ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 6, № 1 (2002) с. 124–132

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 6, No. 1 (2002) p. 124–132

ІНТЕҐРАЛЬНО-ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ МАСОВОГО ОПЕРАТОРА КВАЗІЧАСТИНОК, ЩО ВЗАЄМОДІЮТЬ ІЗ ПОЛЯРИЗАЦІЙНИМИ ФОНОНАМИ ПРИ $T = 0$ K

М. В. Ткач
Чернівецький національний університет,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 274012, Україна

(Отримано 31 липня 2001 р.; в остаточному вигляді — 18 грудня 2001 р.)

Уперше отримано інтеґрально-функціональне зображення масового оператора безспінових квазічастинок, що взаємодіють із поляризаційними фононами при $T = 0$ K. Це зображення еквівалентне безмежному розгалуженому інтеґральному дробові. Воно не залежить від сили зв'язку й ефективно враховує багатофононні процеси.

Ключові слова: електрон, фонон, взаємодія, інтерфейс, наногетеросистема.

PACS number(s): 79.60.Jv

I. ВСТУП

Зображення масового оператора (МО) у вигляді діяграм Фейнмана чи Пайнса [1,2] в теорії взаємодії квазічастинок із поляризаційними фононами при врахуванні багатофононних процесів стикаються з двома проблемами. Перша, менш суттєва, полягає в тому, що кількість доданків МО певного порядку швидко збільшується зі збільшенням степеня функцій зв'язку (кількости вершин у діяграмі). Друга, дуже суттєва, полягає в математичних особливостях скінченого числа діяграм усіх складових МО, що описуються діяграмами Фейнмана чи Пайнса. Добре відомо, що ці особливості такі, що врахування будь-якої великої, але скінченої кількости діяграм МО принципово не дає змоги отримати достатньо точних значень енерґій збуджених станів системи квазічастинок, які взаємодіють з фононами (фононних повторень). У зв'язку з цим виникає питання: чи дозволяє топологічна структура діяграм МО виконати такі точні парціяльні підсумовування безмежних рядів діяграмної техніки (ДТ), які б дозволили уникнути згаданих проблем. Повний МО, згідно з діяграмною технікою Пайнса, має вигляд, зображений на рис. 1, де, як відомо [2], у кожній діяграмі вершини зіставляються з відповідними функціями зв'язку, а суцільні лінії — з енерґетичними знаменниками. Детальний аналіз діяграм МО в техніці Пайнса ($T = 0$ K) показує, що їхня топологічна структура, яка містить два класи діяграм (компактних і некомпактних), дозволяє зобразити МО (рис. 1) в інтеґрально-функціональному або в еквівалентному до нього вигляді безмежного гіллястого інтеґрального (сумарного) нескінченого дробу. Таке зображення є не лише позитивною відповіддю на сформульоване питання, але й конструктивним у практичному застосуванні при розв'язуванні задач, де суттєво необхідно враховувати багатофононні процеси.

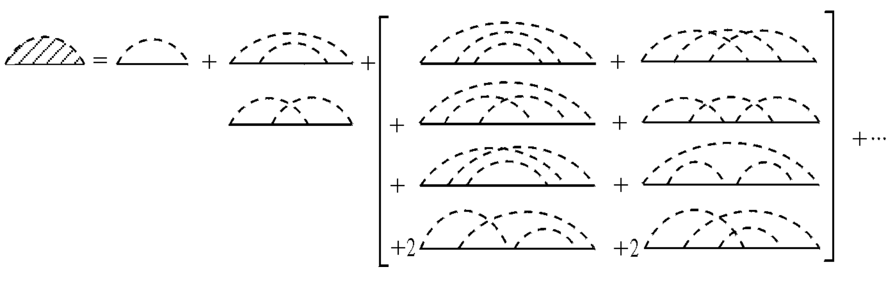


Рис. 1.

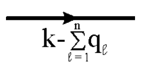
II. ПОСЛІДОВНЕ ПАРЦІЯЛЬНЕ ПЕРЕНОРМУВАННЯ ДІЯГРАМ МО

Отримаємо інтеґрально-функціональне зображення МО квазічастинок (безспінових електронів, домішок чи екситонів), що взаємодіють з фононами поляризаційного типу. Таку систему описують гамільтоніяном фреліхівського типу

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, S=\lambda, \mathbf{q}} F(\mathbf{k}, s) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{+} a_{\mathbf{k}} (b_S + b_{-S}^{+}) + \sum_{S=\lambda, \mathbf{q}} \Omega_S (b_S^{+} b_S + 1/2), \tag{1}$$

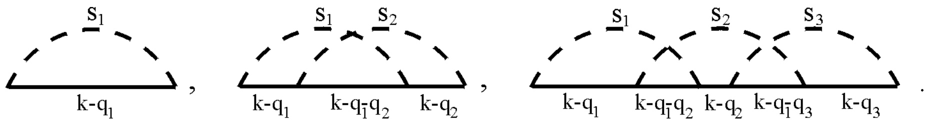
де $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$, Ω_S — енерґії квазічастинок (квазіімпульсу $\mathbf{k}$) та фононів (гілки λ, квазіімпульсу $\mathbf{q}$), а $F(\mathbf{k}, s)$ — функції зв'язку квазічастинок із фононами.

При $T = 0\,\mathrm{K}$ діяграмна техніка Пайнса однакова для всіх безспінових квазічастинок і задається відомими правилами [1,2], головним з яких є правило зіставлення

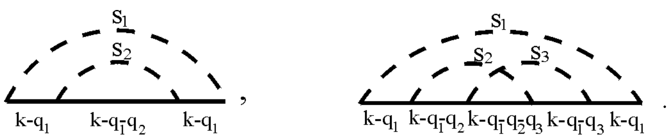


$$= E^{-1}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{n} q_\ell} = \left(\omega - \mathcal{E}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{n} q_\ell} - \sum_{\ell=1}^{n} \Omega_{S_\ell} \right)^{-1}. \tag{2}$$

Щоб отримати інтеґрально-функціональне зображення МО, спочатку необхідно здійснити послідовне парціяльне підсумовування діяграм МО. З цією метою введемо означення компактних діяграм МО як таких, що не містять у собі хоча б двох суцільних ліній з однаковими індексами. Наприклад,

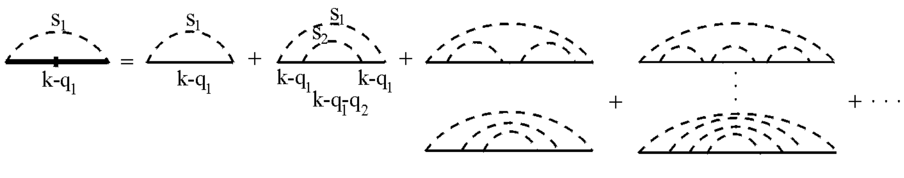


Діяграми, які містять у собі хоча б дві суцільні лінії з однаковими індексами, є некомпактними. Наприклад,



Як видно з діяграмного зображення повного МО (рис. 1) на основі компактної діяграми , вся безмежна сукупність діяграм без перетину фононних ліній точно підсумовується в одноразово перенормовану (одна вертикальна риска на суцільній лінії) діяграму першого порядку

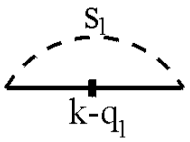
(3)



Аналітичний вираз, еквівалентний діяграмному рядові (3) вперше отримав Пайнс [2]. Відповідно одноразово (верхній індекс) перенормований МО першого порядку (нижній індекс) за числом фононних ліній має вигляд безмежного ланцюгового інтеґрального дробу (БЛІД)

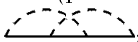
$$M_1^1(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{s_1} \cfrac{|F(\mathbf{k}, s_1)|^2}{E_{k-q_1} - \sum\limits_{s_2} \cfrac{|F(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, s_2)|^2}{E_{k-q_1-q_2} - \ldots - \sum\limits_{s_n} \cfrac{|F(\mathbf{k} - \sum\limits_{\ell=1}^{n-1} \mathbf{q}_\ell, s_n)|^2}{E_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{n} \mathbf{q}_\ell} - \ldots}}}. \tag{4}$$

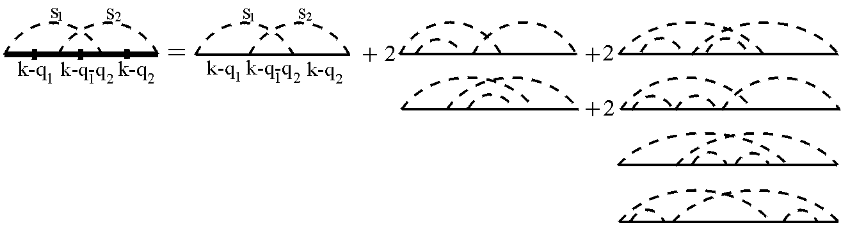
або еквівалентне інтеґрально-функціональне зображення перенормованого МО першого порядку



$$= M_1^1(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{s_1} \frac{|F(\mathbf{k}, s_1)|^2}{E_{k-q_1} - M_1^1(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1, \omega - \Omega_{s_1})}. \tag{5}$$

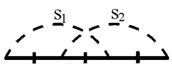
Процедуру послідовного перенормування компактних діяграм МО вищих порядків у діяграмній техніці Пайнса, наскільки відомо, не здійснювали, хоча вона виявляється не лише можливою, але й приводить до точного інтеґрально-функціонального зображення МО з конструктивним урахуванням багатофононних процесів. Цю процедуру здійснюємо так.

З діяграмної структури МО (рис. 1) видно, що серед усіх діяграм є сукупність, яка містить компактну діяграму другого порядку , і безмежний ряд діяграм, які, згідно з правилами діяграмної техніки Пайнса, згортаються в одноразово перенормовану компактну діяграму МО другого порядку



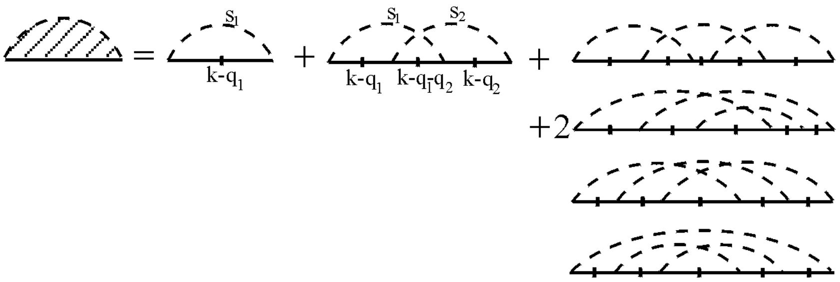
(6)

Таким чином отримуємо одноразово (верхній індекс) перенормований МО другого порядку (нижній індекс)



$$= \quad M_2^1(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1 s_2} \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k},-s_1)}{[E_{k-q_1} - M_1^1(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{s_1})]} \tag{7}$$
$$\times \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{[E_{k-q_1-q_2} - M_1^1(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_1}-\Omega_{s_2})]\,[E_{k-q_2} - M_1^1(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_2})]}.$$

У результаті подібного парціяльного підсумовування у всіх порядках на основі компактної діяграми  для повного МО отримуємо зображення у вигляді безмежного ряду одноразово перенормованих діяграм



(8)

Аналізуючи діяграмну структуру (8), можна побачити, що після повного одноразового перенормування в ряді діяграм МО в перших двох порядках уже немає некомпактних одноразово перенормованих діяграм. У третьому порядку три з чотирьох діяграм є компактними, а четверта некомпактна. Зрозуміло, що у всіх вищих порядках будуть і компактні, і некомпактні одноразово перенормовані діяграми.

Отже, тепер повний МО можна записати як безмежний ряд одноразово перенормованих складових усіх порядків

$$M(\mathbf{k},\omega) = M_1^1(\mathbf{k},\omega) + M_2^1(\mathbf{k},\omega) + \sum_{r=3}^{\infty}\left(M_r^1(\mathbf{k},\omega) + \overline{M}_r^1(\mathbf{k},\omega)\right), \tag{9}$$

де

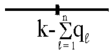
$$M_r^1(\mathbf{k},\omega) = \sum_{\ell=1}^{p_r} M_{r\ell}^1(\mathbf{k},\omega) \tag{10}$$

— сума внесків усіх (p_r) одноразово перенормованих компактних діяграм r-го порядку,

$$\overline{M}_r^1(\mathbf{k},\omega) = \sum_{\ell=1}^{\overline{p}_r} \overline{M}_{r\ell}^1(\mathbf{k},\omega) \tag{11}$$

— сума внесків усіх ($\overline{p}_r$) одноразово перенормованих некомпактних діяграм r-го порядку.

Увівши очевидне позначення для одноразово перенормованого енерґетичного знаменника



$$= \left\{ E^{(1)}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{n} q_\ell} \right\}^{-1} = \left\{ E_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{n} q_\ell} - M_1^1 \left(\mathbf{k} - \sum_{\ell=1}^{n} \mathbf{q}_\ell, \omega - \sum_{\ell=1}^{n} \Omega_{S_\ell} \right) \right\}^{-1}, \tag{12}$$

згідно з правилами діяграмної техніки Пайнса отримуємо аналітичні вирази для одноразово перенормованих складових МО. У перших двох порядках

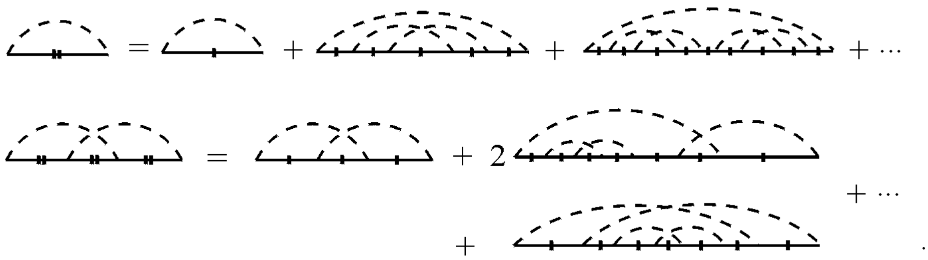
$$= M_1^1(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E^{(1)}_{k-q_1}}, \tag{13}$$

$$= M_2^1(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1 s_2} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{E^{(1)}_{k-q_1}E^{(1)}_{k-q_1-q_2}E^{(1)}_{k-q_2}}. \tag{14}$$

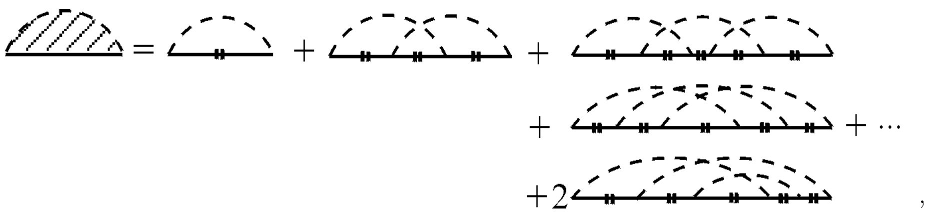
Аналогічно записуємо аналітичні вирази діяграм вищих порядків.

З топологічної структури діяграм МО (8) легко побачити, що вона дозволяє виконати друге парціяльне підсумовування, основним елементом якого вже є одноразово перенормована компактна діяграма (14).

Справді, безмежну сукупність діяграм у правій частині (8) можна згрупувати у такі ряди, які приводять до двічі перенормованих діяграм



У результаті повного подвійного перенормування МО матиме діяграмну форму

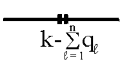


(15)

яка відповідає аналітичному виразові

$$M(\mathbf{k},\omega) = M_1^2(\mathbf{k},\omega) + M_2^2(\mathbf{k},\omega) + M_3^2(\mathbf{k},\omega) + \sum_{r=4}^{\infty} \left(M_r^2(\mathbf{k},\omega) + \overline{M}_r^2(\mathbf{k},\omega) \right). \tag{16}$$

Тут першим двом доданкам МО відповідають дві перші компактні діяграми, які з уведенням двічі перенормованого енерґетичного знаменника



$$= \left\{ E^{(2)}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{S} q_\ell} \right\}^{-1} \equiv \left\{ E^{(1)}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{S} q_\ell} - M_2^1 \left(\mathbf{k} - \sum_{\ell=1}^{S} \mathbf{q}_\ell, \omega - \sum_{\ell=1}^{S} \Omega_{S_\ell} \right) \right\}^{-1} = \tag{17}$$

$$= \left\{ E_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{S} q_\ell} - M_1^1 \left(\mathbf{k} - \sum_{\ell=1}^{S} \mathbf{q}_\ell, \omega - \sum_{\ell=1}^{S} \Omega_{S_\ell} \right) - M_2^1 \left(\mathbf{k} - \sum_{\ell=1}^{S} \mathbf{q}_\ell, \omega - \sum_{\ell=1}^{S} \Omega_{S_\ell} \right) \right\}^{-1}$$

мають аналітичний вигляд

$$= M_1^2(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E^{(2)}_{k-q_1}}, \tag{18}$$

$$= M_2^2(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1 s_2} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{E^{(2)}_{k-q_1}E^{(2)}_{k-q_1-q_2}E^{(2)}_{k-q_2}}. \tag{19}$$

Доданок третього порядку ($M_3^{(2)}(\mathbf{k},\omega)$) містить три складових

$$M_3^2(\mathbf{k},\omega) = M^2_{3(1)}(\mathbf{k},\omega) + M^2_{3(2)}(\mathbf{k},\omega) + M^2_{3(3)}(\mathbf{k},\omega), \tag{20}$$

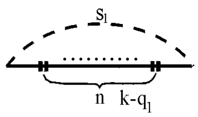
яким відповідають три компактні двічі перенормовані діяграми третього порядку з ряду (15). Цифровий індекс у дужці біля M послідовно нумерує ці діяграми.

Тепер уже видно загальні закономірності, які спостерігаємо при n-му перенормуванні складових МО. Усі n разів перенормовані діяграми від першого до $(n+1)$-го порядку є компактними, а діяграми, починаючи з $(n+2)$-го порядку, містять як компактні, так і некомпактні складові.

$$M(\mathbf{k},\omega) = \sum_{r=1}^{n+1} M_r^n(\mathbf{k},\omega) + \sum_{r=n+2}^{\infty}\left[M_r^n(\mathbf{k},\omega) + \overline{M}_r^n(\mathbf{k},\omega)\right], \tag{21}$$

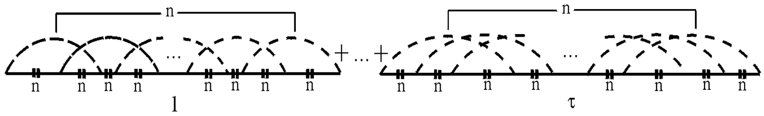
де

$$M_1^n(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s_1} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E^{(n)}_{k-q_1}} =$$



, (22)

$$M_{n+1}^n(\mathbf{k},\omega) = \sum_{s=1}^{\tau_{n+1}} M^n_{n+1(s)}(\mathbf{k},\omega) =$$



. (23)

Тут τ_{n+1} — кількість топологічно нееквівалентних діяграм у $(n+1)$-му порядку, а n разів перенормовані енерґетичні знаменники в загальному випадку мають вигляд

$$E^{(n)}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{s} q_\ell} = \omega - \mathcal{E}_{k-\sum\limits_{\ell=1}^{s} q_\ell} - \sum_{\ell=1}^{s}\Omega_{S_\ell} - \sum_{r=1}^{n} M_r^{n-1}\left(\mathbf{k}-\sum_{\ell=1}^{S}\mathbf{q}_\ell, \omega-\sum_{\ell=1}^{S}\Omega_{S_\ell}\right), \tag{24}$$

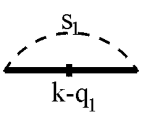
тобто містять суму всіх компактних діяграм $(n-1($ раз перенормованого МО.

При повному перенормуванні $(n\to\infty)$ у МО залишаються лише повністю перенормовані компактні діяграми (ППКД)

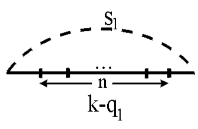
$$M(\mathbf{k},\omega) = \lim_{n\to\infty}\sum_{r=1}^{n+1} M_r^n(\mathbf{k},\omega) = \sum_{r=1}^{\infty} M_r(\mathbf{k},\omega). \tag{25}$$

Тут

$$M_1(\mathbf{k},\omega) =$$



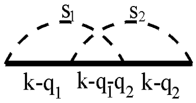
$$= \lim_{n\to\infty}$$



$$\begin{aligned} &= \lim_{n\to\infty}\sum_{s_1}\frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E^{(n-1)}_{k-q_1}} = \sum_{s_1}\frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E_{k-q_1} - \lim\limits_{n\to\infty}\sum\limits_{r=1}^{n} M_r^{n-1}(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{S_1})} \\ &= \sum_{s_1}\frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E_{k-q_1} - M(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{S_1})} = \sum_{s_1} F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{S_1}) \end{aligned} \tag{26}$$

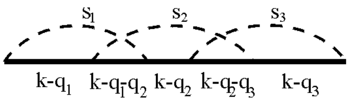
— ППКД МО першого порядку за кількістю фононних ліній у діяграмі, $G(\mathbf{k},\omega)$ — функція Ґріна квазічастинок. Ця діяграма у своєму порядку єдина.

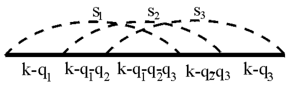
У другому порядку є також лише одна ППКД МО

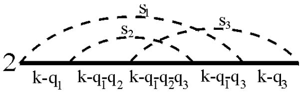
$M_2(\mathbf{k},\omega) =$ 

$$\begin{aligned} M_2(\mathbf{k},\omega) &= \sum_{s_1 s_2} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)}{[E_{k-q_1} - M(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{s_1})]} \\ &\times \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{[E_{k-q_1-q_2} - M(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_1}-\Omega_{s_2})][E_{k-q_2} - M(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_2})]} \\ &= \sum_{s_1 s_2} F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2) \\ &\times G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{s_1})G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_1}-\Omega_{s_2})G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_2}). \end{aligned} \tag{27}$$

У третьому порядку є три ППКД МО

$M_3(\mathbf{k},\omega) =$ 

$+$ 

$+2$ 

,

для яких, як видно з двох діаграм попередніх порядків, аналітичний вираз отримуємо за правилами Пайнса

$$\begin{aligned} M_3(\mathbf{k},\omega) = &\sum_{s_1 s_2 s_3} F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_3,s_3) \\ &\times G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,\omega-\Omega_{s_1})G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_1}-\Omega_{s_2})G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_3,\omega-\Omega_{s_3}) \\ &\times \Bigg\{ F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,\omega-\Omega_{s_2})G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\omega-\Omega_{s_2}-\Omega_{s_3}) \\ &+ F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-s_3)G\left(\mathbf{k}-\sum_{\ell=1}^{3}\mathbf{q}_\ell,\omega-\sum_{\ell=1}^{3}\Omega_{s_\ell}\right) \\ &\times \left[F\left(\mathbf{k}-\sum_{\ell=1}^{3}\mathbf{q}_\ell,s_1\right)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,\omega-\Omega_{s_2}-\Omega_{s_3}) \right. \\ &\left. + 2F\left(\mathbf{k}-\sum_{\ell=1}^{3}\mathbf{q}_\ell,s_2\right)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,-s_1)G(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,\omega-\Omega_{s_1}-\Omega_{s_3})\right]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{28}$$

Тепер очевидно, що аналітичні вирази для ППКД МО довільного порядку отримуємо за правилами діаграмної техніки Пайнса. Залишається ще встановити правила побудови всіх діяграм довільного n-го порядку і таким чином отримати формально точний алґоритм розрахунку повного МО, а отже, і фур'є-образу функції Ґріна.

III. ІНТЕҐРАЛЬНО-ФУНКЦІОНАЛЬНЕ ЗОБРАЖЕННЯ ПОВНОГО МО У ВИГЛЯДІ БЕЗМЕЖНОГО РОЗГАЛУЖЕНОГО ІНТЕҐРАЛЬНОГО ДРОБУ (БРІД)

ППКД кількох перших порядків отримуємо безпосередньо виключенням усіх перенормовуючих діяграм МО так, як це щойно було зроблено для ППКД МО трьох перших порядків. Однак для зображення діяграм високого порядку цей спосіб малоконструктивний через громіздкість. Необхідний алґоритм побудови діяграм довільного n-го порядку легко отримати способом графічної побудови.

Із ППКД МО першого порядку видно, що ППКД МО другого порядку можна отримати графічною добудовою. Для цього вершини діяграми першого порядку перенумеровуємо зліва направо так, як указано на діяграмі (рис. 2а).

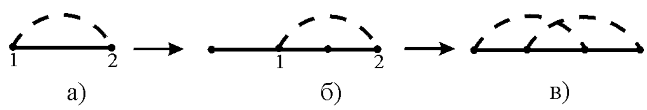
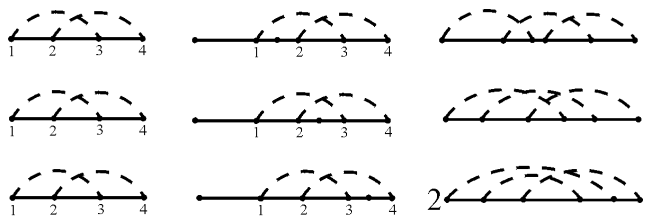


Рис. 2.

Далі до першої вершини долучаємо суцільну лінію з додатковою вершиною зліва, а між першою і другою вершинами зображаємо другу додаткову вершину (рис. 2б). З'єднавши дві додаткові вершини штриховою лінією і опустивши цифрові індекси, отримуємо ППКД МО другого порядку (рис. 2в).

Три ППКД третього порядку отримуємо з діяграми другого порядку так. Зображаємо три діяграми другого порядку (за кількістю суцільних ліній у цій діяграмі) з перенумерованими зліва направо вершинами (рис. 3а). До кожної з діяграм долучаємо суцільну лінію з додатковою вершиною зліва і ще з однією додатковою вершиною в кожній з отриманих діяграм послідовно: у першій між вершинами 1 і 2, у другій — між 2 і 3, у третій — між 3 і 4 (рис. 3б). Додаткові вершини на кожній з діяграм з'єднуємо штриховими лініями, цифрові індекси опускаємо, а до несиметричної діяграми додаємо дзеркально-симетричну або (що еквівалентно) її домножуємо на множник 2 (рис. 3в)



а) б) в)

Рис. 3.

Аналогічним методом ППКД $(n+1)$-го порядку отримуємо з ППКД n-го порядку. Для цього кожну симетричну й кожну пару дзеркально-симетричних діяграм n-го порядку потрібно зобразити $2n$ разів, перенумерувавши їхні вершини зліва направо від 1 до $2n$ і долучивши до кожної по додатковій G-лінії з крайньою зліва вершиною та другою додатковою вершиною між суміжними вершинами діяграмного блоку n-го порядку так, щоб друга додаткова вершина в першій діяграмі $(n+1)$-го порядку знаходилась між 1 і 2-ю вершинами блоку діяграми n-го порядку, друга — між 2-ю і 3-ю вершинами і т.д., а остання — між $(2n-1)$-ю і $(2n)$-ю вершинами блоку діяграми n-го порядку. З'єднавши дві додаткові вершини штриховими лініями на кожній з діяграм, отримаємо всі ППКД МО $(n+1)$-го порядку. Одержані при цьому несиметричні діяграми або подвоюються, або (що еквівалентно) до них додається дзеркально-симетрична діяграма. Так, наприклад, згідно зі встановленими правилами, з двох дзеркально-симетричних діяграм третього порядку одержуємо такі ППДК четвертого порядку (рис. 4):

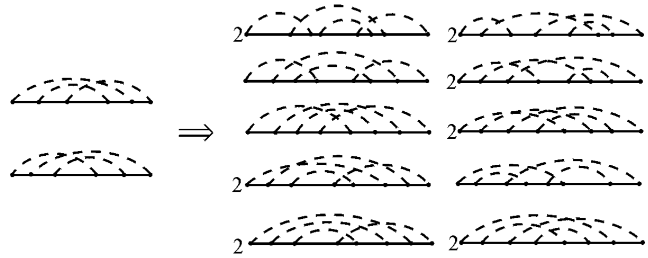


Рис. 4.

Оскільки алґоритм побудови ППДК довільного порядку встановлено і відомі правила зіставлення з діяграмами аналітичних виразів, то з урахуванням зв'язку функцій Ґріна з МО через рівняння Дайсона отримуємо точне зображення повного МО у вигляді безмежного інтеґрально-функціонального ряду (БІФР). З точністю до третього порядку включно МО має вигляд:

$$\begin{aligned}
M(k) = {} & \sum_{s_1} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E_{k-s_1}-M(k-s_1)} \\
& + \sum_{s_1 s_2} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{[E_{k-s_1}-M(k-s_1)][E_{k-s_2}-M(k-s_2)][E_{k-s_1-s_2}-M(k-s_1-s_2)]} \\
& + \sum_{s_1 s_2 s_3} \frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_3,s_3)}{[E_{k-s_1}-M(k-s_1)][E_{k-s_3}-M(k-s_3)][E_{k-s_1-s_2}-M(k-s_1-s_2)]} \\
& \times \left\{ \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)}{[E_{k-s_2}-M(k-s_2)][E_{k-s_2-s_3}-M(k-s_2-s_3)]} \right. \\
& + \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-s_3)}{[E_{k-s_1-s_2-s_3}-M(k-s_1-s_2-s_3)]} \left\{ \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)}{E_{k-s_2-s_3}-M(k-s_2-s_3)} \right. \\
& \left.\left. + 2\ \frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,s_1)}{E_{k-s_1-s_3}-M(k-s_1-s_3)} \right\} \right\} + \ldots\,.
\end{aligned} \tag{29}$$

Тепер очевидно, що аналітичний вираз повного МО у вигляді безмежного інтеґрально-функціонального ряду (БІФР) можна отримати безпосередньо з ППКД за правилами Пайнса з простою модифікацією, а саме — з довільною суцільною лінією ППКД потрібно зіставляти енерґетичний множник:

$$\overset{k-\sum_{\ell=1}^{n} s_\ell}{\overline{\qquad\qquad\qquad}} \sim \left[E_{k-\sum_{l=1}^{n} s_l} - M\left(\mathbf{k}-\sum_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l\right)\right]^{-1}. \tag{30}$$

Хоч у вищих порядках МО кількість ППКД зростає досить швидко, проте простота знайденого алґоритму побудови діяграм (n+1)-го порядку за діяграмами n-го порядку та елементарні правила зіставлення з діяграмами аналітичних виразів дозволяють запрограмувати ці обидві процедури і за допомогою ЕОМ отримувати МО в таких високих порядках, які лімітуються лише можливостями її швидкодії.

Зі стуктури МО видно, що існує можливість подати його в еквівалентному, але дуже зручному для аналітичних досліджень і практичних розрахунків вигляді безмежного розгалуженого інтеґрального дробу (БРІД). Справді, в енерґетичні знаменники всіх складових МО (29) входять такі ж МО, але зі змішаними арґументами, для кожного з яких також справедливі рівняння:

$$M(k-\sum_{l=1}^{n}s_l)=\sum_{s_{n+1}}\frac{F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l,-s_{n+1}\right)F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n+1}\mathbf{q}_l,s_{n+1}\right)}{E_{k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l}-M\left(k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l\right)} \tag{31}$$

$$+\sum_{s_{n+1},s_{n+2}}\frac{F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l,-s_{n+1}\right)F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n+1}\mathbf{q}_l,-s_{n+2}\right)}{\left[E_{k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l}-M\left(k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l\right)\right]\left[E_{k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l-s_{n+2}}-M\left(k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l-s_{n+2}\right)\right]}$$

$$\times\frac{F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n+2}\mathbf{q}_l,s_{n+1}\right)F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l-\mathbf{q}_{n+2},s_{n+2}\right)}{\left[E_{k-\sum\limits_{l=1}^{n+2}s_l}-M\left(k-\sum\limits_{l=1}^{n+2}s_l\right)\right]}+\ldots\qquad(n=1,2,\ldots\infty).$$

Тепер зображення МО у вигляді БРІД отримати просто. Спочатку з рівнянь (31) знаходимо $M(k-s)$, що дозволяє підстановкою в праву частину МО (30) виключити з його енерґетичних множників усі МО з одноразово зміщеними арґументами. Потім з рівнянь (31) знаходимо $M(k-s_1-s_2)$ і аналогічним до попереднього способом з МО (30) виключаються всі МО з дворазово зміщеними арґументами. Така n-разова рекурсивна процедура приводить до зображення МО у вигляді БРІД, що містить у собі МО з арґументами, які зміщені не менше ніж (n+1) раз. Зрозуміло, що при $n\to\infty$ в енерґетичних знаменниках зникають усі МО зі зміщеними арґументами і залишаються лише енерґії невзаємодіючих квазічастинок та фононів, унаслідок чого шуканий МО отримує вигляд повного БРІД. З урахуванням кількох гілок і доданків відповідних рядів МО у зображенні БРІД виглядає так:

$$M(k)=\sum_{s_1}\frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,s_1)}{E_{k-s_1}-\sum\limits_{s_2}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_2)}{\left[E_{k-s_1-s_2}-\sum\limits_{s_3}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_3)}{\left(E_{k-s_1-s_2-s_3}-\ldots-\right.}+\ldots\right.}+}+$$

$$\left.-\sum_{s_n}\frac{F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n}\mathbf{q}_l,-s_{n+1}\right)F\left(\mathbf{k}-\sum\limits_{l=1}^{n+1}\mathbf{q}_l,s_{n+1}\right)}{E_{k-\sum\limits_{l=1}^{n+1}s_l}-\ldots}\right)$$

$$\left.+\sum_{s_2,s_3}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,s_3)}{[E_{k-s_1-s_2}-\sum\limits_{s_4}\ldots][E_{k-s_1-s_3}-\sum\limits_{s_4}\ldots][E_{k-s_1-s_2-s_3}-\sum\limits_{s_4}\ldots]}+\ldots\right]$$

$$+\sum_{s_1s_2}\frac{F(\mathbf{k},-s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_2)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,s_1)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,s_2)}{\left[E_{k-s_1}-\sum\limits_{s_3}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_3,s_3)}{E_{k-s_1-s_3}-\sum\limits_{s_4}\ldots}+\ldots\right]}$$

$$\times\left[E_{k-s_2}-\sum_{s_3}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_3)}{E_{k-s_2-s_3}-\sum\limits_{s_4}\ldots}+\ldots\right]^{-1}$$
$$\times\left[E_{k-s_1-s_2}-\sum_{s_3}\frac{F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2,-s_3)F(\mathbf{k}-\mathbf{q}_1-\mathbf{q}_2-\mathbf{q}_3,s_3)}{E_{k-s_1-s_2-s_3}-\sum\limits_{s_4}\ldots}+\ldots\right]^{-1}+\ldots\,. \tag{32}$$

Оскільки алґоритм знаходження МО у вигляді БРІД з його зображення у формі БІФР рекурсивний і простий, то за допомогою ЕОМ отримуємо аналітичний вигляд МО з урахуванням такого високого порядку, який обмежується лише можливостями швидкодії ЕОМ.

Як видно з МО у формі БРІД (32), через безмежне перенормування всіх енерґетичних множників він, на відміну від МО в неперенормованому вигляді, уже не містить нефізичних особливостей при будь-яких енерґіях, що дозволяє використовувати його не лише для аналізу перенормування основного, але і збуджених станів електрон (екситон)-фононних систем при довільних величинах зв'язку з урахуванням багатофононних процесів.

Застосування знайденого зображення МО в інтеґрально-функціональному чи у вигляді БРІД до конкретних задач буде здійснено в наступних роботах.

---

[1] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (Физматгиз, Москва, 1962).

[2] D. Pines, in *Polarons and Excitons*, (Plenum Press, N.Y., 1962) p. 155-170.

INTEGRAL-FUNCTIONAL REPRESENTATION OF MASS OPERATOR OF QUASIPARTICLES INTERACTING WITH POLARIZATIONAL PHONONS AT $T = 0$ K

M. V. Tkach
Chernivtsi National University, Department of Theoretical Physics,
2 Kotsubinsky Str., 274012, Chernivtsi, Ukraine

The integral-functional representation of mass operator of spinless quasiparticles interacting with polarizational phonons at $T = 0$ K is obtained for the first time. This representation is equivalent to the infinite branched integral fraction. It does not depend on the binding force and effectively takes into account the many phonon processes.