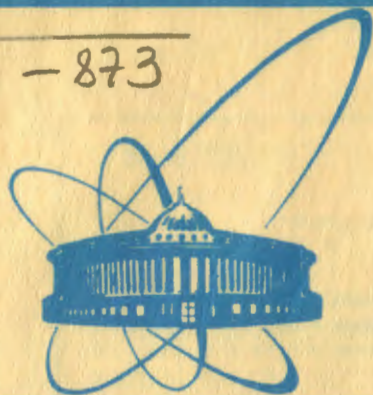


C-873



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

e
f

2360/2-81

18/5-81

P17-81-84

В.К.Струков, В.К.Федянин

ФЕЙНМАНОВСКИЙ ПОЛЯРОН
ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

1981

Основные "квазичастичные" характеристики полярона большого радиуса, энергия основного состояния $\mathcal{E}(0)$ и эффективная масса m рассчитываются различными исследователями уже около тридцати лет как по теории возмущений, так и в рамках аппроксимационных процедур, носящих в основном вариационный характер^{/1,2/}. В достаточной мере полный обзор результатов наряду с их физической интерпретацией содержится в^{/3,4/}. Отметим здесь, что в большинстве работ исследовался вопрос о поведении $\mathcal{E}(0)$ и m в зависимости от α - безразмерного параметра электрон-фононного взаимодействия при нулевой температуре ($\Theta = K_5 T = 0$). Вопрос о температурной зависимости $\mathcal{E}(0)$ и m существует как для решения фундаментальной (поставленной еще Ландау^{/5/}) проблемы автолокализации электрона в кристалле, так и для обсуждения конкретных механизмов переноса поляронного возбуждения в полупроводниках и диэлектриках^{/6/}. Вопрос этот, однако, нельзя считать решенным: анализу температурной зависимости посвящены две работы^{/7,8/}. В^{/7/} предполагается, что квадратичный закон дисперсии энергии полярона при $\Theta \neq 0$ сохраняется и в рамках неконтролируемой аппроксимации. Для свободной энергии рассчитываются характеристики полярона при $\Theta \neq 0$. Как общие выражения, позволяющие рассчитать $\mathcal{E}(0)$ и m при любых Θ , так и количественные значения в предельных случаях $\alpha \ll 1$ и $\alpha \gg 1$ несколько отличаются от того, что дает вариационный подход^{/2/}. Связано это, по-видимому, с

теми аппроксимациями, которые предложены в^{/7/}. В рамках подхода^{/2/} общее выражение для $\mathcal{E}(0)$, справедливое для любых θ, α , получено в^{/8/}. Далее оно там анализируется на ЭВМ. Задача нахождения m при любых α и θ , а также вопрос о величинах $\mathcal{E}(0)$ и m при $\theta \rightarrow 0$ здесь не ставились. В данной работе, используя представление статистической суммы через интеграл по траекториям, мы получим замкнутые выражения для $\mathcal{E}(0)$ и m , справедливые для любых $\alpha, 0 < \alpha < \infty$ и $\theta, 0 < \theta < \infty$ без использования каких-либо аппроксимаций. Далее мы проанализируем те аппроксимации, которые при $\theta \rightarrow 0$ (α - произвольно) приводят к результатам^{/2/}. Общие выражения для $\mathcal{E}(0)$ и $m(\beta)$ в рамках техники интегралов по траекториям будут нами здесь получены на базе гамильтониана Пекара-Фрелиха^{/1,4/}. Это даст возможность сравнить конкретные выражения для этих характеристик при $\theta \rightarrow 0$ в приближениях слабой, $\alpha \ll 1$, и сильной, $\alpha \gg 1$, связи с результатами других исследований^{/1-4,7,8/}, а также с конкретными значениями их, получаемыми в рамках более последовательного Боголюбовского подхода^{/9/}. (Забегая вперед, отметим, что эффективная масса полярона в лидирующей асимптотике по α совпадает не только при $\theta = 0$ - это показано в^{/10/} для $\alpha \gg 1$, - но и при $\theta = 0$; отличаются общие выражения и вклады $\sim \alpha^2$; энергии основного состояния, вычисляемые на базе эффективных гамильтонианов Пекара-Фрелиха^{/1-4/} и Боголюбова^{/9/}, естественно, совпадают).

Существенным здесь становится анализ зависимости $\mathcal{E}(0)$ и m от θ (при произвольном α он возможен лишь с использованием ЭВМ), а также предельного перехода при $\theta \rightarrow 0$ как в асимптотических областях α ($\alpha \ll 1, \alpha \gg 1$), так и при произвольном α .

I. Мы будем исходить из стандартной формы поляронного гамильтониана, выраженного через операторы импульсов и координат нормальных колебаний p_x, q_x ^{/1,2,4/}:

$$H = -\frac{1}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} + \sum_{(k)} \frac{1}{2} (p_k^+ p_k + \omega_k^2 q_k^+ q_k) + \\ + \sum_{(k)} (i\sqrt{2\omega_k} V_k) q_k e^{-ik\vec{r}}, \quad V_k = \frac{ie}{k} \left(\frac{2\pi\omega_k G}{V} \right)^{1/2} (1)$$

где e - заряд, μ - эффективная масса электрона, ω_k - частота продольных оптических колебаний, G - эффективная диэлектрическая постоянная, $\hbar = 1$.

Матричный элемент матрицы плотности системы, описываемой гамильтонианом (1), может быть представлен в виде функционального интеграла^[2]

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2; q_1, q_2 | \beta) = \int_{(q_1, q_2)}^{\beta} \mathcal{D}q \mathcal{D}z e^{S[z, q]}, \\ S[z, q] = -\frac{\mu}{2} \int_0^\beta \dot{\vec{z}}^2 d\tau - \sum_{(k)} \int_0^\beta \left[\frac{1}{2} |\dot{q}_k|^2 + \frac{\omega_k^2}{2} |q_k|^2 + (i\sqrt{2\omega_k} V_k) q_k e^{-ik\vec{z}} \right] d\tau, \quad q = \{q_k\}, \quad \mathcal{D}q = \prod_x \mathcal{D}q_x. \quad (2)$$

Если перейти по фоновым переменным в представление вторичного квантования и воспользоваться для функционала, зависящего от операторов порождения и уничтожения фононов, формулами "выпутывания", полученными в [11], то для матрицы плотности, описывающей полярон в "теплом" бесфононном кристалле (то есть в пренебрежении процессами испускания и поглощения фонона), получаем для редуцированной матрицы плотности

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2 | \beta) = \int \rho(\alpha_1, \alpha_2; q, q | \beta) dq \quad (4)$$

следующую формулу:

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2 | \beta) = Z_{\text{eatt}} \sigma(\alpha_1, \alpha_2 | \beta), \quad Z_{\text{eatt}} = \prod_k \frac{e^{\beta \omega_k}}{e^{\beta \omega_k} - 1}, \\ \sigma(\alpha_1, \alpha_2 | \beta) = \int_{(\alpha_1)}^{\beta} e^{S[z]} \mathcal{D}z, \quad S[z] = -\frac{\mu}{2} \int_0^\beta \dot{\vec{z}}^2 d\tau + \varphi,$$

$$\varphi = \sum_k |V_k|^2 \varphi_k, \quad \varphi_k = \int_0^\beta \int_0^\beta \theta(\tau_1, \tau_2) e^{-\omega_k(\tau_1 - \tau_2) - i\vec{k}[\vec{z}_1 - \vec{z}_2]} d\tau_1 d\tau_2,$$

$$z_i = z(\tau_i), \quad i=1,2, \quad \theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (5)$$

Соотношение (5) и послужит основой дальнейшего анализа поведения $\mathcal{E}(0)$ и m в зависимости от α , θ . Для этой цели, как обычно, ограничимся рассмотрением одной ветви фононного спектра $\omega_k = \omega$, пренебрежем пространственной дисперсией $c_k = c = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}$ (ϵ_∞ — статическая, ϵ_0 — оптическая диэлектрические проницаемости среды /1/) и будем работать в системе единиц $\hbar = \omega = \mu = 1$.

Величина φ в выражении (5) переписывается следующим образом:

$$\varphi = \sum_k |V_k^0|^2 \int_0^\beta \int_0^\beta \theta(\tau_1, \tau_2) e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2) - i\vec{k}[\vec{z}_1 - \vec{z}_2]} d\tau_1 d\tau_2,$$

$$V_k^0 = \frac{i\epsilon}{k} \left(\frac{2\pi\omega c_0}{v} \right)^{1/2} \quad (6)$$

Однородность и изотропность системы позволяют, положив $\vec{R} = z(\beta) - z(0)$ и сделав затем функциональную замену переменных,

$$\vec{z}(\tau) = \vec{\rho}(\tau) + \vec{V}\tau, \quad \vec{V} = \vec{R}\beta^{-1}, \quad \vec{\rho}(\beta) = \vec{\rho}(0),$$

привести интеграл (5) к виду

$$\sigma(\vec{z}_1, \vec{z}_2 | \beta) = \int e^{S[\vec{\rho}]} \mathcal{D}\vec{\rho}, \quad (7)$$

где

$$S[\vec{\rho}] = -\frac{\beta V^2}{2} - \frac{1}{2} \int_0^\beta \vec{\rho}^2 d\eta + \varphi(\vec{\rho}),$$

$$\varphi(\vec{\rho}) = \sum_k |V_k^0|^2 \varphi_k(\vec{\rho}), \quad \varphi_k(\vec{\rho}) = \int_0^\beta \int_0^\beta \theta(\tau_1, \tau_2) \quad (8)$$

$$\left[\exp \left\{ \omega(\tau_2 - \tau_1) + i\vec{k}\vec{V}(\tau_2 - \tau_1) + i\vec{k}(\vec{\rho}(\tau_2) - \vec{\rho}(\tau_1)) \right\} \right] d\tau_1 d\tau_2.$$

Соотношения (7), (8) и послужат основой дальнейшего анализа.

Получим вначале точные выражения через интегралы по траекториям для $\mathcal{E}(0)$ и $m(\beta)$. Вводя интегральный оператор

$$J_{12} = \int_0^\beta \int_0^\beta \theta(\tau_1 - \tau_2) e^{\tau_2 - \tau_1} d\tau_1 d\tau_2 = \beta^2 I_{12}, \quad (9)$$

$$I_{12} = \int_0^1 \int_0^1 dx_1 dx_2 \theta(x_1 - x_2) e^{\beta(x_2 - x_1)},$$

мы можем $S(\rho)$ в (8) компактно записать в виде

$$S(\rho) = -\frac{\beta V^2}{2} - \frac{1}{2} \int_0^\beta \vec{p}^2 d\eta + \sum |V_k^0|^2 J_{12} \left(e^{i\vec{k}\vec{v}t + i\vec{k}\vec{x}} \right),$$

$$\vec{x} = \vec{p}(\tau_2) - \vec{p}(\tau_1), \quad t = \tau_2 - \tau_1. \quad (10)$$

Разлагая экспоненту в (10) до $V^2 \left(e^{i\vec{k}\vec{v}t} \approx 1 + i\vec{k}\vec{v}t - \frac{k^2}{2} V^2 t^2 \right)$ и проводя суммирование по \vec{k} с обычным обрезанием на верхнем пределе ($0 < k < k_{\max}$):

$$\sum |V_k^0|^2 e^{i\vec{k}\vec{x}} = \frac{\alpha}{2|\vec{x}|}, \quad \sum |k| |V_k^0|^2 e^{i\vec{k}\vec{x}} = -\frac{i\alpha}{\sqrt{2}} \frac{|\vec{x}|}{|\vec{x}|^3},$$

$$\sum k^2 |V_k^0|^2 e^{i\vec{k}\vec{x}} = 2^{3/2} \alpha \pi \delta(x), \quad \alpha = \frac{e^2 k_{\max}}{\sqrt{2}}.$$

мы получаем для $\varphi(\rho)$ в (8) следующее выражение:

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left[J_{12} \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right) - J_{12} \left(\frac{\vec{x}\vec{v}}{|\vec{x}|^3} t \right) \right] - \frac{\alpha \pi \sqrt{2}}{3} V^2 J_{12}(\delta k_1 t^2). \quad (11)$$

Пологая $\vec{V} = 0$, мы, очевидно, имеем точное представление для $\varepsilon(0)$, справедливое для любых α и β :

$$\varepsilon(0) = -\theta \ln \int \mathcal{D}\rho e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \vec{p}^2 d\eta + \frac{\alpha}{\sqrt{2}} J_{12} \left(\frac{1}{|\vec{x}|} \right)}. \quad (12)$$

Разлагая экспоненту в (7) по очереди в ряд по малому \vec{V} , до V^2 , получаем выражение для эффективной массы, справедливое для любых α и β :

$$m = 1 + \frac{\alpha \theta}{3} \int \mathcal{D}\vec{\beta} e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \vec{\beta}^2 d\eta} + \frac{\alpha}{\sqrt{2}} J_{12} \left(\frac{1}{\alpha} \right) \cdot \left\{ 2^{3/2} \pi J_{12}(\delta(\alpha) t^2) - \frac{\alpha}{2} J_{12}(\delta(\alpha) t) J_{12}'(\delta(\alpha) t^2) \right\}. \quad (13)$$

Фигурирующие в (12) и (13) функциональные квадратуры могут быть вычислены, естественно, в рамках каких-либо аппроксимаций. Мы проанализируем результаты, полученные в двух аппроксимациях: по теории возмущений по α , и в рамках обобщения на $\theta = 0$ вариационного метода Фейнмана.

2. Представления (12) и (13) весьма удобны для исследования поведения $\mathcal{E}(0, \beta)$ и $m(\beta)$ при $\alpha \ll 1$.

Введя обозначения

$$\langle X \rangle = \int \mathcal{D}\vec{\beta} e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \vec{\beta}^2 d\eta} X[\beta], \quad \langle 1 \rangle = 1 \quad (14)$$

и разлагая соответствующие экспоненты в (12), (13) в ряд до членов $O(\alpha^2)$ включительно, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(0, \beta) &= -\theta \ln \left\{ 1 + \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \langle J_{12} \left(\frac{1}{\alpha} \right) \rangle + \frac{\alpha^2}{4} \langle J_{12} \left(\frac{1}{\alpha} \right) J_{12}' \left(\frac{1}{\alpha} \right) \rangle \dots \right\}, \\ m(\beta) &= 1 + \frac{\alpha \theta}{3} \left\{ 2^{3/2} \pi \langle J_{12}(\delta(\alpha) t^2) \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \alpha \left[2^{1/2} \pi \langle J_{12} \left(\frac{1}{\alpha} \right) J_{12}'(\delta(\alpha) t^2) \rangle - \frac{1}{2} \langle J_{12}(\delta(\alpha) t) J_{12}'(\delta(\alpha) t) \rangle \right] \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Фигурирующие в (15) функциональные квадратуры по гауссовой мере вида

$$\langle e^{i\vec{k}\vec{x}} \rangle, \quad \langle e^{i\vec{k}\vec{x} + i\vec{k}'\vec{x}'} \rangle, \quad \dots$$

(мы "вернулись" в импульсное пространство) вычисляются обычным образом. Если воспользоваться периодичностью $\vec{\beta}(\eta)$ в интервале $0 \leq \eta \leq \beta$ и разложить $\vec{\beta}(\eta)$ в ряд Фурье: $\vec{\beta}(\eta) = \vec{a}_0 + \sum_n \left[\vec{a}_n \cos \frac{2\pi n \eta}{\beta} + \vec{b}_n \sin \frac{2\pi n \eta}{\beta} \right]$, то мы придем к достаточно простому интегрированию по (\vec{a}_n) и (\vec{b}_n) .

В частности,

$$\langle e^{i\vec{k}\vec{x}} \rangle = \exp\left[-\frac{\beta k^2}{2} f(2,1)\right],$$

$$\langle e^{i\vec{k}\vec{x} + i\vec{k}'\vec{x}'} \rangle = \exp\left[-\frac{\beta k^2}{2} f(2,1) - \frac{\beta k'^2}{2} f(2,1') - \frac{\beta \vec{k}\vec{k}'}{2} f(2,1; 2',1')\right]. \quad (16)$$

где

$$f(2,1) = f(1,2) = f\left(\frac{1}{\beta} - \frac{c}{\beta'}\right), \quad f(x) = x(1-x),$$

$$f(2,1; 2',1') = f(2,1') - f(2,2') + f(1,2') - f(1,1') = f_2. \quad (17)$$

Заметим, что $f(2,1,2',1')$ естественно назвать корреляционной функцией; на языке диаграмм она описывает корреляцию процессов испускания и поглощения фоонов с импульсами \vec{k} и \vec{k}' . Далее проводим интегрирование по \vec{k} и \vec{k}' . Оно довольно громоздко, но может быть выполнено до конца. Так, в частности, "производящий" интеграл $\sum_{\vec{k}, \vec{k}'} |V_{\vec{k}}^0|^2 |V_{\vec{k}'}^0|^2 \langle e^{i\vec{k}\vec{x} + i\vec{k}'\vec{x}'} \rangle$ дается выражением

$$J_0 = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} |V_{\vec{k}}^0|^2 |V_{\vec{k}'}^0|^2 e^{-a k^2 - b k'^2 - 2c \vec{k}\vec{k}'} = \frac{\alpha^2}{2\pi c} \arcsin\left(c(ab)^{-1/2}\right). \quad (18)$$

$$a = \frac{\beta}{2} f(2,1), \quad b = \frac{\beta}{2} f(2,1'), \quad c = \frac{\beta}{4} f(2,1; 2',1').$$

а остальные фигурирующие в (15) интегралы $J_p = \sum |V_{\vec{k}}^0|^2 |V_{\vec{k}'}^0|^2 p \exp[-a k^2 - b k'^2 - 2c \vec{k}\vec{k}']$, $p = (k^2, k'^2, \vec{k}\vec{k}')$ получаются из (18) дифференцированием по a, b, c . Проведя эти вычисления, приходим к следующим представлениям для $\varepsilon(0, \beta)$ и $m(\beta)$, в которых фигурируют уже обыкновенные квадратуры:

$$\varepsilon(0, \beta) = \frac{\alpha\sqrt{\beta}}{\pi} I_{12}(f^{-1/2}(2,1)) + \frac{\alpha^2\beta^2}{\pi} I_{12} I_{12}'[f^{-1}(2,1, 2',1')].$$

$$\arcsin\left(\frac{f(2,1, 2',1')}{2\sqrt{f(2,1)f(2,1')}}\right) - \frac{1}{2\sqrt{f(2,1)f(2,1')}} \Big] + o(\alpha^2). \quad (19)$$

$$m(\beta) = 1 + \frac{2\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}} I_{12} \left(f^{-3/2}(2,1) (x_2 - x_1)^2 \right) + \frac{2\alpha^2 \beta^3}{3\pi}$$

$$I_{12} I_{12'} \left\{ (x_2 - x_1)^2 f^{-1}(2,1) \left[\frac{1}{\sqrt{4f(2,1)f(2',1') - f^2(2,2')}} - \frac{1}{2\sqrt{f(2,1)f(2',1')}} \right] + \frac{2(x_2 - x_1)(x_2' - x_1')}{f(2,1,2',1')} \left[f^{-1}(2,1,2',1') \arcsin \left[\frac{f(2,1,2',1')}{2\sqrt{f(2,1)f(2',1')}} \right] - \frac{1}{\sqrt{4f(2,1)f(2',1') - f^2(2,2')}} \right] \right\}$$

где мы перешли к переменной $\eta_i = \beta x_i$, $0 < x_i < 1$, а $f(k, \ell) = f(\ell, k) = |x_k - x_\ell| (1 - |x_k - x_\ell|)$, $i = 1, 2$ и I_{12} — интегральный оператор (по x_2, x_1), определенный выше, в (9). Исследование поведения $\varepsilon(0, \beta)$ и $m(\beta)$ при произвольных температурах по формулам (19) требует использования ЭВМ; только применение ЭВМ позволит рассчитать температурные поправки при слагаемых $\sim \alpha^2$ при $\beta \rightarrow \infty$ и $\beta \rightarrow 0$. Однако коэффициент в слагаемых $\sim \alpha$ может быть найден аналитически. Действительно, воспользовавшись явным видом I_{12} и опуская в нем все члены $\sim e^{-\beta}$, получаем

$$\varepsilon(0, \beta) = -\frac{\alpha}{2} (\pi\beta)^{1/2} e^{-\beta/2} \left[I_0(\beta) + I_1\left(\frac{\beta}{2}\right) \right] + o(\alpha), \quad (20)$$

$$m(\beta) = 1 + \frac{\alpha}{6} \pi^{1/2} \beta^{3/2} e^{-\beta/2} \left[I_0\left(\frac{\beta}{2}\right) - I_1\left(\frac{\beta}{2}\right) \right] + o(\alpha).$$

Подынтегральные выражения в (19) зависят от $(x_2 - x_1)$, что позволило преобразовать двукратные интегралы по x_1, x_2 с помощью формулы Дирихле в однократные; это привело к функциям Бесселя 0-го и 1-го порядков. При $\beta \rightarrow \infty$ ($\theta \rightarrow 0$), воспользовавшись известной асимптотикой для $I_p(\beta/2)$, получаем

$$\varepsilon(0, \beta) = -\alpha \left(1 - \frac{\theta}{4}\right), \quad m(\beta) = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{\alpha\theta}{8}. \quad (21)$$

что переходит в известные результаты теории возмущений^{/2/} при $\theta \rightarrow 0$. Если интересоваться противоположной ситуацией $\beta \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \infty$, то, воспользовавшись опять известной асимптотикой $\bar{I}_p(\beta/2)^{1/2}$, имеем

$$\varepsilon(0, \beta) = -\frac{\alpha}{2} (\pi\beta)^{1/2}, \quad m(\beta) = 1 + \frac{\alpha}{6} \pi^{1/2} \beta^{3/2}. \quad (22)$$

(Первая формула была получена Юкатой - процитировано в^{/8/}+).

3. При произвольных α пользоваться теорией возмущений уже нельзя. Для нахождения температурной зависимости $\varepsilon(0, \beta)$ и $m(\beta)$ воспользуемся обобщением на $\theta \neq 0$ квадратичной аппроксимации для действия и вариационной процедурой Фейнмана^{/2/}. Из методических соображений будем исходить из общей формулы (7), а не эквивалентной ей (9). Проведем обычное в подходе^{/2/} тождественное преобразование функционального интеграла (7):

$$\sigma(R, \beta) = \int_0^{(R)} e^{S[z] - S'[z] + S'[z]} \mathcal{D}z \equiv \langle e^{S-S'} \rangle_{S'} N(R), \quad (23)$$

где

$$\langle A \rangle_{S'} = \frac{\int_0^{(R)} A[z] e^{S'[z]} \mathcal{D}z}{\int_0^{(R)} e^{S'[z]} \mathcal{D}z}, \quad N(R) = \int_0^{(R)} e^{S'[z]} \mathcal{D}z,$$

и выберем $S'[z]$ -аппроксимирующее действие - в виде квадратичного функционала от $\vec{z}(\eta)$, обобщающего функционал $S'[z]$, предложенный в^{/2/}, на рассматриваемый нами случай $\theta \neq 0$:

+ /Заметим, что результаты (22) представляют чисто методический интерес, поскольку при $\theta \rightarrow \infty$ процессы, обусловленные взаимодействием с фонами, существенны.

$$S[z] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{z}^2 d\eta + \delta_2 \varphi,$$

$$\delta_2 \varphi = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\eta_1 d\eta_2 c(\eta_1 - \eta_2) [\dot{z}(\eta_1) - \dot{z}(\eta_2)]^2, \quad (24)$$

$$c(t) = C [(\theta(t) + n_w) e^{-wt} + (\theta(-t) + n_w) e^{wt}], \quad n_w = \frac{1}{e^{\beta w} - 1}.$$

w , C - вариационные параметры, описываемые из требования минимума энергии основного состояния системы (см. ниже). $C(t)$ переходит в фейнмановское выражение¹²⁾, если предельный переход $\theta \rightarrow 0$ провести до выполнения функционального интегрирования. Постулируя, наконец, в (23) обычную аппроксимацию для функционального интеграла числителя $\langle e^{S-S'} \rangle_{S'} \rightarrow e^{\langle S \rangle_{S'}} \bar{e}^{\langle \delta_2 \varphi \rangle_{S'}}$, то есть ставя задачу о вычислении свободной энергии системы, мажорирующей истинную свободную энергию в духе вариационного принципа Гиббса-Боголюбова, получаем для $\sigma(R, \beta)$ выражение через функциональные квадратуры гауссова типа. Они вычисляются, как и выше, переходом к фурье-переменным и использованием затем табличных формул для возникающих при этом сумм. Длинные, но не слишком сложные выкладки дают

$$\langle \varphi \rangle_{S'}^R = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} J_{1,2} (F^{-1/2} (1\tau_1 - \tau_2)) - \frac{\alpha V^2}{6\sqrt{\pi}} J_{1,2} (\tau_2 - \tau_1 - \Delta_1) \cdot F^{1-\frac{3}{2}}(1\tau_1 - \tau_2),$$

$$\langle \delta_2 \varphi \rangle_{S'}^R = \langle \delta_2 \varphi \rangle_{S'}^0 - \frac{V^2}{2} \int_0^\beta \int_0^\beta c(\eta_1 - \eta_2) (\eta_1 - \eta_2)^2 d\eta_1 d\eta_2 -$$

$$- \beta V^2 \left[2\Delta_2 + (v^2 - 1) \frac{\partial \Delta_2}{\partial v^2} \right], \quad v^2 = 1 + \frac{\gamma C}{w^3},$$

$$F(\tau) = \frac{\beta}{v^2} \Phi\left(\frac{\tau}{\beta}\right), \quad \Phi(x) = x(1-x) + \quad (25)$$

$$+ (v^2 - 1) \frac{\text{sh } \lambda v x \text{ sh } \lambda v (1-x)}{\lambda v \text{ sh } \lambda v}, \quad \lambda = \frac{\beta w}{2},$$

$$\Delta_1 = \int_0^\beta \int_0^\beta c(\eta_1 - \eta_2) (\eta_1 - \eta_2) \left[F(1\tau_1 - \eta_1) - F(1\tau_2 - \eta_1) \right],$$

$$\Delta_2 = \beta^{-1} \int_0^\beta \int_0^\beta \int_0^\beta \int_0^\beta c(\eta - \eta_2) c(\eta_1' - \eta_2') (\eta_1 - \eta_2) (\eta_1' - \eta_2') \cdot \\ \cdot F(\eta_1 - \eta_1') d\eta_1 d\eta_2 d\eta_1' d\eta_2'$$

При интегрировании мы провели, как и в разделе 2, функциональную замену переменных $\vec{z}(\tau) = \vec{p}(\tau) + \vec{V}\tau$, $p(\omega) = p(\beta)$; $\vec{V} = \beta^{-1} [\vec{z}(\beta) - \vec{z}(\omega)]$ имеет смысл скорости и естественно, собрав далее коэффициенты при V^2 в $\sigma(\beta, \beta)$, отождествить их с массой полярона.

Интегральный оператор \mathcal{J}_2 в (25) тождественен интегральному оператору, введенному по формуле (9). Используя (25), получаем следующее представление для матрицы плотности:

$$\sigma(\vec{R}, \beta) = \exp \left[-\beta \mathcal{E}(\alpha, \beta) - \frac{\beta m V^2}{2} \right], \\ \mathcal{E}(\alpha, \beta) = 3\theta \ln \frac{sh \lambda v}{v sh \lambda} - 3w \frac{v^2}{4v'} \left[ch \lambda v - \frac{1}{\lambda v} \right] - \\ - \frac{\alpha \beta^{1/2}}{\sqrt{\pi}} I_{1,2} \left[\Phi^{-1/2}(ix_1 - x_2) \right], \\ m(\beta) = 1 - 2 \left[\Delta_2 + (v^2) \frac{\partial \Delta_2}{\partial v^2} \right] + \frac{\alpha v^3 \beta^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} \cdot \\ \cdot I_{1,2} \left[(x_2 - x_1 - \theta \Delta_1)^2 \Phi^{-3/2}(ix_1 - x_2) \right], \theta = \beta^{-1}.$$

Формулы (26) и решают задачу установления замкнутых выражений для $\mathcal{E}(\alpha, \beta)$ и m при произвольных α и θ . Мы видим, что сравнительно с теорией возмущений (см. (15)) ситуация существенно усложнилась: $I_{1,2}$ действует на более сложные функции, параметрически зависящие от β , v , w' , возникли дополнительные слагаемые и т.п. Параметры v и w находятся из условия минимума свободной энергии полярона. Проанализируем сначала случай низких температур ($\theta \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty$). Опуская в интегральном

операторе слагаемые $\sim e^{-\beta}$ и используя формулу Дирихле, имеем

$$\varepsilon(0, \beta) = 3 \theta \ln \left[\frac{sh \lambda v}{v sh \lambda} \right] - 3w \frac{v^2-1}{4v} \left[cth \lambda v - \frac{1}{\lambda v} \right] -$$

$$- 2v \left(\frac{\beta}{3} \right)^{1/2} \int_0^1 (1-x) e^{-\beta x} \phi_{1/2}(x) dx,$$

$$m(\beta) = 1 - 2 \left[\Delta_2 + (v^2-1) \frac{\partial \Delta_2}{\partial v^2} \right] + \frac{\alpha v^3 \beta^{3/2}}{3\sqrt{\pi}}. \quad (27)$$

$$\int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 e^{-\beta(x_1-x_2)} (x_2-x_1-\theta \Delta_1)^2 \phi^{-3/2}(x_1-x_2),$$

$$\Delta_1 = \left(\frac{\beta^2}{v} \right)^2 \int_0^1 \int_0^1 dy_1 dy_2 c(y_1-y_2) (y_1-y_2) \left[\Phi(x_1-y_1) - \Phi(x_2-y_1) \right],$$

$$\Delta_2 = \left(\frac{\beta^3}{v} \right)^2 \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 dy_1 dy_2 dy'_1 dy'_2 c(y_1-y_2) c(y'_1-y'_2) \cdot$$

$$\cdot (y_1-y_2)(y'_1-y'_2), \quad c(x) = c e^{-\beta w|x|}.$$

Ниже мы детальнее обсудим случай сильной и слабой связи: $\alpha \rightarrow \infty$ и $\alpha \rightarrow 0$ соответственно. Анализ поведения Δ_1 и Δ_2 требует весьма громоздких вычислений. В первом случае будет изучена главная асимптотика по α для $m(\beta)$. Во втором случае они оказываются порядка $O(\alpha \theta)$. В обоих этих случаях $\Phi \approx x/(1-x)$. Опуская длинные выкладки, приведем окончательные формулы:

$$\varepsilon(0, \beta) = \frac{3w}{4v} (v-1)^2 - \frac{\alpha v \Phi(0,1)}{\sqrt{\pi}} + \theta \left\{ 3 \left(\frac{v^2-1}{2v} - \ln v \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{\alpha v}{\sqrt{\pi}} \left[\Phi(1,1) - \frac{\Phi(2,3)}{2} \right] \right\} + O(\theta^2), \quad (28)$$

$$m(\beta) = 1 + \frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \Phi(2,3) + \theta \left\{ \frac{3}{w} \left(1 - \frac{1}{v} \right)^2 + \frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \left[\frac{3}{2} \Phi(4,5) - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \Phi(3,3) - \frac{6}{w} \left(1 - \frac{1}{v^2} \right) \Phi(2,3) \right] \right\} + O(\theta^2).$$

где

$$\Phi(k, l) = \int_0^{\infty} x^k e^{-x} \phi_{l/2}(x) dx, \quad \phi_l(x) = x + \frac{v^2-1}{vw} (1-e^{-wx}).$$

Использование ЭВМ позволит проанализировать эволюции $\mathcal{E}(\theta, \beta)$ и $m(\beta)$ во всем интервале $0 < \alpha < \infty$. Если, однако, рассмотреть предельные случаи $\alpha \rightarrow 0$ и $\alpha \rightarrow \infty$, то в первом случае с точностью до $O(\alpha^2)$ имеем $v \approx 1 + O(\alpha)$, $\Phi(k, \ell) \approx (\kappa - \frac{\ell}{2}) \Gamma(\kappa - \frac{\ell}{2})$, $\Gamma(x)$ - гамма-функция Эйлера - и (28) дают

$$\mathcal{E}(\theta, \beta) = -\alpha \left(1 - \frac{\theta}{4}\right) - \frac{\alpha^2}{81} + \dots, \quad m(\beta) = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{\alpha\theta}{8} + 0.025\alpha^2 + \dots, \quad (29)$$

что переходит в известные результаты при $\theta \rightarrow 0^{2-4/}$ и совпадает с первым порядком теории возмущений (21). Опущены члены $O(\alpha^3)$ и $O(\theta\alpha^2)$; по-видимому, представляет интерес для сравнения с результатом использования вариационной процедуры проделать вычисления по теории возмущения до α^2 (см. (19)). В случае $\alpha \rightarrow \infty$ для $\mathcal{E}(\theta, \beta)$ учтем все исчезающие члены, а для $m(\beta)$ ограничимся главной асимптотикой. В этих предположениях имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\theta, \beta) &= \frac{3\theta}{2} - \frac{3W}{2} + \frac{3u}{4} + 3\theta \ln W - 3\theta \ln u + \\ &+ (\theta-1) \frac{\alpha W^{1/2}}{\sqrt{\pi}} + \frac{\alpha}{(\pi u)^{1/2}} \left[\left(\frac{1}{2} - 2\theta \right) W^2 - \tilde{C} \right], \\ m(\beta) &= \frac{2\alpha^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} (1 - 9\theta). \end{aligned} \quad (30)$$

$\tilde{C} = 2 \ln 2 + C$, C - постоянная Эйлера-Маскерони, W и $u = vW$ - вариационные параметры. Если находить их из условия минимума $\mathcal{E}(\theta)$, \bar{W} и \bar{u} даются выражениями

$$\bar{W} = 1 + \theta, \quad \bar{u} = \frac{4\alpha^2}{9\pi} (1 - 2\theta), \quad \bar{v} = \frac{4\alpha^2}{9\pi} (1 - 3\theta). \quad (31)$$

Подставляя (31) в (30), имеем

$$\mathcal{E}(\theta, \beta) = -\frac{\alpha^2}{3\pi} - \frac{3}{2} (2 \ln 2 + C) - \frac{3}{4} + \theta \left[\frac{2\alpha^2}{3\pi} - \right.$$

$$m(\beta) = \frac{16d^4}{81\pi^2} \left(1 - 12\theta \right) \left[-3 \ln \left(\frac{4d^2}{9\pi} \right) - \frac{3}{2} \left(2 \ln 2 + C + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (32)$$

Более последовательное (но приводящее к несколько более громоздким вычислениям) определение их из минимума свободной энергии дает

$$\bar{W} = 1 + \dots, \quad \bar{v} = \frac{4d^2}{9\pi}, \quad \bar{u} = \frac{4d^2}{9\pi}, \quad (33)$$

что не меняет выражения (32) для $\mathcal{E}(0, \beta)$, а $m(\beta) = \frac{16d^4}{81\pi^2} (1 - 9\theta)$. При $\theta \rightarrow 0$ (32) переходят в известные значения, вычисленные Фейнманом^{/2/}. Случай $\beta \rightarrow 0$, если ограничиться главной асимптотикой, анализируется сравнительно несложно. Имеем при $\beta \rightarrow 0$

$$\mathcal{E}(0, \beta) = -\frac{\alpha}{2} (\pi\beta)^{3/2} + O(\beta), \quad m(\beta) = 1 + \frac{\alpha}{6} \pi^{1/2} \beta^{3/2}, \quad (34)$$

что совпадает с результатом (22), полученным по теории возмущений. Оставляя подробное обсуждение температурной зависимости $\mathcal{E}(0, \beta)$ и $m(\beta)$, найденной в рамках использования боголюбовского эффективного гамильтониана^{/9/}, до нашей следующей публикации, отметим лишь, что, как и следовало ожидать, в предельных случаях $\alpha \rightarrow 0$ и $\alpha \rightarrow \infty$ небольшие отличия имеют место в численных коэффициентах при θ для эффективной массы полярона.

В недавно вышедших работах^{/13, 14/} методом континуального интегрирования исследовалась температурная зависимость энергии основного состояния и массы полярона. Использовался большой канонический ансамбль^{/13/} и реакция поляронной системы на внешнее электрическое поле^{/14/}. Масса полярона $m(\beta)$ определялась разложением энергии системы по $(\vec{P} - \vec{P}_p)$:

$$E(\vec{P}) = E(0) + \frac{(\vec{P} - \vec{P}_p)^2}{2 m_{\text{eff}}(\beta)} \dots, \quad \vec{P}_p - \text{средний импульс}$$

поля фононов. Получены представления для $M_{eff}(\beta)$ и исследована высокотемпературная асимптотика.

Мы признательны В.Гётце, М.А.Каганову, Б.В.Мошинскому, М.А.Смондыреву за обсуждения и ценные замечания.

Л и т е р а т у р а

1. С.И.Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, 1951.
2. Р.Фейнман. Статистическая механика, гл.8, "Мир", 1975.
3. Дж.Аппель в сб. Полярны, "Наука", 1975.
4. Polarons and Excitons, Plenum Press, N.Y., 1962.
5. Л.Д.Ландау. Собрание трудов."Наука", 1969, т.1, стр.90.
6. П.С.Зырянов, М.И.Клингер. Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках, "Наука", 1976.
7. М.А.Кривоглаз, С.И.Пекар. Изв. АН СССР, сер.физич, 1957, 21, 3; 1957, 21, 16; 1957, 21, 33.
8. У.Осака. Progr.Theoret.Phys., 1959, 22, 437.
9. Н.Н.Боголюбов. Собрание трудов. "Наукова думка", Киев, 1970, т.2, стр.499.
10. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. ТМФ, 1975, т.25, 1, стр. 30.
11. В.К.Струков, В.К.Федянин. ОИЯИ Р17-11954, Дубна, 1978.
12. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Физматгиз, М., 1962.
13. Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев. ОИЯИ Р2-80-268, Дубна, 1980.
14. Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев. ОИЯИ Р2-08-328, Дубна, 1980.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 февраля 1981 года.