объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-84-689

Н.Н.Боголюбов (мл.), В.Н.Плечко

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Направлено в журнал
"Теоретическая и математическая физика"

1984

В работе[1] был предложен новый подход в равновесной теории полярона, основанный на суммировании по фононным степеням свободы методом T-произведений. Аналогичные методы были развиты и для задач кинетической теории[2]. Формализм T-произведений можно рассматривать как реализацию идей континуального интегрирования на более строгом и простом уровне.

Здесь мы рассмотрим схему теории возмущений для свободной энергии /статистической суммы/ в модели полярона при произвольной температуре, основываясь на полученном в [1] функциональном представлении для свободной энергии с просуммированными фононными степенями свободы /см. ниже /4//. Приведено описание процедуры, позволяющей выписать любой член ряда теории возмущений в виде суммы кратных интегралов, параметрически зависящих от температуры. В рамках метода детально рассматривается вычисление свободной энергии до второго порядка по a. Как оказывается, во всех высших порядках, начиная со второго, центральную роль играет четырехточечный коррелятор /см. /22//, свойства которого подробно изучены. Обсуждаются также аналогии с рядом теории возмущений для S -матрицы в теории поля.

1. МОДЕЛЬ ПОЛЯРОНА

Модель полярона описывает свободный электрон, взаимодействующий с фононным полем ионного кристалла. Задача полярона возникла в теории твердого тела[3-5]. В то же время она представляет и более широкий интерес как одна из задач нерелятивистской теории квантованных полей /о поляроне см., например, обзоры[3-10, 18]/.

С общей точки зрения полярон можно рассматривать как частный случай задачи о взаимодействии малой подсистемы S с бозонным резервуаром Σ.

Будем понимать под S электрон, а под Σ - фононное поле кристалла. Гамильтониан модели имеет вид:

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \sum_f \hbar\omega_f \left(b_f^+ b_f + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_f \frac{g_0}{|\vec{f}|} \left(\frac{\hbar}{2\omega_f}\right)^{1/2} \left(b_f + b_{-f}^+\right) e^{i\vec{f}\vec{r}} , \qquad /1/$$

где $\vec{p}$ и $\vec{r}$ - импульс и вектор положения электрона /квантовые операторы/; m - зонная масса электрона; b_f, b_f^+ - фононные амплитуды /бозе-операторы/; $\vec{f}$ - индекс квазидискретного импульса фононов, $\vec{f} = (2\pi n_1/L,\ 2\pi n_2/L,\ 2\pi n_3/L)$, n_1, n_2, n_3 - целые числа, $L^3 \equiv V$ - объем системы; ω_f - фононные частоты оптической ветви спектра /при вычислениях полагаем, как обычно, $\omega_f \equiv \omega \equiv \mathrm{const}$ /; g_0 - константа электрон-фононного взаимодействия. Введем также стандартную безразмерную константу

$$a = \frac{g_0^2}{4\pi\hbar\omega^2}\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}\,. \qquad /2/$$

Свободную энергию модели можно записать в виде*:

$$f = f(S) + f(\Sigma) + f_{int}(S,\ \Sigma), \qquad /3/$$

где $f(S)$ и $f(\Sigma)$ - хорошо известные выражения для свободных энергий невзаимодействующих подсистем S и Σ, а для свободной энергии взаимодействия после суммирования по фононным степеням свободы было получено [/1/]:

$$f_{int}(S,\ \Sigma) = -\frac{1}{\beta}\ln\langle T\{e^{\Phi}\}\rangle_{\Gamma},\quad \Gamma \equiv \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}, \qquad /4/$$

где $\beta = 1/\theta$, $\theta = kT$ - температура, $\langle\ldots\rangle_{\Gamma}$ - гиббсовское среднее по гамильтониану свободного электрона Γ; функционал Φ имеет следующий вид:

$$\Phi = \frac{1}{V}\sum_{f}\frac{g_0^2}{4\hbar\omega f^2}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, K(s-\sigma)\, e^{i\vec{f}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))}, \qquad /5/$$

$$K(s-\sigma) = \frac{e^{-\omega|s-\sigma|} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega|s-\sigma|}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}, \qquad /5a/$$

$$\vec{R}(s) = e^{s\frac{\Gamma}{\hbar}}\,\vec{r}\,e^{-s\frac{\Gamma}{\hbar}}. \qquad /5б/$$

В выражении для Φ частично сохраняется структура члена с взаимодействием в гамильтониане /1/. Фононные степени свободы здесь просуммированы /коэффициентная функция $K(s-\sigma)$/. В Φ входит

---

*Для произвольной системы с гамильтонианом H и температурой $\theta = kT$ имеем: $f = -\theta\ln \mathrm{Sp}\, e^{-H/\theta}$ - свободная энергия, $Z = \mathrm{Sp}\, e^{-H/\theta}$ - статистическая сумма, $\langle H\rangle = -\theta^2[\partial(f/\theta)/\partial\theta]$ - средняя энергия. Свободная энергия имеет прямой физический смысл как термодинамический потенциал.

операторная экспонента, содержащая только переменные электронной подсистемы. Величину $\vec{R}(s)$ можно рассматривать как оператор положения электрона при мнимом времени $t = -iS$. Знак T в /4/ означает хронологическое упорядочение по "временам" s, σ, входящим в Φ через $\vec{R}(s)$, $\vec{R}(\sigma)$:

$$T\{\vec{R}(s_1)\vec{R}(s_2)\ldots\vec{R}(s_n)\} = \vec{R}(s_{j_1})\vec{R}(s_{j_2})\ldots\vec{R}(s_{j_n}),$$

$$s_{j_1} \geq s_{j_2} \geq s_{j_3} \geq \ldots \geq s_{j_n}. \qquad /6/$$

Хронологически упорядоченные операторные выражения хорошо известны в задачах квантовой теории поля, см., например, [/17/].

Поскольку $\Phi \sim g_0^2 \sim a$ /см. /2//, то разлагая выражение /4/ в формальный ряд по Φ, получаем ряд теории возмущений по a для свободной энергии:

$$f_{int}(S,\Sigma) = -\frac{1}{\beta}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\ln\langle T\{e^{\xi\Phi}\}\rangle_{\Gamma}\right]_{\xi=0} =$$

$$= f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + \ldots, \qquad /7/$$

$$f_0 = 0,\quad f_1 = -\frac{1}{\beta}\langle T\{\Phi\}\rangle_{\Gamma},$$

$$f_2 = -\frac{1}{2\beta}\left[\langle T\{\Phi^2\}\rangle_{\Gamma} - \langle T\{\Phi\}\rangle_{\Gamma}^2\right].$$

... ...

Затравочный член $f_0 = 0$ соответствует свободному электрону, последующие члены описывают поправки вследствие взаимодействия.

Ряд для f_{int} построен из тех же величин, что и ряд для статистической суммы взаимодействия:

$$Z_{int}(S,\ \Sigma) = \langle T\{e^{\Phi}\}\rangle_{\Gamma} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} Z_n, \qquad /8/$$

$$Z_n = \frac{1}{n!}\langle T\{\Phi^n\}\rangle_{\Gamma}. \qquad /8a/$$

Поправка f_n в /7/ выражается через поправки Z_k при $k = 1,\ldots,n$, причем f_n и Z_n пропорциональны a^n. Хотя ряд для Z_{int} устроен проще, прямой физический смысл имеет свободная энергия f_{int}. Прежде всего мы детально рассмотрим вычисление поправок f_1 и f_2, а затем получим общее представление для Z_n через кратные интегралы.

2. ПЕРВАЯ ПОПРАВКА f_1

Первая поправка для свободной энергии f_1 несложно вычисляется в данном подходе /1/, она была получена ранее другими методами. Приведем здесь эти вычисления, поскольку основные моменты понадобятся при обсуждении высших порядков.

В соответствии с /5/ и /7/ имеем:

$$f_1 \equiv -\frac{1}{\beta}\langle T\{\Phi\}\rangle_\Gamma = -\frac{1}{4\beta\hbar\omega}\,\frac{1}{V}\sum_{f}\frac{g_0^2}{f^2}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\cdot K(s-\sigma)\times$$

$$\times\langle T\{e^{i\vec f(\vec R(s)-\vec R(\sigma))}\}\rangle_\Gamma. \qquad /9/$$

Для вычисления среднего воспользуемся общим соотношением вида:

$$\langle e^A\rangle_H = e^{\frac{1}{2}\langle A\rangle_H}, \qquad /10/$$

где H - произвольный квадратичный бозонный гамильтониан, а A - линейная форма по бозе-операторам. Аналогичная формула верна и для T-упорядоченных средних*. Поэтому имеем:

$$\langle T\{e^{i\vec f(\vec R(s)-\vec R(\sigma))}\}\rangle_\Gamma = e^{-\frac{\vec f^2}{6}\langle T\{(\vec R(s)-\vec R(\sigma))^2\}\rangle_\Gamma}. \qquad /11/$$

В правой части мы учли следующее общее правило для средних по изотропному квадратичному гамильтониану:

$$\langle T\{(\vec f\,\vec\Delta_1)(\vec g\,\vec\Delta_2)\}\rangle_\Gamma = \sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{\beta=1}^{3} f_\alpha g_\beta\langle T\{\Delta_1^{(\alpha)}\Delta_2^{(\beta)}\}\rangle_\Gamma =$$

$$= \sum_{\alpha=1}^{3} f_\alpha g_\alpha\langle T\{\Delta_1^{(\alpha)}\Delta_2^{(\alpha)}\}\rangle_\Gamma = \frac{1}{3}(\vec f\,\vec g)\langle T\{(\vec\Delta_1\cdot\vec\Delta_2)\}\rangle_\Gamma, \qquad /12/$$

где $\vec f$, $\vec g$ - трехмерные числовые векторы, $\vec\Delta_1$, $\vec\Delta_2$ - операторные векторы, α, β - декартовы индексы; последнее равенство справедливо, если среднее $\langle T\{\Delta_1^{(\alpha)}\Delta_2^{(\alpha)}\}\rangle_\Gamma$ не зависит от α /изотропно/.

---

*Для доказательства /10/ следует разложить e^A в ряд и применить к каждому члену ряда теорему Блоха-Де Доминициса, которая вполне аналогична теореме Вика в теории поля. Поскольку знак T-упорядочения не нарушает применимости теоремы Блоха- Де Доминициса, формула верна и для T-упорядоченной экспоненты /1/.

Коррелятор, входящий в правую часть /11/,

$$\mathfrak{D}(s-\sigma) \equiv \langle T\{(\vec R(s)-\vec R(\sigma))^2\}\rangle_\Gamma \qquad /13а/$$

будет постоянно встречаться в дальнейшем. Явное выражение для этого коррелятора можно получить прямым вычислением*:

$$\mathfrak{D} = \frac{3\hbar}{m}|s|\left(1-\frac{|s|}{\beta\hbar}\right),\quad |s|\le\beta\hbar. \qquad /13б/$$

На основании /9/ и /11/ получаем, переходя к пределу $V\to\infty$ и интегрируя по волновым векторам /импульсам/ фононов:

$$f_1 = -\frac{1}{\beta}\langle T\{\Phi\}\rangle_\Gamma =$$

$$= -\frac{1}{\beta}\,\frac{g_0^2}{4\hbar\omega}\,\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty df\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, K(s-\sigma)\, e^{-\frac{f^2}{6}\mathfrak{D}(s-\sigma)} \qquad /14/$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\,\frac{g_0^2}{4\beta\hbar\omega}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\,\frac{K(s-\sigma)}{\sqrt{\mathfrak{D}(s-\sigma)}}.$$

Перейдем к безразмерным параметрам

$$b = \beta\hbar\omega,\quad s' = s\omega,\quad \sigma' = \sigma\omega \qquad /15/$$

и безразмерной константе связи α /2/. Тогда выражение /14/ приобретает вид /штрихи опускаем/:

$$\frac{f_1}{\hbar\omega} = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\,\frac{1}{2b}\int_0^b ds\int_0^b d\sigma\,\frac{K(s-\sigma)}{\sqrt{D(s-\sigma)}},\quad b\equiv\beta\hbar\omega, \qquad /16/$$

---

*Вообще говоря, при корректном подходе для применения формулы /10/ следовало бы перейти в /5/, /9/, /11/-/13/ от вырожденного квадратичного гамильтониана $\Gamma = \vec p^{\,2}/2m$ к осцилляторному гамильтониану $\Gamma' = \vec p^{\,2}/2m + \eta^2\vec r^{\,2}/2$, произвести все вычисления, после чего только устремить $\eta^2\to 0$ /1/. Физический смысл η^2-члена - исключение инерционной моды и локализация электрона в заданном объеме. Отметим, что поскольку в $\mathfrak{D}$-коррелятор входит разность $\vec R(s)-\vec R(\sigma)$, правильное выражение /13б/ получится и при прямом вычислении на основе $\Gamma = \vec p^{\,2}/2m$. Аналогичные замечания относятся и к некоторым дальнейшим построениям, но не оговариваются.

здесь K и D – обезразмеренные аналоги функций /5а/ и /13/:

$$K(s) = \frac{e^{-|s|} + e^{-b+|s|}}{1 - e^{-b}}, \quad |s| \le b, \qquad /17а/$$

$$D(s) = |s|\,(1 - \frac{|s|}{b}), \quad |s| \le b. \qquad /17б/$$

Эти функции обладают важными свойствами симметрии:

$$K(s) = K(-s), \quad D(s) = D(-s), \quad |s| \le b, \qquad /17в/$$

$$K(s) = K(b - s), \quad D(s) = D(b - s), \quad 0 \le s \le b, \qquad /17г/$$

и могут быть периодически продолжены на всю вещественную ось с базисного отрезка $[0, b]$ с периодом b /1/*. Будем и всюду в дальнейшем интерпретировать функции $K(s)$, $D(s)$ как фрагменты периодических функций, заданных на всей вещественной оси.

Свойства симметрии и периодичности позволяют снять одно интегрирование в /16/, а в оставшемся перейти к половинному интервалу. В результате получаем окончательное выражение для первой поправки при произвольной температуре:

$$\frac{f_1}{\hbar\omega} = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{b/2} ds\, \frac{e^{-s} + e^{-b+s}}{1 - e^{-b}}\, \frac{1}{\sqrt{s(1 - \frac{s}{b})}}, \quad b \equiv \beta\hbar\omega. \qquad /18/$$

В пределе нулевой температуры $(b \to +\infty)$ получаем первый терм для энергии основного состояния:

$$\frac{E_1}{\hbar\omega} = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-s}}{\sqrt{s}}\, ds = -\alpha. \qquad /19/$$

3. ВТОРАЯ ПОПРАВКА f_2

Вычислим теперь поправку f_2 /см. /7//. Для входящего в f_2 основного члена после перехода к пределу $V \to \infty$ имеем:

---

* Другими словами, функции $K(s - \sigma)$, $D(s - \sigma)$ могут быть представлены через разложение Фурье в виде суперпозиции экспонент $\exp[\pm i 2\pi \frac{n}{b}(s - \sigma)]$, откуда наглядно видны все свойства симметрии и периодичности.

$$\langle T\{\Phi^2\}\rangle_\Gamma = \left(\frac{g_0^2}{4\hbar\omega}\right)^2 \iiiint_0^{\beta\hbar} ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 \times$$

$$\times K(s_1 - s_2) K(s_3 - s_4) \frac{1}{(2\pi)^6} \int \frac{d\vec{f}}{f^2} \int \frac{d\vec{g}}{g^2} \times \qquad /20/$$

$$\times \langle T\{e^{i(\vec{f}\vec{\Delta}_{12} + \vec{g}\vec{\Delta}_{34})}\}\rangle_\Gamma,$$

$$\vec{\Delta}_{12} \equiv \vec{R}(s_1) - \vec{R}(s_2), \quad \vec{\Delta}_{34} \equiv \vec{R}(s_3) - \vec{R}(s_4).$$

Далее, применяя /10/ и /12/, находим:

$$\langle T\{\exp[i(\vec{f}\vec{\Delta}_{12} + \vec{g}\vec{\Delta}_{34})]\}\rangle_\Gamma = \exp[-\frac{1}{2}\langle T\{(\vec{f}\vec{\Delta}_{12} + \vec{g}\vec{\Delta}_{34})^2\}\rangle_\Gamma] = \qquad /21/$$

$$= \exp[-\frac{1}{6}(f^2\mathfrak{D}_{12} + g^2\mathfrak{D}_{34} + 2(\vec{f}\vec{g})\mathcal{F}_{1234}],$$

где $\mathfrak{D}_{12} \equiv \mathfrak{D}(s_1 - s_2)$ и $\mathfrak{D}_{34} \equiv \mathfrak{D}(s_3 - s_4)$ – корреляторы /13/, а через $\mathcal{F}_{1234}$ обозначен четырехточечный коррелятор, играющий в дальнейшем центральную роль:

$$\mathcal{F}_{1234} \equiv \mathcal{F}(s_1, s_2, s_3, s_4) =$$

$$= \langle T\{(\vec{R}(s_1) - \vec{R}(s_2))\,(\vec{R}(s_3) - \vec{R}(s_4))\}\rangle_\Gamma = \qquad /22а/$$

$$= \frac{1}{2}[\mathfrak{D}(s_1 - s_4) + \mathfrak{D}(s_2 - s_3) - \mathfrak{D}(s_1 - s_3) - \mathfrak{D}(s_2 - s_4)]. \qquad /22б/$$

Последнее равенство проверяется прямым сравнением выражений в терминах $\langle T\{\vec{R}_i \vec{R}_j\}\rangle_\Gamma$. Явный вид коррелятора $\mathcal{F}_{1234}$ определяется, таким образом, равенством /13б/.

Теперь мы можем провести суммирование по $\vec{f}$ в /20/. Ввиду /21/ задача сводится к вычислению гауссова интеграла /интегрируем в сферических координатах/:

$$\int \frac{d\vec{f}}{f^2} \int \frac{d\vec{g}}{g^2} \langle T[i(\vec{f}\vec{\Delta}_{12} + \vec{g}\vec{\Delta}_{34})]\}\rangle_\Gamma =$$

$$= (4\pi)^2 \int_0^\infty df \int_0^\infty dg \cdot \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \exp[-\frac{1}{6}(f^2\mathfrak{D}_{12} + g^2\mathfrak{D}_{34} +$$

$$+ 2fg\cdot\cos\theta\cdot\mathcal{F}_{1234})] = (2\pi)^6 \frac{3}{8\pi^3} \int \frac{dx}{\sqrt{\mathfrak{D}_{12}\mathfrak{D}_{34} - x^2\mathcal{F}_{1234}^2}}. \qquad /23/$$

Подставляя /23/$_2$ в /20/, получим $\langle T\{\Phi^2\}\rangle_\Gamma$, это выражение превратится в $\langle T\{\Phi\}\rangle_\Gamma$, если формально положить $\mathcal{F}_{1234} \equiv 0$. Поэтому для f_2 имеем, переходя к безразмерным величинам /см. /2/, /15/, /17/, штрихи опускаем/:

$$\frac{f_2}{\hbar\omega} = -\frac{a}{8\pi b}\int_0^1 dx \iiiint_0^b ds_1 ds_2 ds_3 ds_4 K(s_1 - s_2)\times$$

$$\times K(s_3 - s_4)\left\{\frac{1}{\sqrt{D_{12}D_{34} - x^2F^2_{1234}}} - \frac{1}{\sqrt{D_{12}D_{34}}}\right\}, \qquad /24/$$

где через F_{1234} обозначен обезразмеренный главный коррелятор /22/:

$$F_{1234} = \frac{1}{2}(D_{14} + D_{23} - D_{13} - D_{24}) = \qquad /25а/$$

$$= \frac{1}{2}\{|s_1 - s_4| + |s_2 - s_3| - |s_1 - s_3| - |s_2 - s_4|\} - \frac{1}{b}(s_1 - s_2)(s_3 - s_4), \qquad /25б/$$

в формулах /24/, /25/ $D_{ij} \equiv D(s_i - s_j)$ /17б/, представление /25б/ следует из явного вида D -коррелятора.

Для дальнейших упрощений воспользуемся свойствами симметрий подынтегральных функций. Симметрии главного коррелятора F_{1234} видны из представлений /22/, /25/. Например, F_{1234} не меняется при перестановке пар $(s_1, s_2) \rightleftarrows (s_3, s_4)$ и меняет знак при заменах $s_1 \rightleftarrows s_2$ или $s_3 \rightleftarrows s_4$. Кроме того, функция F_{1234} инвариантна при одновременном сдвиге всех аргументов, $s_j \to s_j + C$, $j = 1,2,3,4$, и поэтому реально зависит только от трех переменных, в качестве которых выберем: $\sigma = s_2 - s_1$, $s = s_4 - s_3$, $t = s_4 - s_1$; параметр t характеризует взаимное расположение отрезков σ и s, /см. рисунок/. В новых переменных имеем:

$$F_{1234} \equiv F(\sigma, s\,|\,t) = \frac{1}{2}[D(t) + D(\sigma + s - t) - D(s - t) - D(\sigma - t)], \qquad /26а/$$

$$\sigma = s_2 - s_1,\ s = s_4 - s_3,\ t = s_4 - s_1. \qquad /26б/$$

В этом представлении будем понимать под $D(s)$ периодическое продолжение функции $s(1 - s/b)$ с отрезка $0 \le s \le b$ на всю вещественную ось, как обсуждалось выше. При этом имеют место следующие свойства симметрии:

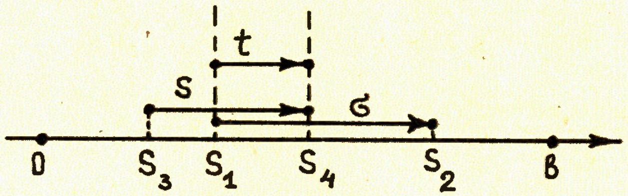
$$F(\sigma, s\,|\,t) = F(s, \sigma|\,t) = F(-s, -\sigma\,|\,-t) = F(\sigma, s\,|\,\sigma + s - t);$$

$$F(-\sigma, s|\,t) = -F(\sigma, s\,|\,t + \sigma);\quad F(\sigma, -s\,|\,t) = -F(\sigma, s\,|\,t + s);$$

$$F(b - \sigma, s\,|\,t) = -F(\sigma, s\,|\,t + \sigma);\quad F(\sigma, b - s\,|\,t) = -F(\sigma, s\,|\,t + s);$$

$$F(\sigma, s\,|\,b - t) = F(\sigma, s\,|\,t + \sigma + s),$$

и т.д.



Учитывая свойства этих симметрий, в дальнейшем достаточно будет рассмотреть поведение $F(\sigma, s|t)$ при фиксированных σ и s из области $0 \le s \le \sigma \le b/2$ и изменяющемся t при $0 \le t \le b$. Используя /25/, /26/, можно проверить, что в этой области главный коррелятор имеет вид:

$$F(\sigma, s\,|\,t) = \Delta_{\sigma,s}(t) - \frac{\sigma s}{b}, \qquad /27а/$$

$$0 \le s \le \sigma \le b/2,\ 0 \le t \le b, \qquad /27б/$$

где $\Delta_{\sigma,s}(t)$ - длина отрезка, параметрически зависящая от t, на котором отрезки σ и s перекрываются /см. рисунок/. В области /27б/ имеем:

$$\begin{aligned} &1/\ \Delta_{\sigma,s}(t) = t && \text{при}\quad 0 \le t \le s,\\ &2/\ \Delta_{\sigma,s}(t) = s && \text{при}\quad s \le t \le \sigma,\\ &3/\ \Delta_{\sigma,s}(t) = \sigma + s - t && \text{при}\quad \sigma \le t \le \sigma + s,\\ &4/\ \Delta_{\sigma,s}(t) = 0 && \text{при}\quad \sigma + s \le t \le b. \end{aligned} \qquad /28/$$

Описанные свойства симметрии и периодичности главного коррелятора, которые справедливы и для всего подынтегрального выражения в /24/, позволяют упростить это выражение, сводя задачу к интегрированию в области /27б/. Учитывая /27/, /28/, имеем:

$$\frac{f_2}{\hbar\omega} = -\frac{a^2}{\pi}\int_0^{b/2} d\sigma \int_0^{\sigma} ds \int_0^{b} dt \int_0^1 dx\, K(s)K(\sigma)\times$$

$$\times\left\{\frac{1}{\sqrt{D(s)D(\sigma) - x^2\left(\Delta_{\sigma,s}(t) - \frac{\sigma s}{b}\right)^2}} - \frac{1}{\sqrt{D(s)D(\sigma)}}\right\} =$$

$$= -\frac{\alpha^2}{\pi}\int_0^{b/2} d\sigma \int_0^{\sigma} ds\, \frac{e^{-\sigma}+e^{-b+\sigma}}{1-e^{-b}}\cdot\frac{e^{-s}+e^{-b+s}}{1-e^{-b}} \times$$

$$\times \int_0^1 dx\, [\, 2\int_0^s \frac{dt}{\sqrt{\sigma s(1-\frac{s}{b})(1-\frac{\sigma}{b}) - x^2(t-\frac{\sigma s}{b})^2}} +$$

$$+ \frac{\sigma - s}{\sqrt{\sigma s(1-\frac{s}{b})(1-\frac{\sigma}{b}) - x^2(s-\frac{\sigma s}{b})^2}} + \qquad /29/$$

$$+ \frac{b-\sigma-s}{\sqrt{\sigma s(1-\frac{s}{b})(1-\frac{\sigma}{b}) - x^2(\frac{\sigma s}{b})^2}} - \frac{b}{\sqrt{\sigma s(1-\frac{s}{b})(1-\frac{\sigma}{b})}}\,],$$

$$b = \beta\hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{\theta}.$$

Здесь учтено, что при интегрировании по t области 1 и 3 в /28/ дают одинаковый вклад.

Формула /29/ дает точное выражение для второй поправки к свободной энергии при произвольной температуре. В пределе нулевой температуры вычисление можно провести до конца. Переходя в /29/ к пределу $b \to +\infty$, получаем сумму трех интегралов, которые берутся явно:

$$\frac{f_2}{\hbar\omega}\Big|_{b\to+\infty} = -\frac{\alpha^2}{\pi}(I_1 + I_2 - I_3), \qquad /30/$$

где

$$I_1 = 2\int_0^{\infty} d\sigma \int_0^{\sigma} ds\, e^{-\sigma-s}\int_0^s dt \int_0^1 dx \frac{1}{\sqrt{\sigma s - t^2x^2}} = \pi \ln\frac{1+\sqrt{2}}{2},$$

$$I_2 = \int_0^{\infty} d\sigma \int_0^{\sigma} ds\, e^{-\sigma-s}\int_0^1 dx \frac{\sigma - s}{\sqrt{\sigma s - s^2x^2}} = \pi\ln\frac{1+\sqrt{2}}{\sqrt{2}} - \pi\frac{\sqrt{2}-1}{2},$$

$$I_3 = \int_0^{\infty} d\sigma \int_0^{\sigma} ds\, e^{-\sigma-s}\frac{\sigma+s}{\sqrt{\sigma s}} = \frac{\pi}{2}.$$

Складывая, получаем окончательную формулу для второй поправки к энергии основного состояния:

$$\frac{E_2}{\hbar\omega} = -\alpha^2[\ln(1+\frac{3}{2\sqrt{2}}) - \frac{1}{\sqrt{2}}] = -(0{,}015919\ldots)\,\alpha^2. \qquad /31/$$

Этот результат был получен впервые методами квантово-механической теории возмущений в /11, 12/ /см. также обсуждение в /13/ /.

Заметим, что в рамках метода континуального интегрирования точное выражение для Z_2, эквивалентное выражению для f_2 /29/, было получено ранее в /14/. Отметим также работы /15,16/, где поправки второго порядка рассматривались в другом контексте также на основе континуальных интегралов.

4. ВЫСШИЕ ПОРЯДКИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Подробно изложенные выше вычисления в первых порядках теории возмущений могут быть обобщены на случай высших порядков. Получим здесь для поправки произвольного порядка Z_n /см./8// представление в виде кратных интегралов.

Исходя из /5/ и /8/, в пределе $V \to +\infty$ получаем:

$$Z_n = \frac{1}{n!}\langle T\{\Phi^n\}\rangle_\Gamma =$$

$$= \frac{1}{n!}\left(\frac{g_0^2}{4\hbar\omega}\right)^n \int_0^{\beta\hbar}\ldots\int_0^{\beta\hbar}\prod_{k=1}^{n}[ds_k d\sigma_k\, \mathcal{K}(s_k-\sigma_k)] \times \qquad /32/$$

$$\times \frac{1}{(2\pi)^{3n}}\underbrace{\int\ldots\int}_{n}\prod_{k=1}^{n}\frac{d\vec{f}_k}{f_k^2}\langle T\{e^{i\sum_{k=1}^{n}(\vec{f}_k\cdot\vec{\Delta}_k)}\}\rangle_\Gamma,$$

где $\vec{\Delta}_k \equiv \vec{R}(s_k) - \vec{R}(\sigma_k)$. Далее, ввиду /10/ и /12/, имеем:

$$\langle T\{e^{i\sum_{k=1}^{n}(\vec{f}_k\cdot\vec{\Delta}_k)}\}\rangle_\Gamma = \exp[-\frac{1}{6}\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}\mathcal{F}_{k\ell}(\vec{f}_k\cdot\vec{f}_\ell)], \qquad /33/$$

где $\mathcal{F}_{k\ell} \equiv \langle T\{(\vec{\Delta}_k\cdot\vec{\Delta}_\ell)\}\rangle \equiv \mathcal{F}(s_k, \sigma_k, s_\ell, \sigma_\ell)$ – главный коррелятор /22/. Подставляя /33/ в /32/ и переходя к безразмерным величинам /2/, /15/, /17/, находим*:

$$Z_n = \frac{1}{n!}\frac{\alpha^n}{(2\pi)^{2n}}\int_0^b\int_0^b ds_1 d\sigma_1\ldots\int_0^b\int_0^b ds_n d\sigma_n \prod_{k=1}^{n}K(s_k-\sigma_k)\times \qquad /34/$$

$$\times\underbrace{\int\ldots\int}_{n}\prod_{k=1}^{n}\frac{d\vec{f}_k}{f_k^2}\exp[-\sum_{k=1}^{n}\sum_{\ell=1}^{n}F_{k\ell}(\vec{f}_k\cdot\vec{f}_\ell)],$$

*В /34/ проведено также масштабное преобразование волновых векторов /импульсов/ фононов: $\vec{f}_k \to \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\vec{f}_k$.

где $F_{k\ell}$ – обезразмеренный главный коррелятор /25/:

$$F_{k\ell} = F(s_k, \sigma_k, s_\ell, \sigma_\ell) =$$

$$= \frac{1}{2}\{|s_k - \sigma_\ell| + |s_\ell - \sigma_k| - |s_k - s_\ell| - |\sigma_k - \sigma_\ell|\} - \frac{1}{b}(s_k - \sigma_k)(s_\ell - \sigma_\ell), \qquad /35а/$$

отметим, что

$$F_{kk} = D(s_k - \sigma_k) \equiv D_k. \qquad /35б/$$

В импульсном интеграле в /34/ мы имеем гауссову экспоненту, сопровождаемую факторами $1/f_k^2$. Во втором порядке эти факторы компенсировались элементами объема при интегрировании в сферических координатах. В общем случае $n > 2$ интегрировать в сферических координатах неудобно, и мы проинтегрируем в декартовых координатах, применяя специальный прием.

Рассмотрим интеграл общего вида, включающий интеграл в /34/ как частный случай:

$$J_n = \underbrace{\int \dots \int}_{n} [\prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k \frac{1}{f_k^2} e^{-D_k f_k^2}]\, \Psi(\vec{f}_1, \vec{f}_2, \dots, \vec{f}_n), \qquad /36/$$

где $\Psi(\dots, \vec{f}_k, \dots)$ – произвольная функция /такая, что интеграл существует/. Воспользуемся тождеством

$$\frac{1}{f_k^2} e^{-D_k f_k^2} = D_k \int_1^\infty dx_k e^{-x_k D_k f_k^2} \qquad /37/$$

и преобразуем интеграл /36/, делая последовательные замены переменных:

$$J_n = \int_1^\infty dx_1 \dots \int_1^\infty dx_n \underbrace{\int \dots \int}_{n} \Psi(\dots, \vec{f}_k, \dots) \prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k D_k e^{-x_k D_k \vec{f}_k^2} =$$

$$= \int_1^\infty dx_1 \dots \int_1^\infty dx_n \underbrace{\int \dots \int}_{n} \Psi(\dots, \frac{\vec{f}_k}{\sqrt{x_k}}, \dots) \prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k \frac{D_k e^{-D_k \vec{f}_k^2}}{(x_k)^{3/2}} =$$

$$= \int_0^1 dy_1 \dots \int_0^1 dy_n \underbrace{\int \dots \int}_{n} \Psi(\dots, \sqrt{y_k}\, \vec{f}_k, \dots) \prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k \frac{D_k e^{-D_k \vec{f}_k^2}}{\sqrt{y_k}} = \qquad /38/$$

$$= \int_0^1 du_1 \dots \int_0^1 du_n \underbrace{\int \dots \int}_{n} \Psi(\dots, u_k \vec{f}_k, \dots) \prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k (2D_k) e^{-D_k \vec{f}_k^2}.$$

Воспользовавшись последним равенством, мы сведем задачу вычисления импульсного интеграла в /34/ к гауссову интегралу, который берется явно в декартовых координатах:

$$\underbrace{\int \dots \int}_{n} [\prod_{k=1}^{n} \frac{d\vec{f}_k}{f_k^2}]\, e^{-\sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} F_{k\ell} (\vec{f}_k \cdot \vec{f}_\ell)} =$$

$$= \underbrace{\int \dots \int}_{n} [\prod_{k=1}^{n} \frac{d\vec{f}_k}{f_k^2} e^{-D_k \vec{f}_k^2}]\, e^{-\sum_{k \neq \ell} F_{k\ell} (\vec{f}_k \cdot \vec{f}_\ell)} =$$

$$= \int_0^1 du_1 \dots \int_0^1 du_n \underbrace{\int \dots \int}_{n} [\prod_{k=1}^{n} d\vec{f}_k (2D_k) e^{-D_k \vec{f}_k^2}]\, e^{-\sum_{k \neq \ell} u_k u_\ell F_{k\ell} (f_k \cdot f_\ell)} = \qquad /39/$$

$$= \pi^{\frac{3n}{2}} \prod_{k=1}^{n} (2D_k) \int_0^1 du_1 \dots \int_0^1 du_n [\det \| A_{k\ell} \|]^{-3/2}.$$

Здесь $\| A_{k\ell} \|$ – симметричная матрица размера n^2 импульсной квадратичной формы, стоящей в экспоненте; на главной диагонали стоят элементы $D_k \equiv F_{kk}$, вне диагонали – элементы $u_k u_\ell F_{k\ell}$ $(k \neq \ell)$:

$$A_{k\ell} = \delta_{k\ell} D_k + (1 - \delta_{k\ell}) F_{k\ell} \cdot u_k u_\ell, \quad k, \ell = 1, 2, 3, \dots, n, \qquad /39а/$$

где $\delta_{k\ell}$ – символ Кронекера.

Подставляя /39/ в /34/, получаем окончательное выражение для поправки n-го порядка:

$$Z_n = \frac{1}{n!} \frac{\alpha^n}{(4\pi)^{n/2}} \int_0^b \int_0^b \dots \int_0^b \int_0^b [\prod_{k=1}^{n} ds_k d\sigma_k\, K(s_k - \sigma_k) \times$$

$$\times D(s_k - \sigma_k)] \int_0^1 du_1 \dots \int_0^1 du_n [\det \| A_{k\ell} \|]^{-3/2}, \quad b \equiv \beta\hbar\omega. \qquad /40/$$

Входящие сюда функции определяются формулами /17/, /35/, /39а/. Поправка f_n для свободной энергии может быть составлена из $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$ /см. /7/, /8//.

Таким образом, поправки Z_n, f_n в произвольном порядке теории возмущений выражаются через кратные интегралы, параметрически зависящие от температуры. Как видим, во всех порядках центральную роль играет четырехточечный коррелятор $F_{k\ell} \equiv F_{1234}$, свойства которого подробно изучены выше.

Поскольку коррелятор $F_{k\ell}$ ведет себя по-разному в зависимости от взаимного расположения точек s_k, σ_k, s_ℓ, σ_ℓ /см., в частности, /27/, /28//, интеграл фактически разлагается в сумму большого числа "элементарных" интегралов, в соответствии со всевозможными вариантами расположения точек $\ldots s_k \ldots \sigma_\ell \ldots$ на отрезке $[0, b]$. Некоторых упрощений при этом можно достичь, учитывая свойства симметрии $F_{k\ell} \equiv F_{1234}$.

Нетрудно показать, что при $n = 1,2$ выражение /40/ приводит к полученным выше формулам /16/, /24/. Используя /40/, можно выписать также явные, хотя и громоздкие, выражения для Z_n, f_n при небольших n, например, при $n = 3,4$. Заметим, что при $b \to +\infty$ поправка f_n дает терм n-го порядка для энергии основного состояния E_n. Было бы интересно, в частности, попытаться получить исходя из /40/ при $n = 3$ конечный ответ для поправки E_3 /аналогичный /31/ для E_2 /. Отметим также, что поправки E_n и f_n, Z_n /при заданных b / при малых n после подходящих преобразований интегралов можно, видимо, эффективно оценивать численно на ЭВМ методами типа Монте-Карло.

Отметим некоторые аналогии представленной здесь теории возмущений в модели полярона со схемой теории возмущений в теории поля. Статистическая сумма $Z = \langle T \{ \exp(\Phi) \} \rangle_\Gamma$ является прямым аналогом S-матрицы, которая в канонической форме также представляется в виде T-экспоненты[17]. Перечисление областей интегрирования, по которым разлагается Z_n, отдаленно напоминает перечисление диаграмм n-го порядка в теории возмущений. При этом в модели полярона мы имеем в n-м порядке компактное выражение /40/, в отличие от более сложных случаев теории поля, где, как правило, не удается учесть единым образом все диаграммы данного порядка*. Здесь нет также логических трудностей, связанных с бесконечными перенормировками, характерных для квантовой релятивистской теории. Мы имеем, таким образом, пример последовательно проведенной на строгом уровне схемы теории возмущений, принятой в квантовой теории поля. Особенность изложенного варианта теории возмущений состоит в том, что вместо импульсных интегралов, соответствующих диаграммам теории поля, здесь мы имеем дело с интегралами по "мнимым временам" $\ldots s_k \ldots \sigma_\ell \ldots$ как при конечной, так и при нулевой температуре.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н./мл./. ОИЯИ, Р17-81-65, Дубна, 1981.

---

*Как известно, в задачах теории поля член ряда теории возмущений n-го порядка описывается комбинаторным образом как сумма всех возможных диаграмм /импульсных интегралов/, при составлении которых должны соблюдаться определенные предписания.

2. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н./мл./. ЭЧАЯ, 1980, т.11, вып.2, с.246-300.
3. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, М.-Л., 1951.
4. Fröhlich H., Pelzer H., Zinau S. Phil.Mag., 1950, vol.41, ser.7, No.314, p.221-242.
5. Fröhlich H. Adv.Phys., 1954, vol.3, No.11, p.325-361.
6. Schultz T.D. Phys.Rev., 1959, vol.116, No.3, p.526-543.
7. Appel J. Sol.State Phys., 1968, vol.21, p.193; перевод в сб.: Поляроны. /Под ред. Ю.А.Фирсова/. "Наука", М., 1975.
8. Devreese J.D., ed. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors. North-Holland, Amsterdam, 1972.
9. Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
10. Кочетов Е.А., Кулешов С.П., Смондырев М.А. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.3, с.635-668.
11. Höhler G., Müllensiefen A. Z.Phys., 1959, vol.157, p.159-165.
12. Rössler J. phys.stat.sol., 1968, vol.25, p.311-316.
13. Saitoh M. J.Phys.Soc.Jap., 1980, vol.49, No.3, p.878-885.
14. Кочетов Е.А., Смондырев М.А. ТМФ, 1981, т.47, №3, с.375-386; ОИЯИ, Р2-80-268, Дубна, 1980.
15. Marshall J.T. Phys.Rev., 1970, vol.2B, No.8, p.3143-3146.
16. Luttinger J.M., Lu Chin-Yuan. Phys.Rev., 1980, vol.21B, No.10, p.4251-4263.
17. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантованных полей. "Наука", М., 1973.
18. Родригес К., Федянин В.К. ЭЧАЯ, 1984, т.15, вып.4, с.870-934.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 октября 1984 года.

СООБЩЕНИЯ, КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ, ПРЕПРИНТЫ И СБОРНИКИ ТРУДОВ КОНФЕРЕНЦИЙ, ИЗДАВАЕМЫЕ ОБЪЕДИНЕННЫМ ИНСТИТУТОМ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ, ЯВЛЯЮТСЯ ОФИЦИАЛЬНЫМИ ПУБЛИКАЦИЯМИ.

Ссылки на СООБЩЕНИЯ и ПРЕПРИНТЫ ОИЯИ должны содержать следующие элементы:

- фамилии и инициалы авторов,
- сокращенное название Института /ОИЯИ/ и индекс публикации,
- место издания /Дубна/,
- год издания,
- номер страницы /при необходимости/.

Пример:

1. Первушин В.Н. и др. ОИЯИ, Р2-84-649, Дубна, 1984.

Ссылки на конкретную СТАТЬЮ, помещенную в сборнике, должны содержать:

- фамилии и инициалы авторов,
- заглавие сборника, перед которым приводятся сокращенные слова: "В кн."
- сокращенное название Института /ОИЯИ/ и индекс издания,
- место издания /Дубна/,
- год издания,
- номер страницы.

Пример:

Колпаков И.Ф. В кн. XI Международный симпозиум по ядерной электронике, ОИЯИ, Д13-84-53, Дубна, 1984, с.26.

Савин И.А., Смирнов Г.И. В сб."Краткие сообщения ОИЯИ", № 2-84, Дубна,1984,с.3.

Боголюбов Н.Н./мл./, Плечко В.Н. Р17-84-689

Теория возмущений в модели полярона при конечной температуре

Построена схема теории возмущений для статистической суммы /свободной энергии/ в модели полярона. Поправка произвольного порядка выражается через кратные интегралы, параметрически зависящие от температуры. Детально проанализированы первые два порядка. В высших порядках центральную роль играет четырехточечная корреляционная функция, для которой получено явное выражение. Изучены свойства этого коррелятора. Обсуждаются аналогии со схемой теории возмущений для S-матрицы в квантовой теории поля.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод авторов

Bogolubov N.N., jr., Plechko V.N. P17-84-689

Perturbation Theory for a Polaron Model at Finite Temperature

A scheme of the perturbation theory in coupling constant for the partition function (free energy) of the polaron model is developed. An arbitrary order correction is represented as multiple integral depending parametrically on the temperature. A detailed analysis of the first two perturbation orders is presented. In higher orders a four-point correlation function plays the central role, which is evaluated explicitly. The properties of this correlator are studied in detail. Analogies with the perturbation theory for the S-matrix in the quantum field theory are discussed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984