计算杂质下的Green function修正，哈密顿量 $H=H_0+V$

Dyson 方程

$$G = G_0 + G_0 V G \quad ①，\quad 其中\ G_0 = \frac{1}{E-H_0}$$

杂质势

$$V(r) = \sum_{i=1}^{N} V_{imp}(r-R_i)$$

傅里叶变换，得

$$V_{kk'} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{V_0} \int V_{imp}(r-R_i)\, e^{-i(k-k')\cdot r}\, dr$$

$$= V_{imp,kk'} \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^{N} e^{-i(k-k')\cdot R_i}$$

V_0是系统体积

在k空间下的Dyson方程

$$G_{kk'} = G_{0k}\delta_{kk'} + G_{0k} V_{kk'} G_{0k'} + G_{0k} \sum_{k''} V_{kk''} G_{0k''} V_{k''k'} G_{0k'} + \cdots$$

对随机分布的杂质，格林函数需要对杂质做平均，即$\langle G_{kk'} \rangle$

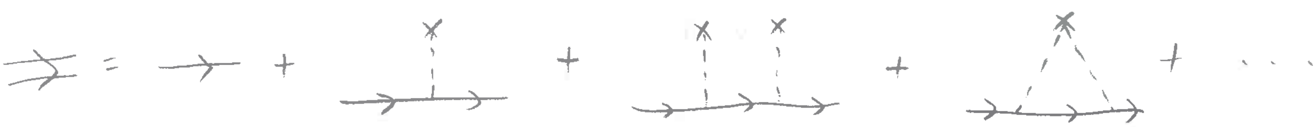
由于G_0不含杂质，因此对杂质平均后不变，所以实际上是对V做杂质平均，即

$$\langle G_{kk'} \rangle = \langle G_{0k}\delta_{kk'} \rangle + \langle G_{0k} V_{kk'} G_{0k'} \rangle + \langle G_{0k} \sum_{k''} V_{kk''} G_{0k''} V_{k''k'} G_{0k'} \rangle + \cdots$$

省略δ后，得到

$$G_{kk} = G_{0k} + G_{0k} n_{imp} V_{imp,kk} G_{0k} + G_{0k} n_{imp} V_{imp,kk} G_{0k} n_{imp} V_{imp,kk} G_{0k}$$
$$+ G_{0k} \frac{n_{imp}}{V} \sum_{k''} V^2_{imp,kk''} G_{0k''} G_{0k} + \cdots \quad ，其中\ n_{imp} = \frac{N}{V} \quad ②$$

相应费曼图



② 可写为

$$G_k = G_{0k} + G_{0k} \Sigma_k G_k \quad ③$$

$$\Rightarrow G_k = \frac{G_{0k}}{1-G_{0k}\Sigma_k} = \frac{1}{G_{0k}^{-1} - \Sigma_k} = \frac{1}{E-\varepsilon_k-\underbrace{\Sigma_k}_{自能}}$$

自能 → 实部是能量的修正

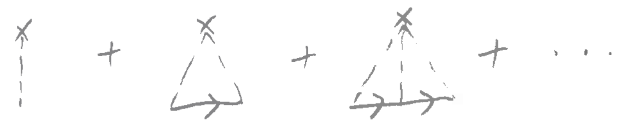
自能 → 虚部是电子的寿命

对比②和③，可得到自能Σ_k表达式

$$\Sigma_k = n_{imp} V_{imp,kk} + \frac{n_{imp}}{V} \sum_{k''} V^2_{imp,kk'} G_{0k''} + \cdots \qquad ④$$

$$= n_{imp} V_{imp,kk} + \frac{1}{V} \sum_{k''} V_{imp,kk'} G_{0k''} \Sigma_{k''k}$$

由④可画出Σ_k费曼图

$\Sigma_k =$ 

作业为求Σ_k表达式和费曼图，上面已求出