объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

1585/2-81

30/III-81

P17-81-8

К.Родригес, В.К.Федянин

ЗНАЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ И РАДИУСА ПОЛЯРОНА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ИНТЕНСИВНОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Направлено в "physica status solidi"

1981

I. В в е д е н и е

Взаимодействие с продольными оптическими фононами оказывает существенное влияние на свойства электронов проводимости в ионных кристаллах. После ряда упрощений электрон-фононная система описывается гамильтонианом Пекара-Фрелиха [1,2], который, в обозначениях работы [3], может быть записан в виде

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

$$\alpha(k) = \frac{2e\omega\pi^{1/2}c_0^{1/2}}{k}\ ; \quad \alpha = e^2 c_0 \left(\frac{m}{2\omega}\right)^{1/2}.$$

Обычно описание системы проводится в терминах свободного фононного поля и невзаимодействующей с ним квазичастицы (полярона), характеристики которой (собственная энергия, эффективная масса и радиус) зависят от константы связи α и от температуры T $\left(\beta = \frac{1}{k_Б T}\right)$.

Существует довольно много работ, посвященных вычислению поляронных характеристик (см. [4]). Однако большинство из них ограничивают рассмотрения случаем нулевой температуры. Чтобы сравнить теоретические предсказания с экспериментальными результатами, полученными при конечных температурах (например, с эффективной массой, найденной методом циклотронного резонанса), необходимо уметь оценить температурные поправки к характеристикам полярона в основном состоянии. Знание температурной зависимости радиуса полярона $R(\alpha,\beta)$ позволяет сформулировать критерий применимости модели Пекара-Фрелиха для описания электрон-фононного взаимодействия (радиус полярона должен быть, во всяком случае, больше постоянной решетки).

В работе [3] рассматривался вопрос о вычислении характеристик полярона при конечных температурах методом континуального интегрирования. Определялась свободная энергия полярона $F(\alpha,\beta,\vec{v})$

в системе отсчета, где электрон движется со скоростью $\vec{v}$, и для нее было получено точное континуальное представление

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = -\frac{1}{\beta}\ln\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta}\mathcal{D}\vec{x}\ \exp\left\{-S[\vec{x},\vec{u}]\right\} \quad ; \ \vec{u}=i\vec{v}\ , \qquad (2)$$

где $S[\vec{x},\vec{u}] = \frac{m}{2}\int\limits_0^\beta d\tau\ \dot{\vec{x}}^2(\tau) - \varphi[\vec{x},\vec{u}]$ и

$$\varphi[\vec{x},\vec{u}] = \sum_{\vec{k}}\frac{d^2(k)}{2\omega\Omega}\iint\limits_0^\beta d\tau_1 d\tau_2\left\{\frac{e^{-\omega|\tau_1-\tau_2|}}{2}+\frac{e^{\omega(\tau_1-\tau_2)}}{e^{\beta(\omega+i\vec{k}\cdot\vec{u})}-1}\right\}e^{i\vec{k}\cdot[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]}.$$

При малых $\vec{v}$ имеем

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = F(\alpha,\beta) - \frac{1}{2}m^*(\alpha,\beta)v^2\ ,$$
$$E(\alpha,\beta) = \frac{\partial}{\partial\beta}\beta F(\alpha,\beta) - \frac{3}{2\beta}\ , \qquad (3)$$

где $F(\alpha,\beta)$ и $E(\alpha,\beta)$ – соответственно свободная и собственная энергии полярона, а $m^*(\alpha,\beta)$ – эффективная масса, которая при $T=0°K$ совпадает с массой полярона, определенной Боголюбовым[5]. При $\vec{v}=0$ выражение (2) совпадает с представлением Осаки[6] для свободной энергии, а при $T=0$ и $\vec{v}\neq 0$ оно приводит к известному представлению Фейнмана[7] для энергий и эффективной массы основного состояния. Кстати, это показывает, что боголюбовская и фейнмановская массы совпадают по определению.

В работе[3] радиус полярона определялся следующим образом. Электрон создает вокруг себя распределение поляризационного заряда, и его потенциальная энергия взаимодействия с ним равна V. Тогда поляронный радиус "R" можно определить как то расстояние от электрона, на котором должен находиться суммарный заряд распределения "q", чтобы его потенциальная энергия взаимодействия с электроном равнялась V. Показано, что $q=eC_0$, а для радиуса получено континуальное представление

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)} = \frac{4\pi\omega}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{k^2}\int\limits_0^\beta d\tau\,\frac{e^{-\omega\tau}}{1-e^{-\beta\omega}}\left\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}(\tau)}\right\rangle_S^0\ , \qquad (4)$$

где

$$\langle A\rangle_S^{\vec{u}} = \frac{\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta}\mathcal{D}\vec{x}\ e^{-S[\vec{x},\vec{u}]}A[\vec{x}]}{\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta}\mathcal{D}\vec{x}\ e^{-S[\vec{x},\vec{u}]}}\ .$$

Как известно, интегралы по траекториям в (I) могут быть вычислены только приближенным образом. При $\alpha \ll 1$ мы будем пользоваться теорией возмущения, а при произвольном α-вариационным методом.

2. Вычисление характеристик полярона по теории возмущений

В случае слабой связи ($\alpha \ll 1$), если ограничиться первым порядком по α, имеем

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = -\frac{1}{\beta}\ln \int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau)} \cdot e^{\langle\varphi\rangle_0^{\vec{u}}},$$

где

$$\langle\varphi\rangle_0^{\vec{u}} = \frac{\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau)}\, \varphi[\vec{x},\vec{u}]}{\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau)}}. \tag{5}$$

Интегралы по траекториям, фигурирующие в (5), вычисляются точно /8/:

$$\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-\frac{m}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}^2(\tau)} = \left(\frac{m}{2\pi\beta}\right)^{3/2} e^{-\beta\frac{mu^2}{2}},$$

$$\left\langle e^{i\vec{k}\cdot[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]}\right\rangle_0^{\vec{u}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}(\tau_1-\tau_2) - \frac{k^2}{2m}|\tau_1-\tau_2|\left(1-\frac{|\tau_1-\tau_2|}{\beta}\right)}. \tag{6}$$

Тогда с учетом (2),(5),(6) после некоторых простых преобразований получаем в первом порядке по α:

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m} - \frac{1}{2}mv^2 - \sum_{\vec{k}} \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega\Omega}\int_0^\beta d\tau\, \frac{e^{-\frac{k^2}{2m}\tau\left(1-\frac{\tau}{\beta}\right) - (\omega-\vec{k}\cdot\vec{v})\tau}}{1-e^{-\beta(\omega-\vec{k}\cdot\vec{v})}},$$

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)} = \frac{4\pi\omega}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{k^2}\int_0^\beta d\tau\, \frac{e^{-\omega\tau - \frac{k^2}{2m}\tau(1-\tau/\beta)}}{1-e^{-\beta\omega}}. \tag{7}$$

В формулах (7) суммирование по "$\vec{k}$" ведется по первой зоне Бриллюэна и предполагается, что $\omega - \vec{k}\cdot\vec{v} > 0$ для всех $\vec{k}$ в области суммирования. При $\Omega \to \infty$ с учетом того, что

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{\vec{k}} \dots \to \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k} \dots\ ; \quad \frac{\mathcal{L}^2(k)}{2\omega} = \alpha\pi\omega\left(\frac{\omega}{2m}\right)^{1/2}\frac{1}{k^2},$$

получаем

$$F(\alpha,\beta,\vec{v})=\frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m}-\frac{1}{2}mv^2-\alpha\omega\sqrt{\frac{\omega}{2m}}\int\limits_{|\vec{k}|<k_0}\frac{d^3\vec{k}}{2\pi^2k^2}\int_0^\beta d\tau\,\frac{e^{-\frac{k^2}{2m}\tau(1-\frac{\tau}{\beta})-(\omega-\vec{k}\cdot\vec{v})\tau}}{1-e^{-\beta(\omega-\vec{k}\cdot\vec{v})}},$$

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)}=\omega\int\limits_{|\vec{k}|<k_0}\frac{d^3\vec{k}}{2\pi^2k^2}\int_0^\beta d\tau\,\frac{e^{-\omega\tau-\frac{k^2}{2m}\tau(1-\frac{\tau}{\beta})}}{1-e^{-\beta\omega}}. \quad (8)$$

Формулы (7),(8) приводят к известным результатам при нулевой температуре. Действительно,

$$\lim_{\beta\to\infty}F(\alpha,\beta,\vec{v})=-\frac{1}{2}mv^2-\alpha\omega\sqrt{\frac{\omega}{2m}}\int\limits_{|\vec{k}|<k_0}\frac{d^3\vec{k}}{2\pi^2k^2}\int_0^\infty d\tau\,e^{-(\omega-\vec{k}\cdot\vec{v}+\frac{k^2}{2m})\tau},$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{R(\alpha,\beta)}=\omega\int\limits_{|\vec{k}|<k_0}\frac{d^3\vec{k}}{2\pi^2k^2}\int_0^\infty d\tau\,e^{-(\omega+\frac{k^2}{2m})\tau}. \quad (9)$$

Если $\frac{1}{2}mv^2<\omega$, то $\omega-\vec{k}\cdot\vec{v}+\frac{k^2}{2m}>0$ для всех $\vec{k}$ и в приближении $k_0\to\infty$ получается известный результат[8]

$$\lim_{\beta\to\infty}F(\alpha,\beta,\vec{v})=-\frac{1}{2}mv^2-\alpha\omega\frac{\arcsin\sqrt{\frac{mv^2}{2\omega}}}{\sqrt{\frac{mv^2}{2\omega}}},$$

$$\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{R(\alpha,\beta)}=\sqrt{2\omega m}. \quad (10)$$

Откуда при $\frac{mv^2}{2\omega}\ll 1$

$$\lim_{\beta\to\infty}F(\alpha,\beta,\vec{v})=E_0-\frac{1}{2}m^*v^2;\ E_0=-\alpha\omega;\ m^*=m\left(1+\frac{\alpha}{6}\right). \quad (11)$$

Для CdS согласно[9] ω =6,76 10^{13} Гц, , m =0,20 m_e (m_e -электронная масса) и α =0,65. Тогда $R(\alpha,\infty)=20{,}69$ Å, что намного больше постоянной решетки. При низких температурах $e^{-\beta\omega}\ll 1$ (для ионных кристаллов $\omega\sim 300^0$K), разлагая величины, фигурирующие в (10), до второго порядка по $\vec{v}$ и пренебрегая членами порядка $e^{-\beta\omega}$, получаем

$$F(\alpha,\beta)=\frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m}-\frac{\alpha\omega}{\pi}\sqrt{\frac{2\omega}{m}}\int_0^{k_0}dk\int_0^\beta d\tau\,e^{-\omega\tau-\frac{k^2}{2m}\tau(1-\frac{\tau}{\beta})},$$

$$m^*(\alpha,\beta) = m + \frac{\alpha\omega}{3\pi}\sqrt{\frac{2\omega}{m}}\int_0^{K_0} dK\, K^2 \int_0^{\beta} d\tau\, e^{-\omega\tau - \frac{K^2}{2m}\tau\left(1-\frac{\tau}{\beta}\right)}, \tag{12}$$

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)} = \frac{2\omega}{\pi}\int_0^{K_0} dK \int_0^{\beta} d\tau\, e^{-\omega\tau - \frac{K^2}{2m}\tau\left(1-\frac{\tau}{\beta}\right)} .$$

В пределе $K_0 \to \infty$, оставляя члены первого порядка по $\frac{1}{\beta\omega}$, получаем

$$F(\alpha,\beta) = \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m} - \alpha\omega\left[1 + \frac{1}{4\beta\omega}\right] ,$$

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left[1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{3\alpha}{8\beta\omega}\right];\ R(\alpha,\beta) = \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\left(1 - \frac{1}{4\beta\omega}\right) . \tag{13}$$

Результат вполне естественный: при включении температуры эффективная масса растет, а радиус полярона уменьшается. Поведение этих величин при высоких температурах будет обсуждаться в пятом разделе работы.

3. Использование вариационного метода

При произвольных значениях параметра связи α уже нельзя пользоваться теорией возмущений. Фейнман в [7] для $T = 0°K$ предложил и использовал вариационный метод, выбрав в качестве пробного интеграла действия гауссову форму. С учетом свойства выпуклости в задаче квадратур минимизация по параметрам пробного интеграла действия доставляет наилучшую оценку сверху для свободной энергии. Метод Фейнмана обобщен на конечные температуры в работах [6,10]. Естественно, конкретные результаты могут зависеть от выбора пробного функционала. В недавно опубликованной работе [11] метод Фейнмана обобщается на более широкий класс пробных интегралов действия.

Здесь мы в качестве пробного функционала S_0 возьмем функционал линейной модели Боголюбова [12], в рамках которой конкретные характеристики полярона были получены нами в [13].

В [13] было получено следующее выражение для свободной энергии полярона в линейной модели Боголюбова:

$$F_0(\beta,\vec{v}) = \frac{3}{2}W(\nu-1) + \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m\nu^2} + \frac{3}{\beta}\ln\frac{1-e^{-\beta W\nu}}{1-e^{-\beta W}} - \frac{1}{2}m\nu^2 v^2; \tag{14}$$

здесь ν и W являются вариационными параметрами. Там же было показано, что

$$F_0(\beta,\vec{v}) = -\frac{1}{\beta}\ln\int\limits_{\vec{x}(0)=0}^{\vec{x}(\beta)=\vec{u}\beta} \mathcal{D}\vec{x}\, e^{-S_0[\vec{x},\vec{u}]}\,, \tag{15}$$

где $S_0[\vec{x},\vec{u}] = \frac{m}{2}\int\limits_0^{\beta}\dot{\vec{x}}^2(\tau)d\tau + \varphi_0[\vec{x},\vec{u}]$,

$$\varphi_0[\vec{x},\vec{u}] = \frac{mW^3(\nu^2-1)}{4}\iint\limits_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \left\{ \frac{e^{-W|\tau_1-\tau_2|}|\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)|^2}{2} + \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta W(n+1)+W(\tau_1-\tau_2)}|\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)-\beta\vec{u}(n+1)|^2 \right\}. \tag{16}$$

Радиус полярона $R_0(\beta)$ для этой модели дается формулой

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

С учетом (2) и (15),(16) несложно показать, что имеет место неравенство

$$F(\alpha,\beta) \leq F_0(\beta) + \frac{1}{\beta}\langle S - S_0\rangle^0_{S_0}\,, \tag{17}$$

являющееся функциональным аналогом неравенства Боголюбова. Минимизация правой части (17) позволяет найти оптимальные значения параметров ν и W линейной модели как функций от α и β . Заметим, что можно доказать, что при мнимой $\vec{v}$ для $F(\alpha,\beta,\vec{v})$ имеет место следующее неравенство:

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) \leq F_0(\beta,\vec{v}) + \frac{1}{\beta}\langle S - S_0\rangle^{\vec{u}}_{S_0} .$$

Однако это не позволяет получить неравенство для эффективной массы.

При оптимальных значениях ν и W имеем приближенные выражения для $F(\alpha,\beta,\vec{v})$ и $R(\alpha,\beta)$:

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = F_0(\beta,\vec{v}) + \frac{1}{\beta}\langle S[\vec{x},\vec{u}] - S_0[\vec{x},\vec{u}]\rangle^{\vec{u}}_{S_0}\,,$$

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)} = \frac{4\pi\omega}{\Omega}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{k^2}\int\limits_0^{\beta}d\tau\,\frac{e^{-\omega\tau}}{1-e^{-\beta\omega}}\langle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}(\tau)}\rangle^0_{S_0} . \tag{18}$$

Первая формула в (18) позволяет найти эффективную массу полярона: она дается суммой эффективной массы линейной модели (см. /13/) дополненной слагаемым $\frac{1}{\beta}\langle S[\vec{x},\vec{u}]-S_0[\vec{x},\vec{u}]\rangle_{S_0}^{\vec{u}}$. Несложно доказать, что имеет место соотношение

$$\frac{1}{\beta}\langle \varphi_0\rangle_{S_0}^{\vec{u}} = \frac{v^2-1}{2v}\frac{\partial}{\partial v}F_0(\beta,v)$$

и, следовательно,

$$F(\alpha,\beta,\vec{v}) = F_0(\beta,\vec{v}) - \frac{v^2-1}{2v}\frac{\partial}{\partial v}F_0(\beta,\vec{v}) - \frac{1}{\beta}\langle\varphi\rangle_{S_0}^{\vec{u}} \,. \tag{19}$$

Для вычисления $\langle\varphi\rangle_{S_0}^{\vec{u}}$ необходимо знать среднее типа $\langle e^{i\vec{k}\cdot[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]}\rangle_{S_0}^{\vec{u}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}(\tau_1-\tau_2)}\langle e^{+i\vec{k}\cdot[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]}\rangle_{S_0}^{0}$.

Оно было вычислено в работе[6] и дается формулой

$$\langle e^{i\vec{k}\cdot[\vec{x}(\tau_1)-\vec{x}(\tau_2)]}\rangle_{S_0}^{\vec{u}} = \exp\left\{-\frac{\beta k^2}{2mv^2}f\left(\frac{\tau}{\beta}\right)\right\} \,,$$

$$f(x) = x(1-x) + \frac{v^2-1}{\lambda v}\,\frac{\operatorname{sh}\lambda v x\,\operatorname{sh}\lambda v(1-x)}{\operatorname{sh}\lambda v}\;;\quad \lambda=\frac{\beta W}{2}\,. \tag{20}$$

С учетом (I),(3),(I4),(I8),(I9),(20) получаем следующие выражения для $F(\alpha,\beta)$, $m^*(\alpha,\beta)$ и $R(\alpha,\beta)$:

$$F(\alpha,\beta) = \frac{3W(v-1)^2}{4v} + \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{mv^2} + \frac{3}{\beta}\,\frac{v^2-1}{v^2} + \frac{3}{\beta}\ln\frac{1-e^{-\beta W v}}{1-e^{-\beta W}} - \frac{3W(v^2-1)}{2v(e^{\beta W v}-1)} - \frac{\alpha\omega}{\pi}\sqrt{\frac{\omega}{2m}}\int_0^{k_0}dk\int_0^{\beta}d\tau\,\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}}\exp\left\{-\frac{\beta k^2}{2mv^2}f\left(\frac{\tau}{\beta}\right)-\omega\tau\right\} \,, \tag{21}$$

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left\{1+\frac{\alpha\omega}{3\pi m}\sqrt{\frac{2\omega}{m}}\int_0^{k_0}dk\,k^2\int_0^{\beta}d\tau\,\frac{e^{-\omega\tau-\frac{\beta k^2}{2mv^2}f\left(\frac{\tau}{\beta}\right)}}{1-e^{-\beta\omega}}\left[\tau^2+\frac{2\beta\tau+\beta^2\operatorname{cth}\frac{\beta\omega}{2}}{e^{\beta\omega}-1}\right]\right\},$$

$$\frac{1}{R(\alpha,\beta)} = \frac{\omega}{\pi}\int_0^{k_0}dk\int_0^{\beta}d\tau\,\frac{e^{-\omega\tau-\frac{\beta k^2}{2mv^2}f\left(\frac{\tau}{\beta}\right)}}{1-e^{-\beta\omega}} \,. \tag{22}$$

Выражения (2I),(22),(23) справедливы для всех температур. Результат для свободной энергии полярона $F(\alpha,\beta)$ совпадает с выражениями для этой величины, полученными в[6,10]. Как упоминалось выше, для того, чтобы найти оптимальные значения параметров ν и W, надо минимизовать $F(\alpha,\beta)$ в (2I). Рассмотрим отдельно некоторые предельные случаи.

4. Случай низких температур

Допустим, что $e^{-\beta\omega} \ll 1$. Пренебрегая членами порядка $e^{-\beta\omega}$, имеем

$$\beta f\left(\frac{\tau}{\beta}\right) \approx g(\tau) = \tau\left(1-\frac{\tau}{\beta}\right) + \frac{\nu^2-1}{W\nu}\left(1-e^{-W\nu\tau}\right) .$$

Тогда, интегрируя по K в (2I),(22),(23), в приближении $K_0 \to \infty$ получаем

$$F(\alpha,\beta) = \frac{3W(\nu-1)^2}{4\nu} + \frac{3}{2\beta}\,\frac{\nu^2-1}{\nu^2} + \frac{3}{\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m\nu^2} - \frac{\alpha\omega^{3/2}\nu}{\sqrt{\pi}}\int_0^\beta d\tau\, e^{-\omega\tau} g^{-1/2}(\tau) ,$$

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left\{1 + \frac{\alpha\omega^{3/2}\nu^3}{3\sqrt{\pi}}\int_0^\beta d\tau\, \tau^2 e^{-\omega\tau} g^{-3/2}(\tau)\right\} , \tag{24}$$

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

Формула для $m^*(\alpha,\beta)$ в (24) является обобщением результата Фейнмана /7/ для эффективной массы на случай низких температур и произвольных α. В работе /I0/ в этих самых приближениях была получена другая формула для эффективной массы при $\beta=\infty$. Поскольку она получена на основе предположения о виде точного спектра гамильтониана Фрелиха, следует считать, что такие предположения ошибочны. Вывод о том, что собственная энергия и масса полярона зависят от температуры при $\beta\omega \gg 1$ только через экспоненциально малые члены, тоже оказывается неправильным.

Считая $\alpha \ll 1$ и делая замену $\nu = 1+\alpha t$, разложим $F(\alpha,\beta)$ в (24) до второго порядка по α и первого порядка по $\frac{1}{\beta\omega}$. Из условия минимума

$$\frac{\partial F(\alpha,\beta)}{\partial\nu} = \frac{\partial F(\alpha,\beta)}{\partial W} = 0$$

имеем

$$\nu = 1 + \frac{2\alpha}{27} + \frac{7\alpha}{9\beta\omega} \quad ; \quad W = 3\omega\left(1-\frac{15}{4\beta\omega}\right) .$$

В этом приближении $F(\alpha,\beta)$, $m^*(\alpha,\beta)$ и $R(\alpha,\beta)$ даются формулами

$$F(\alpha,\beta)=\frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m}-\alpha\omega\left(1+\frac{1}{4\beta\omega}\right)-\frac{\alpha^2\omega}{81}\left(1+\frac{2}{\beta\omega}\right),$$

$$m^*(\alpha,\beta)=m\left\{1+\frac{\alpha}{6}+\frac{3\alpha}{8\beta\omega}+\frac{2\alpha^2}{81}+0{,}235\,\frac{\alpha^2}{\beta\omega}\right\},\tag{25}$$

$$R(\alpha,\beta)=\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\left\{1-\frac{1}{4\beta\omega}-\frac{2\alpha}{81}-\frac{2\alpha}{9\beta\omega}\right\}.$$

Считая $\alpha\gg 1$ и $\nu\sim\alpha^2$, разложим $F(\alpha,\beta)$ в (24) до первого порядка по $1/\beta\omega$, пренебрегая членами порядка α^{-1} . Тогда из условия минимума $F(\alpha,\beta)$ получаем

$$\nu=\frac{4\alpha^2}{9\pi}-2A+1+\frac{6}{\beta\omega}\ ;\ A=2\ln 2+0{,}5772\ ;\ W=\omega\ .$$

В этом приближении $F(\alpha,\beta)$, $m^*(\alpha,\beta)$ и $R(\alpha,\beta)$ даются формулами

$$F(\alpha,\beta)=\frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m}-\frac{\alpha^2\omega}{3\pi}+\frac{3\omega}{2}\left(A-\frac{3}{2}\right)+\frac{3}{\beta}\left(1-\ln\frac{4\alpha^2}{9\pi}\right),$$

$$m^*(\alpha,\beta)=m\left\{\left(\frac{4\alpha^2}{9\pi}\right)^2-\frac{4\alpha^2}{3\pi}\left(1+A-\frac{9}{\beta\omega}\right)\right\}\ ;\ R(\alpha,\beta)=\frac{3\pi}{2\alpha}\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\ .\tag{26}$$

В обоих случаях эффективная масса растет и радиус уменьшается с ростом температуры и константы связи. Однако при $\alpha\gg 1$ зависимость от температуры очень слабая, в главном порядке по α величины $m^*(\alpha,\beta)$ и $R(\alpha,\beta)$ не зависят от температуры и фактически совпадают с величинами m_0^* и R_0 линейной модели. При $\alpha=10$, $\beta\omega=10$ поправка к эффективной массе , полученной для нулевой температуры, порядка 2%.

В случае слабой связи температурная поправка более существенна, члены порядка $\frac{\alpha}{\beta\omega}$ больше членов порядка α^2 при $\beta\omega$ =10 и $\alpha<1$. Для CdS согласно (25) имеем m^* =0,22 m_e, R =20, 36Å при T=0°K и m^* =0,23 и R =19,54Å при T = 50°K ($\beta\omega$ =10). Температурная поправка к массе порядка 5%.

5. Случай предельно высоких температур

Минимизация выражения (21) для свободной энергии при $\beta\omega \ll 1$ была проведена в работе /10/, где было показано, что если выполняются условия

$$\beta\omega \ll 1 \quad ; \quad \alpha\sqrt{\beta\omega} \ll 1 \;, \qquad (27)$$

то $v \cong 1$; $W \cong \omega$ и асимптотики для свободной и собственной энергии имеют вид

$$F(\alpha,\beta) = \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{m} - \alpha\omega\left(\frac{\pi}{\beta\omega}\right)^{1/2},$$
$$E(\alpha,\beta) = -\frac{\alpha\omega}{2}\left(\frac{\pi}{\beta\omega}\right)^{1/2}. \qquad (28)$$

Заметим, что этот предельный случай имеет довольно формальный смысл, поскольку условие $\beta\omega \ll 1$ фактически означает, что температура- порядка тысячи градусов. Кроме того, величины α, ω, m становятся уже температурно зависимыми. Рассмотрение такого случая проводится здесь лишь для полноты изложения в чисто формальных целях.

При получении (28) в (21) был сделан предельный переход $K_0 \to \infty$, что законно, если $\beta\frac{K_0^2}{2m} \gg 1$. Поскольку $\omega \sim 10^{13} - 10^{14}$ Гц и $\frac{\hbar K_0^2}{2m} \sim 10^{16}$ Гц, условия (27) и $\frac{\beta K_0^2}{2m} \gg 1$ могут выполняться одновременно.

В этом приближении из (23) получается для радиуса полярона

$$R(\alpha,\beta) = \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\left(\frac{\beta\omega}{\pi}\right)^{1/2}. \qquad (29)$$

Из (28) ясно, что собственная энергия полярона не обращается в нуль при $\beta\omega \to 0$. С другой стороны, радиус полярона уменьшается, когда температура растет, и при $\beta\omega = 0{,}1$ он уже в 5-6 раз меньше его значения при нулевой температуре. В зависимости от значения m и ω радиус может стать величиной порядка постоянной решетки, это означает, что рассмотрение электрона в ионном кристалле на базе модели Пекара-Фрелиха становится незаконным. Беря $v = 1$, $W = \omega$ и считая, что $\beta\omega \ll 1$, имеем для эффективной массы следующее выражение:

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left\{1 + \frac{4\alpha}{3\pi m\omega}\sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\int_0^{K_0} dk\, k^2 \int_0^1 dt\, e^{-\beta\frac{k^2}{2m}t(1-t)}\right\}.$$

Вычисляя эти интегралы, получаем

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left\{1 + \frac{16\alpha K_0}{3\pi\beta\omega\sqrt{2m\omega}}\left[1 - {}_1F_1\left(1,\frac{3}{2},-\frac{\beta K_0^2}{8m}\right)\right]\right\} .$$

С учетом того, что $\frac{\beta K_0^2}{2m} \gg 1$, вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1\left(1,\frac{3}{2},-\frac{\beta K_0^2}{8m}\right)$ можно заменить ее асимптотикой $\frac{4m}{\beta K_0^2}$. В таком случае

$$m^*(\alpha,\beta) = m\left\{1 + \frac{16\alpha K_0}{3\pi\beta\omega\sqrt{2m\omega}}\right\} .$$

Явная зависимость массы от K_0 свидетельствует о растущей роли коротковолновых мод при высоких температурах.

Для иллюстрации рассмотрим PbS, для которого согласно[9] ω =2,36xI0^{I3} Гц, m =0,33 m_e, α =0,I6. При $\beta\omega$ =0,2 (то есть $T \simeq$ 900^{0}К), считая K_0 =I0^8 см$^{-I}$, получаем $E(\alpha,\beta)$= = - 0,002 эВ, R = 5,89А и m^*= I3 m_e. Постоянная решетки равна 2,98А [I], и мы видим, что $R \gtrsim a_0$. Вытекающая отсюда неприменимость модели Пекара-Фрелиха объясняет такое неожиданно большое значение эффективной массы полярона для PbS - соединения со слабым электрон-фононным взаимодействием (α= 0,I6).

Отметим, что поведение характеристик полярона в этом пределе резко отличается от поведения аналогичных величин линейной модели. Действительно, при ν =I, $W=\omega$ и $\beta\omega \to 0$ $E_0 \to 0, m_0^* \to m$ и $R_0 \to \infty$. Связано это с тем обстоятельством, что линейная модель хорошо аппроксимирует взаимодействие электрона с длинноволновыми фононными модами, а для модели Фрелиха при условиях (27) главную роль играют моды с большим волновым вектором.

Л и т е р а т у р а

I. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов Гос. изд-во технико-теоретической литературы, Москва, I95I.

2. Frohlich H. Electrons in lattice fields. Advances in Physics, 1954, v.3, No.11, p.325-361.

3. C.Rodriguez and V.K.Fedyanin. Characteristics of the Bogolubov's polaron at finite temperatures. Preprint JINR E17-80724, Dubna, JINR, 1980.

4. Polarons and Excitons (edited by C.G.Kuper and G.D.Whit field) Oliver and Boyd, Edinburgh (1963).

5. Боголюбов Н.Н. Избранные труды, т.2. Изд-во "Наукова думка", Киев, 1970, с.499.

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

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

8. Фейнман Р. Статистическая механика. Изд-во"Мир",Москва,1978.

9. Поляроны (под ред. Ю.А.Фирсова), изд-во "Наука",Москва,1975.

10. Кривоглаз М.А. и Пекар С.И. Метод шпуров для электронов проводимости в полупроводниках. Изд-во АН СССР, сер.физ., 1957, т.XXI, № I, с.3-32.

11. Luttinger J.M. and Lu Ch.Y.Generalized path integral formalism of the polaron problem and its second-order semi-invariant correction to the ground state energy. Phys. Rev., B 1980, v.21, No.10, p.4251-4263.

12. Bogolubov N.N. Kinetic equations for the electron-phonon system. Preprint JINR, E17-11822, Dubna, JINR, 1978.

13. Родригес К. и Федянин В.К. Характеристики полярона в линейной модели Боголюбова при конечных температурах. Сообщение ОИЯИ, Р17-80745, Дубна, ОИЯИ, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 января 1981 года.