

В. К. ПЕТЕРСОН

ИЗУЧЕНИЕ МАССОВОГО ОПЕРАТОРА ВБЛИЗИ ДНА ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ В ЗАДАЧЕ О РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ НА ХАОТИЧЕСКИ РАСПОЛОЖЕННЫХ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРАХ

Проведено вблизи дна зоны проводимости исследование массового оператора причинной функции Грина в задаче рассеяния электронов проводимости на хаотически расположенных примесных центрах. Показана неприменимость обычной теории возмущений, и разработан особый асимптотический метод решения задачи в пределе малой константы взаимодействия. Показано, что для достаточно слабого взаимодействия мнимая часть массового оператора возникает в некоторой точке E_0 , имеющей характер точки ветвления второго порядка. Сдвиг дна зоны наряду с членами порядка β^2 , β^3 , β^4 и т. д. содержит неаналитический по константе взаимодействия член порядка $\beta^4 \ln \beta$. Точка E_0 , в которой $-E_p + \text{Re } M(0; E_p) = 0$, не совпадает с точкой E_0 , так как сдвинута в сторону больших значений энергии.

При изучении взаимодействия электронов проводимости в сильно легированных полупроводниках с хаотически расположенными примесными центрами возникает задача исследования соответствующей функции Грина или связанного с ней массового оператора [1—5].

Настоящая работа посвящена изучению массового оператора при энергиях, близких ко дну зоны проводимости. При представлении массового оператора в виде ряда теории возмущений по константе взаимодействия начиная с четвертого порядка появляются диаграммы, дающие при $E \rightarrow 0$ (дно зоны) расходящиеся вклады. Поэтому вблизи точки $E=0$ нельзя пользоваться обычной теорией возмущений. Появление указанных расходимостей связано со сдвигом точки ветвления массового оператора.

В качестве исходных возьмем уравнения Дайссна — Швингера, связывающие между собой ядро взаимодействия (обобщенную вершину) βD , массовый оператор M , функцию Грина G и вершинную часть $\beta \Gamma$ [6]:

$$D(\vec{x}, \vec{y}; E) = f(|\vec{x} - \vec{y}|) - \beta \int \frac{d^3z}{(2\pi)^3} D(\vec{x}, \vec{z}; E) G(z^2; E) f(|\vec{z} - \vec{y}|), \quad (1)$$

$$M(x^2; E) = -n\beta^2 \int \frac{d^3z}{(2\pi)^3} D(\vec{x}, \vec{z}; E) G(z^2; E) \Gamma(\vec{z}, \vec{x}; E), \quad (2)$$

$$G(x^2; E) = \frac{1}{x^2 - E + M(x^2; E)}. \quad (3)$$

Здесь все величины безразмерны, причем за единицу длины взят эффективный радиус взаимодействия α^{-1} [6], а за единицу энергии $\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}$.

Например, безразмерный импульс $\vec{x} = \frac{\vec{k}}{\alpha}$, где \vec{k} — волновой вектор, соответствующий импульсу $\hbar \vec{k}$, безразмерная плотность $n = \frac{N}{V \alpha^3}$, где N — число примесных центров, V — объем полупроводника. В функциях, описывающих взаимодействие, в том числе и в вершинной части, явно выделена безразмерная константа взаимодействия $\beta = \frac{8\pi}{a_B \alpha}$, ($a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m e^2}$).

Функция $f(|\vec{x} - \vec{y}|)$ — безразмерный фурье-образ потенциала взаимодействия, причем $f(0) = 1$ [6].

Уравнения (1), (2), (3) представляют формально точную, но, к сожалению, не замкнутую систему уравнений, для решения которой необходимо знать какое-либо выражение для вершинной части $\beta \Gamma$. Полная вершинная часть представляется рядом

$$\begin{aligned} \beta \Gamma(\vec{z}; \vec{x}; E) = & \beta f(|\vec{z} - \vec{x}|) + \\ & + n \beta^3 \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^3} D(\vec{z}; \vec{z} + \vec{y} - \vec{x}; E) G(|\vec{z} + \vec{y} - \vec{x}|^2; E) \times \\ & \times D(\vec{z} + \vec{y} - \vec{x}, \vec{y}; E) G(y^2; E) D(\vec{y}; \vec{x}; E) + \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

отдельные члены которого интерпретируются на диаграммах (см. рис. 2). В четвертом порядке $\beta \Gamma$ имеется единственная диаграмма порядка $n \beta^4$. В пятом порядке 5 диаграмм: одна порядка $n \beta^5$ и четыре порядка $n^2 \beta^5$. Так как в m -ном порядке ($m \geq 3$), в разложении для $\beta \Gamma$ содержатся диаграммы порядка $n \beta^m$, то, чтобы обеспечить малость вкладов диаграммы высокого порядка, необходимо сделать предположение о малости параметра взаимодействия β .

Отметим, что частичное суммирование указанных вкладов порядка $n \beta^m$ во всех порядках теории возмущений не связано с суммированием, заменяющим взаимодействие βf на амплитуду рассеяния βD , так как указанные диаграммы описывают процессы рассеяния электрона одновременно на двух примесных центрах. (Вклад в массовый оператор указанных диаграмм порядка n^2 .) Аналогичным образом, частичное суммирование вкладов порядка $n^2 \beta^m$ в полной вершинной части $\beta \Gamma$ приводит к неполной вершинной части, описывающей рассеяние электрона на трех примесных центрах и т. д.

В качестве первого приближения рассмотрим приближенную систему уравнений, получающуюся из (1), (2) и (3) в результате замены Γ на f . Смысл такого приближения состоит в том, что в его рамках получаются гарантированные в асимптотическом пределе малых β результаты порядка β^2 и β^3 .

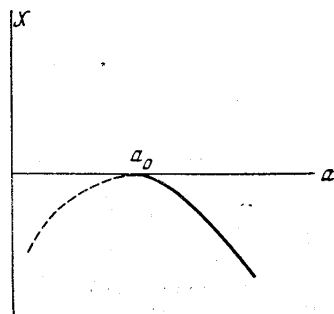


Рис. 1

Если ввести малый параметр $V\sqrt{\lambda} = n\beta^2 \frac{1}{2\pi^2 2\sqrt{2}}$ и функцию $T(x^2; z^2; E)$, возникающую в результате интегрирования по углам ($d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$):

$$T(x^2; z^2; E) = \frac{2\sqrt{2}}{2\pi} \int d\Omega D(\vec{x}; \vec{z}; E) f(|\vec{z} - \vec{x}|),$$

то вместо уравнения (2) мы получим приближенное уравнение (уравнения (1) и (3) остаются при этом без изменения)

$$M(x^2; E) = -V\sqrt{\lambda} \int_0^\infty \frac{z^2 T(x^2; z^2; E)}{z^2 - E + M(z^2; E)} dz$$

или

$$M(x^2; E) = -V\sqrt{\lambda} \int_0^\infty T(x^2; z^2; E) dz + \\ + V\sqrt{\lambda} \int_0^\infty \frac{-E + M(z^2; E)}{z^2 - E + M(z^2; E)} T(x^2; z^2; E) dz. \quad (5)$$

Уравнение (5) будем решать приближенно, учитывая лишь асимптотические величины порядка $V\sqrt{\lambda}$ и λ и рассматривая интересный для нас случай $x \sim V\sqrt{\lambda}$ и $E \sim \lambda$.

Вместо E и M введем новые величины χ и μ , изменяя масштаб переменных x и z :

$$E = E_0 + \lambda\chi, \quad M(x^2; E) = E_0 + \lambda\mu(\tau^2; \chi), \quad x^2 = \lambda\tau^2, \quad z^2 = \lambda u^2,$$

где

$$E_0 = -V\sqrt{\lambda} \int_0^\infty T(0; z^2; E_0) dz - \lambda l.$$

Величину l мы определим таким образом, чтобы E_0 совпадало с точкой, в которой возникает мнимая часть $M(x^2; E)$. Тогда в этой точке величина $T(0; z^2; E)$ будет еще действительной, но для $E > E_0$ эта величина будет иметь мнимую часть.

Учитывая, что $T(\lambda\tau^2; z^2; E)$ и $T(0; z^2; E)$ отличаются на величину порядка λ ($\tau^2 \sim 1$), а $T(0; z^2; E)$ и $T(0; z^2; E_0)$ отличаются на величину порядка $V\sqrt{\lambda} \cdot \beta V|\chi|$, а также считая β малым и пренебрегая в M величинами по порядку меньше λ , получим для $\tau \sim 1$, $\chi \sim 1$:

$$\mu = T \int_0^\infty \frac{-\chi + \mu}{u^2 - \chi + \mu} du + l, \quad (6)$$

где

$$T = T(0; 0; E_0).$$

Здесь учтено, что $T(0; \lambda u^2; E)$ под интегралом можно заменить на $T(0; 0; E_0)$, так как фактически интегрирование в (6) ведется не до бесконечности, а до $u \sim 1$ (ввиду быстрой сходимости интеграла).

Из уравнения (6) видно, что в пределах заданной точности μ не зависит от τ , если $\tau \sim 1$, поэтому из (6) получаем после интегрирования

$$\mu - l = T \frac{\pi}{2} \sqrt{-\chi + \mu}. \quad (7)$$

Разрешая (7) относительно μ , получим

$$\mu = l + \frac{T^2 \pi^2}{8} + \frac{T\pi}{2} \sqrt{\frac{T^2 \pi^2}{16} - \chi + l}.$$

Согласно сказанному выше величину l мы должны определить таким образом, чтобы подкоренное выражение обращалось в нуль при $\chi = 0$, т. е. положим $l = -\frac{T^2 \pi^2}{16}$, тогда для μ получим

$$\mu = \frac{T^2 \pi^2}{16} + \frac{T\pi}{2} \sqrt{-\chi}. \quad (8)$$

Для $\chi > 0$ в массовом операторе возникает мнимая часть (причинная функция Грина):

$$\mu = \frac{T^2 \pi^2}{16} + i \frac{T\pi}{2} \sqrt{\chi}.$$

Решение уравнения (7) с точностью до величин порядка λ мы провели в методических целях, чтобы на разбираемом простом примере пояснить общую ситуацию, возникающую и для более сложного уравнения (11). Конечно, не учтенные здесь члены в вершинной части дают также вклады порядка λ и даже $\lambda \ln \lambda$.

В этих же методических целях рассмотрим другой способ решения уравнения (7), который хотя и дает представление о поведении массового оператора лишь в непосредственной окрестности точки ветвления, но зато является более общим.

Введем вместо χ параметр $a = -\chi + \mu$. Рассмотрим такие значения χ , для которых мнимая часть μ еще не возникает и величина $a > 0$. Из (7) получим

$$\chi = -a + \frac{T\pi}{2} \sqrt{a} + l. \quad (9)$$

Функция $\chi(a)$ имеет максимум в точке $a_0 = \frac{T^2 \pi^2}{16}$. Выбирая l таким, чтобы максимальное значение χ было равно нулю, получим $l = -\frac{T^2 \pi^2}{16}$.

Разложение $\chi(a)$ вблизи экстремальной точки будет начинаться с квадратичного (отрицательного) члена:

$$\chi(a) = -\frac{4}{T^2 \pi^2} (a - a_0)^2 + \frac{32}{T^4 \pi^4} (a - a_0)^3 + \dots \quad (10)$$

Решая уравнение (10) относительно $a - a_0$ (учитывая малость $|a - a_0|$), получим

$$a - a_0 = \frac{T\pi}{2} \sqrt{-\chi} - \chi.$$

Откуда, используя (9), получаем выражение для массового оператора, совпадающее с (8).

В качестве следующего приближения к системе уравнений (1), (2), (3) рассмотрим уравнение, получающееся из (2), если в вершинной части $\beta\Gamma$ сохранить два члена ряда (4). В этом случае уравнение (2) может быть записано в виде

$$M(x^2; E) = -n\beta^2 \int \frac{d^3z}{(2\pi)^3} D(\vec{x}; \vec{z}; E) G(z^2; E) f(|\vec{z} - \vec{x}|) - \\ - n^2\beta^4 \int \frac{d^3y d^3u}{(2\pi)^6} D(\vec{x}; \vec{x} + \vec{y}; E) G(|\vec{x} + \vec{y}|^2; E) D(\vec{x} + \vec{y}; \vec{u}; E) \times \\ \times G(u^2; E) D(\vec{u}; \vec{u} - \vec{y}; E) G(|\vec{u} - \vec{y}|^2; E) D(\vec{u} - \vec{y}; \vec{x}; E). \quad (11)$$

Второй многократный интеграл в (11) разобьем на две части. Для этого введем величину $q \ll 1$, достаточно слабо зависящую от λ , так, чтобы при $\lambda \rightarrow 0$ всегда выполнялось условие $\sqrt{\lambda} \ll q \ll 1$. (Например, $q \sim \sqrt[4]{\lambda}$.) Первая часть интеграла включает область $y < q$, вторая — область $y > q$.

Рассмотрим интеграл по второй области. Учитывая малость x ($x^2 \sim \lambda$), а также малость E и M ($|E| \ll \sqrt{\lambda}$, $M \ll \sqrt{\lambda}$) во второй области, можно произвести замену $G(s; E) \rightarrow G(s; 0)$. (G_0 — нулевая функция Грина). Учет вклада областей $S \sim \sqrt{\lambda}$, в которых указанную замену сделать нельзя, ведет к поправке в M порядка $\lambda^{3/2}$. Бесконечно малая мнимая добавка, обычно имеющаяся в нулевой функции G_0 , также ничего не дает, так как $y > q$.

В силу малости β в интеграле по второй области ($y > q$) величину D можно заменить на f , так как соответствующая поправка будет порядка $\lambda\beta$.

Интеграл по области $y > q$ при $x=0$, $E=0$ логарифмически расходится при $q=0$. Для вычисления коэффициента при логарифмическом члене асимптотики при $q \rightarrow 0$ достаточно вычислить интеграл по области $q < y < 1$, заменив D на единицу (β мало).

При этом получим

$$-n^2\beta^4 \int_{q < y < 1} \frac{d^3y d^3u}{(2\pi)^6} \frac{1}{y^2} \frac{1}{u^2} \frac{1}{(\vec{y} - \vec{u})^2} = -4\pi^2\lambda \ln \frac{1}{q^2}.$$

Оставшуюся (конечную при $q \rightarrow 0$) часть интеграла по области $y > q$ обозначим $\lambda Q(\lambda)$. Тогда интеграл по области $y > q$ можно представить в виде

$$-4\pi^2\lambda \ln \frac{1}{q^2} + \lambda Q(\lambda).$$

При этом для вычисления $\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lambda Q(\lambda) = Q$ нужно знать лишь явный вид f , так как используется замена $G \rightarrow G_0$, $D \rightarrow f$.

Произведем переход от величин E , M , x к величинам χ , μ , τ :

$$E = E_0 + \lambda\chi; \quad M(x^2; E) = E_0 + \lambda\mu(\tau^2; \chi), \quad x^2 = \lambda\tau^2, \quad y^2 = \lambda\tau^2, \quad (12)$$

где

$$E_0 = -\sqrt{\lambda} \int_0^\infty T(0; z^2; E_0) dz - 4\pi^2\lambda \ln \frac{1}{\lambda} + \lambda Q - \lambda l. \quad (13)$$

Величину l определим опять таким образом, чтобы E_0 совпало с точкой ветвления. Из дальнейшего будет видно, что $l \sim 1$, при $\lambda \rightarrow 0$.

Обратим здесь внимание на важность формулы (13), в которой появился логарифмический по малому взаимодействию член $\lambda \ln \frac{1}{\lambda}$ ($\lambda \sim n^2 \beta^4$). Его наличие в особенности свидетельствует, что результат (13) не может быть получен с помощью обычной теории возмущений.

Для перенормированных величин получим, заменяя во втором интеграле D на f :

$$\begin{aligned} \lambda \mu(\tau^2; \chi) = & \lambda \int_0^\infty \frac{-\chi + \mu(z^2; \chi)}{z^2 - \chi + \mu(z^2; \chi)} T(0; \lambda z^2; E_0) - \\ & - n^2 \beta^4 \int_{y < \frac{q}{V\lambda}} \frac{d^3 y d^3 u}{(2\pi)^6} f(V\lambda y) g(|\vec{\tau} + \vec{y}|^2; \chi) f(V\lambda |\vec{\tau} + \vec{y} - \vec{u}|) \times \\ & \times g(u^2; \chi) f(V\lambda y) g(|\vec{u} - \vec{y}|^2; \chi) f(V\lambda |\vec{u} - \vec{y} - \vec{\tau}|) + 4\pi^2 \lambda \ln \frac{q^2}{\lambda} + \lambda l, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$g(u^2; \chi) = \frac{1}{u^2 - \chi + \mu(u^2; \chi)}.$$

Здесь так же, как в (6), можно заменить $T(0; \lambda z^2; E)$ на $T(0; 0; E_0)$. Во втором интеграле в (14) также можно заменить f на единицу, так как эффективная область интегрирования по u порядка единицы, а верхний предел интеграла по y порядка $\lambda^{-1/4}$. Таким образом, вместо (14) получим, проводя элементарные интегрирования:

$$\begin{aligned} \mu(\tau^2; \chi) = & T \int_0^\infty \frac{-\chi + \mu(z^2; \chi)}{z^2 - \chi + \mu(z^2; \chi)} dz - \int_0^{\frac{q}{V\lambda}} \frac{dy}{\tau} \int_{(\tau-y)^2}^{(\tau+y)^2} ds g(s; \chi) \times \\ & \times \int_0^\infty dz g(z; \chi) \int_{(y-Vz)^2}^{(y+Vz)^2} dv g(v; \chi) + 4\pi^2 \ln \frac{q^2}{\lambda} + l. \end{aligned} \quad (15)$$

Вместо χ и $\mu(\tau^2; \chi)$ введем новый параметр a и новую функцию $\sigma(\tau^2; a)$:

$$-\chi + \mu(0; \chi) = a, \quad -\chi + \mu(\tau^2; \chi) = a + \sigma(\tau^2; a), \quad (16)$$

т. е. $\sigma(0; a) = 0$.

Для упрощения записи введем функцию $F(y; a)$:

$$F(y; a) = 4 \int_0^\infty \frac{dz}{z + a + \sigma(z; a)} \int_{(y-Vz)^2}^{(y+Vz)^2} \frac{dV}{V + a + \sigma(V; a)}. \quad (17)$$

С учетом (16) и (17) уравнение (15) запишется в виде

$$\begin{aligned} a + \sigma(\tau^2; a) + \chi = & T \int_0^\infty \frac{a + \sigma(z^2; a)}{z^2 + a + \sigma(z^2; a)} dz - \\ & - \int_0^{\frac{q}{V\lambda}} dy \frac{1}{4\tau} \int_{(\tau-y)^2}^{(\tau+y)^2} \frac{ds}{s + a + \sigma(s; a)} F(y; a) + 4\pi^2 \ln \frac{q^2}{\lambda} + l. \end{aligned} \quad (18)$$

Используя асимптотическое значение $F(\infty; a) = 8\pi^2$, нетрудно убедиться в том, что уравнение (18) имеет предел при $\frac{q}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow \infty$.

Чтобы получить уравнение для σ , рассмотрим уравнение (18) в случае $\tau = 0$:

$$a + \chi = T \int_0^{\infty} \frac{a + \sigma(z^2; a)}{z^2 + a + \sigma(z^2; a)} dz - \int_0^{\frac{q}{\sqrt{\lambda}}} \frac{y dy}{y^2 + a + \sigma(y^2; a)} F(y; a) + 4\pi^2 \ln \frac{q^2}{\lambda} + l. \quad (19)$$

Вычитая из (18) (19) и переходя к пределу $\lambda \rightarrow 0$, получим асимптотически точное уравнение для определения $\sigma(\tau^2; a)$:

$$\sigma(\tau^2; a) = \int_0^{\infty} dy \left\{ \frac{y}{y^2 + a + \sigma(y^2; a)} - \frac{1}{4\tau} \int_{(\tau-y)^2}^{(\tau+y)^2} \frac{ds}{s + a + \sigma(s; a)} \right\} F(y; a). \quad (20)$$

Уравнение (20) не может быть дальше упрощено, так как оно не содержит малого параметра. Уравнение (20) требует численного решения.

Качественное поведение функций $F(y; a)$ и $\sigma(s; a)$ можно, однако, установить, используя асимптотические по переменным y, s формулы. Функция $F(y; a)$ представляет монотонно возрастающую функцию, причем $F(0; a) = 0$, $F(\infty; a) = 8\pi^2$; функция $\sigma(s; a)$ также монотонно возрастает от нуля и при больших s асимптотически равна $\sigma_{ac}(s; a) = 4\pi^2 \ln s - 8\pi^2$; $\tilde{g}(s; a)$ монотонно убывает до нуля, $\tilde{g}(0; a) = \frac{1}{a}$.

Зная $\sigma(s; a)$, можно определить зависимость χ от a :

$$\chi = -a + T \int_0^{\infty} \frac{a + \sigma(z^2; a)}{z^2 + a + \sigma(z^2; a)} dz - \int_0^{\frac{q}{\sqrt{\lambda}}} \frac{y dy}{y^2 + a + \sigma(y^2; a)} F(y; a) + 4\pi^2 \ln \frac{q^2}{\lambda} + l. \quad (21)$$

При $a = 0$ и $y \rightarrow 0$ $\sigma(y^2; 0) \rightarrow 4 \sqrt[4]{\frac{\pi}{30}} y^{3/2} + 0(y^2)$. Первый интеграл и его производная по a в (21) имеют конечные значения при $a \rightarrow 0$. Второй интеграл в (21) имеет особенность при $a \rightarrow 0$, а именно, помимо константной части в его асимптотике имеется вклад порядка $a \ln \frac{1}{a}$ с положительным коэффициентом. Таким образом, $\frac{\partial \chi}{\partial a} \Big|_{a \rightarrow 0} \rightarrow \infty$. С другой стороны, при $a \rightarrow \infty$ функция $\chi \rightarrow -a$, т. е. функция $\chi(a)$ имеет максимум в некоторой точке $a = a_0$ (см. рис. 1).

Возникает ситуация, полностью аналогичная рассмотренной выше в связи с уравнением (9). Величину l опять определим так, чтобы χ_{\max}

было равно нулю. Тогда разложение функции $\chi(a)$ в окрестности точки a_0 будет начинаться с квадратичного (отрицательного) члена:

$$\chi = -\alpha(a - a_0)^2 + \gamma(a - a_0)^3 + \dots \quad (22)$$

Значения параметров a_0 , l и коэффициентов разложения α , γ можно найти, решая численно уравнение (20) для области значений a , включающей экстремальную точку.

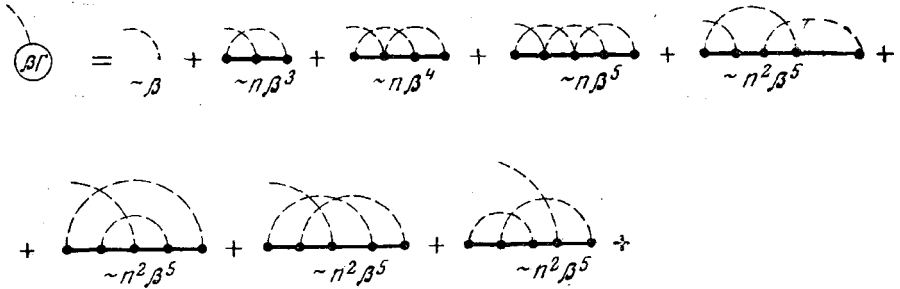


Рис. 2

Все коэффициенты в формуле (22) порядка единицы (даже с учетом упомянутой выше особенности $a \ln \frac{1}{a}$).

Решая (22) относительно $a - a_0$ так же, как ранее, получим

$$a - a_0 = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{-\chi} - \frac{\gamma}{2\alpha^2} \chi + \dots$$

Разлагая, кроме того $\sigma(s; a)$ в ряд около точки a_0 , получим

$$\sigma(s; a) = \sigma_0(s) + \nu(s)(a - a_0) + \rho(s)(a - a_0)^2 + \dots,$$

где

$$\sigma_0(s) = \sigma(s; a_0), \quad \nu(s) = \left. \frac{\partial \sigma(s; a)}{\partial a} \right|_{a=a_0}, \quad \rho(s) = \left. \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma(s; a)}{\partial a^2} \right|_{a=a_0}.$$

Учитывая, что $\mu(s; \chi) = \chi + a + \sigma$, получим

$$\begin{aligned} \mu(s; \chi) &= \mu_0(s) + \frac{1}{\sqrt{\alpha}} (1 + \nu(s)) \sqrt{-\chi} + \\ &+ \left\{ 1 - \frac{\gamma}{2\alpha^2} (1 + \nu(s)) - \frac{1}{\alpha} \rho(s) \right\} \chi + \dots, \end{aligned} \quad (23)$$

где

$$\mu_0(s) = \mu(s; a_0) = a_0 + \sigma(s; a_0).$$

Вычисляя последующие члены разложения (23) и группируя возникающие члены, содержащие четные и нечетные степени $\sqrt{-\chi}$, получим решение вблизи точки ветвления $\chi=0$ в виде

$$\mu(s; \chi) = \mu_1(s; \chi) + b(s; \chi) \sqrt{-\chi}.$$

Причем функции $\mu_1(s; \chi)$ и $b(s; \chi)$ не имеют особенностей в точке $\chi=0$.

Отметим роль остальных неучтенных членов в вершинной части, которые не вошли в уравнение (11). Среди них есть такие, которые дают вклады в M четного порядка $2m$ с множителем $(n\beta^2)^m$. Соответствующие

щие диаграммы M содержат пересекающиеся пунктирные линии, причем каждая пунктирная линия соединяет лишь две обобщенные вершины. Так как эти диаграммы M четного порядка, то все они, согласно правилам вычисления вкладов, входят со знаком минус. Каждая из этих диаграмм в силу своей «сингулярности» (замена $G \rightarrow G_0$ при $x=0$; $E=0$ приводит к расходящемуся вкладу) дает вклад в M порядка $n^2\beta^4 \sim \lambda$. Этот результат легко получить, производя перенормировку (12) и рассматривая, например, соответствующие диаграммы 6-го и 8-го порядков. В шестом порядке таких диаграмм 4, в восьмом порядке — 27.

Ряд, состоящий из вкладов от рассматриваемых диаграмм, не поддается суммированию ввиду сложных топологических свойств диаграмм, т. е. задача суммирования не сводится к решению простой замкнутой системы уравнений. Поэтому исследование M с точностью до величин порядка $n^2\beta^4 \sim \lambda$ связано с исследованием ряда.

Так как при достаточно больших отрицательных энергиях этот ряд сходится, то могут иметь место две ситуации.

1. Сумма ряда $\mu(a) = \mu(0; \chi(a))$ при приближении к некоторому критическому значению $a \rightarrow a_k$ начинает сильно возрастать по абсолютной величине (например, имеется конечный радиус сходимости). Так как при достаточно большом a $\tilde{g}(s; a) = \frac{1}{s + a + \sigma(s; a)} > 0$, то обращение при некотором значении параметра a в некоторой точке s знаменателя \tilde{g} в нуль (без чего невозможно изменение знака $\tilde{g}(s; a)$) приведет к обращению в бесконечность суммы ряда $\mu(a)$ для данного значения a . Это означает, что при $a > a_k$, т. е. в области, где ряд еще сходится $\mu(0; \chi(a)) < 0$, так как вклады всех диаграмм рассматриваемого ряда входят со знаком минус, а подинтегральная функция во всех членах ряда при $\tilde{g} > 0$ существенно положительна. При приближении a к значению a_k $\mu(a)$ быстро уменьшается, возрастая по абсолютной величине, т. е. функция

$$\chi(a) = -a + \mu(0; \chi(a)) \quad (24)$$

имеет в некоторой точке $a = a_0$ максимум.

2. Ряд $\mu(a)$ сходится при всех значениях $a > 0$. Этот случай требует более подробного рассмотрения. Сравним между собой $\mu(a)$ и $\mu(a - \delta a)$ при $0 < \delta a \ll 1$. Значение $\mu(a - \delta a)$ можно получить методом последовательных приближений, используя в качестве нулевого приближения $\sigma(s; a)$. Не трудно убедиться, что при этом в первом приближении $\mu^{(1)}(a - \delta a) < \mu(a)$. Последующие приближения не смогут изменить неравенство, так как их роль уменьшается с уменьшением δa . Таким образом, $\frac{\partial \mu}{\partial a} > 0$.

С другой стороны, на примере уравнения (11) видно, что при $a \rightarrow 0$ $\frac{\partial \mu}{\partial a}$ неограниченно возрастает. Рассматривая уравнение типа (2) с использованием для вершинной части соответствующих диаграмм все более и более высоких порядков и учитывая предполагаемую сходимость ряда $\mu(a)$, можно убедиться, что указанные свойства сохраняются и для всего ряда в целом. Таким образом, для достаточно малых значений a $\frac{\partial \chi}{\partial a} = -1 + \frac{\partial \mu}{\partial a} > 0$, т. е. существует точка $a = a_0$, в которой функция $\chi(a)$ имеет максимум.

Наконец отметим роль всех остальных не учтенных здесь диаграмм вершинной части. Так как эти диаграммы менее «сингулярны» и более высокого порядка малости по β (т. е. дают вклады порядка β^5 и мень-

ше), то они, по крайней мере для достаточно малых β , не могут изменить качественно зависимость $\chi(a)$. Таким образом, в точном соотношении $\chi = \chi(a)$ должен быть максимум, соответствующий точке ветвления (корневая особенность) массового оператора.

Может оказаться, что, начиная с некоторого критического значения β_c , максимум в точной кривой $\chi = \chi(a)$, задаваемой уравнением (24), не имеет места. Этот вопрос требует дополнительного исследования.

Массовый оператор M веществен лишь при $E < E_0$, значения M при $E > E_0$ можно получить аналитическим продолжением, при этом возникает мнимая часть. Таким образом, мы показали, что, по крайней мере для достаточно слабого взаимодействия существует точная формула

$$M(x^2; E) = A(x^2; E) + B(x^2; E) \sqrt{E_0 - E}, \quad E < E_0,$$

$$M(x^2; E) = A(x^2; E) + iB(x^2; E) \sqrt{E - E_0}, \quad E > E_0.$$

где функции $A(x^2; E)$ и $B(x^2; E) > 0$ не имеют особенностей в точке $E = E_0$. Следовательно, нижний край зоны имеет резкую границу, так как мнимая часть массового оператора, определяющая плотность числа состояний, возникает лишь в точке $E = E_0$.

Наличие примесей лишь смещает точку ветвления, изменяя плотность числа состояния вблизи дна зоны.

Асимптотическое выражение ($\beta \rightarrow 0$) для сдвига дна зоны проводимости в приближении слабого взаимодействия наряду с членами порядка β^2 , β^3 содержит член порядка $\beta^4 \ln \beta$. Последний является неаналитическим по константе взаимодействия. Следующие члены рассматриваемого асимптотического выражения порядка β^4 и меньше.

Характерной чертой исследуемой задачи является отсутствие, строго говоря, настоящего элементарного возбуждения с нулевым затуханием на дне зоны, так как мнимая часть массового оператора возникает при более отрицательных энергиях, чем энергии, при которых может возникнуть полюс функции Грина, т. е. $E_0 < E_p$, где E_p определяется условием

$$-E_p + \operatorname{Re} M(0; E_p) = 0.$$

Это утверждение следует из того, что точке ветвления соответствует максимум кривой $\chi = \chi(a)$, который имеет место в точке $a = a_0 > 0$, т. е. при энергии $E < E_0$ (соответствующей значениям $a > a_0$) полюс еще не возникает ($-E + M(0; E) > 0$), тогда как при $E > E_0$ уже имеется мнимая часть массового оператора.

Автор выражает глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и внимание, проявленное к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Edwards S. F. *Philos. Mag.*, **33**, 1020, 1958.
2. Бонч-Бруевич В. Л. В сб. «Физика твердого тела». М., изд. ВИНТИ, 1965.
3. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М., Физматгиз, 1962.
4. Klauder J. R. *Ann. Phys.*, **14**, 43, 1961.
5. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г. «Физика твердого тела», **3**, 3009, 1961.
6. Петерсон В. К. *ДАН СССР*, **180**, 322, 1968.

Поступила в редакцию
1.7 1968 г.

Кафедра
общей физики для физиков