
К-756

2-80-391

КОЧЕТОВ
Евгений Андреевич

СТРУКТУРНЫЕ И ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ
В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА

Специальность 01.04.02. - теоретическая
и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник

С. П. КУЛЕШОВ

кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник

М. А. СМОНДЫРЕВ

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор

А. Н. ВАСИЛЬЕВ

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник

Н. Е. ТЮРИН

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Институт ядерных исследований АН СССР, Москва.

Автореферат разослан " " _____ 1980 года.

Защита диссертации состоится " " _____ 1980 года на заседании Специализированного совета К047.01.01 Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна, Московская область.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

В. И. КУРАВЛЕВ

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

В последнее время большое внимание уделяется попыткам построения динамических моделей составных частиц. Тенденция рассматривать адроны как сложные образования с элементарными составляющими (кварки, партонны) возродила интерес к моделям теории поля, в которых структура частицы появляется в результате ее взаимодействия с окружающим полем.

Представление о сложной структуре частиц и наличии у частицы возбужденных состояний всегда были основной чертой теории сильной связи. Трудности исследования тех или иных моделей с сильной связью обусловлены необходимостью с самого начала оперировать понятиями, сильно отличающимися от представлений теории свободных полей. Наряду с моделированием структуры частицы, возникающей как основной эффект сильного взаимодействия, любое приближение к собственному вектору системы должно реализовывать представление группы симметрии задачи, поскольку в противном случае невыполнение требуемых законов сохранения делает невозможным суждение о степени приближения к точному вектору состояния.

Строгое и последовательное решение этой проблемы дано Н. Н. Боголюбовым в работе /1/, посвященной исследованию так называемой поляронной системы /2,3/, описывающей взаимодействие нерелятивистской частицы с квантованным полем и определяемой гамильтонианом

$$H = -\frac{\Delta}{2\mu} + \sum_{\vec{k}} (A_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}} + A_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}}^{\dagger} e^{-i\vec{k}\vec{r}}) + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}}. \quad (I)$$

Здесь $a_{\vec{k}}^{\dagger}$ и $a_{\vec{k}}$ - операторы рождения и уничтожения квантов скалярного поля (фононов) с энергией $\omega_{\vec{k}}$ и волновым вектором \vec{k} . $A_{\vec{k}}$ - компоненты Фурье плотности источника, g - константа связи.

Объединенный институт
ядерных исследований
Библиотека

Подчеркнем, что переменные \vec{r} и $a_{\vec{r}}$ реализуют представление абелевой группы трансляций: $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{q}$, $a_{\vec{r}} \rightarrow a_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\vec{r}}$ (\vec{q} - произвольный вектор). Оператор полного импульса системы $\vec{p} = -i\vec{\nabla} + \sum_{\vec{k}} \vec{k} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}$ ($\vec{k} = \vec{c} = 1$) коммутирует с H , что соответствует сохранению полного импульса системы.

С помощью предложенного в работе /1/ канонического преобразования гамильтониана (I) трансляционная инвариантность поляронной системы была учтена до построения теории возмущений по обратной константе связи. Результаты этой работы показывают, что, во-первых, существует большая классическая составляющая бозонного поля, ответственная за создание потенциальной ямы для частицы. Во-вторых, радиус-вектор частицы \vec{r} разбивается на две части: $\vec{r} = \vec{\lambda} + \vec{q}$, причем \vec{q} описывает трансляционное движение потенциальной ямы как целого, а вектор $\vec{\lambda}$ трансляционно инвариантен и описывает колебательное движение частицы внутри потенциальной ямы.

Созданная Н.Н.Боголюбовым инвариантная теория возмущений по обратной константе связи, вскрыв важную роль законов сохранения в задачах о сильном взаимодействии, стимулировала широкое изучение различных квантовополевых моделей с сильной связью. Дальнейшему развитию и обобщению метода Н.Н.Боголюбова посвящены работы А.Н.Тавхелидзе; Н.Е.Туркина, В.К.Федянина, О.А.Хрусталева и др. /4-7/.

Будучи физически ясным и математически безупречным, метод Боголюбова, с точки зрения вычислительной, является довольно трудоемким - необходимо решить сложные нелинейные уравнения. В связи с этим предпринимались попытки использовать иные математические приближения, особое место среди них занимает предложенный Р.Фейнманом /8,9/ функциональный вариационный метод, основанный на приближенном вычислении функциональных интегралов. Однако удачно решая первую часть сформулированной выше проблемы сильной связи - моделирование структуры частицы - метод Фейнмана не учитывает свойств симметрии системы. Как следствие этого в подходе Р.Фейнмана получается неверное выражение для энергии поляронного состояния, близкого к основному, но трансляционно вырожденного. В связи с этим большое значение приобрели попытки развития функциональных вариационных методов, строго учитывающих свойства инвариантности системы и позволяющих тем самым подойти к ре-

шению задач о сильном взаимодействии в рамках техники континуального интегрирования.

Цель работы состоит в изучении полярона как структурного образования и исследовании термодинамики поляронной системы.

Научная новизна и практическая ценность

В диссертации развит новый функциональный вариационный метод, учитывающий свойства симметрии поляронной системы и позволяющий последовательно определить в рамках техники континуального интегрирования эффективную массу поляронного состояния.

На основе предложенного вариационного метода впервые проведено детальное изучение эффектов проявления поляронной структуры, возникающей вследствие сильного взаимодействия частицы с полем. Показано, что перекрытие структур двух квазичастиц вследствие сильного электрон-фононного взаимодействия приводит к существенному понижению основного энергетического уровня и к возрастанию эффективной массы системы, что указывает на возможность реализации своеобразного мешка. Полученное в диссертации выражение для амплитуды рассеяния полярона внешним полем показывает, что внешний потенциал "чувствует" полярон как некоторую квазичастицу с определенными параметрами - внутренней энергией E_0 и эффективной массой $M_{эфф}$. Установлено также, что рассеивающий потенциал сглаживается на малых расстояниях вследствие существования у частицы определенной структуры.

Новым вкладом в теорию является проведенное в диссертации в рамках техники континуального интегрирования последовательное изучение термодинамики поляронной системы.

Впервые получено высокотемпературное разложение средней энергии поляронной системы. Дано определение эффективной массы полярона при ненулевой температуре и исследовано ее высокотемпературное поведение.

Показано, что реакцию поляронной системы на слабое возмущение при ненулевой температуре можно описать в терминах появления у частицы некоторой массы, зависящей от температуры. Проведено сравнение этой массы с эффективной массой полярона.

Для защиты выдвигаются следующие основные результаты, полученные в диссертации:

1. Развита новая функциональная вариационная методика, учитывающая трансляционную инвариантность поляронной системы, что позволяет получить выражение для энергии поляронного состояния, близкого к основному, но трансляционно вырожденного. Показано, что с помощью некоторой модификации предложенного вариационного метода можно оценить энергию связанного состояния полярона в слабом внешнем поле.

2. С помощью развитого вариационного подхода дана оценка основного уровня энергии и эффективной массы двухполяронной системы. Показано, что перекрытие структур двух квазичастиц ведет к существенному понижению основного энергетического уровня и к возрастанию эффективной массы системы.

3. На основе обобщения функционального вариационного метода найдена зависимость амплитуды рассеяния полярона внешним полем от его структуры. Установлено, что рассеивающий потенциал сглаживается на малых расстояниях вследствие наличия у частицы определенной структуры.

4. Получено высокотемпературное разложение средней энергии поляронной системы. Найдено точное выражение для энергии во втором порядке теории возмущений при конечных температурах. Исходя из общих термодинамических соотношений дано определение эффективной массы полярона при ненулевой температуре, исследовано ее высокотемпературное поведение.

5. Показано, что реакцию системы на слабое электрическое поле можно описать в терминах появления у полярона массы, зависящей от температуры. Получена оценка этой массы при различных соотношениях между константой связи частицы с полем и температурой системы. Проведено сравнение с эффективной массой полярона, определенной из термодинамических соотношений.

Апробация диссертации

Основные материалы диссертации неоднократно докладывались на семинарах Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований, на сессиях ОЯФ АН СССР; обсуждались на X Международной школе молодых ученых по физике высоких

энергий (Баку, 1976 г.) и на XPI Международной школе по теоретической физике в Карпаче (ПНР, 1980).

Публикации

По результатам диссертации опубликовано 5 статей.

Объем работы

Диссертация состоит из введения, трех глав основного текста и заключения, содержит 81 страницу машинописного текста и библиографический список литературы из 68 названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приведен обзор затрагиваемых в диссертации проблем и дается обоснование их значения для решения задачи о сильном взаимодействии частицы с окружающим полем.

Первая глава диссертации посвящена изучению поляронного состояния при нулевой температуре. Исследование проводится на основе развитого в этой главе нового функционального вариационного подхода, учитывающего трансляционную инвариантность поляронной системы. Показано, что учет инвариантности приводит, как и в методе Боголюбова, к естественному выделению в координате частицы флуктуационной части, ответственной за образование у частицы некоторой структуры. Определены параметры такого структурного образования - внутренняя энергия квазичастицы и ее эффективная масса.

В первом параграфе показано, что для исследования поляронной системы при нулевой температуре достаточно рассмотреть вакуумное среднее $G(\tau) = \langle 0 | e^{-\tau H} | 0 \rangle$, где гамильтониан системы задается соотношением (I), а τ - вещественный параметр. Использование методов функционального интегрирования [10] позволяет представить $G(\tau)$ в виде интеграла по траекториям.

Для приближенного вычисления возникающих континуальных интегралов предлагается аппроксимировать поляронную систему действием вида

$$S' = - \frac{\mu}{2} \int_0^{\tau} ds \left(\dot{\vec{X}}(s) - \frac{i\vec{p}}{M} \right)^2 - \frac{C\mu}{2} \int_0^{\tau} ds_1 ds_2 e^{-W|s_1 - s_2|} \quad x$$

$$\times \left[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2) - \frac{i\vec{p}}{M}(s_1 - s_2) \right]^2, \quad (2)$$

где C , W и M — вариационные параметры, определяемые из условия минимума энергии, \vec{p} — полный импульс системы, являющийся в силу закона сохранения C — числом. Отметим, что при $M = \infty$ действие (2) переходит в аппроксимацию Р.Фейнмана /8,9/, которая, вообще говоря, приводит к неправильному выражению для эффективной массы полярона. Именно конечность параметра M позволяет нам рассматривать переменную $\vec{x}(s)$ в (2) как отклонение от движения системы как целого со средней скоростью $-i\vec{p}/M$ (появление мнимой единицы связано с использованием нами мнимого времени τ) и учесть тем самым трансляционное движение полярона. Из теории Н.Н.Боголюбова следует, что в результате сильного взаимодействия частицы с полем возникает потенциал со сдвинутым аргументом, причем сдвиг отражает квантовые флуктуации /4/. Видно, что S' имеет именно такой вид. На основе аппроксимации (2) получено выражение для энергии поляронной системы вблизи основного состояния /11/:

$$\xi(\vec{p}) = E_0 + \frac{\vec{p}^2}{2m_{\text{эфф}}} + O(\vec{p}^4). \quad (3)$$

Приведены численные результаты для собственной энергии полярона E_0 и эффективной массы $m_{\text{эфф}}$, справедливые при любой константе связи частицы с полем.

Показано далее, что некоторая модификация функционального вариационного подхода, связанная со слабым возмущением траектории квазичастицы внешним потенциалом, позволяет оценить энергию связанного состояния полярона в слабом внешнем поле, не способном разрушить его структуру. Отметим, что электрон, взаимодействующий с колебаниями кристаллической решетки, ведет себя в слабом внешнем поле как некоторая квазичастица с внутренней энергией E_0 и эффективной массой $m_{\text{эфф}}$ /12/.

В заключение данного параграфа обсуждается физический смысл предложенного вариационного метода. Подчеркнем, что использование в рамках техники функционального вариационного подхода аппроксимирующего действия вида (2) показывает, что аналогично тому, как это происходит в теории полярона Н.Н.Боголюбова, последователь-

ный учет трансляционной инвариантности системы приводит к естественному разбиению координаты частицы на трансляционную и флуктуационную части. При этом квантовые флуктуации координаты частицы, обусловленные ее взаимодействием с облаком виртуальных фононов, ответственны за образование у частицы определенной структуры. В случае сильного электрон-фононного взаимодействия эта структура, как видно из (2), моделируется потенциалом осцилляторного типа, что указывает на когерентную природу вектора состояния системы /15,16/.

Исследование эффектов, связанных с явным проявлением структуры полярона, составляет содержание второго и третьего параграфов первой главы диссертации.

Во втором параграфе рассматривается задача о связанном состоянии двух поляронов, взаимодействующих посредством обмена квантами скалярного поля — фононами. На основе развитого в § I вариационного метода оценивается основной уровень энергии и эффективная масса двухполяронной системы. Интенсивное взаимодействие частиц, осуществляющееся посредством фононного обмена, приводит к существенному изменению энергии основного уровня и эффективной массы по сравнению с соответствующими характеристиками системы без обменного взаимодействия. Возникающие в результате сильной связи структуры частиц перекрываются, трансформируясь в новую квазичастицу, что указывает на возможность реализации своеобразного мешка.

На основе дальнейшего обобщения предложенного в § I функционального вариационного метода в третьем параграфе изучается зависимость амплитуды рассеяния полярона внешним полем от его структуры. Показано, что рассеяние полярона на слабом потенциале эффективно сводится к рассеянию частицы массы $m_{\text{эфф}}$ на сглаженном потенциале

$$V_{\text{эфф}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\rho)^{3/2}} \int d\vec{r}_1 V(\vec{r}_1) \exp\left[-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_1)^2}{2\rho}\right],$$

где $V(\vec{r})$ — внешний потенциал, а ρ — некоторая функция параметров задачи ($\rho \ll 1$). Отметим, что сглаживание потенциала вследствие существования у частицы определенной структуры приводит к некоторому повышению энергии связи частицы в поле $V_{\text{эфф}}(\vec{r})$ по сравнению с энергией связи частицы в поле $V(\vec{r})$.

Вторая и третья главы диссертации посвящены исследованию термодинамики поляронной системы.

Во второй главе изучается высокотемпературное поведение средней энергии и эффективной массы полярона.

Первый параграф содержит постановку задачи. Подчеркнем, что при температуре кристалла, отличной от нулевой, частица взаимодействует как с виртуальными, так и с реальными возбуждениями поля, причем именно взаимодействие с реальными фононами приводит к установлению в системе состояния термодинамического равновесия, которое в дальнейшем и рассматривается. При нулевой температуре все реальные фононы "заморожены", флуктуации термодинамических наблюдаемых исчезают, и полярон описывается некоторым квантовомеханическим состоянием. В случае же температуры, отличной от нуля, зависимость среднего числа реальных фононов от температуры приводит к зависимости от температуры средней энергии и эффективной массы полярона.

Исследование поляронной системы при ненулевой температуре осуществляется с помощью статистической суммы $Z = \int \rho e^{-\tau H}$, заменяющей вакуумное среднее $\langle \rho | e^{-\tau H} | \rho \rangle$, использованное в главе I при изучении поляронного состояния в случае нулевой температуры. Статистическая сумма системы позволяет определять все ее характеристики, в частности, среднюю энергию ξ :

$$\xi = - \frac{\partial}{\partial \tau} \ln \int \rho e^{-\tau H} = \frac{\int \rho (H e^{-\tau H})}{\int \rho e^{-\tau H}}, \quad (4)$$

где H - гамильтониан системы, а τ обратно пропорционально температуре системы ($\tau = 1/k\theta$).

Во втором параграфе на основе континуального представления для статсуммы Z получено высокотемпературное разложение средней энергии системы ξ . В частности, найдено точное выражение для энергии во втором порядке теории возмущений при конечных температурах.

Третий параграф посвящен исследованию высокотемпературного поведения эффективной массы полярона. Для определения поляронной массы при конечной температуре необходимо перейти от канонического распределения $\exp[-\tau H]$, использовавшегося во втором параграфе, к большому каноническому распределению $\exp[-\tau(H - \vec{\lambda} \vec{P})]$, которое соответствует фиксации среднего импульса системы

($\vec{\lambda}$ - обычный в большом каноническом распределении множитель Лагранжа). Примем также во внимание, что при температуре, отличной от нуля, в системе существуют реальные фононы, как взаимодействующие, так и не взаимодействующие с частицей. Эти фононы переносят определенную долю полного импульса системы; обозначим через \vec{P}_f средний импульс, переносимый ими. Тогда на долю собственно полярона остается импульс $\vec{P} - \vec{P}_f$, так что за массу полярона принимается коэффициент $M_{эфф}$, входящий в член вида $(\vec{P} - \vec{P}_f)^2 / 2m_{эфф}$ в выражении для средней энергии системы. Заметим, что в случае нулевой температуры $\vec{P}_f = 0$.

С помощью континуального представления для статистической суммы $Z(\vec{\lambda}) = \int \rho \exp[-\tau(H - \vec{\lambda} \vec{P})]$ определяется средняя энергия системы как функция полного импульса \vec{P} . Использование затем некоторой процедуры выделения среднего импульса реальных фононов \vec{P}_f позволяет получить выражение для эффективной массы полярона при фиксированной температуре. Проведено исследование высокотемпературного поведения этой массы, которое вполне соответствует физической картине взаимодействия частицы с фононным полем.

Одной из классических задач в теории полярона является изучение его поведения в переменном электрическом поле. Основным интересом представляет при этом вычисление подвижности полярона и функций отклика (импеданса и адмиттанса). Среди используемых методов наиболее фундаментален подход Н.Н.Боголюбова, основанный на обобщенном кинетическом уравнении электрон-фононной системы, переходящем при надлежащих аппроксимациях в уравнение Больцмана для полярона [13,14].

В третьей главе диссертации изучается реакция поляронной системы при конечной температуре на постоянное электрическое поле. Не ставя задачу о нахождении подвижности или функций отклика, мы интересуемся сдвигом средней энергии системы вследствие ее взаимодействия с внешним полем. В слабых полях реакцию системы можно описать в терминах появления у полярона массы, зависящей от температуры.

В первом параграфе система, определяемая гамильтонианом

$$H(\vec{E}) = H - \vec{E} \cdot \vec{r}$$

(H - гамильтониан поляронной системы (I), а \vec{E} - наложенное электрическое поле), исследуется по теории возмущений в предположении малости константы связи частицы с полем.

На основе континуального представления для статистической суммы $Z(\vec{E}) = \int \rho e^{-\tau H(\vec{E})}$ получено выражение для средней энергии $\bar{\epsilon}$, определяемой соотношением (4). Показано, что сдвиг средней энергии в слабом внешнем поле можно интерпретировать как следствие появления у полярона массы M , зависящей от температуры. Получено явное выражение для этой массы, справедливое при любых температурах.

Во втором параграфе на основе функционального вариационного метода, развитого в первой главе диссертации, дается оценка массы, определяемой по сдвигу средней энергии, справедливая в области любых значений константы связи частицы с фоновым полем. В частности, в предельном случае слабого электрон-фононного взаимодействия воспроизводятся результаты предыдущего параграфа.

Отметим, что масса M , определяемая по сдвигу средней энергии поляронной системы в слабом поле, разумеется, отличается от эффективной массы полярона, введенной в главе II, т.к. внешнее поле "чувствует" существующие в системе реальные фононы.

В третьем параграфе проведено сравнение массы M с эффективной массой полярона $M_{эфф}$, определенной из термодинамических соотношений.

В заключении кратко перечислены основные результаты, полученные в диссертации.

Литература

1. Н.Н.Боголюбов. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем. Избранные труды, т.2. Научная думка, Киев, 1970, с. 499-520.
2. H.Fröhlich, H.Pelzer, S.Zienau. Properties of Slow Electrons in Polar Materials. Phil.Mag., 1950, v. 41, p. 221-242.
3. С.И.Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, М., 1951.
4. Е.П.Солодовникова, А.Н.Тавхелидзе, О.А.Хрусталева. Осцилляционные уровни частицы как следствие сильного взаимодействия с полем. ТМФ, 1972, т. 10, с. 162-181.

5. Е.П.Солодовникова, А.Н.Тавхелидзе, О.А.Хрусталева. Преобразование Н.Н.Боголюбова в теории сильной связи II. ТМФ, 1972, т. II, с. 317-330.
6. V.K.Pedyanin, B.V.Mochinsky, C.Rodriguez. Generating Functional and Functional Analog of the Variational Principle of N.N. Bogolubov. Dubna, 1979. (Preprint / JINR, E17-12850).
7. Н.Е.Тюрин, О.А.Хрусталева. Рассеяние частиц с учетом взаимодействия со скалярным квантованным полем. ТМФ, 1974, т. 20, с. 3-17.
8. R.P.Feynman. Slow Electrons in a Polar Crystal. Phys.Rev., 1955, v. 97, p. 660-665.
9. Р.Фейнман. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
10. Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков. Введение в теорию квантованных полей. 3 изд. "Наука", М., 1976.
11. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. Исследование модели полярона методом функционального интегрирования. ТМФ, 1975, т. 25, с. 30-36.
12. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. Полярон во внешнем поле. Дубна, 1976. (Сообщение / ОИЯИ, P2-10234).
13. N.N.Bogolubov. Kinetic Equations for the Electron-Phonon System. Dubna, 1978, 70 p. (Comm./JINR, E17-11822).
14. Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.). Кинетическое уравнение для динамической системы, взаимодействующей с фоновым полем. ЭЧАЯ, 1980, т. II, вып. 2, с. 245-300.
15. V.A.Matveev, A.N.Tavkhelidze. Coherent State Method in the Problems of High Energy Hadron Interactions. Dubna, 1970. (Comm. / JINR, E2-5141).
16. С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. Квантовые флуктуации и структура частиц в модели теории поля. ТМФ, 1978, т. 34, с. 291-301.

Результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. Полярон как модель протяженной частицы. Труды X Межд. школы молодых ученых, Баку, 1976. ОИЯИ, Д2-10533, Дубна, 1977.
2. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, В.А.Матвеев, М.А.Смондырев. Приближение сильной и слабой связей в задаче двух поляронов. ТМФ, 1977, т. 30, с. 183-189.

3. Е.А.Кочетов. Рассеяние полярона внешним полем. Дубна, 1980. (Сообщение /ОИЯИ, Р2-80-305).
4. Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев. Разложения по обратным степеням температуры в модели полярона. Дубна, 1980. (Препринт / ОИЯИ, Р2-80-268).
5. Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев. Полярон при конечной температуре во внешнем электрическом поле. Дубна, 1980. (Препринт / ОИЯИ, Р2-80-328).

Рукопись поступила в издательский отдел
6 июня 1980 года.