Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Т. Шве́ц, Многочастичные динамические структурные факторы невзаимодействующего электронного газа, *ТМФ*, 1996, том 106, номер 3, 438–451

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1128>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.209.52.79

26 апреля 2023 г., 16:06:17

В. Т. Швец

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ ФАКТОРЫ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Рассчитан трехчастичный динамический структурный фактор невзаимодействующего вырожденного электронного газа. Предложена диаграммная техника для расчета динамических структурных факторов произвольного числа частиц для невзаимодействующего электронного газа. Исследованы свойства симметрии многочастичных динамических структурных факторов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальной задачей физики конденсированного состояния является реализация многочастичного подхода при теоретических исследованиях различных его характеристик. В работах [1–5] была разработана последовательная многочастичная теория электронных явлений переноса в простых неупорядоченных металлах. В рамках этой теории обратные времена релаксации, характеризующие различные явления переноса, были представлены в виде рядов по степеням слабых взаимодействий, в то время как электрон-электронное и ряд других взаимодействий в системе, не являющихся слабыми, учитывались формально точно. Структурными блоками этой теории, содержащими всю информацию о свойствах электронной подсистемы металла, оказались многочастичные динамические структурные факторы электронной подсистемы. Так, например, член второго порядка в разложении обратного времени релаксации для электропроводности простых металлов в ряд по степеням псевдопотенциала электрон-ионного взаимодействия содержит двухчастичный динамический структурный фактор взаимодействующего электронного газа, член третьего порядка – трехчастичный динамический структурный фактор и т. д. [5]. Обсуждаемая теория впервые указала на практическую важность многочастичных структурных факторов электронного газа и сделала заказ на их конкретное вычисление.

Плохая сходимость ряда теории возмущений и сложность расчетов всех последующих его членов, кроме первого, квадратичного по псевдопотенциалу, является основным фактором, влияющим на точность расчетов электросопротивления указанных металлов. Усложняет ситуацию и противоречивость результатов различных авторов, полученных к тому же в рамках одночастичного подхода.

Особое практическое значение в обсуждаемой теории электропроводности имеет член третьего порядка по псевдопотенциалу, а следовательно, и трехчастичный динамический структурный фактор взаимодействующего электронного газа. Это единствен-

ный член, кроме квадратичного, который технически может быть надежно рассчитан, и на основании именно его величины приходится строить предположения относительно сходимости ряда теории возмущений.

Если двухчастичный динамический структурный фактор электронного газа в настоящее время достаточно хорошо исследован [6], то расчеты структурных факторов более высокого порядка все еще отсутствуют. Цель данной статьи – восполнить указанный пробел. При этом мы ограничимся здесь лишь вычислением структурных факторов не-взаимодействующего электронного газа, служащих основой для их последующего рассмотрения при учете электрон-электронного взаимодействия. Последнее будет предметом наших последующих работ.

2. СТРУКТУРНЫЕ ФУНКЦИИ

Фурье-образ оператора электронной плотности определим следующим образом:

$$\hat{\rho}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^+(t) A_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(t), \quad (1)$$

здесь $A_{\mathbf{k}}^+$, $A_{\mathbf{k}}$ – операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии с волновым вектором $\mathbf{k}$. Для всех операторов используется представление Гайзенберга

$$A_{\mathbf{k}}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right) A_{\mathbf{k}}(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t\right), \quad (2)$$

где $\hat{H}$ – гамильтониан взаимодействующего электронного газа.

Рассмотрим следующую последовательность структурных функций:

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2) = \frac{1}{(2\pi)^2 N} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i\omega_1 t_1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{i\omega_2 t_2} \langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1) \hat{\rho}(\mathbf{q}_2, t_2) \rangle; \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) &= \frac{1}{(2\pi)^n N} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{i\omega_1 t_1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{i\omega_n t_n} \langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, t_n) \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по каноническому ансамблю Гиббса с помощью статистического оператора, матричный элемент которого имеет вид

$$\hat{\rho} = Q^{-1}(T, V, N) \sum_n e^{-\beta \varepsilon_n} \Psi_n^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) \Psi_n(\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_N), \quad (5)$$

где Ψ_n и ε_n – собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона системы, $Q(T, V, N)$ – статистическая сумма, N – число электронов.

3. СВОЙСТВА СИММЕТРИИ СТРУКТУРНЫХ ФУНКЦИЙ

С учетом (5) для оригинала структурной функции (4) имеем

$$\begin{aligned} \langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, t_n) \rangle &= Q^{-1}(T, V, N) \sum_{m_1, \dots, m_n} e^{-\beta \varepsilon_{m_1}} \rho_{m_1 m_2}(\mathbf{q}_1, 0) \dots \rho_{m_n m_1}(\mathbf{q}_n, 0) \times \\ &\times \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{m_1} - \varepsilon_{m_2})t_1\right] \dots \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_{m_n} - \varepsilon_{m_1})t_n\right], \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \rho_{m_{k-1}m_k}(\mathbf{q}_m, 0) &= \int \cdots \int \Psi_{m_{k-1}}^*(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{\rho}(\mathbf{q}, 0) \Psi_{m_k}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (7) \\ \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) &= \hbar^n Q^{-1}(T, V, N) \sum_{m_1, \dots, m_n} e^{-\beta \varepsilon_{m_1}} \times \\ &\times \rho_{m_1 m_1}(\mathbf{q}_1, 0) \dots \rho_{m_n m_1}(\mathbf{q}_n, 0) \delta(\varepsilon_{m_1} - \varepsilon_{m_2} + \hbar \omega_1) \dots \delta(\varepsilon_{m_n} - \varepsilon_{m_1} + \hbar \omega_n). \quad (8) \end{aligned}$$

Аналогично имеем

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_n, \omega_n, \mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_{n-1}, \omega_{n-1}) &= \hbar^n Q^{-1}(T, V, N) \sum_{m_1, \dots, m_n} e^{-\beta \varepsilon_{m_n}} \times \\ &\times \rho_{m_n m_1}(\mathbf{q}_n, 0) \rho_{m_1 m_2}(\mathbf{q}_1, 0) \dots \rho_{m_{n-1} m_n}(\mathbf{q}_{n-1}, 0) \times \\ &\times \delta(\varepsilon_{m_n} - \varepsilon_{m_1} + \hbar \omega_n) \delta(\varepsilon_{m_1} - \varepsilon_{m_2} + \hbar \omega_1) \dots \delta(\varepsilon_{m_{n-1}} - \varepsilon_{m_n} + \hbar \omega_{n-1}). \quad (9) \end{aligned}$$

Учитывая, что $\varepsilon_{m_n} = \varepsilon_{m_1} - \hbar \omega_n$, и сравнивая выражения (8) и (9), получим

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_n, \omega_n, \mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_{n-1}, \omega_{n-1}) = \exp(\beta \hbar \omega_n) \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n). \quad (10)$$

Совершенно аналогично получим и все последующие $n - 2$ спектральных соотношения типа

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_{n-1}, \omega_{n-1}, \mathbf{q}_n, \omega_n, \mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_{n-2}, \omega_{n-2}) &= \exp[\beta \hbar (\omega_{n-1} + \omega_n)] \times \\ &\times \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) \quad (11) \end{aligned}$$

и т.д. В случае произвольного числа частиц такие спектральные соотношения нами получены впервые.

Вся совокупность n -частичных структурных функций может быть разбита на $N - 1$ классов, внутри каждого из которых структурные функции отличаются лишь циклической перестановкой аргументов и, следовательно, могут быть выражены друг через друга с помощью $N - 1$ спектрального соотношения типа (10)–(11).

В случае трехчастичных структурных функций таких классов два и для каждого из них имеют место два независимых спектральных соотношения, а именно:

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_3, \omega_3, \mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2) = \exp(\beta \hbar \omega_3) \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3); \quad (12)$$

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3, \mathbf{q}_1, \omega_1) = \exp[\beta \hbar (\omega_3 + \omega_2)] \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) \quad (13)$$

и

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_3, \omega_3) = \exp(\beta \hbar \omega_2) \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_3, \omega_3, \mathbf{q}_2, \omega_2); \quad (14)$$

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_3, \omega_3, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_1, \omega_1) = \exp[\beta \hbar (\omega_3 + \omega_2)] \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_3, \omega_3, \mathbf{q}_2, \omega_2). \quad (15)$$

В такой наиболее симметричной форме соотношения между структурными функциями, фактически эквивалентные соотношениям между спектральными интенсивностями трехвременных запаздывающих, опережающих и смешанных функций Грина [7], нами получены впервые.

В случае двухчастичной структурной функции существует лишь одно спектральное соотношение

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_1, \omega_1) = \exp(\beta \hbar \omega_2) \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2). \quad (16)$$

Учтем теперь, что оригинал n -частичной структурной функции зависит лишь от $n-1$ временного аргумента. В этом случае

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) &= \frac{1}{(2\pi)^n N} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_1 t_1} \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_n t_n} \times \\ &\times \langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1 - t_k) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_k, 0) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, t_n - t_k) \rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

Поскольку интегрирование по времени t_k дает дельта-функцию, содержащую сумму всех частот, то

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) = \delta(\omega_1 + \dots + \omega_n) \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_k, \odot, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n), \quad (18)$$

где $\odot$ обозначает $t = 0$ в отличие от случая $\omega = 0$.

Следующее свойство симметрии является следствием того обстоятельства, что уравнение движения для оператора $\hat{\rho}(\mathbf{q}, t)$, составленное с помощью гамильтониана системы, инвариантно относительно замены t на $-t$ и i на $-i$. В этом случае

$$\langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, t_n) \rangle = \langle \hat{\rho}(\mathbf{q}_1, -t_1) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, -t_n) \rangle^*. \quad (19)$$

Произведя указанную замену в выражении (4), получим, что многочастичные структурные функции являются вещественными:

$$\tilde{S}^*(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) = \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n). \quad (20)$$

Возьмем теперь выражение, сопряженное выражению (4), учитывая при этом, что

$$[\hat{\rho}(\mathbf{q}_1, t_1) \dots \hat{\rho}(\mathbf{q}_n, t_n)]^+ = \hat{\rho}^+(\mathbf{q}_n, t_n) \dots \hat{\rho}^+(\mathbf{q}_1, t_1) \quad (21)$$

и что (это непосредственно следует из выражения (1))

$$\hat{\rho}^+(\mathbf{q}_n, t_n) = \hat{\rho}(-\mathbf{q}_n, t_n). \quad (22)$$

Подставляя затем оба эти соотношения в выражение (21), получим

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) = \tilde{S}(-\mathbf{q}_n, -\omega_n, \dots, -\mathbf{q}_1, -\omega_1). \quad (23)$$

Отметим, что из наиболее общих соотношений (12)–(18) при определенном выборе аргументов следуют спектральные соотношения для трехвременных запаздывающих, опережающих и смешанных функций Грина [7].

4. СТРУКТУРНЫЕ ФАКТОРЫ

При вычислении структурных функций всегда приходится использовать те или иные приближения. Свойства симметрии, с одной стороны, позволяют проконтролировать

степень адекватности используемых приближений, а с другой стороны, – значительно уменьшить количество структурных функций, подлежащих независимому вычислению.

Структурные функции являются более удобными объектами для теоретических расчетов, поскольку непосредственно связаны с соответствующими запаздывающими, опережающими и смешанными функциями Грина. Вместе с тем в приложениях, как правило, фигурируют не структурные функции, а связанные с ними структурные факторы. Рассмотрим эту связь. Для двухчастичной структурной функции она имеет вид

$$\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2) = S(q_1, \omega_1) \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2) + N \Delta(\mathbf{q}_1) \Delta(\mathbf{q}_2) \delta(\omega_1) \delta(\omega_2), \quad (24)$$

где $\Delta(\mathbf{q})$ – символ Кронекера, $\delta(\omega)$ – дельта-функция Дирака, $S(q_1, \omega_1)$ – двухчастичный динамический структурный фактор электронного газа. Очевидно, что

$$S(q, \omega) = \sum_{\mathbf{q}'} \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega, \mathbf{q}', \odot) - N \Delta(\mathbf{q}) \delta(\omega). \quad (25)$$

Для трехчастичного структурного фактора имеем

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \omega_i, \omega_j) \times \\ &\times \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) + \\ &+ NS(q_1, \omega_1) \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \Delta(\mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2) \delta(\omega_3) + \\ &+ NS(q_2, \omega_2) \Delta(\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3) \Delta(\mathbf{q}_1) \delta(\omega_2 + \omega_3) \delta(\omega_1) + \\ &+ NS(q_3, \omega_3) \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3) \Delta(\mathbf{q}_2) \delta(\omega_1 + \omega_3) \delta(\omega_2) + \\ &+ N^2 \Delta(\mathbf{q}_1) \Delta(\mathbf{q}_2) \Delta(\mathbf{q}_3) \delta(\omega_1) \delta(\omega_2) \delta(\omega_3), \end{aligned} \quad (26)$$

где $S(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \omega_i, \omega_j)$ – трехчастичный динамический структурный фактор электронного газа ($i, j = 1, 2, 3$). Проинтегрировав последнее соотношение по одной из частот и просуммировав по одному из волновых векторов, имеем

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, -\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_2, \omega_1, \omega_2) &= \sum_{\mathbf{q}_3} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \odot) - \\ &- NS(q_1, \omega_1) \Delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2) \delta(\omega_1 + \omega_2) - NS(q_2, \omega_2) \Delta(\mathbf{q}_1) \delta(\omega_1) - \\ &- NS(q_1, \omega_1) \Delta(\mathbf{q}_2) \delta(\omega_2) - N^2 \Delta(\mathbf{q}_1) \Delta(\mathbf{q}_2) \delta(\omega_1) \delta(\omega_2). \end{aligned} \quad (27)$$

Аналогично можно определить и структурные динамические факторы произвольного числа частиц:

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_n) &= S(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_{i_1}, \dots, \omega_{i_{n-1}}) \times \\ &\times \Delta(\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n) \delta(\omega_1 + \dots + \omega_n) + N \sum_P \hat{P}_2 S(\mathbf{q}_{i_1}, \omega_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_{n-1}}, \omega_{i_{n-1}}) \times \\ &\times \Delta(\mathbf{q}_{i_1} + \dots + \mathbf{q}_{i_{n-1}}) \Delta(\mathbf{q}_{i_n}) \delta(\omega_{i_1} + \dots + \omega_{i_{n-1}}) \delta(\omega_{i_n}) + \\ &+ N^2 \sum_P \hat{P}_3 S(\mathbf{q}_{i_1}, \omega_{i_1}, \dots, \mathbf{q}_{i_{n-2}}, \omega_{i_{n-2}}) \times \\ &\times \Delta(\mathbf{q}_{i_1} + \dots + \mathbf{q}_{i_{n-2}}) \Delta(\mathbf{q}_{i_{n-1}}) \Delta(\mathbf{q}_{i_n}) \delta(\omega_{i_1} + \dots + \omega_{i_{n-2}}) \delta(\omega_{i_{n-1}}) \delta(\omega_{i_n}) + \\ &+ \dots + \\ &+ N^{n-1} \Delta(\mathbf{q}_{i_1}) \dots \Delta(\mathbf{q}_{i_n}) \delta(\mathbf{q}_{i_1}) \dots \delta(\mathbf{q}_{i_n}). \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь $\hat{P}_2$ – оператор перестановок пар аргументов $(\mathbf{q}_i, \omega_i)$ и $(\mathbf{q}_j, \omega_j)$, обязательно затрагивающий аргументы $n - 1$ -частичного структурного фактора и аргументы всех символов Кронекера и дельта-функций, $\hat{P}_3$ – оператор перестановок троек аргументов $(\mathbf{q}_i, \omega_i)$, $(\mathbf{q}_j, \omega_j)$ и $(\mathbf{q}_k, \omega_k)$, обязательно затрагивающий аргументы $n - 2$ -частичного структурного фактора и аргументы всех символов Кронекера и дельта-функции и т. д. $S(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n, \omega_{i_1}, \dots, \omega_{i_{n-1}})$ – n -частичный динамический структурный фактор электронного газа. Аналогично предыдущему его можно получить, непосредственно проинтегрировав последнее соотношение по одной из частот и просуммировав по одному из волновых векторов.

5. ДВУХЧАСТИЧНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Для невзаимодействующего электронного газа

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}}^+ A_{\mathbf{k}}, \quad (29)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ – энергия свободных электронов. В этом случае

$$\begin{aligned} \tilde{S}_0(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2) &= \frac{\hbar^2}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \langle A_{\mathbf{k}_1}^+(0) A_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1}(0) A_{\mathbf{k}_2}^+(0) A_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2}(0) \rangle \times \\ &\times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1} + \hbar\omega_1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2} + \hbar\omega_2). \end{aligned} \quad (30)$$

Используя для вычисления среднего в последнем выражении теорему Вика–Блоха–Доминисиса [8], получим

$$\tilde{S}_0(\mathbf{q}, \omega, -\mathbf{q}, \odot) = \frac{\hbar}{N} \sum_{\mathbf{k}} n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega). \quad (31)$$

Выполним теперь детальное вычисление рассматриваемой структурной функции. Для этого в последнем выражении перейдем от суммирования по волновому вектору к интегрированию в сферической системе координат и выполним интегрирование по угловым переменным, тогда получим

$$\begin{aligned} \tilde{S}_0(\mathbf{q}, \omega, -\mathbf{q}, \odot) &= \frac{mV}{2\pi^2 N \hbar q} \int_0^\infty dk k n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega)] \times \\ &\times \Theta\left(k - \left|\frac{q}{2} - \frac{\Omega}{2q}\right|\right), \quad \Omega = 2m\omega/\hbar. \end{aligned} \quad (32)$$

Наиболее просто оставшийся интеграл вычисляется в случае вырожденного электронного газа при $\hbar\omega \gg k_B T$, тогда

$$S_0(q, \omega) = \frac{m^2 V}{2\pi^2 N \hbar^3 q} \times \begin{cases} 0, & \text{если } \hbar\omega < 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(\frac{q}{2k_F} - 1 \right), \quad \hbar\omega > 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(\frac{q}{2k_F} + 1 \right) \\ & \text{и } \hbar\omega < 0, \\ \hbar\omega, & \text{если } \hbar\omega > 0 \text{ и } \hbar\omega < 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(\frac{q}{2k_F} + 1 \right), \\ & \hbar\omega > 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(-\frac{q}{2k_F} - 1 \right) \text{ и } \hbar\omega < 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(-\frac{q}{2k_F} + 1 \right), \\ \varepsilon_F - (\varepsilon_q - \hbar\omega)^2 / 4\varepsilon_F, & \text{если } \hbar\omega > 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(\frac{q}{2k_F} - 1 \right) \text{ и} \\ & \hbar\omega < 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(\frac{q}{2k_F} + 1 \right), \quad \hbar\omega < 4\varepsilon_F \frac{q}{2k_F} \left(-\frac{q}{2k_F} + 1 \right), \end{cases} \quad (33)$$

что, естественно, совпадает с хорошо известным результатом [6].

В теории электронных явлений переноса интерес представляет случай, когда $\hbar\omega \ll k_B T$. При этом функция $n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) + \hbar\omega]$ имеет ярко выраженный δ -образный пик при $\varepsilon = \varepsilon_F$ и все медленно меняющиеся функции могут быть вынесены из-под знака интеграла. Для вычисления оставшегося интеграла воспользуемся результатами приложения 1. В итоге получаем

$$\tilde{S}_0(\mathbf{q}, \omega, -\mathbf{q}, \odot) = \frac{m^2 v_0}{2\pi^2 \hbar^3 q} \Theta \left(k_F - \left| \frac{q}{2} - \frac{m\omega}{\hbar q} \right| \right) \frac{\hbar\omega}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}. \quad (34)$$

6. ТРЕХЧАСТИЧНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ ФАКТОР НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Для невзаимодействующего электронного газа имеем

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= \frac{\hbar^3}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} \langle A_{\mathbf{k}_1}^+(0) A_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1}(0) A_{\mathbf{k}_2}^+(0) A_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2}(0) \times \\ &\times A_{\mathbf{k}_3}^+(0) A_{\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3}(0) \rangle \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}_1} + \hbar\omega_1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q}_2} + \hbar\omega_2) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_3} - \varepsilon_{\mathbf{k}_3+\mathbf{q}_3} + \hbar\omega_3). \end{aligned} \quad (35)$$

Используя для вычисления среднего в последнем выражении теорему Вика–Блоха–Доминисиса [8], получим

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= \frac{\hbar^2}{N} \Delta(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}} \{ n(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1})] [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_3})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} + \hbar\omega_1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_3} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_3) - \\ &- [1 - n(\varepsilon_{\mathbf{k}})] n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}) n(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_3}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_3} + \hbar\omega_3) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_1) \}. \end{aligned} \quad (36)$$

Выполним теперь детальное вычисление рассматриваемой структурной функции. Для этого в последнем выражении перейдем от суммирования по волновому вектору к интегрированию в сферической системе координат и выполним интегрирование по угловым переменным (см. приложение 2), тогда

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= \Delta(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \times \\
&\times \frac{m^2}{2\pi^3 \hbar^2 q_1 q_2} \left\{ \int_0^\infty dk n(\varepsilon_k) [1 - n(\varepsilon_k + \hbar\omega_1)] \times \right. \\
&\times [1 - n(\varepsilon_k - \hbar\omega_3)] \Theta\left(k - \left|\frac{q_1}{2} - \frac{\Omega_1}{2q_1}\right|\right) \Theta\left(k - \left|\frac{q_3}{2} + \frac{\Omega_3}{2q_3}\right|\right) \times \\
&\times \left\{ \sin^2(\Theta_{13}) + 2\left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2kq_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2kq_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2kq_1}\right)^2 - \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2kq_3}\right)^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} - \\
&- \int_0^\infty dk [1 - n(\varepsilon_k)] n(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1}) n(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_3}) \Theta\left(k - \left|\frac{q_1}{2} + \frac{\Omega_1}{2q_1}\right|\right) \Theta\left(k - \left|\frac{q_3}{2} - \frac{\Omega_3}{2q_3}\right|\right) \times \\
&\times \left\{ \sin^2(\Theta_{13}) + 2\left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2kq_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2kq_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \right. \\
&\left. - \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2kq_1}\right)^2 - \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2kq_3}\right)^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} \Bigg\}. \tag{37}
\end{aligned}$$

Оставшийся интеграл вычисляется различным образом для случая, когда $\hbar\omega_1, \hbar\omega_3 \gg k_B T$, и для случая, когда выполняется хотя бы одно из условий $\hbar\omega_1 \approx k_B T$ или $\hbar\omega_3 \approx k_B T$. В первом случае

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= \Delta(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \frac{v_0 m^2}{2q_1 q_3 \sin^2(\Theta_{13})} \times \\
&\times \left\{ \left\{ k_F^2 \sin^2(\Theta_{13}) + 2k_F^2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_F q_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_F q_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \right. \right. \\
&- k_F^2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_F q_1}\right)^2 - k_F^2 \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_F q_3}\right)^2 \Bigg\}^{\frac{1}{2}} - \\
&- \left\{ k_M^2 \sin^2(\Theta_{13}) + 2k_M^2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_M q_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_M q_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \right. \\
&- k_M^2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_M q_1}\right)^2 - k_M^2 \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_M q_3}\right)^2 \Bigg\}^{\frac{1}{2}} - \\
&- \left\{ k_m^2 \sin^2(\Theta_{13}) + 2k_m^2 \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_m q_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_m q_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \right. \\
&- k_m^2 \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_m q_1}\right)^2 - k_m^2 \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_m q_3}\right)^2 \Bigg\}^{\frac{1}{2}} + \\
&+ \left\{ k_F^2 \sin^2(\Theta_{13}) + 2k_F^2 \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_F q_1}\right) \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_F q_3}\right) \cos(\Theta_{13}) - \right. \\
&- k_F^2 \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_F q_1}\right)^2 - k_F^2 \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_F q_3}\right)^2 \Bigg\}^{\frac{1}{2}} \Bigg\}, \tag{38}
\end{aligned}$$

здесь

$$\begin{aligned}
k_M &= \max\{k_1, k_2, k_3, k_4\}, & \bar{k}_m &= \min\{\bar{k}_1, \bar{k}_2, \bar{k}_3, \bar{k}_4\}, \\
k_1 &= \sqrt{2m(\varepsilon_F - \hbar\omega_1)/\hbar^2}, & k_2 &= \sqrt{2m(\varepsilon_F + \hbar\omega_3)/\hbar^2}, \\
k_3 &= \left| \frac{q_1}{2} - \frac{\Omega_1}{2q_1} \right|, & k_4 &= \left| \frac{q_3}{2} + \frac{\Omega_3}{2q_3} \right|, \\
\bar{k}_1 &= \sqrt{2m(\varepsilon_F + \hbar\omega_1)/\hbar^2}, & \bar{k}_2 &= \sqrt{2m(\varepsilon_F - \hbar\omega_3)/\hbar^2}, \\
\bar{k}_3 &= \left| \frac{q_1}{2} + \frac{\Omega_1}{2q_1} \right|, & \bar{k}_4 &= \left| \frac{q_3}{2} - \frac{\Omega_3}{2q_3} \right|, \\
\Omega_1 &= 2m\omega_1/\hbar, & \Omega_3 &= 2m\omega_3/\hbar.
\end{aligned}$$

Во втором случае интегралы, входящие в выражение (37), вычислены в приложении 1. В результате имеем

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(\mathbf{q}_1, \omega_1, \mathbf{q}_2, \omega_2, \mathbf{q}_3, \omega_3) &= \Delta(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \delta(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3) \frac{v_0 m^3 k_B T}{2q_1 q_3 k_F \hbar^2} \times \\
&\times \left\{ \frac{\hbar\omega_1/k_B T}{[1 - e^{-\hbar\omega_1/k_B T}][1 - e^{-\hbar(\omega_1+\omega_3)/k_B T}]} - \frac{\hbar\omega_3/k_B T}{[1 - e^{-\hbar\omega_3/k_B T}][1 - e^{-\hbar(\omega_1+\omega_3)/k_B T}]} \right\} \times \\
&\times \left\{ \Theta\left(k_F - \left| \frac{q_1}{2} - \frac{\Omega_1}{2q_1} \right| \right) \Theta\left(k_F - \left| \frac{q_3}{2} + \frac{\Omega_3}{2q_3} \right| \right) \left\{ \sin^2(\Theta_{13}) + \right. \\
&\quad + 2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_F q_1} \right) \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_F q_3} \right) \cos(\Theta_{13}) - \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2k_F q_1} \right)^2 - \left(\frac{\Omega_3 + q_3^2}{2k_F q_3} \right)^2 \left. \right\}^{\frac{1}{2}} - \\
&\quad - \Theta\left(k_F - \left| \frac{q_1}{2} + \frac{\Omega_1}{2q_1} \right| \right) \Theta\left(k_F - \left| \frac{q_3}{2} - \frac{\Omega_3}{2q_3} \right| \right) \left\{ \sin^2(\Theta_{13}) + \right. \\
&\quad + 2 \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_F q_1} \right) \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_F q_3} \right) \cos(\Theta_{13}) - \left(\frac{\Omega_1 + q_1^2}{2k_F q_1} \right)^2 - \left(\frac{\Omega_3 - q_3^2}{2k_F q_3} \right)^2 \left. \right\}^{-\frac{1}{2}} \Big\}. \quad (39)
\end{aligned}$$

Эти результаты для трехчастичного динамического структурного фактора невзаимодействующего вырожденного электронного газа справедливы в широком диапазоне частот и могут использоваться как в теории электронных явлений переноса в различных конденсированных системах (малые частоты), так и, например, в теории рассеяния быстрых электронов тонкими металлическими пленками (высокие частоты).

Аналогичным образом могут быть вычислены и структурные факторы более высокого порядка, однако в этом случае соответствующие выражения будут уже содержать интегралы, которые не могут быть вычислены аналитически.

Наиболее удобно для их получения воспользоваться диаграммной техникой (рис. 1).

Правила построения диаграмм следующие:

1. Структурный фактор изображается совокупностью диаграмм с таким количеством вершин, какое количество операторов плотности входит в структурную функцию.
2. Каждой функции, соединяющей вершину с меньшим номером с вершиной с большим номером, сопоставляется функция распределения электронов $n(k_m)$. При этом номер аргумента совпадает с номером узла, из которого линия исходит. Каждой линии,

Рис. 1

соединяющей вершину с большим номером с вершиной с меньшим номером, отвечает функция $1 - n(k_m)$.

3. Каждой линии, соединяющей вершины с номерами n и m , сопоставляется символ Кронекера $\Delta(\mathbf{k}_m + \mathbf{q}_m - \mathbf{k}_n)$.

4. Каждой вершине с номером m сопоставляется δ -функция $\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_m} - \varepsilon_{\mathbf{k}_m + \mathbf{q}_m} + \hbar\omega)$.

5. По аргументам, отвечающим каждой вершине, производится суммирование.

6. Знак перед диаграммой определяется четностью перестановок ферми-операторов при их перемещении из их первоначальных положений в структурной функции в положении, отвечающие конкретным диаграммам. Можно сформулировать следующее мнемоническое правило для определения знака. Если обход вершин диаграммы осуществляется по часовой стрелке, то диаграмме приписывается сомножитель $(-1)^{n-1}$, где n – число вершин диаграммы. Если линии диаграмм пересекаются, то диаграмме приписывается дополнительный сомножитель $(-1)^m$, где m – число пересечений. Все остальные ситуации не влияют на знак.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Вычисление интегралов, содержащих функции Ферми–Дирака

Рассмотрим интегралы типа

$$I_n = \beta^{n+1} \int_0^\infty d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^n n(\varepsilon) [1 - n(\varepsilon + \hbar\omega)]. \quad (\text{П.1.1})$$

Перейдем в искомом интеграле к безразмерной переменной интегрирования $x = \beta \times (\varepsilon - \mu)$, тогда

$$I_n = \int_{-\infty}^\infty \frac{x^n dx}{(1 + e^x)(1 + e^{-x-\Omega})}, \quad (\text{П.1.2})$$

где $\Omega = \beta\hbar\omega$. Мы полагаем, что $k_B T / \varepsilon_F \ll 1$, поэтому нижний предел в интеграле (П.1.2) взят равным бесконечности.

Рис. 2

Для вычисления интеграла выберем контур интегрирования ($R \rightarrow \infty$), изображенный на рис. 2.

У подынтегральной функции в выражении (П.1.2) имеются две особые точки $z_1 = i\pi$ и $z_2 = i\pi - \Omega$, являющиеся полюсами первого порядка. Применяя теорему о вычетах, имеем

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^\infty \frac{x^n dx}{(1 + e^x)(1 + e^{-x-\Omega})} - \int_{-\infty}^\infty \frac{(x + 2\pi i)^n dx}{(1 + e^x)(1 + e^{-x-\Omega})} = \\ & = 2\pi i \left\{ \lim_{z \rightarrow i\pi} \frac{(z - i\pi)z^n}{(1 + e^z)(1 + e^{-z-\Omega})} - \lim_{z \rightarrow -\Omega + i\pi} \frac{(z - i\pi + \Omega)z^n}{(1 + e^z)(1 + e^{-z-\Omega})} \right\}. \quad (\text{П.1.3}) \end{aligned}$$

При $n = 1$ имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega})} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x+2\pi i) dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega})} = -2\pi i \frac{\Omega}{1-e^{-\Omega}}, \quad (\text{П.1.4})$$

откуда получаем

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega})} = \frac{\Omega}{1-e^{-\Omega}}. \quad (\text{П.1.5})$$

Аналогичным образом могут быть вычислены интегралы для произвольных значений n .

Рассмотрим теперь интегралы типа

$$I_n = \beta^{n+1} \int_0^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^n n(\varepsilon) [1 - n(\varepsilon + \hbar\omega_1)] [1 - n(\varepsilon + \hbar\omega_2)]. \quad (\text{П.1.6})$$

После перехода к безразмерной переменной имеем

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^n dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega_1})(1+e^{-x-\Omega_2})}, \quad (\text{П.1.7})$$

где $\Omega_1 = \beta\hbar\omega_1$, $\Omega_2 = \beta\hbar\omega_2$.

Выбирая контур интегрирования аналогично предыдущему случаю, получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^n dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega_1})(1+e^{-x-\Omega_2})} - \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(x+2\pi i)^n dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega_1})(1+e^{-x-\Omega_2})} = \\ & = 2\pi i \left\{ \lim_{z \rightarrow i\pi} \frac{(z-i\pi)z^n}{(1+e^z)(1+e^{-z-\Omega_1})(1+e^{-z-\Omega_2})} + \right. \\ & + \lim_{z \rightarrow i\pi-\Omega_1} \frac{(z-i\pi+\Omega_1)z^n}{(1+e^z)(1+e^{-z-\Omega_1})(1+e^{-z-\Omega_2})} + \\ & \left. + \lim_{z \rightarrow i\pi-\Omega_2} \frac{(z-i\pi+\Omega_2)z^n}{(1+e^z)(1+e^{-z-\Omega_1})(1+e^{-z-\Omega_2})} \right\}. \quad (\text{П.1.8}) \end{aligned}$$

При $n = 1$ это уравнение принимает вид

$$\begin{aligned} & -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega_1})(1+e^{-x-\Omega_2})} = -2\pi i \left\{ \frac{i\pi}{(1-e^{-\Omega_1})(1-e^{-\Omega_2})} - \right. \\ & - \frac{i\pi-\Omega_1}{(1-e^{-\Omega_1})(1-e^{\Omega_1-\Omega_2})} - \frac{i\pi-\Omega_2}{(1-e^{-\Omega_2})(1-e^{-\Omega_1+\Omega_2})} \left. \right\}. \quad (\text{П.1.9}) \end{aligned}$$

Из этого уравнения получаем

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(1+e^x)(1+e^{-x-\Omega_1})(1+e^{-x-\Omega_2})} = \\ &= \frac{\Omega_1}{(1-e^{-\Omega_1})(1-e^{\Omega_1-\Omega_2})} + \frac{\Omega_2}{(1-e^{-\Omega_2})(1-e^{-\Omega_1+\Omega_2})}. \quad (\text{П.1.10}) \end{aligned}$$

Аналогичным образом можно вычислить и интегралы вида

$$J_n = \beta^{n+1} \int_0^{\infty} d\varepsilon (\varepsilon - \mu)^n [1 - n(\varepsilon)] n(\varepsilon + \hbar\omega_1) n(\varepsilon + \hbar\omega_2). \quad (\text{П.1.11})$$

Легко видеть, что

$$I_n(\Omega_1, \Omega_2) = (-1)^n J_n(-\Omega_1, -\Omega_2). \quad (\text{П.1.12})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Вычисление интегралов, содержащих дельта-функции

Рассмотрим интегралы типа

$$I = \int d\Omega \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1} + \hbar\omega_1) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_2} + \hbar\omega_2). \quad (\text{П.2.1})$$

Преобразуем этот интеграл к виду

$$I = \frac{4m^2}{\hbar^2} \int d\Omega \delta[2kq_1 \cos(\Theta_1) + q_1^2 - \Omega_1] \delta[2kq_2 \cos(\Theta_2) + q_2^2 - \Omega_2], \quad (\text{П.2.2})$$

где $\Omega_1 = 2m\omega_1/\hbar$, $\Omega_2 = 2m\omega_2/\hbar$. Разложим каждую из дельта-функций в ряд по полиномам Лежандра

$$\delta[2kq \cos(\Theta) + q^2 - \Omega] = \sum_n a_n(k, q, \Omega) P_n[\cos(\Theta)]. \quad (\text{П.2.3})$$

После подстановки этого разложения в выражение (П.2.1) получим

$$I = \frac{16\pi m^2}{\hbar^2} \sum_n \frac{1}{(2n+1)} a_n(k, q_1, \Omega_1) a_n(k, q_2, \Omega_2) P_n[\cos(\Theta_{12})]. \quad (\text{П.2.4})$$

Вычислим теперь коэффициенты разложения в (П.2.3). По определению

$$a_n(k, q, \Omega) = \frac{2n+1}{2} \int_{-1}^1 dx P_n(x) \delta[2kq \cos(\Theta) + q^2 - \Omega]. \quad (\text{П.2.5})$$

Этот интеграл будет отличен от нуля, если

$$-k + \sqrt{k^2 + \Omega} = q_1 < q < q_2 = k + \sqrt{k^2 + \Omega}.$$

В этом случае интеграл (П.2.5) будет равен

$$a_n(k, q, \Omega) = \frac{2n+1}{4kq} P_n\left(\frac{\Omega - q^2}{2kq}\right) \Theta(q - q_1) \Theta(q_2 - q) \quad (\text{П.2.6})$$

или

$$a_n(k, q, \Omega) = \frac{2n+1}{4kq} P_n\left(\frac{\Omega - q^2}{2kq}\right) \Theta\left(k - \left|\frac{q}{2} - \frac{\Omega}{2q}\right|\right). \quad (\text{П.2.7})$$

Искомый интеграл теперь равен

$$I = \frac{\pi m^2}{\hbar^2 k^2 q_1 q_2} \sum_n (2n+1) P_n\left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2kq_1}\right) P_n\left(\frac{\Omega_2 - q_2^2}{2kq_2}\right) \times \\ \times P_n[\cos(\Theta_{12})] \Theta\left(k - \left|\frac{q_1}{2} - \frac{\Omega_1}{2q_1}\right|\right) \Theta\left(k - \left|\frac{q_2}{2} - \frac{\Omega_2}{2q_2}\right|\right). \quad (\text{П.2.8})$$

Сумму по n можно вычислить, если воспользоваться соответствующей формулой из [9].

В результате получаем

$$I = \frac{2m^2}{\hbar^2 k^2 q_1 q_2} \Theta\left(k - \left|\frac{q_1}{2} - \frac{\Omega_1}{2q_1}\right|\right) \Theta\left(k - \left|\frac{q_2}{2} - \frac{\Omega_2}{2q_2}\right|\right) \times \\ \times \left\{ 1 + 2 \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2kq_1}\right) \left(\frac{\Omega_2 - q_2^2}{2kq_2}\right) \cos(\Theta_{12}) - \right. \\ \left. - \left(\frac{\Omega_1 - q_1^2}{2kq_1}\right)^2 - \left(\frac{\Omega_2 - q_2^2}{2kq_1}\right)^2 - \cos^2(\Theta_{12}) \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{П.2.9})$$

Список литературы

- [1] *Швец В.Т.* // ТМФ. 1991. Т. 86. №1. С. 111-119.
- [2] *Швец В.Т.* // УФЖ. 1991. Т. 36. С. 581.
- [3] *Швец В.Т.* // ФТТ. 1991. Т. 33. С. 261.
- [4] *Швец В.Т.* // ФНТ. 1994. Т. 20. С. 929.
- [5] *Shvets V.T.* // Materials Sci. and Engineering. 1994. V. B26. P. 141.
- [6] Достижения электронной теории металлов. Т.1 / Под ред. Цише П., Леманна Г. М.: Мир, 1984.
- [7] *Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В.* Метод функций Грина в статистической механике. М.: Физматгиз, 1961.
- [8] *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975.
- [9] *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981.

Одесская государственная
академия холода

Поступила в редакцию
8.VIII.1994 г.,
после переработки
30.VIII.1995 г.

V. T. Shvets

MULTIPARTICLE DYNAMICAL STRUCTURE
FACTORS FOR NONINTERECTING ELECTRON GAS

Multiparticle dynamical structure factors of electron subsystem of the metals are important for calculating the coefficients of electro- and thermal conductivity in the multiparticle theory proposed by the author. The explicit expression for the three-particle dynamical structure factor of noninteracting electron gas is obtained. The symmetry properties of the multiparticle dynamical structure factors of interacting electron gas are also investigated.