сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-83-95

С.Н.Горшков, К.Родригес, В.К.Федянин

ЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ БОГОЛЮБОВА ДЛЯ ПОЛЯРОНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении проблемы полярона очень полезным оказалось детальное обсуждение его характеристик в рамках точно решаемой линейной модели, предложенной в работе Боголюбова [1]. Эта модель передает ряд свойств гамильтониана Фрелиха, и поэтому ее решение позволяет лучше понять поведение исходной электрон-фононной системы. Кроме того, при вычислении характеристик полярона с использованием гамильтонианов Пекара-Фрелиха и Боголюбова линейная модель может быть использована в качестве нулевого приближения для вариационных расчетов. При этом параметры модели выбираются с помощью неравенства Боголюбова для свободной энергии.

В [2,3] были вычислены характеристики полярона в рамках линейной модели для нулевого магнитного поля. В частности, было показано, что электрон-фононное взаимодействие приводит к перенормировке массы электрона и частот фононного поля и что линейная модель в простейшем случае эквивалентна одноосцилляторной модели Фейнмана.

В настоящей работе рассматривается линейная модель полярона при наличии постоянного однородного магнитного поля. В простейшем случае гамильтониан диагонализируется, что позволяет изучить совместное влияние магнитного поля и электрон-фононного взаимодействия на энергетический спектр системы. Далее показано, что линейная модель приводит к функционалам действия, которые обычно используются при рассмотрении полярона в магнитном поле [4]. Проведено вычисление свободной энергии и корреляционных функций такой системы.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Гамильтониан линейной модели в магнитном поле имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}|\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}|^2 + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}}(a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + \frac{1}{2}) +$$

$$+ i \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} (\vec{k}\vec{r}) \{ \mathcal{L}(\vec{k}) a_{\vec{k}} - \mathcal{L}^*(\vec{k}) a^+_{\vec{k}} \} + \sum_{i,j=1}^{3} \gamma_{ij} r_i r_j ,$$

$$\gamma_{ij} = \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \mathcal{L}^*(\vec{k}) \mathcal{L}(\vec{k}) k_i k_j .$$

где $\vec{r}$ и $\vec{p}$ - соответственно /обобщенные/ координата и импульс электрона; $a^+_{\vec{k}}$, $a_{\vec{k}}$ - операторы рождения и уничтожения оптических фононов с квазиимпульсом $\vec{k}$ и частотой $\omega_{\vec{k}}$, величины $\mathfrak{L}(\vec{k})$ описывают взаимодействие электрона с оптическими фононами. Используется система единиц, в которой масса электрона m и постоянная Планка $\hbar$ равны единице $/\hbar = m = 1/$. Магнитное поле будем считать постоянным и направленным вдоль оси z, так что векторный потенциал $\vec{A}$ можно задавать в виде

$$\vec{A} = \{-Hy,\ 0,\ 0\}.$$

Каноническое преобразование

$$\vec{p} = \vec{P} + \sum_{\vec{k}} \{\mathfrak{L}^*(\vec{k}) b^+_{\vec{k}} + \mathfrak{L}(\vec{k}) b_{\vec{k}}\},$$

$$\vec{r} = \vec{R},$$

$$a_{\vec{k}} = b_{\vec{k}} + i\mathfrak{L}^*(\vec{k})\vec{k}\vec{R},$$

$$a^+_{\vec{k}} = b^+_{\vec{k}} - i\mathfrak{L}(\vec{k})\vec{k}\vec{R}$$

от операторов $\vec{p}, \vec{r}; a_{\vec{k}}, a^+_{\vec{k}}$ к новым операторам $\vec{P}, \vec{R}; b_{\vec{k}}, b^+_{\vec{k}}$ позволяет переписать гамильтониан $\hat{H}$ линейной модели в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\{\vec{P} - \frac{e}{c}\vec{A} + \sum_{\vec{k}} \vec{k}[\mathfrak{L}^*(\vec{k}) b^+_{\vec{k}} + \mathfrak{L}(\vec{k}) b_{\vec{k}}]\} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} (b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{1}{2}). \qquad /1/$$

Отметим, что величины P_x и P_z порознь коммутируют с гамильтонианом $\hat{H}$ и между собой: налицо два независимых интеграла движения задачи. В нулевом магнитном поле независимым интегралом движения является также величина P_y.

3. ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА /1/

Выполним диагонализацию гамильтониана $\hat{H}$ /1/ в предположении, что фононные частоты $\omega_{\vec{k}}$ не зависят от $\vec{k}$ $(\omega_{\vec{k}} = \omega)$, а величины $\mathfrak{L}(\vec{k})$, $\mathfrak{L}(\vec{k})$ являются сферически-симметричными функциями вектора $\vec{k}$ $(\mathfrak{L}(\vec{k}) = \mathfrak{L}(|\vec{k}|))$.

Совершая каноническое преобразование фононных операторов $b_{\vec{k}}$, $b^+_{\vec{k}}$:

$$b_{\vec{k}} \to b_{\vec{k}} - \frac{k_z \mathfrak{L}^*(k)}{\omega\nu^2} P_z,$$

$$b^+_{\vec{k}} \to b^+_{\vec{k}} - \frac{k_z \mathfrak{L}(k)}{\omega\nu^2} P_z,$$

где

$$\nu^2 = 1 + \frac{2}{3\omega} \sum_{\vec{k}} k^2\, \mathfrak{L}^*(k)\mathfrak{L}(k),$$

получим

$$\hat{H} = \frac{P_z^2}{2\nu^2} + \frac{1}{2}\{P_x + \frac{eH}{c}y + \sum_{\vec{k}} k_x[\mathfrak{L}^*(k) b^+_{\vec{k}} + \mathfrak{L}(k) b_{\vec{k}}]\}^2 +$$

$$+ \frac{1}{2}\{P_y + \sum_{\vec{k}} k_y[\mathfrak{L}^*(k) b^+_{\vec{k}} + \mathfrak{L}(k) b_{\vec{k}}]\}^2 + \qquad /2/$$

$$+ \frac{1}{2}\{P_z + \sum_{\vec{k}} k_z[\mathfrak{L}^*(k) b^+_{\vec{k}} + \mathfrak{L}(k) b_{\vec{k}}]\}^2 +$$

$$+ \sum_{\vec{k}} \omega(b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \frac{1}{2}).$$

Для диагонализации гамильтониана $\hat{H}$ по операторам y, P_y, $b_{\vec{k}}$, $b^+_{\vec{k}}$ заменим операторы y, P_y на соответствующие операторы рождения и уничтожения b_0, b^+_0 по формулам

$$y + \frac{cP_x}{eH} = \sqrt{\frac{1}{2\omega_c}}(b_0 + b^+_0),$$

$$P_y = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(b_0 - b^+_0),$$

где $\omega_c = |\frac{eH}{c}|$ - циклотронная частота свободного электрона, и воспользуемся общим методом диагонализации квадратичных по бозе-операторам форм /см., например, [5] /. Квадратичная по бозе-операторам b_k, b^+_k эрмитова форма

$$T = \sum_{k,k'} S_{kk'} b^+_k b_{k'} + \frac{1}{2}\sum_{k,k'} R_{kk'} b^+_k b^+_{k'} + \frac{1}{2}\sum_{k,k'} R^*_{kk'} b_k b_{k'}$$

каноническим преобразованием

$$b_k = \sum_\mu u_{k\mu}\beta_\mu + \sum_\mu v_{k\mu}\beta_\mu^+ ,$$

$$b_k^+ = \sum_\mu u_{k\mu}^*\beta_\mu^+ + \sum_\mu v_{k\mu}^*\beta_\mu$$

приводится к виду

$$T = -\sum_{k,\mu} E_\mu |v_{k\mu}|^2 + \sum_\mu E_\mu \beta_\mu^+\beta_\mu ,$$

если E_μ, $u_{k\mu}$, $v_{k\mu}$ являются решением задачи на собственные значения:

$$Eu_k = \sum_{k'} S_{kk'}u_{k'} + \sum_{k'} R_{kk'}v_{k'} , \qquad /3/$$

$$-Ev_k = \sum_{k'} S_{kk'}^* v_{k'} + \sum_{k'} R_{kk'}^* u_{k'} ,$$

при соответствующем условии нормировки

$$\sum_k u_k^* u_k - \sum_k v_k^* v_k = 1 .$$

В нашем случае, как легко проверить, гамильтониан /2/ приводится к виду

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\omega_c + \frac{3}{4}\omega(\nu^2 - 1) + \frac{P_z^2}{2\nu^2} + T + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2}\omega ,$$

где матрицы S и R квадратичной формы T даются формулами

$$S_{00} = \omega_c ,$$

$$S_{0\vec{k}} = S_{\vec{k}0}^* = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\, \mathfrak{L}(k)(\pm k_x + ik_y),$$

$$S_{\vec{k}\vec{k}'} = \vec{k}\vec{k}'\, \mathfrak{L}^*(k)\,\mathfrak{L}(k') + \omega\delta_{\vec{k}\vec{k}'} ,$$

$$R_{00} = 0,$$

$$R_{0\vec{k}} = R_{\vec{k}0} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\, \mathfrak{L}^*(k)(\pm k_x + ik_y),$$

$$R_{\vec{k}\vec{k}'} = \vec{k}\vec{k}'\, \mathfrak{L}^*(k)\,\mathfrak{L}(k') .$$

/Здесь знак "+" относится к случаю $eH > 0$, "-" - к случаю $eH < 0$ /.

Уравнения /3/ с учетом этих формул переписываются в виде

$$Eu_0 = \omega_c u_0 + \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\{\pm B_x + iB_y\} ,$$

$$(E-\omega)u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\, \mathfrak{L}^*(k)\{(\pm k_x - ik_y)u_0 + (\pm k_x + ik_y)v_0\} + $$

$$+ \mathfrak{L}^*(k)\vec{k}\vec{B}$$

и, соответственно,

$$-Ev_0 = \omega_c v_0 + \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\{\pm B_x - iB_y\} ,$$

$$-(E+\omega)v_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\, \mathfrak{L}(k)\{(\pm k_x - ik_y)u_0 + (\pm k_x + ik_y)v_0\} + $$

$$+ \mathfrak{L}(k)\vec{k}\vec{B},$$

где вектор $\vec{B}$ есть, по определению,

$$\vec{B} = \sum_{\vec{k}} \vec{k}\{\mathfrak{L}(k)u_{\vec{k}} + \mathfrak{L}^*(k)v_{\vec{k}}\}.$$

Отметим, что в этой задаче нас должны интересовать лишь неотрицательные собственные значения E.

Будем искать сначала значения E, отличные от ω. В этом случае величины $u_{\vec{k}}$ и $v_{\vec{k}}$ легко могут быть исключены из уравнений нашей системы, и тогда мы придем к решению следующей задачи на собственные значения:

$$Eu_0 = \omega_c u_0 + \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\{\pm B_x + iB_y\} ,$$

$$-Ev_0 = \omega_c v_0 + \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}\{\pm B_x - iB_y\} ,$$

$$B_x = \frac{2\omega}{E^2-\omega^2}\,\frac{1}{3}\sum_{\vec{k}} k^2\,\mathcal{L}^*(k)\,\mathcal{L}(k)\,\{\pm\sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(u_0+v_0) + B_x\},$$

$$B_y = \frac{2\omega}{E^2-\omega^2}\,\frac{1}{3}\sum_{\vec{k}} k^2\,\mathcal{L}^*(k)\,\mathcal{L}(k)\,\{ i\sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(-u_0+v_0) + B_y\},$$

$$B_z = \frac{2\omega}{E^2-\omega^2}\,\frac{1}{3}\sum_{\vec{k}} k^2\,\mathcal{L}^*(k)\,\mathcal{L}(k)\,B_z .$$

Если $E=\omega\nu$, то из последнего уравнения следует, что B_z может принимать любое значение /напомним, что $\nu^2 = 1+\frac{2}{3}\frac{1}{\omega}\sum_{\vec{k}} k^2|\mathcal{L}(k)|^2$/. Из первых четырех уравнений получаем $u_0 = v_0 = B_x = B_y = 0$. В этом случае нормированное решение /3/ имеет вид

$$u_0 = v_0 = 0, \quad u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\nu+1}{2\omega\nu(\nu-1)}}\,k_z\,\mathcal{L}^*(k), \qquad /4/$$

$$v_{\vec{k}} = -\sqrt{\frac{\nu-1}{2\omega\nu(\nu+1)}}\,k_z\,\mathcal{L}(k).$$

Если $E\neq\omega\nu$, то $B_z=0$; переменные B_x и B_y могут быть исключены из системы. В результате получаем

$$\{E(E^2-\omega^2\nu^2) - \omega_c(E^2-\omega^2)\}u_0 = 0,$$

$$\{E(E^2-\omega^2\nu^2) + \omega_c(E^2-\omega^2)\}v_0 = 0.$$

Эта система будет иметь нетривиальное решение, только если E является корнем одного из кубических уравнений:

$$E(E^2-\omega^2\nu^2) = \omega_c(E^2-\omega^2),$$

$$E(E^2-\omega^2\nu^2) = -\omega_c(E^2-\omega^2).$$

Первое из этих уравнений имеет три корня: $-\omega\nu < E_1 < -\omega$, $0 < E_2 < \omega$, $E_3 > \omega\nu$, два из которых E_2 и E_3 положительны и отличны от ω и $\omega\nu$; второе уравнение имеет корни $-E_1$, $-E_2$, $-E_3$, из которых положителен /и отличен от ω и $\omega\nu$/ только один корень $-E_1$.

Нормированное решение, отвечающее корням $E=E_2, E_3$, тогда имеет вид

$$u_0 = \frac{E^2-\omega^2\nu^2}{\sqrt{(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\omega^2-1)}},$$

$$v_0 = 0,$$

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(\pm k_x - ik_y)\,\mathcal{L}^*(k)\,\frac{E+\omega}{\sqrt{(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu^2-1)}}, \qquad /5/$$

$$v_{\vec{k}} = -\sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(\pm k_x - ik_y)\,\mathcal{L}(k)\,\frac{E-\omega}{\sqrt{(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu^2-1)}}.$$

Нормированное же решение, отвечающее значению $E=-E_1$, есть

$$u_0 = 0, \quad v_0 = \frac{E^2-\omega^2\nu^2}{\sqrt{-(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu^2-1)}},$$

$$u_{\vec{k}} = \sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(\pm k_x + ik_y)\,\mathcal{L}^*(k)\,\frac{E+\omega}{\sqrt{-(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu^2-1)}}, \qquad /6/$$

$$v_{\vec{k}} = -\sqrt{\frac{\omega_c}{2}}(\pm k_x + ik_y)\,\mathcal{L}(k)\,\frac{E-\omega}{\sqrt{-(E^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu^2-1)}}.$$

Таким образом, мы нашли четыре неотрицательных значения E, отличные от ω, которым отвечают нетривиальные решения u_0, v_0, $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}}$ системы /3/. Остальные интересующие нас значения E будут просто $E=\omega$. Для соответствующих им нетривиальных решений имеем

$$u_0 = v_0 = 0, \quad v_{\vec{k}} = 0, \qquad /7/$$

а величины $u_{\vec{k}}$ определяются из трех уравнений

$$\sum_{\vec{k}} \vec{k}\,\mathcal{L}(k)\,u_{\vec{k}} = 0. \qquad /7'/$$

С учетом полученных результатов /4-7/ величина

$$-\sum_{\vec{k},\mu} E_\mu |v_{\vec{k}\mu}|^2$$

принимает вид

$$-\frac{\omega(\nu-1)^2}{4} - E_1 - \frac{1}{2}\omega\omega_c(\nu^2-1)\sum_{i=1}^{3} E_i\,\frac{(E-\omega)^2}{(E_i^2-\omega^2\nu^2)^2 + 2E\omega^2\omega_c(\nu-1)}, \qquad /8/$$

где E_i - три корня уравнения

$$E(E^2-\omega^2\nu^2)-\omega_c(E^2-\omega^2)=0,$$

связанные следующими очевидными соотношениями:

$$\begin{aligned} &E_1+E_2+E_3=\omega_c, \\ &E_1E_2+E_2E_3+E_3E_1=-\omega^2\nu^2, \\ &E_1E_2E_3=-\omega_c\omega^2. \end{aligned} \qquad /9/$$

Используя последовательно соотношения /9/, можно вычислить сумму в /8/. Результат этого достаточно громоздкого вычисления позволяет получить окончательно

$$\hat{H}=\frac{P_z^2}{2\nu^2}+\sum_{\vec{k}}^{N-3}\omega\left(\beta^+_{\vec{k}}\beta_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right)+\omega\nu\left(\beta_0^+\beta_0+\frac{1}{2}\right)+ \qquad /10/$$

$$+\sum_{i=1}^{3}E_i\left(\beta_i^+\beta_i+\frac{1}{2}\right),$$

где E_i - три положительных корня уравнений

$$E(E^2-\omega^2\nu^2)=\pm\,\omega_c(E^2-\omega^2),$$

или, что то же самое, уравнения

$$E^2(E^2-\omega^2\nu^2)^2=\omega_c^2(E^2-\omega^2)^2.$$

Отметим, что из диагонализованного /10/ гамильтониана $\hat{H}$ может быть легко рассчитана статистическая сумма и свободная энергия линейной модели в магнитном поле для рассмотренного выше изотропного случая. Учитывая, что в силу вырождения гамильтониана $\hat{H}$ по квантовому числу P_x в интервале ΔP_x содержится $V\frac{\omega_c}{4\pi^2}\Delta P_z$ собственных значений [8] /V - объем системы/, мы получаем для статистической суммы Z выражение

$$Z=V\frac{\omega_c}{4\pi^2}\int dP_z\,\mathrm{Sp}\,e^{-\beta\hat{H}},\quad \beta=\frac{1}{kT}$$ - обратная температура,

то есть

$$Z=V\sqrt{\frac{1}{2\pi\beta}}^{\,3}\,\nu\beta\omega_c\prod_{\vec{k}}\frac{1}{2\sinh\frac{\beta\omega}{2}}\times\prod_{i=1}^{3}\frac{\sinh\frac{\beta\omega}{2}}{\sinh\frac{\beta E_i}{2}}\times\frac{1}{2\sinh\frac{\beta\omega\nu}{2}}.$$

Соответственно вклад в свободную энергию, обусловленный взаимодействием электрона с фононами и магнитным полем, примет вид

$$F=-\frac{1}{\beta}\ln\left\{\nu\beta\omega_c\prod_{i=1}^{3}\frac{\sinh\frac{\beta\omega}{2}}{\sinh\frac{\beta E_i}{2}}\times\frac{1}{2\sinh\frac{\beta\omega\nu}{2}}\right\}.$$

4. КОНТИНУАЛЬНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

В общем случае статистическая сумма, отвечающая гамильтониану H/1/, может быть записана в виде [7]

$$Z=\mathrm{Sp}\,e^{-\beta H_0}\,T e^{-\int_0^\beta d\tau\,\frac{1}{2}\left\{\vec{P}(\tau)-\frac{e}{c}\vec{A}(\tau)+\sum_{\vec{k}}\vec{k}\left[\mathcal{L}^*(\vec{k})\,b^+_{\vec{k}}(\tau)+\mathcal{L}(\vec{k})\,b_{\vec{k}}(\tau)\right]\right\}^2}, \qquad /11/$$

где

$$H_0=\sum_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}}\left(b^+_{\vec{k}}b_{\vec{k}}+\frac{1}{2}\right),\quad \text{а}\quad \hat{B}(\tau)=e^{H_0\tau}\,\hat{B}\,e^{-H_0\tau}$$ -

оператор $\hat{B}$ в температурном представлении оператора H_0.

Вводя в рассмотрение символ континуального интегрирования и используя равенство

$$\int\limits_{\vec{x}(0)=0}D\vec{x}\,e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta\dot{\vec{x}}^2d\tau}=\int\limits_{\vec{x}(0)=0}D\vec{x}\,e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta\left\{\dot{\vec{x}}-i\mathbf{a}(\tau)\right\}^2d\tau}=1,$$

получим

$$Z = \int\limits_{\vec{x}(0)=0} D\vec{x}\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau}\, \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H_0} \times \qquad /12/$$

$$\times\, T\, e^{i\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}\{\vec{P}(\tau) - \frac{e}{c}\vec{A}(\tau) + \sum_{\vec{k}} \vec{k}[\mathfrak{L}^*(\vec{k}) b^+_{\vec{k}}(\tau) + \mathfrak{L}(\vec{k}) b_{\vec{k}}(\tau)]\}} .$$

Учитывая теперь, что под знаком T-произведения операторы $P_x(\tau)$ и $P_z(\sigma)$ коммутируют между собой, а также со всеми другими операторами в любой момент времени, мы можем выделить из T-произведения множители $T e^{i\int_0^\beta d\tau P_x(\tau)\dot{x}_1(\tau)} \equiv e^{iP_x x_1(\beta)}$ и $T e^{i\int_0^\beta d\tau P_z(\tau)\dot{x}_3(\tau)} \equiv e^{iP_z x_3(\beta)}$. Тогда вычисление в /12/ шпура по переменным P_x и P_z с учетом того, что в интервале ΔP_x имеется $\frac{L_x}{2\pi}\Delta P_x$, а в интервале ΔP_z соответственно $\frac{L_z}{2\pi}\Delta P_z$ собственных значений, дает

$$Z = L_x L_z \int\limits_{\substack{x(0)=0;\\ x_1(\beta)=x_3(\beta)=0}} Dx\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau}\, \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H_0}\, T\, e^{i\int_0^\beta d\tau\{P_y(\tau)\dot{x}_2(\tau) + \frac{eH}{c} y(\tau)\dot{x}_1(\tau)\}} \times \qquad /12'/$$

$$\times\, T e^{i\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}}(\tau) \sum_{\vec{k}} \vec{k}[\mathfrak{L}^*(\vec{k}) b^+_{\vec{k}}(\tau) + \mathfrak{L}(\vec{k}) b_{\vec{k}}(\tau)]} .$$

"Распутывание" оставшихся в /12'/ T-произведений может быть выполнено, например, методом, описанным в работе [8]. В частности, первое из них при учете условия $x(\beta) = 0$ "распутывается" в виде

$$e^{iP_y x_2(\beta) - i\frac{eH}{c}\int_0^\beta \dot{x}_1(\tau) x_2(\tau) d\tau} .$$

После вычисления шпура по P_z получим для Z выражение

$$Z = V \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\beta)=0} D\vec{x}\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau - i\frac{eH}{c}\int_0^\beta \dot{x}_1 x_2 d\tau} \times$$

$$\times\, \mathrm{Sp}\, e^{-\beta H_0}\, T e^{i\int_0^\beta d\tau\, \dot{\vec{x}} \sum_{\vec{k}} [\mathfrak{L}^*(\vec{k}) b^+_{\vec{k}}(\tau) + \mathfrak{L}(\vec{k}) b_{\vec{k}}(\tau)]} ,$$

где $V = L_x L_y L_z$ - объем системы. "Распутывая" далее оставшееся T-произведение и беря шпур по фононным переменным, имеем

$$Z = V \prod_{\vec{k}} \frac{1}{2\sinh\frac{\beta\omega_{\vec{k}}}{2}} \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\beta)=0} D\vec{x}\, e^{-S_0[\vec{x}]} ,$$

$$S_0[\vec{x}] = \frac{1}{2}\int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau + i\frac{eH}{c}\int_0^\beta x_1(\tau) x_2(\tau) d\tau + \qquad /13/$$

$$+ \sum_{\vec{k}} |\mathfrak{L}(\vec{k})|^2 \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2\, (\vec{k}\dot{\vec{x}}(\tau_1))(\vec{k}\dot{\vec{x}}(\tau_2)) \times$$

$$\times \left\{ \frac{e^{\omega_{\vec{k}}(\tau_1-\tau_2)}}{e^{\beta\omega_{\vec{k}}} - 1} + \frac{e^{-\omega_{\vec{k}}(\tau_1-\tau_2)}}{1 - e^{\beta\omega_{\vec{k}}}} \right\} .$$

Отметим, что интегрирование по частям последнего слагаемого в действии $S_0[\vec{x}]$ с учетом условия $\vec{x}(0) = \vec{x}(\beta) = 0$ позволяет написать

$$S_0[\vec{x}] = \frac{1}{2}\int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau + i\frac{eH}{c}\int_0^\beta \dot{x}_1(\tau) x_2(\tau) d\tau +$$

$$+ \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\tau_1 - \tau_2)\{x_i(\tau_1) - x_i(\tau_2)\}\{x_j(\tau_1) - x_j(\tau_2)\},$$

где

$$C_{ij}(\tau) = C_{ij}(\beta - \tau) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \omega^2_{\vec{k}} |\mathcal{L}(\vec{k})|^2 k_i k_j \times$$

$$\times \left\{ \frac{e^{\omega_{\vec{k}}\tau}}{e^{\beta\omega_{\vec{k}}} - 1} + \frac{e^{-\omega_{\vec{k}}\tau}}{1 - e^{-\beta\omega_{\vec{k}}}} \right\}.$$

Если все фононные частоты $\omega_{\vec{k}}$ линейной модели одинаковы ($\omega_{\vec{k}} = \omega$) или если электрон взаимодействует только с одной фононной модой, то выражение $S_0[\vec{x}]$ приводится к виду

$$S_0[\vec{x}] = \frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau + i \frac{eH}{c} \int_0^\beta \dot{x}_1(\tau) x_2(\tau) d\tau + \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \times$$

$$\times \{ x_i(\tau_1) - x_i(\tau_2) \} \{ x_j(\tau_1) - x_j(\tau_2) \} \left\{ \frac{e^{\omega(\tau_1 - \tau_2)}}{e^{\beta\omega} - 1} + \frac{e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2)}}{1 - e^{-\beta\omega}} \right\},$$

$$C_{ij} = \frac{1}{2} \omega^2 \sum_{\vec{k}} |\mathcal{L}(\vec{k})|^2 k_i k_j$$

– действию одноосцилляторной анизотропной модели Фейнмана в магнитном поле H.

Приведем общие выражения для свободной энергии и корреляционной функции

$$J(k; \tau_1, \tau_2) \equiv \left\langle e^{i\vec{k}\{\vec{x}(\tau_1) - \vec{x}(\tau_2)\}} \right\rangle_{S_0} = \frac{\int\limits_{x(0) = x(\beta) = 0} D\vec{x}\, e^{-S_0[\vec{x}]} e^{i\vec{k}\{\vec{x}(\tau_1) - \vec{x}(\tau_2)\}}}{\int\limits_{x(0) = x(\beta) = 0} D\vec{x}\, e^{-S_0[\vec{x}]}}$$

для линейной модели, в которой $C_{ij}(\tau) = \delta_{ij} C_{ij}(\tau)$, то есть действие $S_0[\vec{x}]$ имеет вид

$$S_0[\vec{x}] = \frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{\vec{x}}^2 d\tau + i \frac{eH}{c} \int_0^\beta \dot{x}_1(\tau) x_2(\tau) d\tau + \tag{14}$$

$$+ \sum_{i=1}^{3} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 C_{ii}(\tau_1 - \tau_2) \{ x_i(\tau_1) - x_i(\tau_2) \}^2 .$$

В этом случае можно получить

$$F = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left\{ \frac{Z_n^{(3)}}{\bar{\omega}_n^2} \right\} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left\{ \frac{Z_n^{(1)} Z_n^{(2)} + \omega_c^2 \bar{\omega}_n^2}{\bar{\omega}_n^4} \right\}$$

и

$$J(\vec{k}; \tau_1, \tau_2) = J(\vec{k}; \tau_1 - \tau_2) = e^{-\frac{2}{\beta} \sum_{i=1}^{3} k_i^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - \cos \bar{\omega}_n(\tau_1 - \tau_2)}{\tilde{Z}_n^{(i)}}},$$

где

$$Z_n^{(i)} = \bar{\omega}_n^2 \left\{ 1 + \sum_{\vec{k}} |\mathcal{L}(\vec{k})|^2 k_i^2 \frac{2\omega_{\vec{k}}}{\bar{\omega}_n^2 + \omega_{\vec{k}}^2} \right\}, \quad \bar{\omega}_n = \frac{2\pi n}{\beta}, \quad n = 1, 2, \ldots$$

и, соответственно,

$$\tilde{Z}_n^{(1)} = Z_n^{(1)} + \frac{\omega_c^2 \bar{\omega}_n^2}{Z_n^{(2)}};$$

$$\tilde{Z}_n^{(2)} = Z_n^{(2)} + \frac{\omega_c^2 + \bar{\omega}_n^2}{Z_n^{(1)}};$$

$$\tilde{Z}_n^{(3)} = Z_n^{(3)}.$$

Эти общие выражения могут быть использованы в конкретных расчетах.

Отметим, что действие /14/ при $C_{ii}(\tau) = C_i \left\{ \frac{e^{w_i\tau}}{e^{\beta w_i} - 1} + \frac{e^{-w_i\tau}}{1 - e^{-\beta w_i}} \right\}$;

$C_1 = C_2 = C_\perp$, $C_3 = C_\parallel$; $w_1 = w_2 = w_\perp$, $w_3 = w_\parallel$ было использовано в работе /4/ в качестве пробного при вариационном расчете характеристик полярона в магнитном поле.

Мы признательны Н.Н.Боголюбову /мл./ за обсуждение результатов и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bogolubov N.N. JINR, E17-11822, Dubna, 1978.
2. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. /мл./ ОИЯИ, Р17-81-65, Дубна, 1981.
3. Родригес К., Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-80-745, Дубна, 1980.
4. Peeters F.M., Devreese J.T. Phys.Rev.B, 1982, v. 25, No.12, p. 7281, 7302.
5. Тябликов С.В. Методы квантовой теории магнетизма."Наука", М., 1975.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. ГИФМЛ, М., 1963.
7. Мощинский Б.В., Родригес К., Федянин В.К. ТМФ, 1980, т. 45, №2, с. 251-260.
8. Струков В.К., Федянин В.К. ОИЯИ, Р17-11954, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 февраля 1983 года.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Горшков С.Н., Родригес К., Федянин В.К. Р17-83-95

Линейная модель Боголюбова для полярона в магнитном поле

Изучается линейная модель Боголюбова для полярона в магнитном поле. В простейшем случае изотропной зависимости параметра взаимодействия электрона с фононными модами одинаковой частоты выполнена диагонализация гамильтониана модели. Показано, что линейная модель приводит к функционалам действия, которые обычно используются как пробные при рассмотрении полярона в магнитном поле. Проведено вычисление свободной энергии и корреляционных функций.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Gorshkov S.N., Rodriguez C., Fedyanin V.K. P17-83-95

Linear Model of Bogolubov for the Polaron in Magnetic Field

Linear model of Bogolubov for the polaron in a constant magnetic field is studied. For the particular case of isotropic dependence of the interaction parameter of electron with phonon modes of similar frequency the diagonalization of the Hamiltonian of the model is carried out. It is shown that the linear model leads to the action functionals which are usually used as trial while considering the polaron in the magnetic field. The calculation of the free energy and correlation functions is given.

The investigation has been performed at the Laboratory of the Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.