Для упрощения описания ограничиваемся функцией G_+, полагаем $\delta = 0$ и опускаем в дальнейшем индекс «+».

Исходим из уравнения (П.42) с $H = H_0 = -(\hbar^2/2m)\Delta$. Вставляя множитель $1 = \sum_{\mathbf{k}''} |\mathbf{k}''\rangle\langle\mathbf{k}''|$ и переходя к $\mathbf{k}$-представлению, получаем

$$\sum_{\mathbf{k}''} \langle\mathbf{k}|E - H_0|\mathbf{k}''\rangle\langle\mathbf{k}''|G_0|\mathbf{k}'\rangle = \langle\mathbf{k}|\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tag{П.48}$$

или, вследствие $H_0|\mathbf{k}\rangle = (\hbar^2k^2/2m)|\mathbf{k}\rangle$,

$$\langle\mathbf{k}|G_0|\mathbf{k}'\rangle = \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{E - \hbar^2k^2/2m}. \tag{П.49}$$

Для $V \neq 0$ находим, в соответствии с (П.48),

$$\left(E - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\langle\mathbf{k}|G_0|\mathbf{k}'\rangle - \sum_{\mathbf{k}''}\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{k}''\rangle\langle\mathbf{k}''|G|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tag{П.50}$$

или, с учетом (П.49),

$$\langle\mathbf{k}|G|\mathbf{k}'\rangle = \langle\mathbf{k}|G_0|\mathbf{k}'\rangle + \sum_{\mathbf{k}''}\langle\mathbf{k}|G_0|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{k}''\rangle\langle\mathbf{k}''|G|\mathbf{k}'\rangle. \tag{П.51}$$

Для матричных элементов в дальнейшем используем сокращенные обозначения $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E)$, $G_0(\mathbf{k}, \mathbf{k}, E) = G_0(\mathbf{k}, E)$, $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ или также $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, $G_{0\mathbf{k}}$, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Тогда можно формально записать (П.51) в виде

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = G_{0\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + (G_0VG)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tag{П.52}$$

и получить методом итераций *борновский ряд*

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = G_{0\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + (G_0VG_0)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + (G_0VG_0VG_0)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \ldots \tag{П.53}$$

Полностью отсуммировать этот ряд можно только в немногих случаях. Обычно обходятся частичным суммированием, следовательно, приближениями, в которых важно, какие члены в данной проблеме следует удерживать, а какими можно пренебречь.

Определение диагональных элементов $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ для *периодического потенциала* $V(\mathbf{r})$ доставляет мало трудностей. Напомним изложенное в ч. I, § 19 приближение почти свободных электронов, в котором изменение энергии свободных электронов вследствие слабого возмущающего потенциала трактовалось по теории возмущений. Для определения зонной структуры получается секулярный детерминант, который был приведен в (ч. I.19.6) для частной проблемы, а в (ч. I.28.1) — в общем виде.

Разлагаем периодический потенциал в ряд, как в (ч. I.19.1):

$$V(\mathbf{r}) = \sum_m V(\mathbf{K}_m)\exp(i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}). \tag{П.54}$$

Тогда получаем немедленно для $\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\rangle$:

$$\langle\mathbf{k}|V|\mathbf{k}'\rangle = \sum_m V(\mathbf{K}_m)\,\delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k},\mathbf{K}_m}. \tag{П.55}$$

Тем самым борновский ряд (П.53) для диагонального элемента $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$