的二项,利用了近似公式

$$\int_a^b \frac{f(x)dx}{1 + e^{\beta(x-\mu)}} = \frac{F(x) - F(\mu)}{1 + e^{\beta(x-\mu)}} \Big|_a^b + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \left(\frac{df}{dx} \right)_{x=\mu} \theta(b - \mu) \theta(\mu - a) + \dots,$$

其中 $F(x) = \int f(x)dx$, $\theta(x)$ 为阶梯函数

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0, \\ 0 & x < 0. \end{cases}$$

在低温近似下,我们只保留展式的前二项. 对于(2.7)式中,含有 m_q 的二项,我们应用了关系式

$$\int \frac{f(\omega)}{e^{\beta\omega} - 1} d\omega = \sum_{n=1}^{\infty} \int f(\omega) e^{-n\beta\omega} d\omega,$$

逐项积分,并在结果中仅保留 $1/\beta$ 的低次项.

计算结果为

$$\begin{aligned} M_1^R(\mathbf{p}, \omega) = & -\frac{\rho c}{8pp_F} \left\{ \frac{q_m^3}{3} \ln \left| \frac{(q_m + p)^2 + (cq_m - \omega)}{(q_m - p)^2 - (cq_m + \omega)} \right| + \frac{q_m^3}{3} \ln \left| \frac{\omega - \mu + cq_m}{\omega - \mu - cq_m} \right| + \right. \\ & + \left(p + \frac{c}{2} \right) \left[\frac{\left(p + \frac{c}{2} \right)^2}{3} + a^2 \right] \ln \left| \frac{(q_m + p)^2 + (cq_m - \omega)}{\omega - \mu + c(p - p_0)} \cdot \frac{(q_m - p)^2 - (cq_m + \omega)}{\omega - p^2} \right| + \\ & + \left(p - \frac{c}{2} \right) \left[\frac{\left(p - \frac{c}{2} \right)^2}{3} + b^2 \right] \ln \left| \frac{\omega - \mu - c(p - p_0)}{\omega - p^2} \right| + \\ & + a \left[\left(p + \frac{c}{2} \right)^2 + \frac{a^2}{3} \right] \ln \left| \frac{q_m + p + \frac{c}{2} + a}{q_m + p + \frac{c}{2} - a} \cdot \frac{p + \frac{c}{2} - a}{p + \frac{c}{2} + a} \cdot \frac{p_0 + \frac{c}{2} - a}{p_0 + \frac{c}{2} + a} \right| \times \\ & \times \left. \frac{p + \frac{c}{2} - q_m + a}{p + \frac{c}{2} - q_m - a} \right| + b \left[\left(p - \frac{c}{2} \right)^2 + \frac{b^2}{3} \right] \ln \left| \frac{p_0 - \frac{c}{2} + b}{p_0 - \frac{c}{2} - b} \cdot \frac{p - \frac{c}{2} - b}{p - \frac{c}{2} + b} \right| + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{3} \left(\frac{\omega - \mu}{c} \right)^3 \ln \left| \frac{(\omega - \mu)^2 - c^2 q_m^2}{(\omega - \mu)^2 - c^2 (p - p_0)^2} \right| - \frac{4}{3} c p (p - p_0) + 2p(p - p_0)^2 + \\
& + [q_m^2 - (p - p_0)^2] \left[(2p + c) + \frac{1}{3} \frac{\omega - \mu}{c} \right] - \frac{4}{3} \left[\frac{c}{2} (p^2 - \mu) + \left(p + \frac{c}{2} \right) q_m^2 \right] - \\
& - \frac{\rho \pi^2 (\hbar T)^2}{48 p p_F} \left\{ \frac{2(\omega - \mu) q_m^2}{(\omega - \mu)^2 - c^2 q_m^2} + \frac{4(\omega - \mu)}{c^2} \ln \left| \frac{c q_m}{\omega - \mu} \right| - \frac{c^2 (p - p_0)}{p_0 (p + p_0)^2} \right\} + \\
& + \frac{\rho \pi^4 (\hbar T)^4}{32 c^3 p_F} \cdot \frac{1}{\omega - p^2} \quad (p_0 - q_m < p < p_0 + q_m). \quad (3.3)
\end{aligned}$$

式中 $\rho = \frac{g^2 p_F}{2\pi^2}$; $p_0 = \mu^{1/2}$; $p_F = \mu_0^{1/2}$; $a = \sqrt{\frac{c^2}{4} + pc + \omega}$; $b = \sqrt{\frac{c^2}{4} - pc + \omega}$. 我們注意到, 实际上有 $p \gg c$, $q_m \gg c$, 因此可以略去 c/p 与 c/q_m 的項, 而且我們关心的是动量值在費米动量附近的性質, 由(3.1)式及(3.3)式, 便得到电子的重正化能量:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_p = \varepsilon_p^0 - \frac{\rho c}{8 p p_F} \left\{ \frac{q_m^3}{3} \ln \left| \frac{q_m + 2p}{q_m - 2p} \right| + \frac{8}{3} p^3 \ln \left| 1 - \frac{q_m^2}{4p^2} \right| + \frac{2}{3} p q_m^2 + \frac{q_m^2}{c} (\varepsilon_p - \mu) \right\} - \\
- \frac{\pi^2 \rho}{12 p p_F} (\hbar T)^2 \frac{\varepsilon_p - \mu}{c} \ln \left| \frac{c q_m}{\varepsilon_p - \mu} \right| + \frac{\rho \pi^4 (\hbar T)^4}{32 c^3 p_F} \cdot \frac{1}{\varepsilon_p - \varepsilon_p^0}. \quad (3.4)
\end{aligned}$$

由上式可得电子声子相互作用对化学势的修正 $\mu - \mu_0$. 它由方程式

$$\begin{aligned}
\mu - \mu_0 = - \frac{\rho c}{8 p_F^2} \left\{ \frac{q_m^3}{3} \ln \left| \frac{q_m + 2p_F}{q_m - 2p_F} \right| + \frac{8}{3} p_F^3 \ln \left| 1 - \frac{q_m^2}{2p_F^2} \right| + \frac{2}{3} p_F q_m^2 \right\} + \\
+ \frac{\rho \pi^4 (\hbar T)^4}{32 c^3 p_F} \cdot \frac{1}{\mu - \mu_0} \quad (3.5)
\end{aligned}$$

解出.

利用(3.5)式, 可把(3.4)式近似地写为

$$\varepsilon_p - \mu = \frac{\varepsilon_p^0 - \mu_0}{1 + \alpha + \alpha'},$$

其中 $\alpha = \frac{\rho q_m^2}{8 p p_F}$; $\alpha' = \frac{\pi^2 \rho}{12 c^2 p p_F} (\hbar T)^2 \ln \left| \frac{c q_m}{p^2 - \mu} \right|$. α' 是温度对元激发能譜的影响. 在绝对零度下, 与 Мигдал^[2] 的结果符合.

根据(2.8)式計算 M_2^R 得到

$$\begin{aligned}
M_2^R(\mathbf{p}, \omega) = - \frac{\pi \rho}{24 c^2 p p_F} \left\{ |\omega - \mu|^3 + \pi^2 (\hbar T)^2 |\omega - \mu| + 12 (\hbar T)^3 \times \right. \\
\left. \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} [1 - (-1)^n e^{-n|\omega - \mu|/\hbar T}] \right\} \quad (\mu - c q_m < \omega < \mu + c q_m). \quad (3.6)
\end{aligned}$$

由(3.2)式即得到元激发的衰減 $\gamma(\varepsilon_p) = |M_2^R(\mathbf{p}, \varepsilon_p)|$.

由(3.6)式可見, 在绝对零度下, 衰減与 $|\varepsilon_p - \mu|^3$ 成正比, 在有限温度下, 衰減随温度升高而变大, 并且在 $\varepsilon_p = \mu$ 这一点也有衰減, 但数值很小:

$$\gamma(\mu) = \frac{7}{8} \frac{\pi \rho}{c^2 p p_F} (\hbar T)^3 \zeta(3),$$

其中 $\zeta(n)$ 是黎曼 ζ -函数.

根据计算,在 $|\epsilon_p - \mu| > \omega_m (\omega_m = cq_m)$ 区域,衰减很大, $\gamma \cong \frac{\pi \rho \omega_m^3}{24 c^2 p p_F}$, 所以当能量 ϵ_p 离化学势较远时,用赝粒子来描写系统的激发态就失去意义了。

本文系作者 1961 年于复旦大学的毕业论文。作者对指导教师周世助教授在选题及具体工作中的悉心指导以及陶瑞宝同志在本文校阅工作中的协助在此致以衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] Бонч-Бруевич, В. Л., *ЖЭТФ*, **28** (1955), 121; **30** (1956), 342.
- [2] Мигдал, А. Б., *ЖЭТФ*, **34**, (1958), 1438.
- [3] 周世助, 复旦大学—自然科学学报, **2** (1959), 99.
- [4] Matsubara, T., *Prog. Theor. Phys.*, **14** (1955), 351.
- [5] Абрикосов, А. А., Горьков, Л. П., Дзялошинский, И. Е., *ЖЭТФ*, **36** (1959), 900.
- [6] Fröhlich, H., *Phys. Rev.*, **79** (1950), 845.
- [7] Галицкий, В. М., Мигдал, А. Б., *ЖЭТФ*, **34** (1958), 139.