сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-80-745

К.Родригес, В.К.Федянин

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛЯРОНА В ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ БОГОЛЮБОВА ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

1980

I. Определение линейной модели

Рассмотрим гамильтониан Фрёлиха, описывающий взаимодействие электрона с продольными оптическими фонами в ионном кристалле /I/:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\sum_{\vec{k}}\omega\left(\hat{a}^+_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right)+\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}(k)}{\sqrt{2\omega\Omega}}\left(\hat{a}_{\vec{k}}+\hat{a}^+_{-\vec{k}}\right)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (I.I)$$

Если в гамильтониане (I.I) разложить $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ в ряд Тейлора и сделать преобразование

$$\hat{a}_{\vec{k}}\to\hat{a}_{\vec{k}}-\frac{\mathcal{L}(k)}{\omega\sqrt{2\omega\Omega}},$$

то получаем

$$\hat{H}=-\frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega^2}+\frac{\hat{p}^2}{2m}+\sum_{\vec{k}}\omega\left(\hat{a}^+_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right)+\sum_{\vec{k}}\frac{i\mathcal{L}(k)(\vec{k}\cdot\vec{r})}{\sqrt{2\omega\Omega}}\left(\hat{a}_{\vec{k}}+\hat{a}^+_{-\vec{k}}\right)+$$

$$+\left(\frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{k^2\mathcal{L}^2(k)}{3\omega^2}\right)r^2-\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}(k)}{\sqrt{2\omega\Omega}}\frac{(\vec{k}\cdot\vec{r})^2}{2}\left(\hat{a}_{\vec{k}}+\hat{a}^+_{-\vec{k}}\right)+\cdots. \quad (I.2)$$

Сохраняя первые четыре слагаемые и заменяя квадратичные члены эффективным потенциалом $\frac{r^2}{2\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{k^2\mathcal{L}^2(k)}{3\omega^2}$, получаем приближенный гамильтониан

$$\hat{H}'=-\frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega}+\frac{\hat{p}^2}{2m}+\sum_{\vec{k}}\omega\left(\hat{a}^+_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right)+\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}^2(k)k^2}{3\omega^2\Omega}\frac{r^2}{2}+$$

$$+\,i\sum_{\vec{k}}\frac{\mathcal{L}(k)}{\sqrt{2\omega\Omega}}(\vec{k}\cdot\vec{r})\left(\hat{a}_{\vec{k}}+\hat{a}^+_{-\vec{k}}\right).$$

Гамильтониан $\hat H'$ описывает осциллятор, взаимодействующий простым образом с фононами, причем потенциальная яма, в которой находится осциллятор, определена параметрами взаимодействия с фононным полем. Гамильтониан (I.2) и кладется в основу линейной модели:

$$\hat H_0 = \frac{\hat p^2}{2m} + \frac{1}{2}\gamma^2 r^2 + \sum_{\vec k} W\left(\hat a^+_{\vec k}\hat a_{\vec k} + \frac{1}{2}\right) + i\sum_{\vec k}\frac{\text{Л}(k)(\vec k\cdot\vec r)}{\sqrt{2W\Omega}}\left(\hat a_{\vec k} + \hat a^+_{-\vec k}\right),$$

$$\gamma^2 = \frac{1}{\Omega}\sum_{\vec k}\frac{k^2\text{Л}^2(k)}{3W^2}. \qquad (I.3)$$

Такая модель была предложена Боголюбовым[2] и исследована при изучении кинетики движения полярона в электрическом поле. Отметим, что W и $\text{Л}(k)$ (I.3) не обязательно совпадают с ω и $\mathcal{L}(k)$. Они могут быть использованы в качестве вариационных параметров, чтобы оптимально (в смысле наилучшей оценки для свободной энергии) аппроксимировать модель Фрёлиха гамильтонианом (I.3). Связь между линейной моделью и моделью, использованной Фейнманом в[3-5], будет установлена в параграфе 5.

Из способа получения гамильтониана (I.2) можно ожидать, что линейная модель хорошо аппроксимирует взаимодействие электрона с длинноволновыми фононами, фигурирующими в (I.I). Помимо этого модель (I.3), как было отмечено в[2], допускает точное решение и сохраняет несколько основных особенностей гамильтониана Фрёлиха, к обсуждению которых мы и переходим.

2. Свойства линейной модели

В работе[2] было показано, что:

а) гамильтониан (I.3) инвариантен относительно преобразования

$$\vec r \Rightarrow \vec r + \vec a\,;\quad \hat a_{\vec k} \Rightarrow a_{\vec k} + i\,\frac{\text{Л}(k)(\vec k\cdot\vec a)}{W\sqrt{2W\Omega}}\,; \qquad (2.I)$$

б) инвариантность относительно преобразования (2.I) приводит к сохранению вектора $\vec{\mathcal{P}}_0$, коммутирующего с $\hat H_0$:

$$\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0 = \hat{\vec p} - \sum_{\vec k}\frac{\vec k\,\text{Л}(k)}{W\sqrt{2W\Omega}}\left(\hat a_{\vec k} + \hat a^+_{\vec k}\right); \qquad (2.2)$$

в) если учесть, что в присутствии однородного электрического поля $\vec E(t)$ гамильтониан системы имеет вид $\hat H_0 = \hat H_0 - e\vec E(t)\cdot\vec r$, то

$$\frac{d\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0}{dt} \equiv i\left[\hat H_0, \hat{\vec{\mathcal{P}}}_0\right] = -e\vec E(t); \qquad (2.3)$$

г) каноническое преобразование

$$\hat a_{\vec k} = \hat b_{\vec k} - i\,\frac{(\vec k\cdot\vec r)\text{Л}(k)}{W\sqrt{2W\Omega}}\,;\quad \hat a^+_{\vec k} = \hat b^+_{\vec k} + i\,\frac{(\vec k\cdot\vec r)\text{Л}(k)}{W\sqrt{2W\Omega}}\,;$$

$$\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0 = \hat{\vec p} - \sum_{\vec k}\frac{\vec k\,\text{Л}(k)}{W\sqrt{2W\Omega}}\left(\hat b_{\vec k} + \hat b^+_{\vec k}\right) \qquad (2.4)$$

позволяет избавиться от $\vec r$ и записать $\hat H_0$ в представлении "полного импульса" $\vec{\mathcal{P}}_0$:

$$\hat H_0 = \frac{\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0^{\,2}}{2m} + \sum_{\vec k} W\left(\hat b^+_{\vec k}\hat b_{\vec k} + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\frac{2}{m}}\sum_{\vec k}\vec\lambda(\vec k)\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0\left(\hat b_{\vec k} + \hat b^+_{\vec k}\right) + \sum_{\vec k\vec k'}\vec\lambda(\vec k)\cdot\vec\lambda(\vec k')\left(\hat b_{\vec k} + \hat b^+_{\vec k}\right)\left(\hat b_{\vec k'} + \hat b^+_{\vec k'}\right), \qquad (2.5)$$

где

$$\vec\lambda(\vec k) = \frac{\vec k\,\text{Л}(k)}{2W\sqrt{mW\Omega}}.$$

Пусть теперь $\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)$ и $|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle$ - собственные значения и собственные векторы гамильтониана $\hat{H}_0$; здесь $\vec{\mathcal{P}}_0$ - полный импульс, а η обозначает набор остальных квантовых чисел.

$$[\hat{H}_0-\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)]|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle=0,$$
$$\langle\eta,\vec{\mathcal{P}}_0|\eta',\vec{\mathcal{P}}_0'\rangle=\delta_{\eta\eta'}\,\delta_{\vec{\mathcal{P}}_0,\vec{\mathcal{P}}_0'}. \qquad (2.6)$$

В выражении (2.6) $\vec{\mathcal{P}}_0$ можно считать С -числом; дифференцируя по $\vec{\mathcal{P}}_0$, получаем

$$\left[\frac{\partial\hat{H}_0}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}-\frac{\partial\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}\right]|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle+[\hat{H}_0-\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)]\frac{\partial}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle=0$$

и с учетом (2.6)

$$\langle\eta,\vec{\mathcal{P}}_0|\frac{\partial\hat{H}_0}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle=\frac{\partial\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}.$$

Но согласно (2.4),(2.5)

$$\frac{\partial\hat{H}_0}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}=\frac{\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0}{m}+\sqrt{\frac{2}{m}}\sum_{\vec{k}}\vec{\lambda}(\vec{k})(\hat{b}_{\vec{k}}+\hat{b}^+_{\vec{k}})=\frac{\hat{\vec{p}}}{m},$$

что позволяет установить следующее свойство;

д) средняя скорость электрона $\vec{v}(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)$ в состоянии $|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle$ дается следующей формулой:

$$\vec{v}(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)\equiv\langle\eta,\vec{\mathcal{P}}_0|\frac{\hat{\vec{p}}}{m}|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle=\frac{\partial\varepsilon_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)}{\partial\vec{\mathcal{P}}_0}. \qquad (2.7)$$

Аналогичные соотношения получены Боголюбовым в /6/ и для модели Фрёлиха. В случае гамильтониана (I.I) оператор полного импульса дается формулой

$$\hat{\vec{\mathcal{P}}}=\hat{\vec{p}}+\sum_{\vec{k}}\vec{k}\,\hat{a}_{\vec{k}}a_{\vec{k}}.$$

Отметим, однако, что между операторами $\hat{\vec{\mathcal{P}}}$ и $\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0$ существует принципиальное различие. Оператор $\hat{\vec{\mathcal{P}}}$ является оператором макроскопической величины, относящейся ко всему кристаллу и в отсутствие взаимодействия, а $\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0$ в отсутствие взаимодействия совпадает с оператором импульса электрона $\hat{\vec{p}}$ и, в общем случае, является оператором импульса квазичастицы.

3. Диагонализация гамильтониана (2.5)

Гамильтониан (2.5) можно диагонализовать методом канонических преобразований Боголюбова. Пусть

$$\hat{b}_{\vec{k}}=\hat{\alpha}_{\vec{k}}-\frac{\vec{\lambda}(\vec{k})\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0}{Wm^{1/2}\nu^2}\;;\quad\hat{b}^+_{\vec{k}}=\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}-\frac{\vec{\lambda}(\vec{k})\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0}{Wm^{1/2}\nu^2}; \qquad (3.1)$$

$$\nu^2=1+\frac{1}{\Omega}\sum\frac{k^2\Lambda^2(k)}{3mW^4} \qquad (3.2)$$

и операторы $\hat{\alpha}_{\vec{k}}$, $\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}$ удовлетворяют бозевским соотношениям коммутации. Преобразованием (3.I) гамильтониан (2.5) приводится к виду

$$\hat{H}_0=\frac{3W}{4}(\nu^2-1)+\frac{\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0^2}{2m\nu^2}+\sum_{\vec{k}}\frac{W}{2}+\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\left\{S(\vec{k},\vec{k}')\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}\hat{\alpha}_{\vec{k}'}+\frac{1}{2}R(\vec{k},\vec{k}')[\hat{\alpha}_{\vec{k}}\hat{\alpha}_{\vec{k}'}+\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}\hat{\alpha}^+_{\vec{k}'}]\right\}. \qquad (3.3)$$

Квадратичная форма по бозе-операторам

$$\hat{T}=\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\left\{S(\vec{k},\vec{k}')\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}\hat{\alpha}_{\vec{k}'}+\frac{1}{2}R(\vec{k},\vec{k}')[\hat{\alpha}_{\vec{k}}\hat{\alpha}_{\vec{k}'}+\hat{\alpha}^+_{\vec{k}}\hat{\alpha}^+_{\vec{k}'}]\right\}, \qquad (3.4)$$

$$S(\vec{k},\vec{k}')=W\,\delta_{\vec{k},\vec{k}'}+\vec{\lambda}(\vec{k})\cdot\vec{\lambda}(\vec{k}')\;;\quad R(\vec{k},\vec{k}')=\vec{\lambda}(\vec{k})\cdot\vec{\lambda}(\vec{k}') \qquad (3.5)$$

может быть диагонализована методом u-v преобразования Боголюбова (см. /7/). Пусть

$$\hat{\alpha}_{\vec{k}}=\sum_{\vec{k}'}u(\vec{k},\vec{k}')\hat{\beta}_{\vec{k}'}+v(\vec{k},\vec{k}')\hat{\beta}^+_{\vec{k}'}\;;\quad\alpha^+_{\vec{k}}=\sum_{\vec{k}'}u(\vec{k},\vec{k}')\hat{\beta}^+_{\vec{k}'}+v(\vec{k},\vec{k}')\hat{\beta}_{\vec{k}'}, \qquad (3.6)$$

тогда $\hat{T}$ принимает вид

$$\hat{T}=-\sum_{\vec{k},\vec{k}'}E(\vec{k}')|v(\vec{k},\vec{k}')|^2+\sum_{\vec{k}}E(\vec{k})\hat{\beta}^+_{\vec{k}}\hat{\beta}_{\vec{k}}, \qquad (3.7)$$

если $E(\vec{k})$, $u(\vec{k},\vec{k}')$ и $v(\vec{k},\vec{k}')$ удовлетворяют системе уравнений

$$[E(\vec{k})-W]\,u(\vec{k}',\vec{k}) = \lambda(\vec{k}')\cdot\sum_{\vec{k}_1}\vec{\lambda}(\vec{k}_1)[u(\vec{k}_1,\vec{k})+v(\vec{k}_1,\vec{k})] \equiv \lambda(\vec{k}')\cdot\vec{A}(\vec{k}),$$

$$[E(\vec{k})+W]\,v(\vec{k}',\vec{k}) = -\vec{\lambda}(\vec{k}')\cdot\sum_{\vec{k}_1}\vec{\lambda}(\vec{k}_1)[u(\vec{k}_1,\vec{k})+v(\vec{k}_1,\vec{k})] \equiv -\vec{\lambda}(\vec{k}')\cdot\vec{A}(\vec{k}) \qquad (3.8)$$

и условиям ортогональности и нормировки

$$\sum_{\vec{k}_1} u(\vec{k}_1,\vec{k})u(\vec{k}_1,\vec{k}') - v(\vec{k}_1,\vec{k})v(\vec{k}_1,\vec{k}') = \delta_{\vec{k}\vec{k}'},$$
$$\sum_{\vec{k}_1} u(\vec{k}_1,\vec{k})v(\vec{k}_1,\vec{k}') - u(\vec{k}_1,\vec{k}')v(\vec{k}_1,\vec{k}) = 0. \qquad (3.9)$$

Если $\vec{k}$ принимает N значений, существует три решения с $E(\vec{k}_i)=W\nu$ ($i=1,2,3$) и $N-3$ решения с $E(\vec{k})=W$ ($\vec{k}\neq\vec{k}_i$). Действительно, пусть $E(\vec{k}_i)\neq W$, тогда

$$u(\vec{k}',\vec{k}_i) = \frac{\vec{\lambda}(\vec{k}')\cdot A(\vec{k}_i)}{E(\vec{k}_i)-W}\ ; \quad v(\vec{k}',\vec{k}_i) = -\frac{\lambda(\vec{k}')\cdot\vec{A}(\vec{k})}{E(\vec{k}_i)+W}. \qquad (3.10)$$

Из (3.8) следует, что

$$E(\vec{k}_i) = W\nu, \qquad (3.11)$$

а из (3.9) имеем

$$u(\vec{k}',\vec{k}_i) = -\sqrt{\frac{W(\nu+1)}{2\nu(\nu-1)}}\,\vec{\lambda}(\vec{k}')\cdot\vec{e}_i\ ; \quad v(\vec{k}',\vec{k}_i) = \sqrt{\frac{W(\nu-1)}{2\nu(\nu+1)}}\,\vec{\lambda}(\vec{k}')\cdot\vec{e}_i, \qquad (3.12)$$

где $\vec{e}_i$ ($i=1,2,3$) — ортонормальные векторы. Остальные $N-3$ решения соответствуют случаю $E(\vec{k})=W$, и из (3.8) имеем в этом случае

$$v(\vec{k}',\vec{k}) = 0, \quad \vec{k}\neq\vec{k}_i. \qquad (3.13)$$

В таком случае $u(\vec{k}',\vec{k})$ при $\vec{k}\neq\vec{k}_i$ определяются системой $N(N-3)$ уравнений:

$$\sum_{\vec{k}_1}\vec{\lambda}(\vec{k}_1)u(\vec{k}_1,\vec{k}) = 0, \quad \vec{k}\neq\vec{k}_i,$$
$$\sum_{\vec{k}_1}u(\vec{k}_1,\vec{k})u(\vec{k}_1,\vec{k}') = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}, \quad \vec{k},\vec{k}'\neq\vec{k}_i. \qquad (3.14)$$

С учетом (3.11),(3.12),(3.13) имеем для T

$$\hat{T} = -\frac{3W}{4}(\nu-1)^2 + \sum_{\vec{k}}E(\vec{k})\hat{\beta}^+_{\vec{k}}\hat{\beta}_{\vec{k}} \qquad (3.15)$$

и для $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 = \frac{3}{2}W(\nu-1) + \frac{\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0^2}{2m\nu^2} + \sum_{\vec{k}}W\left(\hat{\beta}^+_{\vec{k}}\hat{\beta}_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right) + W(\nu-1)\sum_{i=1}^{3}\hat{\beta}^+_{\vec{k}_i}\hat{\beta}_{\vec{k}_i}. \qquad (3.16)$$

4. Собственные энергии и свободная энергия линейной модели

Согласно (3.16) энергия собственного состояния $|\eta,\vec{\mathcal{P}}_0\rangle$ гамильтониана $\hat{H}_0$ будет равна

$$\mathcal{E}_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0) = \frac{3}{2}W(\nu-1) + \frac{\vec{\mathcal{P}}_0^2}{2m\nu^2} + \sum_{\vec{k}}W\left(\eta_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right) + \sum_{i=1}^{3}W(\nu-1)\eta_{\vec{k}_i}, \qquad (4.1)$$

где $\eta=\{\eta_{\vec{k}}\}$; $\eta_{\vec{k}}=0,1,\dots$.
Средняя скорость электрона в этом состоянии согласно (2.7) выражается формулой

$$\vec{V}(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0) = \frac{\vec{\mathcal{P}}_0}{m\nu^2}, \qquad (4.2)$$

так что

$$\mathcal{E}_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0) = \frac{3}{2}W(\nu-1) + \frac{1}{2}m_0^*\vec{V}^2 + \sum_{\vec{k}}W\left(\eta_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right) + W(\nu-1)\sum_{i=1}^{3}\eta_{\vec{k}_i}, \qquad (4.3)$$

где $m_0^* = m\nu^2$ — эффективная масса квазичастицы. Для статистической суммы имеем

$$Z_0(\beta) = \int\frac{d^3\vec{\mathcal{P}}_0}{(2\pi)^3}\sum_{\{\eta_{\vec{k}}\}}e^{-\beta\mathcal{E}_0(\eta,\vec{\mathcal{P}}_0)} = \prod_{\vec{k}}\left(\frac{e^{-\frac{\beta W}{2}}}{1-e^{-\beta W}}\right)e^{-\beta F_0(\beta)},$$

причем $F_0(\beta)$ дается формулой

$$F_0(\beta)=\frac{3}{2}w(\nu-1)+\frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m\nu^2}+\frac{3}{\beta}\ln\frac{1-e^{-\beta w\nu}}{1-e^{-\beta w}}\ . \qquad (4.4)$$

Используя данное конкретное выражение для $F_0(\beta)$, несложно по обычным формулам термодинамики получить среднюю термодинамическую энергию $U_0(\beta)=\frac{\partial}{\partial\beta}\beta F_0(\beta)$, автоэнергию $U_0(\beta)-\frac{3}{2\beta}$ и другие термодинамические величины квазичастицы.

Для дальнейших применений этих результатов целесообразно вычислить свободную энергию в системе отсчета, двигающейся со скоростью $-\vec{v}$. Гамильтониан принимает вид

$$\hat{H}_0'=\hat{H}_0-\vec{v}\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0\ ,$$

и статистический оператор дается теперь формулой

$$\hat{\rho}_0(\vec{v})=\exp\left\{-\beta(\hat{H}_0-\vec{v}\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0)\right\}.$$

Статистическая сумма вычисляется без труда:

$$S_p\,\hat{\rho}_0(\vec{v})=\prod_{\vec{k}}\left(\frac{e^{-\frac{\beta w}{2}}}{1-e^{-\beta w}}\right)e^{-\beta F_0(\beta,\vec{v})}\ ,$$

$$F_0(\beta,\vec{v})=F_0(\beta)-\frac{1}{2}m^*(\beta)\vec{v}^{\,2}. \qquad (4.5)$$

5. Связь линейной модели Боголюбова с моделью Фейнмана

В работах/3-5,8-10/ в качестве модели для вариационных расчетов в теории полярона была использована модель, в которой электрон полагался связанным не с решеткой, а с некоторой другой "фиктивной частицей" посредством "пружины". Гамильтониан такой модели имеет вид/11/

$$\hat{H}_\phi=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{\hat{p}'^2}{2M}+\frac{1}{2}K|\vec{r}-\vec{r}'|^2, \qquad (5.1)$$

а редуцированный статистический оператор электрона в представлении координат

$$\sigma_\phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\left(2\,\mathrm{sh}\frac{\beta W}{2}\right)^3\int d\vec{r}'\,\langle\vec{r}_1,\vec{r}'|\,e^{-\beta\hat{H}_\phi}\,|\vec{r}_2,\vec{r}'\rangle \qquad (5.2)$$

выражался через континуальный интеграл

$$\sigma_\phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\Omega}\int_{\vec{r}(0)=\vec{r}_2}^{\vec{r}(\beta)=\vec{r}_1}\mathcal{D}\vec{r}\ e^{-S_0[\vec{r}]}\ , \qquad (5.3)$$

где

$$S_0[\vec{r}]=\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\,\dot{\vec{r}}^{\,2}(\tau)+\frac{C}{2}\iint_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\,|\vec{r}(\tau_1)-\vec{r}(\tau_2)|^2\left\{\frac{e^{-W|\tau_1-\tau_2|}}{1-e^{-\beta W}}+\frac{e^{W|\tau_1-\tau_2|}}{e^{\beta W}-1}\right\}, \qquad (5.4)$$

$$W=\sqrt{\frac{K}{M}}\ ;\quad C=\frac{MW^3}{4}\ .$$

Для линейной модели (I.3) соответствующий оператор определяется выражением

$$\sigma_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{\int dQ\,\langle\vec{r}_1,Q|\,e^{-\beta\hat{H}_0}\,|\vec{r}_2,Q\rangle}{\prod_{\vec{k}}\left(\frac{e^{-\frac{\beta w}{2}}}{1-e^{-\beta w}}\right)}\ , \qquad (5.5)$$

где $Q=\{q_{\vec{k}}\}$ – набор координат осцилляторов решетки.

$$\hat{q}_{\vec{k}}=\frac{i}{\sqrt{2w}}(\hat{a}_{\vec{k}}-\hat{a}^+_{\vec{k}})\,;\ \hat{p}_{\vec{k}}=\sqrt{\frac{w}{2}}(a_{\vec{k}}+a^+_{\vec{k}})\,;\ [\hat{q}_{\vec{k}},\hat{p}^+_{\vec{k}}]=i\,\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\,,$$

так что

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}\gamma^2 r^2+\frac{1}{2}\sum_{\vec{k}}(\hat{p}_{\vec{k}}^2+w^2 q_{\vec{k}}^2)+\sum_{\vec{k}}\frac{\Pi(k)}{\sqrt{\Omega}}\vec{k}\cdot\vec{r}(u)\,q_{\vec{k}}(u)\ .$$

Континуальное представление для $\sigma_0(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ получается методом, описанным в/11/:

$$\sigma_0(\vec r_1,\vec r_2)=\frac{1}{\Omega}\,\frac{\displaystyle\int\limits_{\vec r(0)=\vec r_1}^{\vec r(\beta)=\vec r_2}\mathcal{D}\vec r\int\limits_{Q(0)=Q(\beta)}\mathcal{D}Q\;e^{-\int_0^\beta du\,H_0[\vec r(u),Q(u)]}}{\displaystyle\prod_{\vec k}\frac{e^{-\frac{\beta W}{2}}}{1-e^{-\beta W}}}\,,$$

где $H_0[\vec r,Q]=\frac{m\dot{\vec r}^{\,2}}{2}+\frac{1}{2}\delta^2 r^2+\frac{1}{2}\sum_{\vec k}\dot q_{\vec k}^2+W^2q_{\vec k}^2+\sum_{\vec k}\frac{\Pi(k)}{\sqrt{\Omega}}\vec k\cdot\vec r\,q_k$.
Интеграл по $Q(u)$ вычисляется с помощью тождества/II/

$$\int\limits_{q(0)=q(\beta)}\mathcal{D}q\;e^{-\int_0^\beta du\left[\frac{1}{2}\dot q^2+\frac{W^2}{2}q^2+\gamma(u)q\right]}=\frac{e^{\frac{\beta W}{2}}}{e^{\beta W}-1}\exp\left\{\iint\limits_0^\beta\frac{du\,dv}{4W}\gamma(u)\gamma(v)\psi(u-v)\right\},$$

где $\psi(x)=\frac{e^{-Wx}}{1-e^{-\beta W}}+\frac{e^{Wx}}{e^{\beta W}-1}$.

Если ввести теперь $C=\frac{mW^3(\nu^2-1)}{4}$, то приходим к равенству

$$\sigma_0(\vec r_1,\vec r_2)=\sigma_\phi(\vec r_1,\vec r_2)=\frac{1}{\Omega}\int\limits_{\vec r(0)=\vec r_2}^{\vec r(\beta)=\vec r_1}\mathcal{D}\vec r\;e^{-S_0[\vec r]}.$$

Таким образом, линейная модель (I.3) и модель (5.I) при такой связи между параметрами эквивалентны (в том смысле, что приводят к одному и тому же редуцированному оператору плотности). Кроме того, эффективная масса $m\nu^2$ квазичастицы в линейной модели совпадает с суммарной массой $(m+M)$ модели (5.I). Эта масса при значениях параметров ν и W, определенных с помощью вариационного принципа для свободной энергии, была вычислена Осакой/8/ как функция от температуры и принята в качестве оценки эффективной массы полярона.

6. Континуальное представление для $F_0(\beta,\vec v)$

Получим теперь представление для величины $F_0(\beta,\vec v)$ линейной модели через континуальный интеграл. Данное выражение будет использовано нами в другой работе при вычислении соответствующей величины модели Фрёлиха $F(\beta,\vec v)$ вариационным методом.

По определению,

$$e^{-\beta F_0(\beta,\vec v)}=\mathrm{Sp}\,e^{-\beta(\hat H_0-\vec v\cdot\hat{\vec{\mathcal{P}}}_0)}\cdot\left[\prod_{\vec k}\frac{e^{-\frac{\beta W}{2}}}{1-e^{-\beta W}}\right]^{-1}= \qquad (6.1)$$

$$=\int\frac{d^3\vec{\mathcal{P}}_0}{(2\pi)^3}\,e^{-\beta\left[\frac{\mathcal{P}_0^2}{2m}\mp\vec v\cdot\vec{\mathcal{P}}_0\right]}W_0(\vec{\mathcal{P}}_0),$$

где
$$W_0(\vec{\mathcal{P}}_0)=\mathop{\mathrm{Sp}}_{\phi}\,e^{-\beta(\hat H_1+\hat H_2+\hat H_3)}, \qquad (6.2)$$

$$\hat H_1=\sum_{\vec k}W\left(\hat b_k^+\hat b_k+\tfrac{1}{2}\right);\quad \hat H_2=\sum_{\vec k}\sqrt{\frac{2}{m}}\,\vec\lambda(\vec k)\cdot\vec{\mathcal{P}}_0(\hat b_k+\hat b_k^+);\quad \hat H_3=\sum_{\vec k,\vec k'}\vec\lambda(\vec k)\cdot\vec\lambda(\vec k')(\hat b_{\vec k}+\hat b_{\vec k}^+)\times(\hat b_{\vec k'}+\hat b_{\vec k'}^+).$$

Определим обычным образом (см./I2/) производящий функционал:

$$W_g^0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec\xi)=\mathop{\mathrm{Sp}}_{\phi}\,e^{-\beta\hat H_1}T\exp\left\{-\int_0^\beta d\tau\left[\hat H_2(\tau)+g\hat H_3(\tau)+2i\vec\xi(\tau)\cdot\sum_{\vec k}\vec\lambda(\vec k)\left[\hat b_{\vec k}(\tau)+\hat b_{\vec k}^+(\tau)\right]\right],\right. \qquad (6.3)$$

удовлетворяющий уравнению /I2/

$$\frac{\partial W_g^0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec\xi)}{\partial g}=\frac{1}{4}\int_0^\beta d\tau\,\frac{\delta^2W_g^0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec\xi)}{\delta\vec\xi(\tau)\,\delta\vec\xi(\tau)},$$

$$W_0^0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec\xi)=\mathop{\mathrm{Sp}}_{\phi}\,e^{-\beta\hat H_1}T\exp\left\{-\int_0^\beta d\tau\left\{\hat H_2(\tau)+2i\vec\xi(\tau)\cdot\sum_{\vec k}\vec\lambda(\vec k)\left[\hat b_{\vec k}(\tau)+\hat b_{\vec k}^+(\tau)\right]\right\}\right\}.$$

Для $W_0(\vec{\mathcal{P}}_0)=W_1^0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec 0)$ с помощью метода, описанного в/I2/, получим

$$W_0(\vec{\mathcal{P}}_0)=\frac{\int\mathcal{D}\vec\xi\;e^{-\int_0^\beta d\tau\,\vec\xi^2(\tau)}\,W_0^0(\mathcal{P}_0,\vec\xi)}{\int\mathcal{D}\vec\xi\;e^{-\int_0^\beta d\tau\,\vec\xi^2(\tau)}}. \qquad (6.4)$$

Воспользовавшись результатами работы/I3/, можно переписать $W_0^0(\mathcal{P}_0,\vec\xi)$ в виде

$$W_0^\circ(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec{\xi}) = \prod_{\vec{k}} R^\circ_{\vec{k}} \operatorname{Sp}_{\phi}\left\{ e^{-\beta W(\hat{b}^+_{\vec{k}}\hat{b}_{\vec{k}}+\frac{1}{2})} e^{-A^\circ_{\vec{k}}\hat{b}^+_{\vec{k}}} e^{-B^\circ_{\vec{k}}\hat{b}_{\vec{k}}} \right\}, \quad (6.5)$$

где

$$R^\circ_{\vec{k}} = \exp \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \left[\sqrt{\frac{2}{m}}\, \vec{\lambda}(\vec{k})\cdot\vec{\mathcal{P}}_0 + 2i\vec{\xi}(\tau_1)\cdot\lambda(\vec{k})\right]\left[\sqrt{\frac{2}{m}}\,\vec{\mathcal{P}}_0 + 2i\vec{\xi}(\tau_2)\right]\cdot\vec{\lambda}(\vec{k})\, e^{-W(\tau_1-\tau_2)},$$

$$A^\circ_{\vec{k}} = \int_0^\beta d\tau \left[\sqrt{\frac{2}{m}}\,\vec{\mathcal{P}}_0 + 2i\vec{\xi}(\tau)\right]\cdot\vec{\lambda}(\vec{k})\, e^{W\tau},$$

$$B^\circ_{\vec{k}} = \int_0^\beta d\tau \left[\sqrt{\frac{2}{m}}\,\vec{\mathcal{P}}_0 + 2i\vec{\xi}(\tau)\right]\cdot\vec{\lambda}(\vec{k})\, e^{-W\tau}. \quad (6.6)$$

Шпур по фононным переменным в (6.5) вычисляется без затруднений, и мы имеем в итоге

$$W_0(\vec{\mathcal{P}}_0,\vec{\xi}) = \prod_{\vec{k}} \frac{e^{-\frac{\beta W}{2}}}{1-e^{-\beta W}}\, R^\circ_{\vec{k}} \exp\frac{A^\circ_{\vec{k}} B^\circ_{\vec{k}}}{e^{\beta W}-1}. \quad (6.7)$$

Пусть теперь $\vec{v} = -i\vec{u}$; $\vec{\xi}(\tau) = i\frac{\vec{\mathcal{P}}_0}{\sqrt{2m}} - \sqrt{\frac{m}{2}}\,\dot{\vec{x}}(\tau)$; $C = \frac{mW^3(\nu^2-1)}{4}$,

с учетом (6.I),(6.4),(6.6),(6.7) получаем для $F_0(\beta,\vec{v})$ следующее представление через континуальный интеграл:

$$e^{-\beta F_0(\beta,\vec{v})} = \int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\; e^{-\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2 - \frac{2C}{W^2}\int_0^\beta d\tau_1\int_0^{\tau_1} d\tau_2\, \dot{\vec{x}}(\tau_1)\dot{\vec{x}}(\tau_2)\left[\frac{e^{-W(\tau_1-\tau_2)}}{1-e^{-\beta W}} + \frac{e^{W(\tau_1-\tau_2)}}{e^{\beta W}-1}\right]}. \quad (6.8)$$

Интегрируя по частям, можно привести (6.8) к виду

$$F_0(\beta,\vec{v}) = -\frac{1}{\beta}\ln\int_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\; e^{-S_0[\vec{x},\vec{u}]}, \quad (6.9)$$

$$S_0[\vec{x},\vec{u}] = \frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau) + C\iint_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \left\{\frac{1}{2} e^{-W|\tau_1-\tau_2|}\, |\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)|^2 + \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta W(n+1)+W(\tau_1-\tau_2)}\, |\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)-\vec{u}\beta(n+1)|^2\right\}. \quad (6.10)$$

Между выражением (6.9), (6.I0) и представлением для аналогичной величины модели Фрёлиха существует явная формальная аналогия. Как и следовало ожидать, они находятся в том же формальном отношении, как линейная модель Боголюбова (I.3) и модель Фрёлиха (I.I). Выражение (6.I0) для $S_0[\vec{x},\vec{u}]$ можно получить из соответствующего аналога для $S[\vec{x},\vec{u}]$ в модели Фрёлиха, если в последнем разложить фигурирующие там экспоненты до второго порядка по $\vec{x}$, опустить постоянное слагаемое и сделать замену $\omega \to W$; $\alpha(k) \to \Lambda(k)$.

7. Радиус полярона в линейной модели

В рамках линейной модели (I.3) взаимодействие электрона с фононами эквивалентно взаимодействию с фиктивной частицей массы $M = m(\nu^2-1)$, связанной с ним посредством "пружины". Поэтому в качестве радиуса полярона R_0 здесь следует принимать то расстояние от электрона, на котором должна фиксироваться эта фиктивная частица, чтобы ее потенциальная энергия взаимодействия с электроном $\frac{1}{2}\kappa R_0^2$ равнялась среднему значению этой величины.

Согласно (5.I) относительное движение между электроном и фиктивной частицей соответствует трехмерному гармоническому осциллятору с частотой $W\nu$. Тогда для радиуса R_0 имеем

$$R_0^2 = \frac{\sum\limits_{n_1,n_2,n_3=0}^{\infty} e^{-\beta W\nu[n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}]} \int d^3\vec{x}\; \vec{x}^{\,2}\, |\psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{x})|^2}{\sum\limits_{n_1,n_2,n_3=0}^{\infty} e^{-\beta W\nu(n_1+n_2+n_3+3/2)}},$$

где

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{x}) = \left(\frac{mW\nu}{4}\right)^{3/4} e^{-\frac{mW\nu}{2}\vec{x}^2} \frac{H_{n_1}(x_1\sqrt{mW\nu})\,H_{n_2}(x_2\sqrt{mW\nu})\,H_{n_3}(x_3\sqrt{mW\nu})}{\sqrt{2^{n_1+n_2+n_3}\; n_1!\, n_2!\, n_3!}},$$

откуда

$$R_0^2 = 3\,\frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty} e^{-\beta W\nu(n+1/2)} x^2(n)}{\sum\limits_{n=0}^{\infty} e^{-\beta W\nu(n+\frac{1}{2})}}.$$

Здесь $H_n(x)$ - полином Эрмита порядка n и

$$x^2(n) = \frac{1}{2^n n!}\left(\frac{mW\nu}{\pi}\right)^{1/2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2\, e^{-mW\nu x^2} H_n^2(x\sqrt{mW\nu}).$$

Нетрудно показать, что $x^2(n) = (n+\frac{1}{2})/mW\nu$.

Отсюда получаем следующую формулу для радиуса полярона:

$$R_0^2 = \frac{3}{2mW\nu}\, cth\, \frac{\beta W\nu}{2}.$$

При $\beta \to \infty$, $R_0^2 \to \frac{3}{2mW\nu}$, этот результат получен Шульцем/I0/.

Литература

1. Пекар С.И. Исследования по электронной структуре кристаллов. Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва, I95I.

2. Bobolubov N.N. Kinetic equations for the electron-phonon system. Preprint JINR, E17-11822, Dubna, I978.

3. Feynman R.P. Slow electrons in a polar crystal. Phys.Rev., 1955, v.97, No.3, p.660-667.

4. Feynman R.P., Hellwarth R.W., Iddings C.K. and Platzman P.M. Mobility of slow electrons in a polar crystal. Phys.Rev., 1962, v.127, No.4, p.1004-1017.

5. Feynman R.P. and Thornber K.K. Velocity adquired by an electron in a finite electric field in a polar crystal. Phys.Rev. B, 1970, v.1, No.10, p.4099-4114.

6. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, т.2. "Наукова думка", Киев, I970, с.499.

7. Боголюбов Н.Н. Избранные труды,т.2. "Наукова думка", Киев, I970, с.I9.

8. Osaka Y. Polaron state at finite temperature. Progres of Theor. Phys. (Jap.) , 1959, v.22, No.3, p.437-446.

9. Кривоглаз М.А. и Пекар С.И. Метод шпуров для электронов проводимости в полупроводниках. Изв. АН СССР, сер.физ., I957, т.XXI, №I, с. 3-32.

10. Schultz T.D. Slow electrons in polar crystals: self.energy, mass and mobility. Phys. Rev.,1959, v.116, p.526-543.

11. Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", Москва, I978.

12. Fedyanin V.K., Mochinsky B.V., Rodrigues C. Generating Functional and Functional Analog of the Variational Principle of N.N.Bogolubov. Preprint JINR, E17-12850, Dubna, 1979.

I3. Струков В.К., Федянин В.К. "Распутывание" фононных операторов под знаком Т-произведения. Препринт ОИЯИ, PI7-II954, Дубна, I978.

Рукопись поступила в издательский отдел
I8 ноября I980 года.