

КЛАСИФІКАЦІЯ ПОДВІЙНИХ ПЕРЕСТАНОВОК ЯК ПРЕДСТАВЛЕННЯ ФЕЙНМАНОВИХ ДІАГРАМ ДЛЯ ЕЛЕКТРОН-ФОНОННОЇ ВЗАЄМОДІЇ

© Товстюк К.К., 2009

C.C. Tovstyuk

CLASSIFICATION OF DOUBLE PERMUTATIONS AS REPRESENTATION OF FEYNMAN DIAGRAMS FOR ELECTRON PHONON INTERACTION

© Tovstyuk C.C., 2009

Проаналізовано подвійні перестановки для функції Гріна електронів за електрон-фононної взаємодії, що описується гамільтоніаном Фреліха. Подвійні перестановки і діаграми Фейнмана відповідають однаковим аналітичним виразам. Проведена у роботі класифікація та доведені теореми дають змогу ідентифікувати клас подвійних перестановок, які відповідають незв'язаним та звідним діаграмам Фейнмана, а також таким діаграмам, які містять функції Гріна фононів, і виділити клас подвійних перестановок, які відповідають масовому оператору за $T=0$. Запропонований метод дасть змогу аналізувати потрібну фізичну величину (масовий оператор, поляризаційний оператор, густину часток) у високих порядках теорії збурення.

The analysis of double permutations for electron Green function in electron – phonon interaction, represented by Frelich Hamiltonian is carried out in this work. Double permutations (DPs) and corresponded Feynman diagrams define the same analytical expressions. The classification, carried out in this work, allows to identify the class of DPs, corresponded to disconnected and improper Feynman diagrams, to diagrams including phonon Green functions and to separate the class of DPs corresponding to mass operator at $T=0$. This method allows to analyze the requited physical magnitude (mass operator, polarization, density of particles) in high orders of perturbation theory .

Вступ

Дослідження багаточастинкової взаємодії у сильнокорельованих системах має багато складностей. Зокрема вони пов'язані із проблемою збіжності рядів і необхідністю врахування високих порядків теорії збурення. Зокрема в [1], під час розрахунку масового оператора полярона вказано на необхідність врахування високих порядків теорії збурення. Однак сьогодні в літературі існують розбіжності навіть стосовно повної кількості зв'язаних діаграм. Зокрема у [2] наводяться цифри 74, 706 для третього та четвертого порядків теорії збурення системи взаємодіючих ферміонів, в той час як у [3] – це 84, 3120. У [2] також доведено, що використання «скелетних» діаграм Хартрі-Фока визначає 80 % діаграм Фейнмана для другого наближення, та лише 16,5 і 7,7 % діаграм для четвертого та п'ятого порядку теорії збурення. Використання замкненої алгебри подвійних перестановок дасть змогу встановити точну кількість таких виразів. У роботі розвивається метод подвійних перестановок, запропонованих у [4] та розвинутих у [5], для міжелек-

тронної взаємодії. Проведена у роботі класифікація подвійних перестановок (ПП) дає змогу на початку виділити вирази, які безпосередньо визначають масовий оператор, зміну густини системи, обумовлену взаємодією; зміну поляризаційних властивостей середовища (поляризаційний оператор). На відміну від [2, 3], де спочатку будуються усі діаграми Фейнмана, з яких потім відбираються потрібні (відкидаються незв'язані та звідні).

Метод подвійних перестановок побудовано для електрон-фононої взаємодії, яка записується за допомогою гамільтоніана Фреліха [6]:

$$H = \sum_{\mathbf{a}\mathbf{k}} e_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} a_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{b}\mathbf{q}} W_{\mathbf{b}\mathbf{q}}^{\mathbf{r}} b_{\mathbf{b}\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{b}\mathbf{q}}^{\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{k},\mathbf{q}} V_{\mathbf{a}\mathbf{b}}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{a}\mathbf{k}-\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}} (b_{\mathbf{b}-\mathbf{q}}^{\mathbf{r}} + b_{\mathbf{b}\mathbf{q}}^{\dagger}). \quad (1)$$

Перший доданок правої частини (1) – гамільтоніан електронного газу H_0 , в якому $e_{\mathbf{a}\mathbf{k}}^{\mathbf{r}}$ – відома залежність енергії електронів \mathbf{a} – зони від квазіімпульсу \mathbf{k} . Другий доданок (1) – H_0' – описує фононний газ, тут $W_{\mathbf{b}\mathbf{q}}^{\mathbf{r}}$ – відома залежність енергії оптичних фононів вітки β від квазіімпульсу фонона \mathbf{q} . Взаємодія між електронами та фононами описується третім доданком, в якому $V_{\mathbf{a}\mathbf{b}}(\mathbf{q})$ – відома функція зв'язку. Далі, розглядаючи однозонне наближення, ми опускаємо індекси α, β . За $T=0$ перенормування електронного спектра визначається полюсом Фур'є перетворення функції Гріна електронів, яка відповідає рівнянню Дайсона:

$$G(\mathbf{k}, w) = \frac{1}{w - e - M(\mathbf{k}, w)} \quad (2)$$

із масовим оператором (МО) – $M(\mathbf{k}, w)$.

Утворення подвійних перестановок

Для знаходження МО використовують топологічно нееквівалентні незвідні діаграми Фейнмана [1–3]. За їх допомогою визначають взаємозв'язок між квазіімпульсами, які і визначають відповідний до діаграм Фейнмана аналітичний вираз. Подвійні перестановки записуються в такий спосіб, щоб з них, за допомогою правил відбору, отримували такі самі закони збереження квазіімпульсу, як і у фейнманових діаграмах. Таку подвійну перестановку можна створити, якщо провести у добутках $H_{\text{int}}(t_i)H_{\text{int}}(t_{i+1})$ перепозначення змінних:

$$\mathbf{q}_{i+1}^{\mathbf{r}} \rightarrow -\mathbf{q}_i^{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{k}_{i+1}^{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{k}_i^{\mathbf{r}}. \quad (3)$$

Такий добуток запишеться як

$$\sum_{\mathbf{b},\mathbf{b}'} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} V(\mathbf{q}_i) V(\mathbf{q}_i') a_{\mathbf{k}_i-\mathbf{q}_i}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_i}^{\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}_i+\mathbf{q}_i}^{\dagger} a_{\mathbf{k}_i'}^{\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}_i'-\mathbf{q}_i'}^{\dagger} b_{\mathbf{q}_i}^{\dagger} b_{\mathbf{q}_i'}. \quad (4)$$

Як випливає із (4), можна вважати, що усі оператори породження фононів нумеруються не штрихованими індексами, в той час, як оператори знищення фононів – штрихованими індексами. Подвійна перестановка складається із двох компонент – електронної та фононої і містить чотири рядки. Стовпчик такої ПП має вигляд

$$\begin{array}{c} i \\ l \\ j' \\ t' \end{array} \quad (5)$$

Проаналізуємо елементи фононої компоненти ПП у (5): індекс i у верхньому рядку відповідає операторові породження фонона $b_{\mathbf{q}_i}^{\dagger}$ та індекс j у нижньому рядку, який відповідає операторові знищення $b_{\mathbf{q}_j}^{\mathbf{r}}$. Розташування таких двох операторів в одному стовпчиківі фононої

компоненти ПП відображає попарне усереднення названих операторів вторинного квантування фононів. Отже, у подвійну перестановку фононна компонента записується у перший та третій (основні) рядки, при цьому індекси третього рядка штрихуються. Попарне усереднення електронних операторів відображає електронна компонента ПП, для якої цифра i у першому рядку позначає оператор $a_{k_i - q_i}^{\dagger, \mathbf{r}}$, а j' у третьому рядку – оператор $a_{k_j' + q_i}^{\dagger, \mathbf{r}}$, цифри l та l' у другому та четвертому рядках позначають оператори $a_{k_l}^{\mathbf{r}}, a_{k_l'}^{\mathbf{r}}$. У ПП електронна компонента записується так: цифра

l – записується у стовпчик під цифрою i за парного усереднення $\langle Ta_{k_i - q_i}^{\dagger, \mathbf{r}} a_{k_l}^{\mathbf{r}} \rangle$. Отже, цифри основних рядків трактуються як позначення відповідних операторів породження (цифри верхнього рядка електронної перестановки), цифри додаткових рядків (другого та четвертого) містять індекси операторів знищення з нижніх рядків електронної компоненти. Так, стовпчик подвійної перестановки (5) позначає добуток:

$$V(\vec{q}_i) V(\vec{q}_j') \langle Ta_{k_i - q_i}^{\dagger, \mathbf{r}} a_{k_l}^{\mathbf{r}} \rangle \cdot \langle Ta_{k_j' + q_i}^{\dagger, \mathbf{r}} a_{k_l'}^{\mathbf{r}} \rangle \cdot \langle Tb_{q_i}^{\dagger, \mathbf{r}} b_{q_j}^{\mathbf{r}} \rangle, \quad (6)$$

якому, згідно із [4, 5], відповідають взаємозв'язки між квазіімпульсами (правила відбору):

$$\vec{k}_i + \vec{k}_j' = \vec{k}_l + \vec{k}_l', \quad \vec{q}_i = \vec{q}_j' = \vec{k}_l - \vec{k}_l' = \vec{k}_i' - \vec{k}_j'. \quad (7)$$

Стовпчикові ПП. (5) відповідає елемент діаграми Фейнмана, зображений на рис. 1.

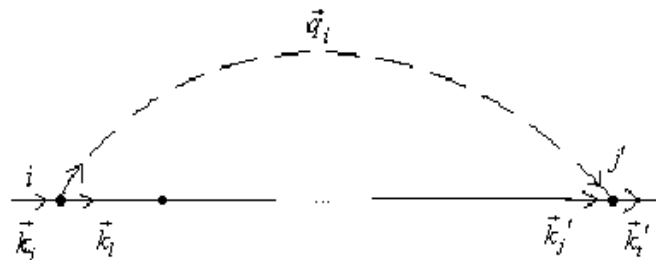


Рис. 1. Елемент діаграми Фейнмана, який відповідає (5)

Такому елементу відповідають закони збереження квазіімпульсів

$$\vec{k}_l + \vec{q}_i = \vec{k}_i, \quad \vec{k}_j + \vec{q}_i = \vec{k}_j', \quad (8)$$

які збігаються із правилами відбору (7).

Класифікація подвійних перестановок

За допомогою проведеної класифікації виділяються подвійні перестановки, що відповідають не зв'язаним звідним діаграмам, а також діаграмам, що відповідають функціям Гріна фононів вищого порядку. Із теорії перестановок відомо [7], що група перестановок поділяється на класи, які зображаються схемами Юнга. Такий поділ на класи за електронною компонентою ПП. проведено і у цій роботі. Аналіз класів ПП. дозволив ідентифікувати ПП, які відповідають різним типам діаграм Фейнмана.

1. Подвійні перестановки, які відповідають незв'язаним діаграмам Фейнмана

У методі фейнманових діаграм вирази, що задаються незв'язаними діаграмами, не беруться до розгляду. Таким виразам відповідає добуток функцій Гріна із двома або більше підмножинами незв'язаних між собою квазіімпульсів. Розглянемо ПП, у якої електронна компонента задається двома (або більше) циклами, а фононна – не об'єднує між собою цифри різних циклів. Таку ПП. можна зобразити, як показано на рис. 2, де вертикальна пунктирна пряма розділяє частини, що належать до різних циклів. Жодна із цифр першого циклу не зустрічається у частині ПП., яка

відповідає другому циклові. Тому правила відбору розпадуться на дві (або більше) підмножини, не зв'язаних між собою квазіімпульсів на рис. 2, б.

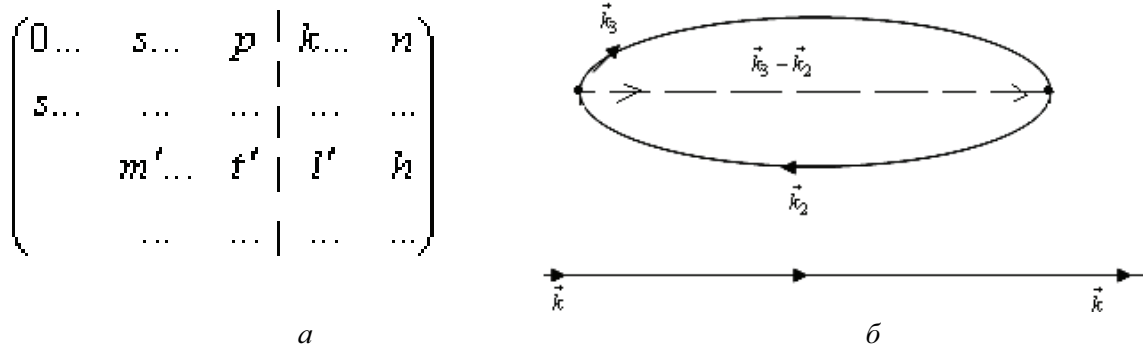


Рис. 2. Схема ПП, які відповідають незв'язаним діаграмам (а); зображено приклад незв'язаної діаграми Фейнмана (б)

2. Подвійні перестановки, які відповідають прямій взаємодії без обміну імпульсами

Для знаходження таких подвійних перестановок використовують теорему 1.

Теорема 1. Якщо подвійна перестановка містить два або більше циклів електронної перестановки, а фононна перестановка об'єднує лише по одній цифрі з кожного циклу, то її правила відбору містять

$$\bar{q}_i = 0. \quad (9)$$

Доведення. Кожна цифра входить у ПП двічі – у основний та допоміжний рядочки, як це схематично показано на рис. 3, усі стовпчики, окрім одного, містять цифри (індекси \bar{k}) одного електронного циклу. В такий спосіб ПП, які містять два та більше циклів із одним з'єднанням, можна зобразити як групу стовпчиків із цифрами першого циклу, групу стовпчиків із цифрами другого циклу та одного стовпчика (m), що містить цифри обох циклів – стовпчик m на рис. 3, а. Правила відбору (7) можна переписати для i стовпчика у вигляді:

$$\bar{k}_{1i} + \bar{k}_{3i} - \bar{k}_{2i} - \bar{k}_{4i} = 0. \quad (10)$$

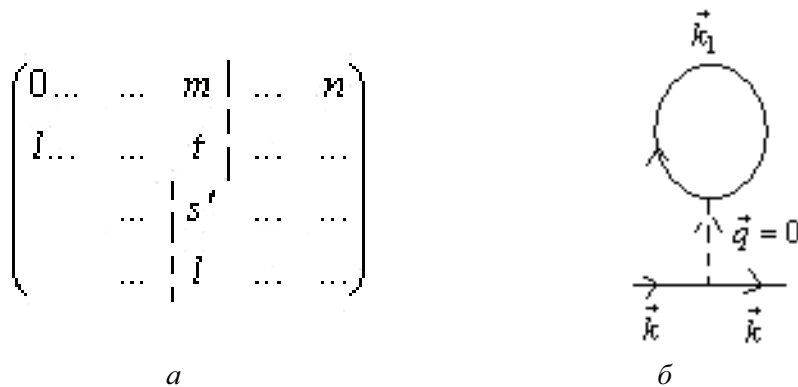


Рис. 3. Схематичне зображення ПП (а) та приклад відповідної діаграми Фейнмана, які визначають густину системи (б)

Підсумовуючи вирази (10) для m стовпчиків, отримаємо

$$\bar{k}_l^{(2)} - \bar{k}_s^{(2)} = \bar{q}_m = 0. \quad (11)$$

Оскільки усі цифри першого циклу входять у стовпчики двічі, то у суму вони увійдуть із протилежними знаками. На рис. 3, б показано приклад діаграми, яка відповідає такій подвійній перестановці.

3. Подвійні перестановки, які містять функцій Гріна фонона вищого порядку

Розглядається подвійна перестановка, яка складається із електронної перестановки із двома циклами і фононної перестановки, яка об'єднує по дві цифри із кожного циклу. Доведемо, що така подвійна перестановка містить у правилах відбору два рівні квазіімпульси фононів.

Теорема 2. Якщо подвійна перестановка містить два або більше циклів електронної перестановки, а фононна перестановка об'єднує лише по дві цифри з кожного циклу, то правила відбору такої подвійної перестановки містять

$$\vec{q}_i = \vec{q}_j . \quad (12)$$

Доведення. Нехай подвійна перестановка складається із двох електронних циклів, а фононна перестановка об'єднує по дві цифри з кожного циклу. Зауважимо, що індекс фононного квазіімпульсу збігається із цифрою першого рядка, який нумерує стовпчик відповідної подвійної перестановки. Кожен стовпчик подвійної перестановки містить чотири цифри, які або належать одному електронному циклу, або складаються із двох півстовпчиків із цифрами підмножин – комбіновані стовпчики, як показано на рис. 4. Подвійна перестановка такого типу містить два комбіновані стовпчики (i, s). Наприклад, $(\dots i, \dots m, \dots l', \dots n)$ належать до одного циклу, $(j', \dots l, \dots s, \dots t)$ – до іншого. Просумуємо правила відбору у формі (10) для усіх стовпчиків, наприклад, першого циклу разом із i -, s -стовпчиками. Отримаємо:

$$\vec{k}_j^{(2)} - \vec{k}_l^{(2)} + \vec{k}_s^{(2)} - \vec{k}_t^{(2)} = 0 . \quad (13)$$

Порівнюючи із правилами відбору (7), отримаємо

$$\vec{q}_i = \vec{q}_s . \quad (14)$$

Такі правила відбору визначають функцію Гріна фононів вищого порядку [6], як, наприклад, це показано на рис. 4, б.

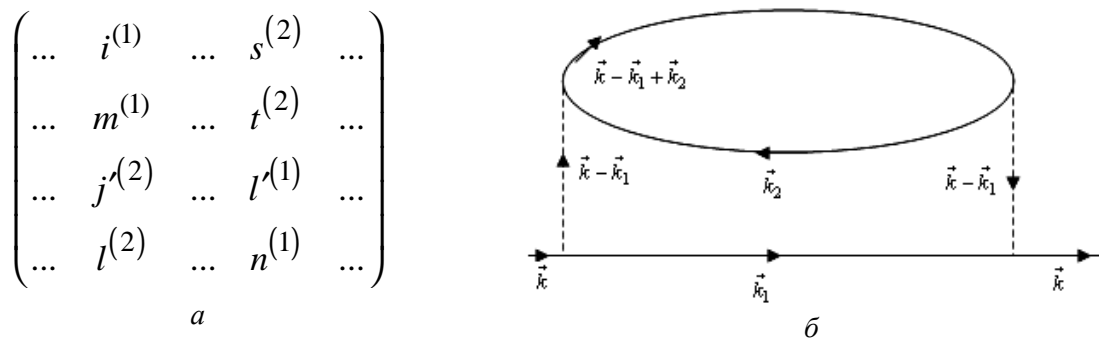


Рис. 4. Схематичне зображення ПП та приклад відповідної діаграми Фейнмана, які визначають фононну функцію Гріна і містять поляризаційний оператор

4. Подвійні перестановки, що відповідають звідним діаграма Фейнмана

Для знаходження ПП. такого типу доведемо теорему.

Теорема 3. Подвійним перестановкам, що задаються одним циклом, у якому фононні перестановки утворюють дві (i більше) підмножин, відповідає звідний аналітичний вираз. Кожній підмножині, утвореній фононною перестановкою у межах одного циклу, відповідає у правилах відбору додатковий вираз

$$\vec{k}_m = \vec{k} . \quad (15)$$

Доведення. Розглянемо подвійну перестановку, що складається із одного циклу, і фононні перестановки, що утворюють дві підмножини. Схематично її можна зобразити так, як це показано на рис. 5.

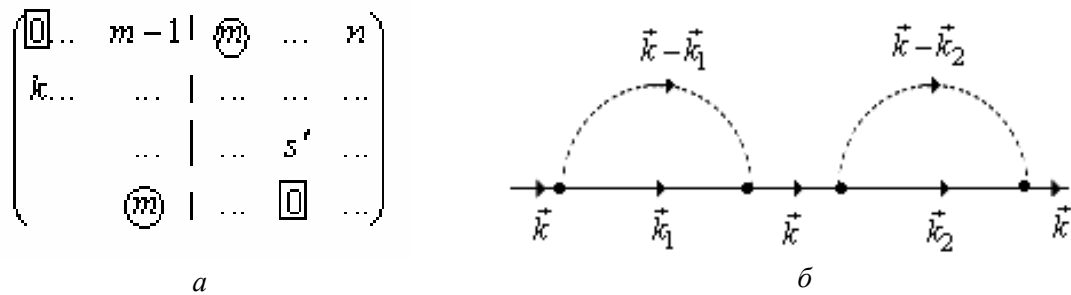


Рис. 5. Схематичне зображення ПП (а) та приклад діаграми Фейнмана, які відповідають звідним виразам (б)

Пунктирна вертикальна лінія розмежовує частини подвійної перестановки, які відносяться до двох підгруп фононного з'єднання. Якщо електронна компонента утворює один цикл, то цифра (m), з якої починається нова підгрупа, знаходиться в одному із допоміжних рядків (2 або 4) подвійної перестановки. На рис. 5, а вона обведена колом. У подвійній перестановці із одним циклом цифра 0 фігурує в основному (першому) піврядкові першої підгрупи і у допоміжному рядкові (2 або 4) подвійної перестановки другої підгрупи (на рис. 5, а вона позначена прямокутником). Інші цифри кожної підгрупи ($k, m-1; s'$) зустрічаються у подвійній перестановці двічі по один бік від пунктирної лінії. Підсумовуючи правила відбору у вигляді (10) для m - n -стовпчиків, отримаємо

$$\vec{k}_m = \vec{k}. \quad (16)$$

Перший півстовпчик ПП з рис. 5, а визначає

$$\vec{k}_k = \vec{k}. \quad (17)$$

На рис. 5, а зображено приклад звідної діаграми Фейнмана.

Проведена класифікація приводить до висновку, що для побудови масового оператора електронів за електрон-фононної взаємодії за $\Gamma = 0$ використовуються подвійні перестановки із електронними компонентами, які відповідають класу із одним циклом, а фононні перестановки утворюють одну підмножину.

Висновок

У роботі проведено класифікацію подвійних перестановок для електрон-фононної взаємодії. За допомогою такої класифікації виділено ПП., які відповідають незв'язаним та звідним діаграмам Фейнмана, а також ПП., які містять поляризаційний оператор (відповідають фононним функціям Гріна вищого порядку). Виділено також ПП., які визначають перенормовану густину системи, вказано який клас ПП. відповідає масовому оператору. Проведена класифікація дає змогу дослідникам обмежитися побудовою лише тих діаграм, які визначають вирази, якими цікавиться дослідник, на відміну від, наприклад [2], де будуються усі діаграми Фейнмана, а потім з них вибираються потрібні.

1. Tkach M., Voitsekivska O., Val O. *Condensed Matter Physics*. – 1998. – **1**, 401.
2. Mathar R. *Int. J. of Quantum Chemistry*. – 2007. – **107**. – 1975.
3. Cederbaum L.S. *Theor. Chim Acta*. – 1973. – **31**, 239.
4. Товстюк К.Д. *Полупроводниковое материаловедение*. – К.: Наук. думка, **2000**. – 264 с.
5. Tovstyuk K.D., Tovstyuk C.S., Danylevych O.O. *Int. J. of Modern Physics*. – 2003. – **B17**, 3813.
6. Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялоцинский И.Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. – М.: Физматгиз, 1962. – 441 с.
7. Каплан Дж. Г. *Симметрия много-частичных систем*. – М.: Наука, 1969. – 435 с.