УДК 537.311.33

К.К. Товстюк
Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра напівпровідникової електроніки

КЛАСИФІКАЦІЯ ПОДВІЙНИХ ПЕРЕСТАНОВОК ДЛЯ ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ

C.C. Tovstyuk

CLASSIFICATION OF DOUBLE PERMUTATIONS FOR ELECTRON – PHONON INTERACTION

Виконана класифікація подвійних перестановок, які відображають ряд теорії збурення для електрон-фононної взаємодії. Для цього аналізують цикли електронної перестановки та іх зв’язок між собою за допомогою фононних перестановок. Встановлено залежність між типами зв’язку між електронними циклами та різними виразами для згортки у відповідних аналітичних виразах. Вказується і відповідність до діаграм Фейнмана.

We classify of double permutations, which describe the items of the perturbation theory sum for electron – phonon interaction. For this purpose, we analyze the cycles of electron perturbation and connection between them with phonon perturbation. We determine the dependences between different types of connections and different convolutions in their analytical expressions. We also denote the accordance to Feynman diagrams.

1. Вступ

У [1] розробляється новий формалізм на базі теорії симетричних груп, придатний для описання багаточастинкової взаємодії. Для цього записується подвійна перестановка (ПП) і виводяться правила, за допомогою яких ставиться у відповідність ПП доданок з ряду теорії збурення для міжелектронної взаємодії. Подвійна перестановка записується так, щоби врахувати закони збереження енергії та імпульсу у кожному віртуальному акті взаємодії. Формулюються правила відбору, які дають змогу поставити кожній ПП у відповідність певний аналітичний вираз. У [2,3] ця методика поширюється на електрон-фононну взаємодію у наближенні гамільтоніана Фреліха. Вводяться правила побудови ПП та доводиться, що така ПП задовольняє постулати теорії груп. Ця робота присвячена класифікації ПП електрон-фононної взаємодії. З множини всіх можливих ПП виділяють такі, що відповідають функції Гріна (ФГ) електронів вищих наближень, ФГ фононів вищих наближень, а також ефективній взаємодії. Виконана згортка виразів для ФГ електронів та фононів, а також ефективної взаємодії у відповідних аналітичних виразах. Аналізується випадок ПП, що відповідає добутку 2 і більше незалежних виразів – аналог незв’язаної діаграми Фейнмана. Такий аналіз здійснюється за допомогою розбиття на класи у перестановці, що описує попарне усереднення операторів вторинного квантування електронів (схеми Юнга), на яке накладається з’єднання лініями між цифрами, зазначеними у фононній перестановці. В роботі також доводяться правила зарахування ПП до певного ряду (ряд для ФГ електронів, фононів, ефективної взаємодії) за аналізом за циклами електронної перестановки та їх з’єднання фононною перестановкою. Така класифікація дасть змогу проаналізувати кожний з цих рядів зокрема і згорнути їх для ФГ електронів та фононів а також для ефективної взаємодії у певних наближеннях, аналогічно до того як це було зроблено у [1]. Використання розробленого методу для певних конкретних задач дасть змогу проаналізувати вплив температури на основні параметри електронного спектра (зміна кривини зони та її зсув) вплив електронної системи на Раманові спектри (зсув фононних частот з температурою) та зміну ефективної взаємодії (зміна півширини рівнів) з температурою для широкого класу задач.

2. Постановка задачі та використані наближення

Розглядається електрон-фононна взаємодія у наближенні гамільтоніана Фреліха

$$H = \sum_{\alpha\vec{k}} \varepsilon_{\alpha\vec{k}} a^{+}_{\alpha\vec{k}} a_{\alpha\vec{k}} + \sum_{\beta\vec{q}} \omega_{\beta\vec{q}} b^{+}_{\beta\vec{q}} b_{\beta\vec{q}} + \sum_{\alpha\beta\vec{k}\vec{q}} V_{\alpha,\beta}(\vec{q}) a^{+}_{\alpha\vec{k}-\vec{q}} a_{\alpha\vec{k}} \left(b_{\beta-\vec{q}} + b^{+}_{\beta\vec{q}} \right) \tag{2.1}$$

де $\varepsilon_{\alpha\vec{k}}$ – енергія електрона з квазіімпульсом $\vec{k}$, що перебуває у енергетичній зоні α; $\omega_{\beta\vec{q}}$ – енергія фонона з квазіімпульсом $\vec{q}$, вітки β, $V_{\alpha,\beta}(\vec{q})$ – енергія взаємодії з обміном квазіімпульсу $\vec{q}$, $a^{+}_{\alpha\vec{k}}$, $a_{\alpha\vec{k}}$ – оператори породження та знищення електронів, $b^{+}_{\beta\vec{q}}$, $b_{\beta\vec{q}}$ – оператори породження та знищення фононів. Шукаємо функцію Гріна електрон-фононної взаємодії

$$G_{\vec{k}}\left(t-t'\right) = -i \left\langle \hat{T} a^{+}_{\vec{k}}(t) a_{\vec{k}}(t') \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i)^m}{m!} H_i(t_1)\cdot H_i(t_2)\ldots H_i(t_m) \right\rangle_{H_0} \cdot \left\langle S(\infty) \right\rangle^{-1}_{H_0} \tag{2.2}$$

з

$$\left\langle S(\infty) \right\rangle_{H_0} = \left\langle \left\{ 1 - i\int_{-\infty}^{\infty} H_i dt + \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} T\left[H_i(t_1) H_i(t_2) \right] dt_1 dt_2 + \ldots \right\} \right\rangle_{H_0}, \tag{2.3}$$

враховуючи [4]:

$$\begin{aligned} &< T a_{\alpha\vec{k}}(t) a_{\alpha'\vec{k}'}(t') >_{H_{0e}} = 0; \\ &< T a^{+}_{\alpha\vec{k}}(t) a^{+}_{\alpha'\vec{k}'}(t') >_{H_{0e}} = 0; \\ &-i < T a_{\alpha\vec{k}}(t) a^{+}_{\alpha'\vec{k}'}(t') >_{H_{0e}} = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} G^{0}_{\alpha\vec{k},\alpha\vec{k}}(t-t'); \end{aligned} \tag{2.4}$$

та

$$\left\langle T b^{+}_{\beta\vec{q}}\left(t\right) b_{\beta'\vec{q}'}\left(t'\right) \right\rangle_{H_{0ph}} = \delta_{\beta\beta'} \delta_{\vec{q}\vec{q}'} D^{0}_{\beta\vec{q},\beta\vec{q}}\left(t-t'\right). \tag{2.5}$$

3. Побудова подвійної перестановки

У [2] виконана подвійна перестановка (ПП), що описує попарні усереднення операторів вторинного квантування (2.2). Зокрема, стовпчикові ПП

$$\begin{matrix} \ldots & i & \ldots \\ \ldots & m & \ldots \\ \ldots & j' & \ldots \\ \ldots & l & \ldots \end{matrix} \tag{3.1}$$

відповідає середнє

$$\left\langle T b^{+}_{\vec{q}_i} b_{\vec{q}'_j} \right\rangle \cdot \left\langle T a^{+}_{\vec{k}_i - \vec{q}_i} a_{\vec{k}_m} \right\rangle \cdot \left\langle T a^{+}_{\vec{k}'_j + \vec{q}'_j} a_{\vec{k}_l} \right\rangle. \tag{3.2}$$

Правила відбору, сформульовані у [1,2] базуються на виразах (2.4) та (2.5), визначать для (3.1) закони збереження чотиривимірного імпульсу

$$\begin{aligned} &\vec{k}_i + \vec{k}_{j'} = \vec{k}_m + \vec{k}_l; \\ &\vec{q}_i = \vec{k}_i - \vec{k}_m \end{aligned} \tag{3.3}$$

якому відповідає добуток у аналітичному виразі

$$\ldots\int \frac{d^4\vec{k}_i}{(2\pi)^4} G^{0}_{\vec{k}_i}\left(\omega_i\right) G^{0}_{\vec{k}_m+\vec{k}_l-\vec{k}_i}\left(\omega_m + \omega_l - \omega_i\right) D^{0}_{\vec{k}_l-\vec{k}_i}\left(\omega_l - \omega_i\right)\ldots \tag{3.4}$$

Знак відповідного до ПП аналітичного виразу визначається за кількістю перетинів ліній електронної перестановки (відповідає парності перестановки) та кількістю середніх $\left\langle Ta_i^+ a_j \right\rangle$.

4. Класифікація подвійних перестановок

Для виконання класифікації ПП запишемо цикли електронної перестановки, цифри якої з'єднаємо лініями, що відповідають фононній перестановці. ПП, її розбиття на цикли та їх з'єднан-

Таблиця 1

Класифікація подвійних перестановок

1. 0 1 2 3 4 1 3 4 3′ 4′ 3′ 4′ 1′ 2′ ; 1′ 2′ 0 2	(0 1 3 3' 1') (2 4 4' 2')	$\vec{k} = \vec{k}_1$; $\vec{k}_1' = \vec{k} + \vec{k}_3' - \vec{k}_3$; $\vec{k}_4' = \vec{k}_4 + \vec{k}_2' - \vec{k}_2$;	$\vec{q}_1 = \vec{k} - \vec{k}_3$; $\vec{q}_2 = \vec{k}_2 - \vec{k}_4$; $\vec{q}_3 = \vec{k}_3 - \vec{k}_3'$; $\vec{q}_4 = \vec{k}_2 - \vec{k}_2'$.
$G_{\vec{k}}^0(\omega)\times\int\frac{d^4\vec{k}_3}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_3}^0(\omega_3)\Omega\left(\vec{k}-\vec{k}_3\right)\int\frac{d^4\vec{k}_3'}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_3'}^0(\omega_3')G_{\vec{k}+\vec{k}_3'-\vec{k}_3}^0(\omega+\omega_3'-\omega_3)\Omega\left(\vec{k}_3-\vec{k}_3'\right)\times G_{\vec{k}}^0(\omega)\times$ $\int\frac{d^4\vec{k}_2}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_2}^0(\omega_2)\int\frac{d^4\vec{k}_2'}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_2'}^0(\omega_2')\Omega\left(\vec{k}_2-\vec{k}_2'\right)\int\frac{d^4\vec{k}_4}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_4}^0(\omega_4)G_{\vec{k}_4+\vec{k}_2'-\vec{k}_2}^0(\omega_4+\omega_2'-\omega_2)\Omega\left(\vec{k}_2-\vec{k}_4\right).$			
2. 0 1 2 3 4 5 1' 4 5 1 4' 5' 5' 1' 2' 4' 3' 0 3' 3 2' 2	(0 1' 3' 2 5 5') (1 4 4' 2' 3)	$\vec{k} = \vec{k}_1' = \vec{k}_5'$; $\vec{k}_1 = \vec{k}_2' = \vec{k}_4$; $\vec{k}_3' = \vec{k}_2 + \vec{k} - \vec{k}_5$	$\vec{q}_1 = 0$; $\vec{q}_2 = \vec{k}_2 - \vec{k}_5$; $\vec{q}_3 = \vec{k}_3 - \vec{k}_1$; $\vec{q}_4 = \vec{k}_2' - \vec{k}_4'$: $\vec{q}_5 = \vec{k}_5 - \vec{k}$.
$-G_{\vec{k}}^0(\omega)\times\int\frac{d^4\vec{k}_5}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_5}^0(\omega_5)\Omega\left(\vec{k}-\vec{k}_5\right)\int\frac{d^4\vec{k}_2}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_2}^0(\omega_2)G_{\vec{k}+\vec{k}_2-\vec{k}_5}^0(\omega+\omega_2-\omega_5)\Omega\left(\vec{k}_2-\vec{k}_5\right)\times G_{\vec{k}}^0(\omega)\times$ $\int\frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4}(G_{\vec{k}_1}^0(\omega_1))^3\Omega(0)\int\frac{d^4\vec{k}_4'}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_4'}^0(\omega_4')\Omega\left(\vec{k}_1-\vec{k}_4'\right)\int\frac{d^4\vec{k}_3}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_3}^0(\omega_3)\Omega\left(\vec{k}_3-\vec{k}_1\right)\times G_{\vec{k}}^0(\omega).$			
3. 0 1 2 3 4 5 3 1′ 2′ 3′ 4' 5' 1' 5' 4' 3' 2' 2 0 5 4 1	(0 3 3' 4 4' 5 5') (1 1' 2 2')	$\vec{k} = \vec{k}_3 = \vec{k}_5$; $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$; $\vec{k}_3' = \vec{k}_4'$ $\vec{k}_5' = \vec{k}_2' + \vec{k} - \vec{k}_1$	$\vec{q}_1 = \vec{k}_1 - \vec{k}_1'$; $\vec{q}_2 = \vec{q}_5 = \vec{k}_1 - \vec{k}_2'$; $\vec{q}_3 = \vec{k} - \vec{k}_3'$; $\vec{q}_4 = \vec{k}_4 - \vec{k}_3'$;
$-G_{\vec{k}}^0(\omega)\times\int\frac{d^4\vec{k}_3'}{(2\pi)^4}(G_{\vec{k}_3'}^0(\omega_3'))^2\Omega\left(\vec{k}-\vec{k}_3'\right)\int\frac{d^4\vec{k}_4}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_4}^0(\omega_4)\Omega\left(\vec{k}_4-\vec{k}_3'\right)\times G_{\vec{k}}^0(\omega)\times$ $\int\frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4}(G_{\vec{k}_1}^0(\omega_1))^2\int\frac{d^4\vec{k}_1'}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_1'}^0(\omega_1')\Omega\left(\vec{k}_1-\vec{k}_1'\right)\int\frac{d^4\vec{k}_2'}{(2\pi)^4}G_{\vec{k}_2'}^0(\omega_2')G_{\vec{k}_2'+\vec{k}-\vec{k}_1}^0\Omega^2\left(\vec{k}_1-\vec{k}_2'\right)\times G_{\vec{k}}^0(\omega).$			

Табл. 1 містить приклади ПП (перший стовпчик); відповідне розбиття на цикли електронної перестановки та їх з'єднання фононними лініями (другий стовпчик); правила відбору на квазіімпульси електрона (третій стовпчик); та визначення квазіімпульсу фонона. В рядку знизу наводиться відповідний аналітичний вираз.

ня, правила відбору, що відповідають цій ПП, задаються у стовпчиках табл. 1. Рядок знизу містить відповідний аналітичний вираз. Аналіз наведених прикладів дасть змогу зробити висновок про аналітичний вираз з вигляду самої ПП.

1. ПП складається з прямої суперпозиції 2 ПП (0,1,3 та 2,4 – стовпчики). Цій ПП відповідають два незв'язані між собою електронні цикли. Аналітичний вираз ПП1 складається із добутку двох виразів, один з яких містить $\vec{k}$, від якого залежить функція Гріна (2.2), інший – ні. Такі вирази у діаграмах Фейнмана відповідають незв'язаним діаграмам. Як показано, наприклад, у [4], внесок таких виразів дорівнює (2.3) а, отже, скорочується із знаменником (2.2).

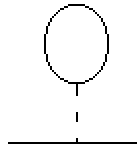
Таблиця 2

Згортка аналітичного виразу ПП 3 з табл. 1

1	$\int \frac{d^4\vec{k}_4}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_4}(\omega_4)\Omega(\vec{k}_4-\vec{k}'_3) = -i\Sigma^0(\vec{k}'_3);$
2	$-iG^0_{\vec{k}'_3}(\omega_3)\Sigma^0(\vec{k}'_3)G^0_{\vec{k}'_3}(\omega_3) = -iG_{\vec{k}'_3}^{(1)}(\omega'_3);$
3	$-i\int \frac{d^4\vec{k}'_3}{(2\pi)^4} G^{(1)}_{\vec{k}'_3}(\omega'_3)\Omega(\vec{k}-\vec{k}'_3) = \Sigma^{(1)}(\vec{k});$
4	$G^0_{\vec{k}}(\omega)\Sigma^1(\vec{k})G^0_{\vec{k}}(\omega) = G_{\vec{k}}^{(1)}(\omega);$
5	$\int \frac{d^4\vec{k}'_1}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}'_1}(\omega'_1)\Omega(\vec{k}_1-\vec{k}'_1) = -i\Sigma^0(\vec{k}_1);$
6	$-iG^0_{\vec{k}_1}(\omega_1)\Sigma^0(\vec{k}_1)G^0_{\vec{k}_1}(\omega_1) = -iG_{\vec{k}_1}^{(1)}(\omega_1);$
7	Замінимо змінні $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}'_2;$
8	$\int \frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_1}(\omega_1)\int \frac{d^4\vec{k}'_2}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}'_2}(\omega'_2)G^0_{\vec{k}'_2+\vec{k}-\vec{k}_1}(\omega'_2+\omega-\omega_1)\Omega^2(\vec{k}_1-\vec{k}'_2) =$ $\int \frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_1}(\omega_1)\int \frac{d^4\vec{q}_2}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_1+\vec{q}}(\omega_1+\omega_q)G^0_{\vec{k}-\vec{q}}(\omega-\omega_q)\Omega^2(\vec{q}) =$ $\int \frac{d^4\vec{q}}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}-\vec{q}}(\omega-\omega_q)\Omega^2(\vec{q})\int \frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_1}(\omega_1)G^0_{\vec{k}_1+\vec{q}}(\omega_1+\omega_q).$
9	$\int \frac{d^4\vec{k}_1}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}_1}(\omega_1)G^0_{\vec{k}_1+\vec{q}}(\omega_1+\omega_q) = -\frac{i}{2}\Pi(\vec{q});$
10	$-\frac{i}{2}D^0_{\vec{q}}(\omega_q)\Pi(\vec{q})D^0_{\vec{q}}(\omega_q) = D^1_{\vec{q}}(\omega_q);$
11	$-\frac{i}{2}\int \frac{d^4\vec{q}}{(2\pi)^4} G^0_{\vec{k}-\vec{q}}(\omega-\omega_q)D^1_{\vec{q}}(\omega_q) = -\frac{1}{2}\Sigma^2(\vec{k})$
12	$G^0_{\vec{k}}(\omega)\Sigma^1(\vec{k})G^0_{\vec{k}}(\omega)\Sigma^2(\vec{k})G^0_{\vec{k}}(\omega)$

Табл. 2 містить поетапну згортку аналітичного виразу ПП3 з табл. 1.

2. ПП складається із двох циклів зв’язаних між собою лише однією фононною лінією. Оскільки всі цифри (індекси $\vec{k}$) зустрічаються двічі в межах одного циклу, а значення $\vec{q}$ визначаються як різниця $\vec{k}$ з індексами першого та другого рядків ПП, такому з’єднанню відповідатиме тільки $\vec{q}=0$. (четвертий стовпчик другого рядка табл. 1). Це ПП, які відповідають діаграмам Фейнмана типу



(4.1)

Два цикли ПП з’єднуються двома фононними лініями. Правила відбору (четвертого стовпчика 3 рядка Табл.1) вказують на наявність рівних $\vec{q}$. Тоді аналітичний вираз, що відповідає цій ПП, містить квадрат нульової функції Гріна фононів. Згідно із рівнянням Дайсона [4,5] такий вираз відповідатиме функції Гріна фононів вищого порядку–доданку, який важливий для з’ясування зміни фононної підсистеми у результаті електрон-фононної взаємодії. Дійсно, у табл. 2 наводиться поетапна згортка аналітичного виразу ПП 3 (четвертий рядок табл.1). Рядки 9 та 10 табл.2 ілюструють сказане.

Висновок

Зроблено аналіз подвійних перестановок, які відповідають електрон-фононній взаємодії у наближенні гамільтоніана Фреліха. ПП класифікують за допомогою аналізу циклів електронної перестановки та зв’язку між ними за допомогою ліній фононної перестановки.

Вказуються типи ПП, які відповідають незв’язаним діаграмам Фейнмана.

Зазначено, які ПП відповідають виразам, зв’язаним між собою тільки за допомогою $\vec{q}=0$.

Класифікація дасть змогу відмежувати вирази, що дають внесок у фононну функцію Гріна.

Класифікації дає змогу зробити висновок, що для знаходження функції Гріна електронів слід відбирати такі ПП, електрона перестановка яких задається одним циклом.

1. *Tovstyuk K.D.,.Tovstyuk C.C, Danylevych O.O. // International Journal of Modern Physics B. – 2003. – Vol. 17. – N 21. – P. 3813–3830.*

2. *Товстюк К.Д. Полупроводниковое материаловедение. – К., 1984.*

3. *Товстюк К.К. // Вісник НУ “Львівська політехніка” “Електроніка” – 2001. – №423. – С. 121–125.*

4. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Меты квантовой теории поля в статистической физике. – М., 1962.*

5. *Марч Н., Янг У., Сампантхар С. Проблема многих тел в квантовой механике. – М., 1969.*