บทที่ III

การคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะโดยวิธีการรวมเส้นทาง

(The Evaluation of the Density of States by Path Integral Method)

ในบทนี้เราจะกล่าวถึงแบบจำลองเอดวาร์ดส ที่ใช้ศักย์แบบคูลอมบ์ที่ถูกกำบัง เรานำเอาแบบจำลองนี้ไปหาค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจาย หรือกรีนฟังก์ชัน (Green Function) ของระบบที่ไม่เป็นระเบียบ โดยใช้เทคนิคแห่งการรวมเส้นทาง เมื่อเราทราบค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจายของระบบที่ไม่เป็นระเบียบ ก็ทำให้เราอาจคำนวณหาความหนาแน่นของสถานะได้ วิธีหาเราทำได้ 2 วิธีด้วยกัน คือ วิธีไม่รบกวน และ วิธีรบกวน

III.1 แบบจำลองเอดวาร์ดส (Edwards'Model)

เอดวาร์ดสเป็นผู้เสนออิเลกตรอนเฉพาะที่ของระบบที่ไม่เป็นระเบียบ โดยใช้แบบจำลองง่าย ๆ ที่เขียนอยู่ในรูปของการรวมเส้นทาง แบบจำลองนี้กล่าวถึง อิเลกตรอนตัวหนึ่งเคลื่อนที่อยู่ภายในระบบของตัวกระเจิง (Scatterer) ที่มีความหนาแน่นสูง ศักย์อ่อน และอยู่กันอย่างไม่เป็นระเบียบ ถ้าให้ ρ เป็นความหนาแน่นของตัวกระเจิง และ $v(\underline{r})$ เป็นศักย์กระเจิง ดังนั้นแบบจำลองนี้อาจเขียนอยู่ในรูปของลิมิต ดังนี้คือ

$$\lim_{\rho v^2} \equiv \left(\rho \to \infty \ , \ v \to 0 \ , \ \rho v^2 \to \text{finite} \right) \qquad (3.1)$$

เมื่อความหนาแน่นของตัวกระเจิงมีค่ามาก แต่อันตรกริยาของอิเลกตรอนกระเจิงเป็นศักย์อ่อน

การที่เอดวาร์ดสเลือกลิมิตตามสมการ (3.1) เพราะเหตุว่าแต่ละตัวของอิเลกตรอนกระเจิงมีศักย์อ่อน จึงไม่อาจยึดอิเลกตรอนตัวหนึ่งไว้ได้

ดังนั้นจึงมีความเหมาะสมกับกรณีของกึ่งตัวนำที่มีอสุทธิปริมาณสูง

เราพิจารณาถึงอิเลกตรอนตัวหนึ่งของกรีนฟังก์ชัน หรือตัวแพรกระจาย $G(\underline{r}_2, \underline{r}_1, t, [\underline{R}_j])$ ของอิเลกตรอนตัวหนึ่ง ในกลุ่มของตัวกระเจิง n ตัว ที่ตำแหน่งประจำ $\underline{R}_j$ ปรากฏว่าอิเลกตรอนตัวหนึ่งของกรีนฟังก์ชันขึ้นอยู่กับตำแหน่งของตัวกระเจิงที่ต่าง ๆ กัน ฮามิลโทเนียน (Hamiltonian) หรือพลังงานทั้งหมดของอิเลกตรอนตัวหนึ่งเคลื่อนที่ในกลุ่มของตัวกระเจิง n ตัว เขียนในรูปสมการดังนี้

$$H(\{\underline{R}_j\}) = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + \sum_j^n V(\underline{r} - \underline{R}_j) \qquad (3.2)$$

เมื่อ m^* คือ มวลยังผลของอิเลกตรอน

$V(\underline{r}-\underline{R}_j)$ คือ ศักย์ของตัวกระเจิงเดียวที่ตำแหน่ง $\underline{R}_j$

สมการโชร์ดินเยอร์ที่ขึ้นอยู่กับเวลา มีรูปดังนี้

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\Psi(\underline{r}, t) = 0 \qquad (3.3)$$

เมื่อ $\Psi(\underline{r},t)$ คือ คลื่นฟังก์ชัน

สำหรับในหนึ่งรูปลักษณ์ของตัวกระเจิงที่กำหนดให้ ที่อิเลกตรอนตัวหนึ่งของกรีนฟังก์ชัน $G(\underline{r}_1,\underline{r}_2;t,[\underline{R}_j])$ ซึ่งสอดคล้องกับสมการโชร์ดินเยอร์ คือ

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H([\underline{R}_j])\right) G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t,[\underline{R}_j]) = \delta(\underline{r}_2-\underline{r}_1)\,\delta(t)\,i\hbar \qquad (3.4)$$

เมื่อ $\delta(\underline{r}_1-\underline{r}_2)$ และ $\delta(t)$ คือ เดลตาฟังก์ชัน

แต่สำหรับกรีนฟังก์ชันที่ขึ้นอยู่กับเวลา อาจเขียนอยู่ในรูปของการรวมเส้นทาง ดังสมการ

$$G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t,[\underline{R}_j]) = \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar} S[\underline{r}(\tau)]\} \qquad (3.5)$$

เมื่อ $\mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]$ คือ ฟายน์แมนเมเชอร์ (Feynman Measure) หรือการรวมเส้นทางที่หาได้จากเงื่อนไขขอบเขตที่ว่า $\underline{r}(0) = \underline{r}_1$ และ $\underline{r}(t) = \underline{r}_2$ และแอคชัน

$$S[\underline{r}(\tau)] = \int_0^t d\tau\{\frac{m^*}{2}(\dot{\underline{r}}(\tau))^2 - \sum_j^n V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}_j]\} \qquad (3.6)$$

แทนสมการ (3.6) ลงในสมการ (3.5) จะได้กรีนฟังก์ชัน คือ

$$G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t,[\underline{R}_j]) = \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,(\frac{m^*}{2}[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 - \sum_j^n V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}_j])\} \qquad (3.7)$$

เราอาจเขียนสมการ (3.7) เสียใหม่ได้ว่า

$$G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t,[\underline{R}_j]) = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau(\frac{m^*}{2}[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 - \sum_j^n V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}_j])\} \qquad (3.8)$$

แต่การแจกแจงความน่าจะเป็น(Probability Distribution)

$P(\underline{R}_1, \ldots\ldots\ldots \underline{R}_N)$ ของศักย์กระเจิงของระบบที่ไม่เป็นระเบียบ คือ

$$P(\underline{R}_1, \ldots\ldots\ldots \underline{R}_n) = \prod_{j=1}^{n} \frac{d\,\underline{R}_j}{\int d\,\underline{R}_j} = \prod_{j=1}^{n} \frac{d\underline{R}}{\Omega} \qquad (3.9)$$

เมื่อ n คือ จำนวนของศูนย์กลางการกระเจิง

Ω คือ ปริมาตรของระบบ

เอการ์ดสและกัลเยว์ ได้พิสูจน์ว่า ค่าเฉลี่ยทุก ๆ รูปลักษณ์ทั้งหมดในสมการ (3.8) อาจเขียนในรูปดังนี้คือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \int P[\underline{R}]d([\underline{R}])G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t,[\underline{R}_j]) \quad (3.10)$$

เมื่อสัญลักษณ์ $\langle \ldots\ldots \rangle$ แทนค่าเฉลี่ยทุก ๆ รูปลักษณ์ของไอออนทั้งหมด

แทนสมการ (3.8) และ (3.9) ลงในสมการ (3.10)

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \iint\cdots\cdots\int_{\underline{r}(0)=\underline{r}_1}^{\underline{r}(t)=\underline{r}_2} \mathcal{D}\,[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int d\tau[\underline{\dot{r}}(\tau)]^2 - \sum_j^n V\,[\underline{r}(\tau)-\underline{R}_j]\} \prod_{j=1}^{n} (\frac{d\underline{R}_j}{\Omega})$$

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\underline{\dot{r}}(\tau)]^2\} \iint\cdots\int \exp\{-\frac{i}{\hbar}\sum_j V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}_j]\} \prod_{j=1}^{n} (\frac{d\underline{R}_j}{\Omega})\ \mathcal{D}\,[\underline{r}(\tau)]$$

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \left[\exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2\}\right]\left[\int \exp\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau \frac{dR}{\Omega}\frac{n}{n}\}^n\right] \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]$$

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2\} \left[1 + \frac{\rho}{n}\int[\exp\{-\frac{i}{\hbar}\int V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau\}d\underline{R} - 1\right]^n \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]$$

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2\}\left[1 + \frac{\rho\int \exp\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau\}d\underline{R} - n\}}{n}\right]^n \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]$$

เมื่อ $\rho = \frac{n}{\Omega}$ คือ ความหนาแน่นของการกระเจิง

แต่ $(1+\frac{Q}{N})^N = \exp(Q)$

$$\left[1 + \frac{\rho[\int \exp(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau)d\underline{R}]-n}{n}\right]^n$$

$$= \exp\{[\rho\int \exp(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R}d\tau)d\underline{R}] - n\}$$

ดังนั้นค่าของเฉลี่ยของกรีนฟังก์ชันจะอยู่ในรูปดังนี้คือ.

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 + \rho\int \exp[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau]d\underline{R} - n\}\mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]$$

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 + \rho\int d\underline{R}[\exp(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t V(\underline{r}(\tau)-\underline{R})d\tau)-1]\} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)] \quad (3.11)$$

ใช้สมการ (3.1) สมการ (3.11) เราอาจกระจายเอกซ์โปเนนต์เชียลของ $V(\underline{r}(\tau) - \underline{R})$ โดยใช้เทอมเชิงเส้นและเทอมที่สอง สมการ (3.11) จะกลายเป็น

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t d\tau[\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 - \frac{i\rho}{\hbar}\int d\underline{R}\int_0^t d\tau V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}] - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int d\underline{R}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}]V[\underline{r}(\sigma)-\underline{R}]\} \quad (3.12)$$

เราอาจเอาเทอมอินทิเกรชันที่สองออก และอินทิกรัลของศักย์เฉลี่ยคือ

$$\langle V\rangle = \rho\int d\underline{R}V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}]$$

$$= \rho\int d\underline{R}V(\underline{R}) \quad (3.12a)$$

มีค่าอนันต์ตามลิมิตในสมการ (3.1) อย่างไรก็ตามเรามีเสรีที่จะเลือกพลังงานต้นกำเหนิดของเรา เป็นค่าเฉลี่ยของพลังงาน โดยกำจัดค่าอนันต์ในสมการ (3.12) ดังนั้นค่าเฉลี่ยของอิเลกตรอนตัวหนึ่งในกรีนฟังก์ชันอาจเขียนในรูปของการรวมเส้นทางได้ดังนี้คือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t [\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 d\tau - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int d\underline{R}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma V[\underline{r}(\sigma)-\underline{R}]V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}]\}$$

$$= \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\int_0^t [\dot{\underline{r}}(\tau)]^2 d\tau - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t W[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]\}d\tau d\sigma \qquad (3.13)$$

เมื่อ $W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]$ คือฟังก์ชันสมพันธ์(Correlation Function) ของศักย์กระเจิงและมีค่าเท่ากับ $\int d\underline{R}V[\underline{r}(\tau)-\underline{R}]V[\underline{r}(\sigma)-\underline{R}]$ สมการ (3.13) อาจเขียนในรูปของแอกชันคือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp(\frac{i}{\hbar}S) \qquad (3.14)$$

เมื่อแอกชัน

$$S = \int_0^t d\tau \frac{m^*}{2}\dot{\underline{r}}^2(\tau) - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\, W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)] \qquad (3.15)$$

โดยใช้การแปลงของฟูเรียร์(Fourier Transformation) เทียบกับ $\underline{K}$ จะได้ฟังก์ชันสัมพันธ์ของศักย์ $W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]$ คือ

$$W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)] = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\underline{K}\left|V(\underline{K})\right|^2\exp\{i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\} \qquad (3.16)$$

ศักย์แบบคูลอมบ์ที่ถูกกำบัง $V(\underline{K})$ คือการแปลงของฟูเรียร์ $V(\underline{r})$ นั่นคือ

$$V(\underline{K}) = \int V(\underline{r})\exp(i\underline{K}.\underline{r})d^3\underline{r} \qquad (3.17)$$

แทนสมการ(1.10) ลงในสมการ(3.17) จะได้

$$V(\underline{K}) = -\int \frac{e^2}{\varepsilon_d}\frac{\exp(-\Lambda\underline{r})}{\underline{r}}\exp(i\underline{K}.\underline{r})d^3\underline{r}$$

$$= -\int \frac{e^2}{\varepsilon_d}\frac{\exp(-\Lambda\underline{r}+i\underline{K}.\underline{r})}{\underline{r}}\,2\pi r^2\sin\theta d\theta d\underline{r}$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_d}2\pi\int_0^{\infty}\exp(-\Lambda\underline{r})\underline{r}d\underline{r}\int_0^{\pi}\frac{\exp(i\underline{K}\underline{r}\cos\theta)}{\underline{K}r}dKr\cos\theta$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_d}2\pi\int_0^{\infty}\exp(-\Lambda\underline{r})\underline{r}d\underline{r}\left[\frac{2\sin\underline{K}\underline{r}}{\underline{K}r}\right]$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_d}\frac{4\pi}{K}\int_0^{\infty}\exp(-\Lambda\underline{r})\sin\underline{K}\underline{r}d\underline{r}$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_d}\frac{4\pi}{K}\left[\frac{K}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right]$$

$$= \frac{e^2}{\varepsilon_d}\left[\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right] \qquad (3.18)$$

เมื่อ Λ คือส่วนกลับแห่งความยาวกำบังที่สัมพันธ์กับความหนาแน่นของอสุทธิ ดังสมการ (1.11) ที่กล่าวแล้วในบทที่ 1

แทนสมการ (3.18) และสมการ (3.16) ลงในสมการ (3.15) ผลที่ได้คือ

$$S = \int_0^t d\tau\frac{m}{2}\dot{\underline{r}}^2(\tau) - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2$$

$$\langle\exp\{i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\}\rangle_{S_o} \qquad (3.19)$$

ในการวิจัยนี้ เราใช้ศักย์คูลอมบ์แบบกำบังเพียงอย่างเดียว ที่เหมาะกับระบบกายภาพจริงโดยเฉพาะอย่างยิ่งในกึ่งตัวนำที่มีปริมาณอสุทธิสูง

ปริมาณกายภาพที่น่าสนใจก็คือ ความหนาแน่นของสถานะ N(E) ซึ่งชี้ว่ามีจำนวนสถานะเท่าใดของอิเลคตรอนที่มีพลังงาน E ค่าเฉลี่ยความหนาแน่นของสถานะ หาจากการแปลงของฟูเรียร์ค่าเฉลี่ยกรีนฟังก์ชันในอวกาศพลังงานของสมการ (3.5) และคิดเทรซ(Trace) ในกรีนฟังก์ชันเราจะได้ว่า

$$N(E) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ \mathrm{Tr}G(\underline{r}_1,\underline{r}_2;t)\exp\left(\frac{iE}{\hbar}t\right) \qquad (3.20)$$

เมื่อสัญญลักษณ์ Tr แทน เทรซ (Trace) แต่ค่าเฉลี่ยของระบบไม่แปรผันสำหรับการเคลื่อนที่ย้าย (Translational Invariance) ซึ่งมีคุณสมบัติว่า

$$G(\underline{r}_1,\underline{r}_2;t) \equiv G(\underline{r}_1-\underline{r}_2;t) \qquad (3.21)$$

โดยคุณสมบัติอันนี้เอง ทำให้สมการ (3.20) ใน

$$\mathrm{Tr}G(\underline{r}_1,\underline{r}_2;t) = \iint d\underline{r}_1\ G(\underline{r}_1-\underline{r}_2;t)\ \delta(\underline{r}_1-\underline{r}_2)d\underline{r}_2$$

จากนิยามของไดแรกเดลตาฟังก์ชัน (Dirac Delta Function) $\delta(r_2-r_1)$ จะมีค่าเป็นศูนย์ยกเว้นจุดที่ $\underline{r}_1$ เท่ากับ $\underline{r}_2$ ดังนั้น

$$\mathrm{Tr}\,G(\underline{r}_1,\underline{r}_2;t) = \Omega\,G(0,0;t) \qquad (3.22)$$

เมื่อ Ω คือ ปริมาตรของระบบ

แทนสมการ (3.22) ลงในสมการ (3.20) จะได้ว่า

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ G\ (0,0\ ;t)\ \exp\left(\frac{iE}{\hbar}t\right) \qquad (3.23)$$

ที่เกี่ยวข้องกับส่วนทะแยงของ G เพียงอย่างเดียว

III.2 <u>โดยวิธีไม่รบกวน</u>[21] (Non-Perturbative Method)

จากสมการ (3.13) ค่าเฉลี่ยกรีนฟังก์ชันของระบบที่ไม่เป็นระเบียบ อาจเขียนในรูปดังนี้คือ.-

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t)\rangle = \int_{\underline{r}(0)}^{\underline{r}(t)} \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\Big\{\frac{im^*}{2\hbar^2}\int_0^t d\tau\,\dot{\underline{r}}^2(\tau) - \frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\, W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\Big\} \quad (3.24)$$

เมื่อฟังก์ชันสัมพันธ์ของศักย์คูลอมบ์แบบกำบังใน 3 มิติ คือ

$$W[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)] = \frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\left(\frac{4\pi}{K^2+\Lambda^2}\right)^2 \exp\{i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\} \quad (3.25)$$

---

[21] ดูหนังสืออ้างอิง (19) หน้า 1188

ขอให้พิจารณาเส้นทางในเอกซ์โปเนนต์ของสมการ (3.25) โดยการกระจายเส้นทาง $\underline{r}(\sigma)$ รอบ $\underline{r}(\tau)$ ใช้การกระจายแบบเทย์เลอร์ (Taylor's Expansion) จะได้

$$\begin{aligned}
\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma) &= \underline{r}(\tau) - \underline{r}[\tau - (\tau - \sigma)] \\
&= \underline{r}(\tau) - [\underline{r}(\tau) - \dot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma) \\
&\quad + \frac{1}{2}\ddot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)^2 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots] \\
&= \dot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma) - \frac{1}{2}\ddot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)^2 + \ldots\ldots \qquad (3.26)
\end{aligned}$$

แทนสมการ(3.26) ลงในสมการ (3.25) ฟังก์ชันสัมพันธ์จะเป็น

$$\begin{aligned}
W[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)] &= \frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\int \frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2 \exp\{i\underline{K}.[\dot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma) \\
&\quad - \frac{1}{2}\ddot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)^2 + \ldots\ldots\ldots\} \qquad (3.27)
\end{aligned}$$

แทนสมการ (3.27) ลงในสมการ (3.24) เราจะได้นิพจน์ทั่วไป (General Expression) ของกรีนฟังก์ชันคือ

$$\begin{aligned}
\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t)\rangle &= \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\left[\frac{im^*}{2\hbar}\int_0^t d\tau\,\dot{\underline{r}}^2(\tau)\right\}\exp\left\{-\frac{\mathcal{L}}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau\, d\sigma\right. \\
&\quad \left.\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\left(\frac{4\pi}{K^2+\Lambda^2}\right)^2\exp[i\underline{K}(\dot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)-\frac{1}{2}\ddot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)^2+\ldots\ldots)]\right]
\end{aligned}$$

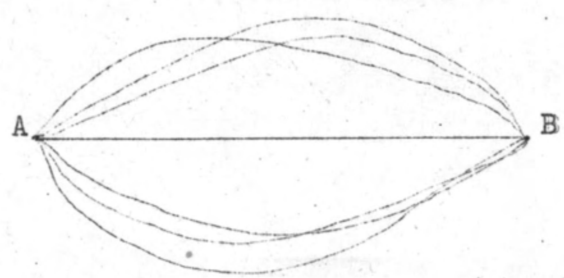
$$= G_o[\underline{r}(\tau)]\exp\left[-\frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\,\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2 \exp\left[i\underline{K}.\left(\dot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)-\frac{1}{2}\ddot{\underline{r}}(\tau)(\tau-\sigma)^2+\ldots\right)\right]\right] \quad (3.28)$$

เมื่อกรีนฟังก์ชันหรือตัวแพร่กระจายของอนุภาคอิสระ

$$G_o[\underline{r}(\tau)] = \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\left\{\frac{im^*}{2\hbar}\int_0^t d\tau\,\dot{\underline{r}}^2(\tau)\right\}$$

$$= \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{im^*}{2\hbar}\,\frac{(\underline{r}_2-\underline{r}_1)^2}{t}\right)$$

ตามที่พิสูจน์ไว้ในบทที่ 2 ถ้าเวลา t เข้าใกล้ศูนย์ หมายถึงว่า $\tau, \sigma \ll t$ และความหมายทางกายภาพของเส้นทาง ก็คือมีความเร็วคงตัวจากจุดเริ่มต้น A ไปยังจุดปลายทาง B ดังแสดงโดยรูปข้างล่างดังนี้



รูปที่ 3.1 การเคลื่อนที่ของอนุภาคระหว่างจุด A กับ B ที่มีความเร็วคงตัว สมมุติว่าอนุภาคไม่มีความเร่ง กล่าวคือ $\ddot{\underline{r}}(\tau) = 0$

ทำให้เราได้ค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจายเป็น

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = G_o[\underline{r}(\tau)]\exp\left[-\frac{\rho}{2\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2 \frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\exp[i\underline{K}.\dot{\underline{r}}(0)(\tau-\sigma)]\right]$$

$$= G_o[\underline{r}(\tau)]\exp\left[-\frac{\rho}{2\hbar^2}t\int_0^t dx\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2 \frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\exp[i\underline{K}.\dot{\underline{r}}(0)x]\right] \quad (3.29)$$

เมื่อ $x = \tau - \sigma$

ใช้เอกลักษณ์

$$\frac{1}{(\underline{K}^2+\Lambda^2)^2} = \int_0^\infty dy\, y\exp[-(K^2+\Lambda^2)y]$$

แทนลงในสมการ (3.29) จะได้

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = G_o[\underline{r}(\tau)]\exp\left[-\frac{\rho}{2\hbar^2}\frac{(4\pi)^2}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}t\int_0^t dx\int_0^\infty\int_{-\infty}^{\infty} d\underline{K}dy\, y\exp[-K^2y + i\underline{K}\dot{\underline{r}}(0)x - \Lambda^2 y]\right]$$

ทำการอินทิเกรตเทียบกับ $\underline{K}$ โดยใช้สูตร

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp[-ax^2+bx] = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}\right)$$

ผลที่ได้ก็คือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = G_o[\underline{r}(\tau)]\exp\left[-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}\sqrt{\pi}\,t\int_0^t dx\int_0^\infty dy\,y^{-1/2}\frac{\exp[-\Lambda^2 y-\dot{\underline{r}}^2(0)x^2]}{4y}\right]$$

$$= \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im^*}{2\hbar}(\underline{r}_2-\underline{r}_1)^2-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}\sqrt{\pi}\int_0^t dx\int_0^\infty dy\,y^{-1/2}\exp[-\Lambda^2 y-\frac{\dot{\underline{r}}^2(0)x^2}{4y}]\right] \quad (3.30)$$

อินทิกรัลในเอกซ์โปเนนต์สมการ (3.30) หาได้เมื่อใช้สูตร

$$\int_0^\infty \exp(-\frac{a}{r^2}-br^2)\,dr = \sqrt{\frac{\pi}{4b}}\exp(-2\sqrt{ab})$$

โดยการเปลี่ยนตัวแปร $y = r^2$ ผลที่ได้ก็คือ

$$\int_0^\infty dy\,y^{-1/2}\exp\left(-\frac{\dot{\underline{r}}^2(0)x^2}{4y}-\Lambda^2 y\right) = 2\int_0^\infty dr\exp[-\frac{\dot{\underline{r}}^2(0)x^2}{4r^2}-\Lambda^2 r^2]$$

$$= 2\sqrt{\frac{\pi}{4\Lambda^2}}\exp\left(-2\sqrt{\frac{\Lambda^2 x^2\dot{\underline{r}}^2(0)}{4}}\right)$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{\Lambda}\exp[-|\Lambda x\dot{\underline{r}}(0)|]$$

จะได้ค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจายเป็น

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im^*}{2\hbar}(\underline{r}_2-r_1)^2-\frac{\rho e^4\pi}{\hbar^2\varepsilon_d^2\Lambda}t\int_0^t dx\exp[-\Lambda x\dot{\underline{r}}(0)]\right]$$

เนื่องจากตัวแพร่กระจายอยู่ในเทอมของความเร็วสม่ำเสมอ ดังนั้นอาจแทนค่า

$\dot{\underline{r}}(0) = \frac{\underline{r}_2-\underline{r}_1}{t}$ จะได้ว่า

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{im^*}{2\hbar}(\underline{r}_2-\underline{r}_1)^2 - \frac{\rho e^4 \pi t}{\Lambda \hbar^2 \varepsilon_d^2}\int_0^t dx \exp\left[-\Lambda x\frac{(\underline{r}_2-\underline{r}_1)}{t}\right]\right]$$

แทนสมการข้างบนลงในสมการ (3.20) ให้ $\underline{r}_2 = \underline{r}_1$ ดังนั้นความหนาแน่นของสถานะเป็น

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\left(\frac{m^*}{2\pi\hbar}\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty} dt(it)^{-3/2}\exp\left[-\frac{\rho e^4 \pi t^2}{\Lambda \hbar^2 \varepsilon_d^2} + \frac{iE}{\hbar}t\right] \tag{3.31}$$

ขอให้เราพิจารณาอะซิมป์โทติค ความหนาแน่นของสถานะ N(E) อินทิกรัลทางขวามือของสมการ (3.31) อาจเขียนในรูปปิด (Closed Form) โดยใช้สูตร[22] **ในการคำนวณดังนี้คือ.-**

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt(it)^n \exp(-P^2t^2+iqt) = 2^{-\frac{n}{2}}\sqrt{\pi}\, P^{-n-1}\exp\left(-\frac{q^2}{8P^2}\right) D_n\left(-\frac{q}{\sqrt{2}P}\right) \tag{3.32}$$

---

[22] ดูหนังสืออ้างอิง (17) หน้า 338

เมื่อ $\mathrm{Re}P > 0$, $\mathrm{Re}\, n > -1$, $\arg it = \frac{\pi}{2}\mathrm{sign}t$

, $D_n\left(-\frac{q}{\sqrt{2P}}\right)$ คือ พาราโบลิคซิลินเดอร์ฟังก์ชัน

ถ้าเราใช้ $q = \frac{E}{\hbar}$, $P^2 = \frac{\rho \pi e^4}{\hbar^2 \Lambda \varepsilon_d^2}$ และอินทิเกรตแบ่งส่วน (Integrate By Part) ตามเงื่อนไข $\mathrm{Re}\, n > -1$ ในสมการ (3.32) จะได้ว่า

$$N(E) = \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}}\left[4P^2\int_{-\infty}^{\infty}(it)^{1/2}\exp(-P^2t^2+iqt)\,dt + 2q\int_{-\infty}^{\infty}(it)^{-1/2}\exp(-P^2t^2+iqt)\,dt\right]$$

$$= \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}}\left[2^{7/4}\sqrt{\pi P}\exp\left(-\frac{q^2}{8P^2}\right)\right]\left[D_{1/2}\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right) + \frac{q}{P\sqrt{2}}D_{-1/2}\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)\right] \qquad (3.33)$$

พฤติกรรมอะซิมป์โทติกของพาราโบลิคซิลินเดอร์ฟังก์ชัน คือ

$$D_n\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right) = \exp\left[-\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^2\Big/4\right]\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^n\left[1-\frac{n(n-1)}{2\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^2}+\cdots\cdots\right]$$

$$-\frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-n)}\exp(n\pi i)\exp\left[\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^2\Big/4\right]\left[-\frac{q}{P\sqrt{2}}\Big/4\right]^{-n-1}\left[1+\frac{(n+1)(n+2)}{2\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^2}+\cdots\right] \qquad (3.34)$$

เมื่อ $\frac{\pi}{4} < \arg\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right) < \frac{5}{4}\pi$, $\left|\frac{q}{P\sqrt{2}}\right| >> 1$, $\left|\frac{q}{P\sqrt{2}}\right| >> n$

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย

พิจารณาเวลา t เข้าใกล้ศูนย์ นั่นคือพลังงาน E เข้าใกล้ ∞ หรือ $q \to \infty$ ใช้อะซิมป์โทติคสมการ (3.34) ในสมการ (3.33) ความหนาแน่นของสถานะเป็น

$$N(E) = \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}}\left[2^{7/4}\sqrt{\pi P}\exp\left(-\frac{q^2}{8P^2}\right)\right]\left[-\sqrt{2}\exp\left(\frac{q^2}{8P^2}\right)\left(\frac{q^2}{8P^2}\right)^{-3/2} + \sqrt{2}\exp\left(\frac{q^2}{8P^2}\right)\left(\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^{1/2}\right] \qquad (3.35)$$

เนื่องจาก $q \to \infty$ จะได้ความหนาแน่นของสถานะเป็น

$$N(E) = \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}} 2^{7/4}\sqrt{\pi P}\sqrt{2}\left(\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^{1/2}$$

เมื่อแทน $q = \frac{E}{\hbar}$ และ $P = \sqrt{\frac{\rho\pi e^4}{\Lambda\hbar^2\varepsilon_d^2}}$ จะได้

$$N(E) = \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}} 2^{7/4}\sqrt{2\pi}\left(\frac{\rho\pi e^4}{\Lambda\hbar^2\varepsilon_d^2}\right)^{1/4}\left(\frac{E}{\frac{e^2}{\varepsilon_d}\sqrt{\frac{2\rho\pi}{\Lambda}}}\right)^{1/2}$$

$$= \frac{\Omega m^{*3/2}\sqrt{2\eta}}{2\pi^2\hbar^3}\left(\frac{E}{\eta}\right)^{1/2}$$

$$= \frac{1}{2}c_1\left(\frac{E}{\eta}\right)^{1/2}$$

เมื่อ $c_1 = \frac{\Omega m^{*3/2}\sqrt{2\eta}}{\pi^2\hbar^3}$

$$\eta = \frac{e^2}{\varepsilon_d}\sqrt{\frac{4\pi\rho}{\Lambda}}$$

จากหลักการกีดกันของเปาลี โดยคิดการหมุนของอิเลกตรอนซึ่งจะต้องคูณด้วย 2 จะได้

$$N(E) = c_1\left(\frac{E}{\eta}\right)^{1/2} \qquad (3.36)$$

พิจารณา E เข้าใกล้ $-\infty$ หรือ q เข้าใกล้ $-\infty$ อาศัยพฤติกรรมอะซิมป์โทติคจากสมการ (1.41) ตัดแต่เทอมอันดับที่สองในสมการ (3.33) ความหนาแน่นของสถานะจะเป็น

$$N(E) = \frac{\Omega m^{*3/2}}{(2\pi\hbar)^{5/2}}\left[2^{7/4}\sqrt{\pi}\,P\exp\left(-\frac{q^2}{8P^2}\right)\right]$$

$$\left[\frac{1}{2}\left(-\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^{-3/2}\exp\left(-\left(\frac{q}{P\sqrt{2}}\right)^2\frac{1}{4}\right)\right] \qquad (3.37)$$

แทน $q = E/\hbar$ และ $P = \sqrt{\pi\rho e^4/\Lambda\hbar^2\varepsilon_d^2}$ ในสมการข้างบนจะได้ว่า

$$N(E) = \frac{1}{2}\left(\frac{\Omega m^{*3/2}}{4\pi^2\hbar^3}\right)\left(\frac{4\rho\pi e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}\right)^{1/4}\left(-\frac{E}{\sqrt{\frac{4\pi\rho e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}}}\right)^{-3/2}$$

$$\exp\left(-\frac{E^2}{\frac{4\pi\rho e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}}\right)$$

$$= \frac{1}{2}c_2\left(\frac{|E|}{\eta}\right)^{-3/2}\exp(-E^2/\eta^2) \qquad (3.38)$$

เมื่อ $c_2 = \frac{\Omega m^{*3/2}}{4\pi^2\hbar^3}\eta^{1/2}$

$$\eta = \frac{e^2}{\varepsilon_d}\sqrt{\frac{4\pi\rho}{\Lambda}}$$

โดยใช้หลักการกีดกันของเปาลี ในสมการ(3.38) จะได้

$$N(E) = c_2\left(\frac{|E|}{\eta}\right)^{-3/2} \exp\left(-\frac{E^2}{\eta^2}\right) \qquad (3.39)$$

III.3 วิธีรบกวน (Perturbative Method)

จากสมการ (3.14) ค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจาย อาจเขียนในรูปดังนี้คือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\rangle = G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\ \langle \exp\,[i(S-S_o)/\hbar]\rangle_{S_o} \qquad (3.40)$$

เมื่อตัวแพร่กระจาย คือ

$$G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t) = \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{\frac{i}{\hbar}S_o\} \qquad (3.41)$$

และแอกชัน

$$S_o = \int_0^t d\tau\,\frac{m^*}{2}\dot{\underline{r}}^2(\tau) \qquad (3.42)$$

คำจำกัดความของค่าเฉลี่ยฟังก์ชันใด ๆ O ดังสมการ

$$\langle O\rangle_{S_o} \equiv \frac{\int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp[\frac{i}{\hbar}S_o]\,O}{\int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp[\frac{i}{\hbar}S_o]} \qquad (3.43)$$

โดยใช้การกระจายคิวมูแลนท์[23] (Cumulant Expansion) เราอาจกระจายค่าเฉลี่ยของสมการ (3.40) ได้ดังนี้คือ

$$\langle G(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t)\rangle = G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle S-S_o\rangle_{S_o} + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\frac{1}{2}\left[\langle(S-S_o)^2\rangle_{S_o} - \langle S-S_o\rangle^2_{S_o}+\ldots\right]\right] \quad (3.44)$$

เมื่อเราคิดเพียงคิวมูแลนท์ที่หนึ่ง จะได้ว่า

$$G_1(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t) = G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t)\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\langle S-S_o\rangle_{S_o}\right\} \quad (3.45)$$

ความแตกต่างระหว่าง S กับ S_o ถือว่าเป็นการรบกวน จะมีปริมาณตัวที่ไม่รู้ค่าสองตัวคือ G_o และ $\langle S-S_o\rangle_{S_o}$ ซึ่งจะต้องคำนวณหาต่อไป พิจารณาการหา $\langle S-S_o\rangle_{S_o}$ จะได้

$$\langle S-S_o\rangle_{S_o} = \langle S\rangle_{S_o} - \langle S_o\rangle_{S_o} \quad (3.46)$$

โดยการคิดค่าเฉลี่ยในสมการ (3.19) กับสมการ (3.42) แทนลงในสมการ (3.46) เราจะได้ว่า

$$\langle S-S_o\rangle_{S_o} = \frac{i\rho}{2\hbar}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma \frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2 \langle\exp\{i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\}\rangle_{S_o} \quad (3.47)$$

---

23 R. Kubo, "General Cumulant Expansion Method" Journal of the Physical Society of Japan, 17,(1962) 1100.

ให้เรากลับมาพิจารณาปริมาณ $\langle \exp i\underline{K}\cdot[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]\rangle_{S_o}$ ซึ่งอาจกระจายได้โดยใช้อนุกรมคิวมูแลนท์ที่กระจายคิดเพียงสองคิวมูแลนท์แรกที่ไม่เป็นศูนย์เท่านั้นจะได้

$$\begin{aligned}\langle \exp\{i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\}\rangle_{S_o} &= \exp\{\langle i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\rangle_{S_o} \\ &\quad + \frac{1}{2!}[\langle (i\underline{K}[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)])^2\rangle_{S_o} \\ &\quad - \langle i\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\rangle^2_{S_o} + \ldots\ldots\ldots]\} \\ &= \exp\{i\underline{K}.\langle \underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle_{S_o} - \frac{1}{2}\underline{K}^2[\frac{1}{3}\langle[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]^2\rangle_{S_o} \\ &\quad - \langle \underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)\rangle^2_{S_o}]\} \\ &= \exp\{\underline{C}_1 + \underline{C}_2\}\end{aligned} \tag{3.48}$$

เมื่อ

$$\underline{C}_1 = i\underline{K}\,.\,\langle[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]\rangle_{S_o} \tag{3.48a}$$

$$\begin{aligned}\underline{C}_2 &= -\frac{1}{2}K^2\{\frac{1}{3}\langle[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]^2\rangle_{S_o} \\ &\quad - \langle \underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle^2_{S_o}\}\end{aligned} \tag{3.48b}$$

การคำนวณนี้ เราได้ใช้ค่าเฉลี่ยของตัวกลางสมลักษณ์ (Isotropic Medium) คือ

$$\{\underline{K}.[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\}^2 \simeq \frac{1}{3}K^2[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]^2$$

แทนสมการ (3.48) ลงในสมการ (3.19) จะได้

$$\langle S\rangle_{S_o} = \frac{i\rho}{2\hbar}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\left(\frac{4\pi}{\underline{K}^2+\Lambda^2}\right)^2\exp\{i\underline{K}\cdot\langle\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle_{S_o}$$

$$-\frac{1}{2}\underline{K}^2[\frac{1}{3}\langle[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]^2\rangle_{S_o}-\langle\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle^2_{S_o}\} \qquad (3.49)$$

จากสมการเอกลักษณ์

$$\frac{1}{\left(\underline{K}^2+\Lambda^2\right)^2} = \int_0^\infty dyy\exp[-(\underline{K}^2+\Lambda^2)y] \qquad (3.50)$$

แทนสมการ (3.50) ลงในสมการ (3.49) จะได้

$$\langle S\rangle_{S_o} = \frac{i\rho}{2\hbar}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}(4\pi)^2\int_0^\infty dyy\exp\{-(\underline{K}^2+\Lambda^2)y$$

$$+ i\underline{K}\cdot\langle\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle_{S_o} - \frac{1}{2}\underline{K}^2\cdot[\frac{1}{3}\langle[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]\rangle_{S_o}$$

$$-\langle\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle^2_{S_o}]\}$$

$$= \frac{i\rho}{2\hbar}\int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma\int\int\frac{d\underline{K}}{(2\pi)^3}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}(4\pi)^2 dyy\exp\{-\Lambda^2y^2$$

$$+\underline{K}^2A + i\underline{K}B^2\} \qquad (3.50a)$$

เมื่อ $A = A(t,\tau-\sigma,y)$

$$= y + \frac{1}{2}\{ \frac{1}{3} \langle[\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]^2\rangle_{S_o} - \langle\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)\rangle^2_{S_o} \quad (3.50b)$$

$$B = \underline{B}\,(\underline{r}_2-\underline{r}_1,t,\tau,\sigma;y)$$

$$= \langle\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)\rangle_{S_o} \quad (3.50c)$$

เราอินทิเกรทเฉพาะ K อินทิเกรทชั้นในสมการ (3.50a) ผลที่ได้ก็คือ

$$\langle S\rangle_{S_o} = \frac{i\rho}{\hbar}\frac{e^4}{\varepsilon_d^2}\sqrt{\pi}\int_0^t\int_0^t\int_0^\infty d\tau d\sigma dy\, yA(t,\tau-\sigma,y)^{-3/2}$$

$$\exp\{ -\Lambda^2 y + \frac{B^2(\underline{r}_2-\underline{r}_1;t,\tau,\sigma,y)}{4A(t,\tau-\sigma,y)} \} \quad (3.51)$$

โดยที่ได้ใช้สูตรในการอินทิเกรทคือ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\,(Ax^2+Bx)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{-A}}\,\exp\left(-\frac{B^2}{4A}\right)$$

จากสมการ (3.42b) ค่าเฉลี่ย S_o คือ

$$\langle S_o\rangle_{S_o} = \int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)]\exp\{ \frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\langle\dot{\underline{r}}^2(\tau)\rangle_{S_o} \} \quad (3.51a)$$

และสมการ(3.51) จะเห็นได้ว่ามีปริมาณตัวที่ไม่รู้ค่า คือค่าเฉลี่ย $\langle\underline{r}(\tau)\rangle_{S_o}$

กับ $\langle \underline{r}(\tau) . \underline{r}(\sigma) \rangle_{S_o}$ อาจหาได้จากลักษณะของฟังก์ชัน (Characteristic Functional) ของค่าเฉลี่ย $\langle \exp[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \underline{f}(\tau) . \underline{r}(\tau)] \rangle_{S_o}$ [24] ลักษณะของฟังก์ชันแอคชัน S_o นิยามดังสมการ

$$\langle \exp [\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \underline{f}(\tau) . \underline{r}(\tau)] \rangle_{S_o} = \frac{\int \mathcal{D}[\underline{r}(\tau)] \exp \left[\frac{i}{\hbar}[S_{o,cl} + \int_0^t d\tau \underline{f}(\tau) . \underline{r}(\tau)] \right]}{\int \mathcal{D} [\underline{r}(\tau)] \exp[\frac{i}{\hbar} S_{o,cl}]} \qquad (3.52)$$

เมื่อ $\underline{f}(\tau)$ คือ ฟังก์ชันของเวลา

แทน $S'_{o,cl}$ ด้วยสมการ

$$S'_{o,cl} = S_{o,cl} + \int_0^t d\tau \underline{f}(\tau) . \underline{r}(\tau)$$

และกระทำการอินทิเกรทเส้นทางในสมการ (3.52) แฟคเตอร์ร่วมทั้งเศษและส่วนตัดกันหมด ทำให้สมการ (3.52) ลดรูปเป็น

$$\langle \exp[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \underline{f}(\tau) . \underline{r}(\tau)] \rangle_{S_o} = \exp\{ \frac{i}{\hbar}[S'_{o,cl} - S_{o,cl}]\} \qquad (3.53)$$

เมื่อ $S'_{o,cl}$ และ $S_{o,cl}$ ตรงกับแอคชันเดิมของ S_o และ S_o ตามลำดับ แอคชันเดิม $S'_{o,cl}$ [25] หาได้อยู่ในรูปดังนี้คือ.-

---

[24] ดูหนังสืออ้างอิง (18) หน้า 182.

[25] ดูหนังสืออ้างอิง (13) ภาคผนวก โดยให้ $\omega = 0$

$$S'_{o,cl} = \frac{m^*}{2t}\left|\underline{r}_2-\underline{r}_1\right|^2 + \frac{\underline{r}_2}{t}\int_0^t d\tau\,\underline{f}(\tau)\tau + \frac{\underline{r}_1}{t}\int_0^t d\tau\,\underline{f}(\tau)(t-\tau)$$

$$+\frac{1}{mt}\int_0^t\int_0^t \underline{f}(\tau)\cdot\underline{f}(\sigma)[(t-\tau)\sigma H(\tau-\sigma)$$

$$+(t-\sigma)\tau H(\sigma-\tau)] \qquad (3.54)$$

เมื่อ H คือเฮฟวิไสด์สเตพฟังก์ชัน (Heaviside Step Function)

ถ้า $\underline{f}(\tau) = 0$ แทนลงในสมการ (3.54) จะได้แอคชันเดิม $S_{o,cl}$ เป็น

$$S_{o,cl} = \frac{1}{2}\frac{m^*}{t}\left|\underline{r}_2-\underline{r}_1\right|^2 \qquad (3.54a)$$

ดิฟเฟอเรนชิเอทสมการ(3.53) เทียบกับ $\underline{f}(\tau)$ และคำนวณหาทั้งสองข้างของสมการแล้วแทน $\underline{f}(\tau) = 0$ เราจะหาได้ว่า

$$\left\langle \underline{r}(\tau)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,\underline{f}(\tau)\cdot\underline{r}(\tau)\right]\right\rangle_{S_o} = \frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\tau)}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t d\tau\,\underline{f}(\tau)\cdot\underline{r}(\tau)\right]$$

$$\langle \underline{r}(\tau)\rangle_{S_o} = \left.\frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\tau)}\right|_{\underline{f}(\tau)\equiv 0} \qquad (3.55)$$

ดิฟเฟอเรนชิเอทสมการข้างบนเทียบกับ $\underline{f}(\sigma)$ อีกครั้ง เราจะได้

$$\langle \underline{r}(\tau)\cdot\underline{r}(\sigma)\rangle_{S_o} = \frac{\delta^2 \exp[S'_{o,cl} - S_{o,cl}]}{\delta \underline{f}(\tau)\,\delta \underline{f}(\sigma)}$$

$$= \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\delta^2 S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\tau)\delta \underline{f}(\sigma)} + \frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\tau)} \cdot \frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\sigma)} \right]_{\underline{f}\equiv 0} \quad (3.56)$$

การหา $\underline{B}$ ใช้สูตร (3.55) นั่นคือ

$$\underline{B} = \langle \underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma) \rangle_{S_o}$$

$$= \frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\tau)} \bigg|_{\underline{f}(\tau)\equiv 0} - \frac{\delta S'_{o,cl}}{\delta \underline{f}(\sigma)} \bigg|_{\underline{f}(\sigma)\equiv 0}$$

$$= \frac{\underline{r}_2}{t}\tau + \frac{\underline{r}_1}{t}(t-\tau) - \frac{\underline{r}_2}{t}\sigma - \frac{\underline{r}_1}{t}(t-\sigma)$$

$$= \frac{\underline{r}_2}{t}(\tau-\sigma) - \frac{\underline{r}_1}{t}(\tau-\sigma)$$

$$= \frac{(\tau-\sigma)}{t}(\underline{r}_2-\underline{r}_1) \quad (3.57)$$

ปริมาณตัวที่ไม่รู้คือ $\langle [\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]^2 \rangle_{S_o}$ ของ A อาจคำนวณหาได้
โดยการกระจายจะได้

$$\langle [\underline{r}(\tau)-\underline{r}(\sigma)]^2 \rangle_{S_o} = \langle [\underline{r}(\tau)]^2 \rangle_{S_o} + \langle [\underline{r}(\sigma)]^2 \rangle_{S_o} - 2\langle \underline{r}(\tau)\underline{r}(\sigma) \rangle_{S_o}$$

เมื่อใช้สูตรสมการ (3.56) จะได้ว่า

$$\langle[\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]^2\rangle_{S_o} = \frac{h}{i}\left[\frac{\delta^2 \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\tau)\delta \underline{f}(\sigma)}\Bigg|_{\underline{f}(\tau) = \underline{f}(\sigma)} + \frac{\delta^2 \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\tau)\delta \underline{f}(\sigma)}\Bigg|_{\underline{f}(\tau) = \underline{f}(\sigma)} + -2\frac{\delta^2 \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\tau)\delta \underline{f}(\sigma)}\Bigg|_{\underline{f} = 0}\right]_I$$

$$+\left[\frac{\delta \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\tau)} \cdot \frac{\delta \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\sigma)}\Bigg|_{\underline{f}(\tau) = \underline{f}(\sigma)} + \frac{\delta \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\sigma)} \cdot \frac{\delta \underline{S}_o'}{\delta \underline{f}(\tau)}\Bigg|_{\underline{f}(\tau) = \underline{f}(\sigma)} - 2\frac{\delta S_o'}{\delta \underline{f}(\tau)} \cdot \frac{\delta S_o'}{\delta \underline{f}(\sigma)}\Bigg|_{\underline{f} = 0}\right]_{II} \qquad (3.58)$$

ในหนึ่งมิติ ของวงเล็บแรกสมการ (3.58) อาจหาได้ว่า

$$\frac{1}{3}[\cdots\cdots\cdots]_I = \frac{1}{m^*t}(t-\tau)\tau + \frac{1}{m^*t}(t-\sigma)\sigma - 2\frac{1}{m^*t}(t-\tau)\sigma$$

$$= \frac{1}{m^*t}[t(\tau-\sigma) - (\tau^2 - 2\tau\sigma + \sigma^2)]$$

$$= \frac{1}{m^*t}[t(\tau-\sigma) - (\tau-\sigma)^2]$$

$$= \frac{1}{m^*t}[(\tau-\sigma)(t-(\tau-\sigma))] \qquad (3.58a)$$

ผลของวงเล็บสองในสมการ (3.58) สำหรับหนึ่งมิติ กรณี $\tau > \sigma$ จะได้

$$\frac{1}{3}[\cdots\cdots\cdots\cdots]_{II} = \frac{(\tau-\sigma)^2}{t^2}|\underline{r}_2 - \underline{r}_1|^2 \qquad (3.58b)$$

แทนสมการ (3.58a) กับสมการ (3.58 b) ลงในสมการ (3.58) จะได้ว่า

$$\frac{1}{3}\left\langle [\underline{r}(\tau) - \underline{r}(\sigma)]^2 \right\rangle_{S_o} = \frac{2i\hbar}{m^*}\frac{(\tau-\sigma)(t-(\tau-\sigma))}{t} + \frac{(\tau-\sigma)^2}{t^2}\left|\underline{r}_2-\underline{r}_1\right|^2 \quad (3.59)$$

ใช้สมการ (3.59) กับสมการ (3.57) แทนลงในสมการ (3.50 b) จะได้

$$A = \gamma + \frac{i\hbar}{2m^*}\frac{(\tau-\sigma)(t-(\tau-\sigma))}{t} \quad (3.60)$$

ต่อไปพิจารณาการหา $G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t)$ ซึ่งอาจเขียนในรูปดังนี้คือ

$$G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t) = F(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{o,cl}(\underline{r}_2-\underline{r}_1,t)\right] \quad (3.61)$$

เมื่อ

$$F(t) = \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \quad (3.62)$$

แทนสมการ (3.54 a) กับสมการ (3.62) ลงในสมการ (3.61) จะได้

$$G_o(\underline{r}_2,\underline{r}_1,t) = \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\frac{|\underline{r}_2-\underline{r}_1|^2}{t}\right] \quad (3.63)$$

แทนผลสมการ (3.51) สมการ (3.63) ลงในสมการ (3.45) เราจะได้ค่าเฉลี่ยของตัวแพร่กระจายเป็น

$$G_1(\underline{r}_2,\underline{r}_1;t) = \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}(\pi)^{1/2} \int_0^t\int_0^t d\tau d\sigma \int_0^\infty dy\, y A(t,\tau-\sigma,y)^{-3/2} \exp-[\Lambda^2 y + \frac{B^2}{4A}] + \frac{i}{\hbar}\frac{m^*}{2}\frac{|\underline{r}_2-\underline{r}_1|^2}{t}\right] \qquad (3.64)$$

ให้ $\underline{r}_2 = \underline{r}_1$ แทนลงในสมการ (3.64) และนำผลที่ได้นี้ไปแทนลงใน สมการ (3.23) จะได้

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}(\pi)^{1/2} t \int_0^\infty dy \int_0^t dx\, y\, A(t;x,y)^{-3/2} \exp(-\Lambda^2 y) + \frac{iE}{\hbar}t\right] \qquad (3.65)$$

เมื่อ $A(t,x,y) = ax^2 + bx + c$

ในที่นี้ $a = -\frac{i\hbar}{2m^* t}$, $b = \frac{i\hbar}{2m^*}$ และ $c = y$

โดยใช้เอกลักษณ์

$$\int_0^t\int_0^t f(\tau,\sigma)\, d\tau d\sigma = \frac{1}{2}t\int_0^t d\tau f(\tau,\sigma)$$

ในสมการ (3.65) แล้ว เนื่องจากการอินทิเกรทสมการ (3.65) ทำได้ยาก เพื่อให้ง่ายขึ้น เราจะพิจารณาเวลา t มีค่าน้อย นั่นคือพลังงาน E มีค่ามาก และจะไม่คิดเทอมที่สองในเอกโปเนนท์ เพราะหลังจากอินทิเกรท

แล้วอยู่ในอันดับ t^2 ทำให้ความหนาแน่นของสถานะ อยู่ในรูป ดังนี้คือ.—

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{iE}{\hbar}t\right) \qquad (3.66)$$

ความหนาแน่นของสถานะในสมการ (3.66) อาจคำนวณหาได้โดยใช้สูตรในสมการ (3.33) ผลที่ได้ก็คือ

$$N(E) = \frac{1}{2} c_1 \left(\frac{E}{\eta}\right)^{1/2} \qquad (3.67)$$

เมื่อ $c_1 = \dfrac{\Omega\, m^{*3/2}\sqrt{2\eta}}{\pi^2 \hbar^3}$

$$\eta = \frac{e^2}{\varepsilon_d}\sqrt{\frac{4\pi\rho}{\Lambda}}$$

โดยการใช้กฎการกีดกันในสมการ (3.6) จะได้ความหนาแน่นของสถานะเป็น

$$N(E) = c_1\left(\frac{E}{\eta}\right)^{1/2} \qquad (3.68)$$

ต่อไปเราพิจารณากรณีเวลา t มีค่าน้อย ในสมการ (3.65) แต่เราจะคิดเวลาที่ยกกำลังสองด้วย โดยการอินทิเกรทในเอกซ์โปเนนท์เทอมที่หนึ่งของ dx ใช้สูตรดังนี้คือ

$$\int \frac{dx}{(ax^2+bx+c)^{3/2}} = \frac{2(2ax+b)}{(4ac-b^2)\sqrt{ax^2+bx+c}}$$

ผลที่ได้ก็คือ

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}(\pi)^{1/2}t^2 \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{y}\left(y+\frac{i\hbar t}{8m^*}\right)} dy\,y\exp(-\Lambda^2 y) + \frac{iE}{\hbar}\,t\right] \quad (3.69)$$

เราจะพิจารณาอะซิมป์โทติคของ $N(E)$ เมื่อพลังงาน $E \rightarrow -\infty$ และจะคิดกรณี y มีค่ามาก คือ $y \gg \frac{i\hbar t}{8m^*}$ ดังนั้นเราอาจเขียนสมการ (3.69) ได้ว่า

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{e^4\rho}{\hbar^2\varepsilon_d^2}(\pi)^{1/2}t^2 \int_0^{\infty} dy\,y^{-1/2}\exp(-\Lambda^2 y) + \frac{iE}{\hbar}\,t\right]$$

หอสมุดกลาง
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ดังนั้นเมื่อทำการอินทิเกรทในเอกซ์โปเนนท์เทอมที่ 1 จากสมการข้างบนเทียบกับ y โดยใช้สูตร

$$\int_0^{\infty} y^n \exp(-ay)\,dy = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$$

เมื่อ $\Gamma(n+1)$ คือแกมมาฟังก์ชัน ผลที่ได้ก็คือ

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\left(\frac{m^*}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\rho e^4}{\hbar^2\varepsilon_d^2}\,\frac{\pi}{\Lambda}\,t^2 + \frac{iE}{\hbar}t\right] \quad (3.70)$$

อินทิกรัลทางขวามือในสมการ (3.70) อาจหาได้ โดยใช้สูตรในสมการ (3.32) และพฤติกรรมอะซิมป์โทติค ในสมการ (3.34) ผลที่ได้ลัพธ์ก็คือ

$$N(E) = \frac{1}{2}\left(\frac{\Omega m^{*3/2}}{4\pi^2 h^3}\right)\left(\frac{4\rho\pi e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}\right)^{1/4}\left(\frac{-E}{\sqrt{\frac{4\rho\pi e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}}}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{E^2}{\frac{4\rho\pi e^4}{\Lambda\varepsilon_d^2}}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\, c_2 \left(\frac{|E|}{\eta}\right)^{-3/2} \exp\left(-E^2/\eta^2\right) \qquad (3.71)$$

เมื่อ $c_2 = \frac{\Omega m^{*3/2}}{4\pi^2 h^3}\, \eta^{1/2}$

$$\eta = \frac{e^2}{\varepsilon_d}\sqrt{\frac{4\pi\rho}{\Lambda}}$$

ใช้หลักการกีดกันของเปาลีในสมการ (3.71) จะได้ความหนาแน่นของสถานะที่พลังงานต่ำเป็น

$$N(E) = c_2\left(\frac{|E|}{\eta}\right)^{-3/2} \exp\left(-E^2/\eta^2\right) \qquad (3.72)$$