сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-85-169

О.В.Селюгин, М.А.Смондырев

# ТРЕТИЙ ПОРЯДОК ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА. ЭНЕРГИЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

1985

§1.

Настоящая работа продолжает исследование третьего порядка теории возмущений в модели полярона, начатое в нашей предыдущей статье[1]. С помощью континуальных интегралов там было получено представление для статистической суммы системы в третьем порядке теории возмущений по константе связи:

$$Z_3 = \sum_{k=1}^{11} D_k \; .$$

$$D_k = \frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6(1-e^{-\beta})^3} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int \prod_{i=1}^{6} d\lambda_i \, e^{-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)}$$

$$\exp\Big[-\sum_{i=1}^{3} k_i^2 \lambda_i (1-\lambda_i)\Big] P\{ d_k \exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2(\lambda_4 -$$

$$-\lambda_1\lambda_2) - 2\vec{k}_2\vec{k}_3(\lambda_5-\lambda_2\lambda_3) - 2\vec{k}_1\vec{k}_3(\lambda_6-\lambda_1\lambda_3)]\}. \qquad /1.1/$$

Здесь $\beta=\omega/\theta$ , $\omega$ - частота фононов, а $\theta$ - температура системы. Операция $P$ симметризует произвольную функцию переменных $\lambda_1$ , $\lambda_2$ и $\lambda_3$ относительно всех возможных замен вида $\lambda_i \to 1-\lambda_i$:

$$P f(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) = f(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) + f(1-\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) +$$

$$+ f(\lambda_1,1-\lambda_2,\lambda_3) + f(\lambda_1,\lambda_2,1-\lambda_3) + f(1-\lambda_1,1-\lambda_2,\lambda_3) + \qquad /1.2/$$

$$+ f(1-\lambda_1,\lambda_2,1-\lambda_3) + f(\lambda_1,1-\lambda_2,1-\lambda_3) + f(1-\lambda_1,1-\lambda_2,1-\lambda_3) .$$

Функции $d_k$, входящие в /1.1/, зависят от переменных $\lambda_i$ , $i = 1,\dots,6$. В явном виде они выписаны в работе[1]. Мы не станем их сейчас воспроизводить, поскольку далее будут выписаны все 11 интегралов /1.1/. Полученные выражения могут быть использованы для расчета средней энергии полярона при конечной температуре. В частности, можно найти асимптотику $Z_3$ при больших $\beta$ , то есть в пределе нулевой температуры. Эта асимптотика имеет вид:

$$Z_3 = A\beta^3 + B\beta^2 + C\beta + \dots \qquad /1.3/$$

Из общих соображений, изложенных в работе[1], следует, что коэффициенты $A$ и $B$ должны принимать следующие значения:

$$A = \frac{1}{6}, \quad B = 2\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{3}{2}\ln 2 - \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{1}{8}. \qquad /1.4/$$

Коэффициент разложения энергии основного состояния по степеням константы связи $\alpha$ в третьем порядке связан с коэффициентом C асимптотического разложения /1.3/ соотношением:

$$E_3 = -C + \frac{5}{2}\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{11}{8}\ln 2 - \frac{17\sqrt{2}}{16} + \frac{85}{192} = \qquad /1.5/$$
$$= -C + 0{,}190\,463\,018.$$

Наша задача - вычислить C с возможно большей точностью, поскольку вариационные оценки указывают, что $E_3$ имеет порядок $10^{-3}$, так что для получения, скажем, трех-четырех значащих цифр в $E_3$ надо знать по крайней мере шесть значащих цифр в коэффициенте C. Мы будем по отдельности исследовать асимптотику каждого из 11 интегралов /1.1/.

## §2. ПЕРВЫЕ ЧЕТЫРЕ ИНТЕГРАЛА

Исследование асимптотики интегралов $D_1 - D_4$ объединено в один раздел, потому что они и только они дают вклад в коэффициенты A и B старших членов асимптотического разложения /1.3/. Подробнее остановимся на интеграле $D_1$, чтобы избежать выписывания длинных формул в других, более сложных интегралах, для которых будем приводить лишь начальные выражения и окончательные ответы. На примере интеграла $D_1$ продемонстрируем технику вычислений, которая остается той же самой и для прочих интегралов.

Итак, интеграл $D_1$ имеет вид

$$D_1 = \frac{\beta^{9/2}}{48\pi^6(1-e^{-\beta})^3}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) - \sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\, P\{\theta(\lambda_1)\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\times$$
$$\times(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^3\exp[2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j]\}. \qquad /2.1/$$

При больших значениях обратной температуры $\beta$ основной вклад в интеграл дает область интегрирования, где все переменные $\lambda_1$, $\lambda_2$ и $\lambda_3$ лежат вблизи нуля. Из восьми слагаемых, в которые операция P превращает фигурную скобку в /2.1/, лишь четыре содержат эту область интегрирования: само выражение в фигурной скобке, которое мы будем называть основным слагаемым, и то, что из него получается при замене одной из переменных интегрирования $\lambda_i \to 1-\lambda_i$. Вследствие симметрии подынтегрального выражения нам достаточно произвести замену только одной переменной, например, $\lambda_1 \to 1-\lambda_1$.



а затем умножить это слагаемое на множитель 3, чтобы учесть возможность замены прочих переменных $\lambda_2$ и $\lambda_3$. Таким образом, точное выражение /2.1/ для $D_1$ и его приближенная форма

$$D_1 = \frac{\beta^{9/2}}{48\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i\exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) - \sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\times\{\theta(\lambda_1)\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\times$$
$$\times(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^3\exp[2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j] + 3\theta(1-\lambda_1)\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\times \qquad /2.2/$$
$$\times\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^3\exp[2\vec{k}_1\vec{k}_2(1-\lambda_1)\lambda_2 +$$
$$+2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_2\lambda_3 + 2\vec{k}_1\vec{k}_3(1-\lambda_1)\lambda_3]\}.$$

отличаются в пределе больших $\beta$ лишь на экспоненциально малые члены.

Далее мы вводим в подынтегральное выражение единичный множитель, записанный в виде $1 = \int_0^\infty d\lambda\,\delta(\lambda-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)$, и делаем замену переменных $\lambda_i \to \lambda\cdot\lambda_i$ и $\vec{k}_i \to \vec{k}_i/\sqrt{\lambda}$, после чего /2.2/ приобретает вид

$$D_1 = \frac{\beta^{9/2}}{48\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int_0^\infty d\lambda\cdot\lambda^{1/2}e^{-\beta\lambda}\int\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i\,\delta(1-\lambda_1-$$
$$-\lambda_2-\lambda_3)\exp[-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i]\{\theta(\lambda_1)\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\theta(1-\lambda)(1-\lambda)^3\times$$
$$\times\exp[\lambda(\sum_{i=1}^{3}\vec{k}_i\lambda_i)^2] + 3\lambda^3\theta(1-\lambda\lambda_1)\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\times \qquad /2.3/$$
$$\times(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^3\exp[2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_2 + 2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_3 + \lambda(-\vec{k}_1\lambda_1+\vec{k}_2\lambda_2+\vec{k}_3\lambda_3)^2]\}.$$

Теперь ясно, что для получения вкладов в коэффициенты A, B и C надо разложить фигурную скобку в /2.3/ по степеням $\lambda$ вплоть до членов $O(\lambda^2)$. Это означает, что второе слагаемое вообще не дает вклада в эти коэффициенты, а оставшаяся часть может быть записана в виде

$$D_1 = \frac{\beta^{9/2}}{48\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int_0^\infty d\lambda\,\lambda^{1/2}e^{-\beta\lambda}\int_0^1\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i\,\times$$

$$\times\ \delta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\exp[-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i]\{1+\lambda[-3+$$

$$+(\sum_{i=1}^{3}\vec{k}_i\lambda_i)^2]+\lambda^2[3-3(\sum_{i=1}^{3}\vec{k}_i\lambda_i)^2+\frac{1}{2}(\sum_{i=1}^{3}\vec{k}_i\lambda_i)^4]\}. \qquad /2.4/$$

Все интегралы в /2.4/ теперь легко вычисляются, и мы приходим к разложению:

$$D_1=A\beta^3+B_1\beta^2+C_1\beta+\ldots \qquad A=\frac{1}{6},\ B_1=-\frac{5}{8},\ C_1=\frac{217}{192}. \qquad /2.5/$$

Забегая вперед, отметим, что $D_1$ - единственный интеграл, асимптотическое разложение которого начинается с члена, пропорционального $\beta^3$, и который тем самым дает вклад в коэффициент A.

Интеграл $D_2$:

$$D_2=\frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int d\lambda_{1-3,5}\ \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-$$

$$-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\,P\{\theta(\lambda_1)\theta(\lambda_5)\theta(\lambda_2-\lambda_5)\theta(\lambda_3-\lambda_5)\times$$

$$\times\ \theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_5)(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_5)^2\exp[-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_5+$$

$$+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Для простоты записи мы с самого начала здесь и далее опускаем экспоненциально малый член $e^{-\beta}$ в знаменателе численного множителя перед интегралами.

В интеграле $D_2$ слагаемые, в которых произведены замены $\lambda_i\to1-\lambda_i$ каких-то из переменных интегрирования, также не дают вклада в интересующие нас коэффициенты A, B и C. Асимптотическое разложение имеет вид:

$$D_2=B_2\beta^2+C_2\beta+\ldots$$

$$B_2=\ln(\sqrt{2}+1)-\ln 2 \qquad /2.6/$$

$$C_2=-\frac{19}{4}[\ln(\sqrt{2}+1)-\ln 2]+\frac{13\sqrt{2}}{8}-2.$$

Интеграл $D_3$:

$$D_3=\frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i\ \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-$$

$$-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\,P\{\theta(\lambda_1)\theta(\lambda_3)\theta(\lambda_2-\lambda_3)\theta(1-\lambda_1-\lambda_2)\times$$



$$\times(\lambda_2-\lambda_3)(1-\lambda_1-\lambda_2)^2\exp[-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_3+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j]\}.$$

В этом интеграле интересующий нас вклад дает не только основное слагаемое, явно выписанное в фигурной скобке, но и слагаемое, получаемое из основного заменой $\lambda_2\to1-\lambda_2$. Асимптотическое разложение имеет вид

$$D_3=B_3\beta^2+C_3\beta+\ldots$$

$$B_3=\ln(\sqrt{2}+1)-\frac{1}{2}\ln 2-\frac{\sqrt{2}}{2}+\frac{1}{2}, \qquad /2.7/$$

$$C_3=-\frac{3}{4}\ln(\sqrt{2}+1)+\frac{3}{8}\ln 2+\frac{5\sqrt{2}}{16}-\frac{5}{8}.$$

Интеграл $D_4$:

$$D_4=\frac{\beta^{9/2}}{16\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{3}d\lambda_i\ \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-$$

$$-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\,P\{\theta(\lambda_2)\theta(\lambda_3)\theta(1-\lambda_1)\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\times$$

$$\times(1-\lambda_1)(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^2\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_2-2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_3+$$

$$+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Помимо основного слагаемого вклад в интересующие нас коэффициенты вносит и слагаемое, в котором произведена замена $\lambda_1\to1-\lambda_1$. Оказывается, что именно это последнее слагаемое ответственно за квадратичный по $\beta$ член в асимптотическом разложении. Такая ситуация, как выяснилось, заслуживает более внимательного рассмотрения, и поэтому мы выпишем вклады каждого из слагаемых по отдельности. Вклад основного слагаемого обозначим $D_4^{(1)}=-G_1\beta+\ldots$ Вклад второго слагаемого имеет вид $D_4^{(2)}=B_4\beta^2+C'_4\beta+\ldots$ Таким образом, асимптотическое разложение интеграла $D_4$ мы записываем как $D_4=B_4\beta^2+C_4\beta+\ldots$, где

$$B_4=\frac{1}{4},\quad C_4=C'_4-G_1,\quad C'_4=-\frac{15}{16},$$

$$G_1=\frac{5\sqrt{2}}{4}\ln(\sqrt{2}+1)-\frac{23\sqrt{2}}{8}\ln 2-\frac{15}{4}\ln^2(\sqrt{2}+1)+ \qquad /2.8/$$

$$+\frac{\sqrt{2}}{4}-\frac{1}{2}+\frac{15}{8}\int_1^{3+2\sqrt{2}}\frac{dz}{z}\ln(1+z)=-0{,}173\,361\,050.$$

Мы получили асимптотические разложения всех четырех интегралов, которым посвящен данный раздел работы. Суммируя все вклады /2.5/-/2.8/, получаем асимптотическое разложение

$$\sum_{k=1}^{4} D_k = A\beta^3 + B\beta^2 + \beta \sum_{k=1}^{4} C_k + \ldots$$

$$A = \frac{1}{6}, \quad B = \sum_{k=1}^{4} B_k = 2\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{3}{2}\ln 2 - \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{1}{8},$$

$$\sum_{k=1}^{4} C_k = -\frac{11}{2}\ln(\sqrt{2}+1) + \frac{41}{8}\ln 2 + \frac{31\sqrt{2}}{16} - \frac{467}{192} - G_1 = \qquad /2.9/$$

$$= -0{,}987\,428\,318 - G_1 = -0{,}814\,067\,268\,.$$

В дальнейшем выяснится, что все последующие интегралы $D_k$ при больших $\beta$ ведут себя как $O(\beta)$, так что из /2.9/ следует, что коэффициенты $A$ и $B$ принимают в точности те самые значения /1.4/, которые они и должны принимать из общих соображений.

Бросается в глаза сложность аналитического выражения для $G_1$ по сравнению с выражениями для остальных коэффициентов. Это не случайно. Для вычисления энергии полярона по теории возмущений можно развить диаграммную технику /2/. Оказывается, что $G_1$ - не что иное, как вклад одной из связанных диаграмм третьего порядка. Всего имеется восемь различных связанных диаграмм третьего порядка. Их вклады, когда они нам будут встречаться в процессе вычислений, мы станем обозначать буквой $G$ с индексом, соответствующим порядковому номеру диаграммы. Все остальные вклады, обозначаемые нами буквой $C$ с индексами, соответствуют несвязанным диаграммам.

## §3. СЛЕДУЮЩИЕ ЧЕТЫРЕ ИНТЕГРАЛА

Интегралы $D_5$–$D_8$ объединяет то, что все они в конечном итоге сводятся к однократным интегралам, выражаемым, подобно $G_1$ в /2.8/, через такой же логарифмический интеграл с различными пределами интегрирования, сводимый к специальной функции, известной как дилогарифм Эйлера. Мы не будем здесь приводить аналитических выражений для интегралов $D_5 - D_8$, ограничившись их численными значениями, которые в принципе известны с произвольно высокой точностью. Исключение сделано только для вкладов, не обозначенных буквой $G$.

Интеграл $D_5$:

$$D_5 = \frac{\beta^{9/2}}{4\pi^6} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int d\lambda_{1-3,6} \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) -$$



$$- \sum_{i=1}^{3} k_i^2 \lambda_i(1-\lambda_i)]\, P\{\theta(\lambda_2)\,\theta(\lambda_6)\,\theta(\lambda_3-\lambda_6)\,\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_6) \times$$

$$\times\, \theta(1-\lambda_1-\lambda_3+\lambda_6)(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_6)(1-\lambda_1-\lambda_3+\lambda_6) \exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_2 -$$

$$-2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_6 + 2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3} \vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j\,]\}.$$

Вклад в главный асимптотический член дают основное слагаемое и получаемое из него заменой $\lambda_1 \to 1-\lambda_1$. Вклад первого слагаемого записываем в виде $D_5^{(1)} = -G_2\,\beta + \ldots$, а вклад второго - в виде $D_5^{(2)} = C_5'\,\beta + \ldots$ .

Таким образом, в пределе больших $\beta$ $D_5 = C_5\beta + \ldots$, где

$$C_5 = C_5' - G_2, \quad C_5' = 2[\ln(\sqrt{2}+1) - \ln 2] - \frac{3\sqrt{2}}{2} + 2, \qquad /3.1/$$

$$G_2 = -0{,}170\,935\,051\,.$$

Интеграл $D_6$:

$$D_6 = \frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int \prod_{i=1}^{3} d\lambda_i \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) - \sum_{i=1}^{3} k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)] \times$$

$$\times\, P\{\theta(1-\lambda_1)\,\theta(\lambda_1-\lambda_2)\,\theta(\lambda_2-\lambda_3)\,\theta(\lambda_3)(1-\lambda_1)(\lambda_1-\lambda_2)(\lambda_2-\lambda_3) \times$$

$$\times \exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_2 - 2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_3 - 2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_3 + 2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3} \vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j\,]\}.$$

Главный асимптотический член линеен по $\beta$, и в него дают вклад три слагаемых. Вклад основного слагаемого обозначаем как $D_6^{(1)} = -G_3\beta + \ldots$ Сумма вкладов двух других слагаемых, получаемых из основного заменами $\lambda_1 \to 1-\lambda_1$ и $\lambda_1 \to 1-\lambda_1$, $\lambda_2 \to 1-\lambda_2$ соответственно, записывается в виде: $D_6^{(2)} = C_6'\beta + \ldots$

Таким образом, интеграл $D_6$ имеет разложение: $D_6 = C_6\,\beta + \ldots$, где

$$C_6 = C_6' - G_3\,,$$

$$C_6' = \frac{1}{2}\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{1}{4}\ln 2 - \frac{3\sqrt{2}}{8} + \frac{1}{2}, \qquad /3.2/$$

$$G_3 = -0{,}037\,613\,108\,.$$

Интеграл $D_7$:

$$D_7 = \frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int \prod_{i=1}^{5} d\lambda_i \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) -$$

$$-\sum_{i=1}^{3} k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]P\{\theta(\lambda_4)\,\theta(\lambda_5)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\lambda_3-\lambda_5)\times$$

$$\times\theta(\lambda_2-\lambda_4-\lambda_5)\,\theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4+\lambda_5)(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4+\lambda_5)\times$$

$$\times\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_4-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_5+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\,\lambda_i\lambda_j]\}.$$

В главный асимптотический член дает вклад только основное слагаемое:

$$D_7=C_7\beta+\ldots,\quad C_7=-G_4,\qquad /3.3/$$
$$G_4=-0{,}045\,165\,941.$$

Интеграл $D_8$:

$$D_8=\frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{4}d\lambda_i\exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]\times$$

$$\times P\{\theta(\lambda_3)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\lambda_2-\lambda_4)\,\theta(\lambda_4-\lambda_3)\,\theta(1-\lambda_1-\lambda_2+\lambda_4)\,(\lambda_4-\lambda_3)\times$$

$$\times(1-\lambda_1-\lambda_2+\lambda_4)\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_4-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_3-2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_3+$$

$$+\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\,\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Линейная по $\beta$ зависимость следует из двух слагаемых: основного и того, которое из него получается при замене $\lambda_1\to 1-\lambda_1$, $\lambda_2\to 1-\lambda_2$. Вклады этих слагаемых обозначены, соответственно: $D_8^{(1)}=-G_5\beta+\ldots$, $D_8^{(2)}=C_8'\beta+\ldots$, так что интеграл $D_8$ имеет асимптотическое разложение

$$D_8=C_8\beta+\ldots,\quad C_8=C_8'-G_5,\quad C_8'=\frac{3\sqrt{2}}{4}-1,\qquad /3.4/$$
$$G_5=-0{,}032\,259\,338.$$

На этом закончились интегралы, которым посвящен данный раздел работы. Суммируя вклады /3.1/-/3.4/, получаем

$$\sum_{k=5}^{8}C_k=\frac{5}{2}\ln(\sqrt{2}+1)-\frac{9}{4}\ln 2-\frac{9\sqrt{2}}{8}+\frac{3}{2}-\sum_{i=2}^{5}G_i=\qquad /3.5/$$

$$=0{,}552\,862\,554-\sum_{i=2}^{5}G_i=$$

$$=0{,}838\,835\,990\,.$$



## §4. ТРИ ПОСЛЕДНИХ ИНТЕГРАЛА

То общее, что позволило объединить рассмотрение интегралов $D_9-D_{11}$ в один раздел настоящей работы, звучит не слишком привлекательно: нам не удалось свести эти интегралы к компактной аналитической форме, пусть даже в виде сколь угодно сложных специальных функций. Максимум того, что мы сумели добиться - это понизить кратность интегралов. В нашей конечной форме все эти интегралы трехкратны. Однако уже это позволяет вычислить их на ЭВМ с хорошей точностью без особых затрат машинного времени.

Интеграл $D_9$:

$$D_9=\frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int\prod_{i=1}^{5}d\lambda_i\exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]$$

$$\times P\{\theta(\lambda_4+\lambda_5-\lambda_2)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\lambda_2-\lambda_4)\,\theta(\lambda_3-\lambda_5)\,\theta(\lambda_2-\lambda_5)\times$$

$$\times\theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4+\lambda_5)(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_4+\lambda_5)\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_4-$$

$$-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_5-2\vec{k}_1\vec{k}_3(\lambda_4+\lambda_5-\lambda_2)+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\,\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Вклад в главный асимптотический член дает только основное слагаемое:

$$D_9=C_9\beta+\ldots,\quad C_9=-G_6,\qquad /4.1/$$
$$G_6=-0{,}015\,020\,0(2)\,.$$

Здесь и далее цифры в круглых скобках означают погрешность в последних значащих цифрах результата.

Интеграл $D_{10}$:

$$D_{10}=\frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6}\int\prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int d\lambda_{1-3,5}\exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)-$$

$$-\sum_{i=1}^{3}k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]P\{\theta(\lambda_5)\,\theta(\lambda_2-\lambda_5)\,\theta(\lambda_3-\lambda_5)\,\theta(1-\lambda_1)\,\theta(\lambda_1+\lambda_5-$$

$$-\lambda_2-\lambda_3)(1-\lambda_1)(\lambda_1+\lambda_5-\lambda_2-\lambda_3)\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_2-2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_5-$$

$$-2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_3+2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\,\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Помимо основного слагаемого вклад в главный асимптотический член дает также слагаемое, получаемое из первого заменой $\lambda_1 \to 1-\lambda_1$. Вклад основного слагаемого обозначаем $D_{10}^{(1)} = -G_7\beta + \dots$, а вклад второго – $D_{10}^{(2)} = C'_{10}\,\beta + \dots$ Таким образом, $D_{10}$ имеет асимптотическое разложение $D_{10} = C_{10}\,\beta + \dots$, где

$$C_{10} = C'_{10} - G_7, \quad C'_{10} = \frac{1}{2}[\ln(\sqrt{2}+1) - \ln 2], \quad G_7 = -0{,}022\,882\,3(1). \qquad /4.2/$$

Интеграл $D_{11}$:

$$D_{11} = \frac{\beta^{9/2}}{4\pi^6}\int \prod_{i=1}^{3}\frac{d\vec{k}_i}{k_i^2}\int d\lambda_{1-4,6}\ \exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3) - \sum_{i=1}^{3} k_i^2\lambda_i(1-\lambda_i)]$$

$$P\{\theta(\lambda_6)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\lambda_3-\lambda_6)\,\theta(\lambda_4-\lambda_6)\,\theta(\lambda_2+\lambda_6-\lambda_3-\lambda_4)\,\theta(1-\lambda_1-$$

$$-\lambda_2+\lambda_4)(1-\lambda_1-\lambda_2+\lambda_4)\exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2\lambda_4 - 2\vec{k}_2\vec{k}_3\lambda_3 -$$

$$-2\vec{k}_1\vec{k}_3\lambda_6 + 2\sum_{\substack{i<j\\ i,j=1}}^{3}\vec{k}_i\vec{k}_j\lambda_i\lambda_j]\}.$$

Интересующий нас вклад дает только основное слагаемое:

$$D_{11} = C_{11}\beta + \dots, \quad C_{11} = -G_8, \quad G_8 = -0{,}034\,581\,4(3). \qquad /4.3/$$

Суммируя вклады /4.1/-/4.3/, получаем

$$\sum_{k=9}^{11} C_k = \frac{1}{2}\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{1}{2}\ln 2 - \sum_{i=6}^{8} G_i =$$
$$= 0{,}094\,113\,203 - \sum_{i=6}^{8} G_i = 0{,}166\,596\,9(4). \qquad /4.4/$$

## §5. РЕЗУЛЬТАТ

Из формул /2.9/, /3.5/ и /4.4/ получаем численное значение для коэффициента C из асимптотического разложения /1.3/: C = = 0,191 365 6(4). Подставляя это значение в /1.5/, находим коэффициент разложения энергии основного состояния полярона в третьем порядке по степеням константы связи

$$E_3 = -0{,}000\,902\,6(4). \qquad /5.1/$$

Полученное число является основным результатом настоящей работы.



В значении коэффициента $E_3$ можно явно выделить вклады 8 связанных диаграмм, используя те же формулы /1.5/, /2.9/, /3.5/ и /4.4/: $E_3 = \sum_{i=1}^{8} G_i + \Delta$, где

$$\Delta = 5\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{15}{4}\ln 2 - \frac{15\sqrt{2}}{8} + \frac{11}{8} = 0{,}530\,915\,579. \qquad /5.2/$$

Выражение для $\Delta$ в точности совпадает с суммарным вкладом несвязанных диаграмм /2/. Таким образом, энергия полярона вплоть до третьего порядка теории возмущений изучена нами двумя различными методами – с помощью континуальных интегралов и диаграмм. Оба метода дали одинаковый результат, что подтверждает его справедливость.

В итоге, разложение энергии основного состояния полярона по степеням константы связи имеет вид:

$$E/\omega = -\alpha - 1{,}591\,962\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 - 0{,}903\cdot\left(\frac{\alpha}{10}\right)^3 - \dots \qquad /5.3/$$

Это выражение можно использовать для вычисления энергии полярона при не слишком больших значениях ($\alpha \lesssim 5 \div 6$) константы связи. При больших значениях $\alpha$ может проявиться влияние следующих членов разложения. Выражение /5.3/ может также служить критерием при проверке истинности различного рода приближенных методов вычисления энергии полярона.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Селюгин О.В., Смондырев М.А. ОИЯИ, Р17-85-9, Дубна, 1985.
2. Smondyrev M.A. JINR, E17-85-222, Dubna, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 марта 1985 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.*

Селюгин О.В., Смондырев М.А. Р17-85-169

Третий порядок теории возмущений в модели полярона. Энергия основного состояния

В результате исследования, проведенного в настоящей работе, получено, что разложение энергии основного состояния полярона в ряд по степеням константы связи $\alpha$ имеет вид:

$$E/\omega = -\alpha - 1{,}591\,962\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 - 0{,}903\left(\frac{\alpha}{10}\right)^3 - \dots$$

Вычисление энергии полярона в третьем порядке теории возмущений дает одинаковые результаты как в методе континуального интегрирования, так и в диаграммной технике. Результат согласуется по порядку величины с вариационными оценками.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод

Seljugin O.V., Smondyrev M.A. P17-85-169

The Third Order of the Perturbation Theory in the Polaron Model. Ground State Energy

It is found that the expansion of the polaron ground state energy in powers of the coupling constant $\alpha$ is as follows:

$$E/\omega = -\alpha - 1{,}591\,962\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 - 0{,}903\left(\frac{\alpha}{10}\right)^3 - \dots$$

Both path integral technique and the diagram method lead to the same value of the polaron energy in the third order of perturbation theory. This value is also in accordance with the variational estimates.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985