ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р- 615

17-81-646

РОДРИГЕС КАСТЕЛЬЯНОС
Карлос дэ Хесус

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ АНАЛОГ ВАРИАЦИОННОГО МЕТОДА БОГОЛЮБОВА В ЗАДАЧАХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

Специальность: 01.04.02 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1981

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
профессор В.К.ФЕДЯНИН

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
профессор Н.Н.БОГОЛЮБОВ(мл)

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник Б.И.САДОВНИКОВ

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Ленинградский государственный университет им.А.А.Жданова.

Автореферат разослан "____"____________ 1981 года.

Защита диссертации состоится "____"____________ 1981 года на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета В.И.ЖУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Метод континуального интегрирования в последнее время находит все более широкое применение в теоретической физике и, в частности, в статистической механике /1-4/. На основе формально точных представлений через континуальные интегралы для физических величин в моделях статистической механики оказывается очень удобно исследовать в ряде случаев свойства этих моделей и разрабатывать различные аппроксимационные процедуры вычисления возникающих функциональных квадратур. Особый интерес представляют приближенные методы расчета, непосредственно не связанные с наличием в теории малого параметра, позволяющие выйти за рамки стандартной теории возмущений. К такому классу методов относится функциональный аналог вариационного метода Боголюбова /5-6/.

Среди проблем, при изучении которых необходимо выйти за рамки стандартной теории возмущений и которые очень интенсивно изучаются в последнее время, особое место занимают следующие:

А. Теория фазовых переходов второго рода. При описании системы в окрестности критической точки необходимо отказаться от предположения о малости флуктуаций в системе и учитывать их вклад при исследовании поведения корреляционных функций и термодинамических величин /7-8/.

Б. Проблема полярона. В ионных кристаллах и полярных полупроводниках взаимодействие электронов проводимости с оптическими фононами нельзя считать слабым. Вычисление характеристик (собственной энергии, эффективной массы и радиуса) образующейся квазичастицы (полярона) при конечной температуре во всем интервале параметра связи и исследование линейных и нелинейных явлений электропереноса вне рамок теории возмущений и уравнения Больцмана представляет большой теоретический и практический интерес. Следует отметить, что в настоящее время по этим проблемам существует ряд спорных вопросов /9-10/.

Цель работы. Целью диссертационной работы является применение функционального аналога вариационного метода Боголюбова к некоторым задачам равновесной и неравновесной статистической механики. При этом особое внимание уделяется проблеме электрон-фононного взаимодействия в полярных кристаллах: вычислению характеристик полярона при конечной температуре и изучению поведения электрона в конечном электрическом поле.

Научная новизна. В диссертации предложен новый подход для получения континуальных представлений физических величин широкого класса

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ БИБЛИОТЕКА

моделей статистической механики при произвольных внешних полях. Получены новые точные континуальные представления для эффективной массы и радиуса полярона при конечной температуре, а также для уравнения баланса энергии электрон-фононной системы во внешнем электрическом поле. Точно решена линейная модель полярона Боголюбова. В рамках функционального аналога вариационного метода Боголюбова получены новые результаты для свободной энергии, корреляционных функций и критической температуры моделей ϕ^4 и Изинга, для эффективной массы и радиуса полярона при низких температурах, для дрейфовой подвижности и стационарной скорости полярона во внешнем поле.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на II Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (ОИЯИ, Дубна, август 1981), на семинарах Лаборатории теоретической физики ОИЯИ (Дубна), на семинарах отдела теоретической физики Гаванского университета (Куба), на семинарах Лейпцигского университета (ГДР) и Института физики АН ЧССР.

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано десять печатных работ (список прилагается).

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Развит подход для получения континуальных представлений величин неравновесной статистической механики для широкого класса моделей, построенных на бозе-и спиновых операторах.

2. Проведено исследование моделей ϕ^4 и Изинга с помощью функционального аналога вариационного метода Боголюбова. С использованием вариационных функционалов негауссовского типа получены приближенные выражения для свободной энергии и корреляционных функций. Проведено численное исследование решения уравнения для критической температуры в зависимости от спина для трехмерной модели Изинга.

3. Получены точные континуальные представления для эффективной массы и радиуса полярона при конечной температуре. Доказано, что фейнмановская масса совпадает с массой, определенной через закон дисперсии.

4. В случае, когда частота фононов не зависит от волнового вектора, точно решена линейная модель, предложенная Боголюбовым для полярона. Вычислены энергетический спектр, свободная энергия, эффективная масса, радиус и электропроводность полярона в этой модели. Установлена связь между линейной моделью и одноосцилляторной моделью Фейнмана.

5. В рамках функционального вариационного метода в модели Фрелиха для полярона получены приближенные выражения для эффективной массы и радиуса полярона при низкой температуре и произвольной константе

связи. Показано, что при низкой температуре масса растет и радиус уменьшается с ростом температуры. Проведено сравнение с экспериментальной температурной зависимостью циклотронной массы полярона в кристаллах $CdTe$ и $AgBr$. Получено удовлетворительное согласие теории с экспериментом.

6. Предложен новый подход, основанный на уравнении баланса энергии, для вычисления соотношения между скоростью $\vec{v}$, достигаемой электроном в конечном, статическом электрическом поле, и напряженностью поля $\vec{E}$. Получено точное континуальное представление для уравнения баланса энергии.

7. В рамках функционального аналога вариационного метода Боголюбова получены общие приближенные выражения для функции $\vec{v}=\vec{v}(\vec{E})$ и для дрейфовой подвижности полярона.

Объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, состоящего из 116 наименований. Общий объем диссертации - 133 страницы машинописного текста.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается краткий обзор по использованию метода континуального интегрирования в теоретической физике и кратко излагается содержание диссертационной работы.

Первая глава диссертации посвящена изложению метода получения континуальных представлений для величин равновесной и неравновесной статистической механики и обсуждению функционального аналога вариационного метода Боголюбова.

В первом параграфе получаются континуальные представления для статистической суммы и корреляционных функций моделей, описываемых гамильтонианами типа $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_I$, где $\hat{H}_0$ - одночастичный гамильтониан и $\hat{H}_I$ - гамильтониан взаимодействия, имеющий вид

$$\hat{H}_I=-\frac{1}{4}\sum_{s,s'}J_{ss'}\left[\hat{\mathcal{L}}_s\hat{\mathcal{L}}^+_{s'}+\hat{\mathcal{L}}^+_{s'}\hat{\mathcal{L}}_s\right]. \qquad (1)$$

В качестве примеров рассматриваются частные случаи модели Гейзенберга и моделей, где $\hat{\mathcal{L}}_s=\hat{a}^+_s\hat{a}_s$ и $\hat{a}_s,\hat{a}^+_s$ - операторы Бозе.

Во втором параграфе рассматривается временная эволюция систем, описываемых гамильтонианом типа

$$\hat{H}(t)=\hat{H}_0+e^{\varepsilon t}\hat{H}_I+e^{\varepsilon t}\sum_s h_s(t)\hat{\mathcal{L}}_s+h^*_s(t)\hat{\mathcal{L}}^+_s\ ;\ t>t_0, \qquad (2)$$

где $\hat{H}_0$ - одночастичный гамильтониан; $\hat{H}_I$ дается выражением (1) и $h_s(t)$, $h_s^*(t)$ - неоднородные и зависящие от времени внешние поля. Получается континуальное представление для среднего значения $A(t)$ любой динамической величины системы.

В третьем параграфе обсуждаются стандартные приближения, которые обычно делаются при вычислении интегралов полученного нами типа, и развивается процедура вычисления всех величин в рамках функционального аналога вариационного метода Боголюбова.

Четвертый и пятый параграфы главы I посвящены иллюстрации вариационного метода на примере моделей ϕ^4 и Изинга. В качестве вариационных функционалов используется класс функционалов негауссового типа, для которых функциональные квадратуры вычисляются точно. Вычисляются корреляционные функции, критические индексы и критическая температура. Для критической температуры $\tau_k = \frac{k_Б T_k}{J}$ трехмерной модели Изинга получено уравнение

$$\tau_k^{1/2} = \sqrt{\frac{1}{2\pi g}} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-\frac{\tau_k t^2}{2g}}\, Q_S''(t), \tag{3}$$

где $Q_S(t) = \ln \sum_{m=-S}^{S} e^{mt}$; S - величина спина и g - параметр, который зависит от выбора вариационного функционала. Приводятся численные решения уравнения (3) для разных значений спина S и параметра g .

Вторая глава диссертации посвящена вычислению эффективной массы и радиуса полярона при конечной температуре в рамках функционального аналога вариационного метода Боголюбова.

В первом параграфе дается обзор работ, посвященных изучению проблемы полярона методом континуального интегрирования.

Во втором и третьем параграфах обсуждается определение эффективной массы полярона $m^*(\beta)$ при конечной температуре $(\beta = 1/k_Б T)$. Получено нетривиальное обобщение определения Фейнмана на случай конечной температуры:

$$F(\beta,\vec{u}) = F(\beta) + \frac{1}{2} m^*(\beta)\vec{u}^2 + \dots = -\frac{1}{\beta} \ln \int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-S[\vec{x},\vec{u}]}, \tag{4}$$

$$S[\vec{x},\vec{u}] = \frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau) - \sum_{\vec{k}} \frac{\ell^2(k)}{2\omega\Omega} \iint_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \left\{ \frac{e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|}}{2} + \frac{e^{\omega(\tau_1-\tau_2)}}{e^{\beta(\omega+i\vec{k}\vec{u})}-1} \right\} e^{i\vec{k}[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]} .$$

Здесь $F(\beta)$ - свободная энергия полярона; m - эффективная масса электрона проводимости; ω - частота оптических фононов; Ω - объем системы; $\frac{1}{2\omega}\ell^2(k) = (2\omega)^{3/2} m^{-1/2} \pi\alpha k^{-2}$; α - константа связи. Показано, что при $\beta \to \infty$ получается представление Фейнмана /II/

для энергии и эффективной массы основного состояния полярона и что фейнмановская эффективная масса совпадает с массой, определенной обычным образом через закон дисперсии квазичастицы.

В четвертом параграфе дается определение радиуса полярона $R(\beta)$ при конечной температуре и выводится точное континуальное представление для него:

$$\frac{1}{R(\beta)} = \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k^2} \int_0^\beta d\tau\, \frac{e^{-\omega\tau}}{1-e^{-\beta\omega}} \left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}(\tau)} \right\rangle_S^0 , \tag{5}$$

где

$$\left\langle A[\vec{x}] \right\rangle_S^{\vec{u}} = \frac{\int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, \exp[-S(\vec{x},\vec{u})]\, A[\vec{x}]}{\int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, \exp[-S(\vec{x},\vec{u})]} .$$

Пятый параграф посвящен подробному изучению линейной модели полярона Боголюбова /I2/. Гамильтониан линейной модели приводится к диагональному виду, что позволяет вычислить энергетический спектр, свободную энергию, эффективную массу и электропроводность полярона в этой модели. Устанавливается связь между линейной моделью и одноосцилляторной моделью Фейнмана, вычисляется радиус полярона при конечной температуре. На основе полученного континуального представления для свободной энергии и эффективной массы линейной модели предлагается ее обобщение на случай, когда свободная энергия $F_0(G)$ и эффективная масса $m_0^*(G)$ полярона определяются через

$$F_0(G) + \frac{1}{2} m_0^*(G)\vec{u}^2 = -\frac{1}{\beta} \ln \int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-S_0[\vec{x}]} , \tag{6}$$

$$S_0[\vec{x}] = \frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau) + 2\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dW}{W^2} G(W) \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2\, e^{W(\tau_1-\tau_2)}\, \dot{\vec{x}}(\tau_1)\dot{\vec{x}}(\tau_2) .$$

В частном случае, когда

$$G(W') = \frac{m(v^2-1)W^3}{4} \frac{1}{e^{\beta W'}-1} \left[\delta(W'-W) - \delta(W'+W)\right], \tag{7}$$

выражение (6) приводит к свободной энергии и эффективной массе полярона в одноосцилляторной модели Фейнмана.

В шестом и седьмом параграфах применяется функциональный аналог вариационного метода Боголюбова к вычислению $F(\beta), m^*(\beta)$ и $R(\beta)$. В качестве вариационного функционала используется $S_0[\vec{x}]$, для которого возникающие континуальные интегралы вычисляются точно.

В восьмом параграфе приводятся конкретные формулы для $F(\beta)$, $m^*(\beta)$ и $R(\beta)$ при низкой температуре ($e^{-\beta\omega} \ll 1$):

$$F(\beta)= \frac{3W(v-1)^2}{4v}+\frac{3}{2\beta}\left[\frac{v^2-1}{v^2}-\ln\frac{mv^2}{2\pi\beta}\right]-\frac{\alpha v\omega^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\beta/2}d\tau\ e^{-\omega\tau}g^{-1/2}(\tau),$$

$$m^*(\beta)= m\left\{1+\frac{\alpha\omega^{3/2}v^3}{3\sqrt{\pi}}\int_0^{\beta/2}d\tau\ \tau^2 e^{-\omega\tau}g^{-3/2}(\tau)\right\}, \tag{8}$$

$$R^{-1}(\beta)= \omega v\sqrt{\frac{2m}{\pi}}\int_0^{\beta/2}d\tau\ e^{-\omega\tau}g^{-1/2}(\tau),$$

где $g(\tau)=\tau(1-\frac{\tau}{\beta})+\frac{v^2-1}{Wv}(1-e^{-Wv\tau})$. На основе формул (8) можно вычислить характеристики полярона при конечной температуре и произвольных значениях константы связи α. Для эффективной массы при $\beta\omega \gg 1$ и небольших α получена формула

$$m^*(\beta)=m\left\{1+\frac{\alpha}{6}+\frac{3\alpha}{8\beta\omega}+\frac{2\alpha^2}{81}+0{,}235\frac{\alpha^2}{\beta\omega}\right\}. \tag{9}$$

В девятом параграфе на основе формулы (9) проведено сравнение теоретических предсказаний с экспериментальной температурной зависимостью поляронной циклотронной массы в кристаллах $CdTe$ и $AgBr$. Получено удовлетворительное согласие между теорией и экспериментом и сделан вывод о том, что наблюдаемый рост эффективной массы полярона с температурой при низких температурах является следствием непараболичности поляронной зоны, обусловленной электрон-фононным взаимодействием.

Третья глава диссертационной работы посвящена применению метода континуального интегрирования к изучению явлений электропереноса в полярных кристаллах. Для определенности рассматривается задача о вычислении соотношения между стационарной скоростью $\vec{V}$, достигаемой электроном под влиянием статического, однородного, конечного электрического поля, и напряженностью поля $\vec{E}$.

В первом параграфе дается обзор литературы, посвященной изучению явлений электропереноса в полярных кристаллах. Особое внимание уделяется тем ситуациям, когда метод кинетического уравнения Больцмана и теория линейного отклика Кубо не применимы.

Во втором параграфе обсуждается метод получения соотношения между $\vec{V}$ и $\vec{E}$ на основе уравнений баланса импульса и энергии. В отличие от работы Торнбера и Фейнмана /13/, где было использовано уравнение баланса для импульса, предлагается брать за основу уравнение баланса энергии, позволяющее получить точное соотношение между $\vec{V}$ и $\vec{E}$.

В третьем и четвертом параграфах применяются методы, развитые в главе I для получения точных континуальных представлений статистического оператора системы и уравнения баланса энергии.

В пятом и шестом параграфах обсуждается выбор аппроксимирующего функционала и вычисляются возникающие континуальные интегралы.

В седьмом параграфе получены общие приближенные формулы для функции $\vec{V}=\vec{V}(\vec{E})$ и для дрейфовой подвижности. Все величины выражаются через некоторый импеданс $Z(\omega)$, который определяется на основе вариационного принципа для свободной энергии.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

1. Мощинский Б.В., Родригес К., Федянин В.К. Производящий функционал и функциональный аналог вариационного метода Боголюбова. Теор.и матем.физ., 1980, т.45, №2, с.251-260.
2. Fedyanin V.K., Mochinsky B.V., Rodriguez C. Generating functional and functional analog of the variational principle of Bogolubov. Preprint JINR, E17-12850, Dubna, 1979.
3. Fedyanin V.K., Mochinsky B.V., Rodriguez C. Application of a functional analog of a variational principle of N.N.Bogolubov to the ϕ^4 model. Communication of the JINR,E17-12852,Dubna,1979.
4. Fedyanin V.K., Mochinsky B.V., Rodriguez C. Application of a functional analog of the variational method of Bogolubov to the Ising model. Communication of the JINR, E17-12887, Dubna, 1979.
5. Родригес К., Федянин В.К. Характеристики боголюбовского полярона при конечных температурах. ДАН СССР, 1981, т. 259, № 5, с.1088.
6. Rodriguez C., Fedyanin V.K. Characteristics of Bogolubov's Polaron at Finite Temperatures. Preprint JINR, E17-80-724, Dubna, 1980.
7. Родригес К., Федянин В.К. Характеристики полярона в линейной модели Боголюбова при конечных температурах. Сообщение ОИЯИ, Р17-80-745, Дубна, 1980.
8. Родригес К., Федянин В.К. Значения эффективной массы и радиуса полярона в зависимости от температуры и интенсивности взаимодействия. Препринт ОИЯИ, Р17-81-8, Дубна, 1981.

9. Родригес К., Федянин В.К. К вопросу о зависимости эффективной массы полярона от температуры в экспериментах по циклотронному резонансу. Сообщение ОИЯИ, Р17-81-169, Дубна, 1981.
10. Родригес К., Федянин В.К. II Международный симпозиум по избранным вопросам статистической механики. Дубна, 1981. Сборник аннотаций. ОИЯИ, Д17-81-411, Дубна, 1981, с.39.

ЛИТЕРАТУРА

1. Васильев А.Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Изд-во ЛГУ, Ленинград, 1976.
2. Попов В.Н. Континуальные интегралы в квантовой теории поля и статистической физике. Атомиздат, М., 1976.
3. Фейнман Р.П. Статистическая механика. Изд-во "Мир", М., 1978.
4. Изюмов Ю.А., Кассан-оглы Ф.А., Скрябин Ю.Н. Полевые методы в теории ферромагнетизма. "Наука",М., 1974.
5. Мощинский Б.В. Метод интегрирования в функциональных пространствах для квантовостатистических моделей. ОИЯИ, 17-11491, Дубна, 1978.
6. Мощинский Б.В., Родригес К., Федянин В.К. Производящий функционал и функциональный аналог вариационного метода Боголюбова. Теор. и матем. физ., 1980, т.45, № 2, с. 251-260.
7. Паташинский А.З., Покровский В.П. Флуктуационная теория фазовых переходов. "Наука",М., 1975.
8. Ma S-keng. Modern Theory of Critical Phenomena.Benjamin, London, 1976.
9. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors (ed. by J.T.Devreese). North Holland, Amsterdam, 1972.
10. Devreese J.T. and Evrard R. Linear and Non Linear Transport in Solids. Plenum Press, 1976.
11. Feynman R.P. Slow electrons in a Polar Crystal. Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 660-665.
12. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. (мл.). Кинетическое уравнение для динамической системы,взаимодействующей с фононным полем. Физика элементарных частиц и атомного ядра , 1980, т. II, вып. 2, с. 245-300.
13. Thornber K.K., Feynman R.P. Velocity acquired by an electron in a finite electric field in a polar crystal. Phys. Rev. B, 1970, v. 1, No. 10, p. 4089-4114.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 октября 1981 года.