сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P17-85-9

О.В.Селюгин, М.А.Смондырев

ТРЕТИЙ ПОРЯДОК ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА.

Общий подход

1985

В теории твердого тела хорошо известна сравнительно простая, но в то же время нетривиальная модель полярона /1/, описывающая взаимодействие нерелятивистской частицы /электрона/ с квантованным скалярным полем колебаний решетки /фононами/. Одним из основных методов изучения любой квантово-полевой модели является теория возмущений по константе связи; в особенности интересны ее высшие порядки. В настоящей работе изложены стержневые идеи метода вычисления энергии полярона в третьем порядке теории возмущений.

Мы исходим из представления статистической суммы системы в виде континуального интеграла. Полная статистическая сумма факторизуется:

$$Z = \mathrm{Sp}\,\exp(-H/\theta) = Z_0 \cdot Z_{int}.$$

Здесь Z_0 - произведение статистических сумм свободной нерелятивистской частицы и свободного квантованного скалярного поля. Все эффекты взаимодействия частицы с полем описываются статистической суммой Z_{int}, для которой можно получить представление:

$$Z_{int} = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \frac{\delta \vec{x}}{N} \exp S[\vec{x}],$$

$$S[\vec{x}] = -\frac{1}{2}\int\limits_0^1 \dot{\vec{x}}^2(s)\,ds + \frac{\alpha\beta^{3/2}}{4\pi^2\,\mathrm{sh}\beta/2}\int \frac{d\vec{k}}{k^2}\int\limits_0^1 ds\,d\sigma\, e^{-i\sqrt{2}\vec{k}[\vec{x}(s)-\vec{x}(\sigma)]}\,\mathrm{ch}\beta(1/2-|s-\sigma|).$$

Здесь ω - частота фононов, которая предполагается не зависящей от их волнового вектора /импульса/, θ - температура системы, $\beta=\omega/\theta$, а нормировочный множитель N определяется из условия обращения Z_{int} в единицу при равенстве нулю константы связи α.

§1. ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Разлагая Z_{int} в ряд по степеням α, получаем обычный ряд теории возмущений

$$Z_{int} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha^n Z_n$$

с коэффициентами Z_n, выраженными в виде

$$Z_n = \frac{1}{n!}\left(\frac{\beta^{3/2}}{4\pi^2 \operatorname{sh}\beta/2}\right)^n \int \prod_{i=1}^{n} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int_0^1 J_n \prod_{i=1}^{n} \left(ds_i\, d\sigma_i\, \operatorname{ch}\beta(1/2 - |s_i - \sigma_i|)\right). \qquad /1.1/$$

Величины J_n являются простыми континуальными интегралами гауссова типа

$$J_n = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \frac{\delta \vec{x}}{N} \exp\left\{-\frac{1}{2}\int_0^1 \dot{\vec{x}}^2 - i\sqrt{2}\sum_{i=1}^{n} \vec{k}\,[\vec{x}(s_i) - \vec{x}(\sigma_i)]\right\},$$

вычисление которых производится стандартными методами /см. приложение/. В результате имеем

$$J_n = \exp\left\{-\sum_{i=1}^{n} \vec{k}_i^2 G_{ii} - 2\sum_{\substack{i<j \\ i,j=1}}^{n} \vec{k}_i \vec{k}_j G_{ij}\right\},$$

$$G_{ii} = |s_i - \sigma_i|\,(1 - |s_i - \sigma_i|), \qquad /1.2/$$

$$G_{ij} = \frac{1}{2}(-|s_i - s_j| - |\sigma_i - \sigma_j| + |s_i - \sigma_j| + |s_j - \sigma_i|) - (s_i - \sigma_i)(s_j - \sigma_j).$$

В принципе, можно упростить формулы /1.1/ и /1.2/ и получить более удобные и компактные выражения для коэффициентов Z_n, хотя практически это выполнимо только для низших порядков теории возмущений.

В первом порядке все интегралы вычисляются до конца:

$$Z_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{\beta^{3/2}}{\operatorname{sh}\beta/2}\,I_0(\beta/2). \qquad /1.3/$$

Этот результат был получен в 1957 г. в работе М.А.Кривоглаза и С.И.Пекара [2]. В дальнейшем нам понадобится разложение Z_1 по степеням температуры, которое нетрудно выписать, зная свойства модифицированной функции Бесселя:

$$Z_1 = \beta + \frac{1}{4} + \frac{9}{32\beta} + \ldots \qquad /1.4/$$

Во втором порядке теории возмущений точное выражение для Z_2 при конечных температурах было впервые получено в 1980 г. в работе Е.А.Кочетова и одного из авторов /М.А.С./ [3], которые исходили из общих выражений /1.1/ и /1.2/. К сожалению, здесь уже не удалось вычислить все интегралы до конца, но по сравнению с формулами /1.1/ и /1.2/ выражение было существенно упрощено и записано в красивой симметричной форме:

$$Z_2 = \frac{\beta^3}{2\pi \operatorname{sh}^2 \beta/2}\int_0^1 d\sigma_1\, d\sigma_2\, \theta(1 - \sigma_1 - \sigma_2)\operatorname{ch}\beta(1/2 - \sigma_1)\operatorname{ch}\beta(1/2 - \sigma_2)\times$$

$$\times\left\{\frac{1 - \sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_1 \sigma_2}\arcsin\kappa + 2\int_0^{\kappa}\frac{dx}{x}\arcsin x\right\}, \qquad /1.5/$$

$$\kappa = \sqrt{\sigma_1 \sigma_2/(1 - \sigma_1)(1 - \sigma_2)}.$$

Из формулы /1.5/ следует разложение Z_2 по обратным степеням β:

$$Z_2 = \frac{\beta^2}{2} + \beta\left[2\ln(\sqrt{2} + 1) - \frac{3}{2}\ln 2 - \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{1}{4}\right] +$$

$$+\left[2\ln(\sqrt{2} + 1) - \ln 2 - \frac{15\sqrt{2}}{16} + \frac{7}{12}\right] + \ldots \qquad /1.6/$$

Естественно, сложность выражений /1.1/, /1.2/ быстро возрастает с увеличением порядка теории возмущений. Уже для Z_3 мы получаем 6-кратный интеграл по переменным собственного времени s_i и σ_i, не считая интегралов по импульсам. Эти последние могут быть вычислены стандартным способом, но ценой введения еще трех дополнительных интегрирований /например, при использовании α-представления для множителей $1/k_i^2$/.

Получающийся таким образом 9-кратный интеграл может быть несколько упрощен, но не настолько, чтобы представлять практический интерес даже для численных расчетов с привлечением ЭВМ. Так, если мы захотим получить из этого интеграла энергию основного уровня поларона /а мы вправе на это рассчитывать/, то нам надо перейти к пределу больших β, то есть к нулевым температурам. В этом пределе асимптотика Z_3 имеет вид:

$$Z_3 = A\beta^3 + B\beta^2 + C\beta + \ldots \qquad /1.7/$$

Вклад в энергию поларона дает третий член асимптотического разложения /1.7/. Если фитировать результаты численного расчета 9-кратного интеграла формулой /1.7/, то придется вычислять его для многих значений β. При разумных затратах машинного времени точность определения коэффициента C может оказаться слишком низкой. С другой стороны, как мы сейчас убедимся, значение коэффициента C должно быть известно с большой точностью.

В самом деле, средняя энергия поларона при любой температуре может быть вычислена по формуле

$$E/\omega = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{int}.$$

Подставляя сюда разложение Z_{int} в ряд теории возмущений, получаем:

$$E/\omega = \sum_{n=1}^{\infty} a^n E_n, \quad E_1 = -\frac{\partial}{\partial\beta} Z_1, \qquad /1.8/$$

$$E_2 = -\frac{\partial}{\partial\beta}(Z_2 - \frac{1}{2}Z_1^2), \quad E_3 = -\frac{\partial}{\partial\beta}(Z_3 - Z_1 Z_2 + \frac{1}{3}Z_1^3).$$

При стремлении температуры к нулю ($\beta \to \infty$) средняя энергия переходит в энергию основного состояния полярона. Используя соотношения /1.4/, /1.6/ и /1.7/, получаем коэффициенты разложения энергии основного состояния по теории возмущений:

$$E_1 = -1, \quad E_2 = -2\ln(\sqrt{2}+1) + \frac{3}{2}\ln 2 + \frac{\sqrt{2}}{2} = -0{,}015919622.$$

Значение для коэффициента E_1 было известно с момента рождения модели полярона. Правильное значение для E_2 в численном виде $E_2 = -0{,}016$ было впервые найдено в 1959 г. в работе Хёлера и Мюллензифена [4]. Аналитическое выражение для E_2 было получено Рёзелером вариационным методом [5] в 1968 г. Как точный результат прямых вычислений по теории возмущений указанное аналитическое значение коэффициента E_2 получено из формулы /1.5/ в [3]. Заметим, что в то время мы еще не подозревали о существовании работ [4,5], а в литературе бытовало утверждение, что точный результат во втором порядке теории возмущений был получен в 1954 г. в работе Хага [6], который нашел, что

$$E_2 = -\frac{2}{3}(\frac{1}{8} - \frac{1}{3\pi}) = -0{,}012598.$$

/см., например, широко известные книги Фейнмана [7] /.

В третьем порядке теории возмущений для энергии полярона получаем в пределе нулевой температуры следующее выражение:

$$E_3 = -3\beta^2(A - 1/6) - 2\beta(B - 2\ln(\sqrt{2}+1) + \frac{3}{2}\ln 2 + \frac{\sqrt{2}}{2} - \frac{1}{8}) - (C - \frac{5}{2}\ln(\sqrt{2}+1) + \frac{11}{8}\ln 2 + \frac{17\sqrt{2}}{16} - \frac{85}{192}) + \ldots \qquad /1.9/$$

При больших β коэффициент E_3 должен стремиться к конечному пределу, так что значения первых двух коэффициентов в формуле /1.7/ должны быть следующими:

$$A = 1/6, \quad B = 2\ln(\sqrt{2}+1) - \frac{3}{2}\ln 2 - \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{1}{8}. \qquad /1.10/$$

Тогда выражение для E_3 будет определяться последней скобкой в /1.9/ или, численно,

$$E_3 = -C + 0{,}190463018. \qquad /1.11/$$

Для ориентира всегда полезно хотя бы грубо представить, что нас ожидает в конце длинных вычислений. Для интерполяции энергии полярона при любых значениях константы связи применялся известный вариационный метод Фейнмана [8] /см. также [7] /. Для начала мы вычислили из формул Фейнмана значение коэффициента E_3, оказавшееся равным

$$E_3 = -\frac{2^3}{3^8}(7\sqrt{7} - 18) = -0{,}634 \cdot 10^{-3}.$$

Кроме того, имеется вариационная оценка, полученная в 1961 г. А.В.Тулубом [9]: $E_3 = -1{,}875 \cdot 10^{-3}$.

Надо подчеркнуть, что уже значения коэффициента E_2, полученные в этих работах /-1,23 и -1,26 соответственно/, более чем на 20% отличаются от точного значения. Поэтому заведомо нет никаких оснований слишком доверять выписанным числам для E_3. Но если эти оценки правильно передают хотя бы порядок величины коэффициента E_3, то, как следует из /1.11/, для определения трех - четырех значащих цифр в E_3 мы должны найти по крайней мере шесть значащих цифр коэффициента C. Как уже говорилось, вовсе не очевидно, что прямые расчеты на ЭВМ с использованием общих выражений /1.1/ и /1.2/ могут быть эффективно выполнены с такой точностью.

Все сказанное предопределило нашу программу вычисления энергии полярона в третьем порядке теории возмущений.

Во-первых, на основе общих выражений /1.1/ и /1.2/ мы получаем представление для E_3, удобное для дальнейших приложений и, в частности, для получения асимптотического разложения /1.7/. Далее необходимо убедиться, что первые коэффициенты разложения A и B удовлетворяют соотношениям /1.10/. Собственно говоря, ничего иного и быть не может, но совпадение результатов, полученных разными путями, будет свидетельствовать о согласованности подхода. После этого останется настолько упростить интегралы, через которые выразится коэффициент C, чтобы его можно было вычислить на ЭВМ с большой точностью, коль скоро не удастся сделать это аналитически. Реализации первой части этой программы и посвящена настоящая работа.

В заключение этого параграфа заметим, что выражения для Z_n, эквивалентные /1.1/ и /1.2/, были недавно получены Н.Н.Боголюбовым /мл./ и В.Н.Плечко [10] в рамках метода T-произведений для равновесной теории полярона, развитого Н.Н.Боголюбовым и Н.Н.Боголюбовым /мл./ [11].

§2. СВОЙСТВА СИММЕТРИИ

Итак, из общих выражений /1.1/ и /1.2/ для Z_n при конкретном значении $n = 3$ следует представление

$$Z_3 = \frac{\beta^{9/2}}{384\pi^6 \mathrm{sh}^3 \beta/2} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int \prod_{i=1}^{3} (ds_i\, d\sigma_i\, \mathrm{ch}\beta(1/2 - |s_i - \sigma_i|)) \times$$

$$\times \exp\{-\sum_{i=1}^{3} \vec{k}_i^2 G_{ii} - 2\vec{k}_1 \vec{k}_2 G_{12} - 2\vec{k}_2 \vec{k}_3 G_{23} - 2\vec{k}_1 \vec{k}_3 G_{13}\}, \qquad /2.1/$$

которое трудно использовать для практических целей.

Дальнейшему упрощению этих интегралов мешают знаки модуля в выражении /1.2/ для G_{ij}. Их можно снять, разбивая полный интеграл /2.1/ на части, дающие вклады от интегрирования по отдельным областям, каждая из которых соответствует какому-то определенному относительному расположению шести точек s_i и σ_i /$i = 1,2,3$/ на отрезке $[0,1]$. Всего имеется 6!=720 таких областей, но вычисление такого большого количества интегралов - весьма неперспективное и малоинтересное занятие. Как обычно, положение спасают свойства симметрии подынтегрального выражения, существенно уменьшающие число различных интегралов.

Обратимся еще раз к выражению /1.2/ для G_{ij}. Легко убедиться, что при замене $s_i \leftrightarrow \sigma_i$ для какого-то конкретного значения индекса i функция G_{ij} $(i \neq j)$ меняет знак. После замены импульсной переменной интегрирования $\vec{k}_i \to -\vec{k}_i$ подынтегральное выражение восстанавливает свой прежний вид. Это позволяет ограничиться интегрированием только по областям $s_i > \sigma_i$, $i = 1,2,3$, добавив соответствующий числовой множитель, учитывающий вклады прочих областей интегрирования. Иными словами, в подынтегральное выражение /2.1/ можно ввести множитель

$$8\theta(s_1 - \sigma_1)\, \theta(s_2 - \sigma_2)\, \theta(s_3 - \sigma_3), \qquad /2.2/$$

позволяющий свести число различных областей интегрирования до 720/8 = 90.

Далее, функции G_{ij}, равно как и все подынтегральное выражение /2.1/, симметричны относительно замены $i \leftrightarrow j$, т.е. относительно замены любых пар переменных $s_i \leftrightarrow s_j$, $\sigma_i \leftrightarrow \sigma_j$ с одновременной заменой импульсов интегрирования $\vec{k}_i \leftrightarrow \vec{k}_j$. Поэтому в подынтегральное выражение можно ввести также множитель, который упорядочит относительное расположение точек s_i:

$$6\theta(s_1 - s_2)\, \theta(s_2 - s_3), \qquad /2.3/$$

уменьшая тем самым число различных интегралов до 90/6 = 15. Как мы увидим ниже, и это число интегралов может быть уменьшено благодаря другим свойствам симметрии функций G_{ij}, но это уже не имеет смысла рассматривать в общем виде: у нас осталось не такое большое число различных интегралов. Каждый из них соответствует различным относительным расположениям точек σ_i при условии выполнения ограничений /2.2/ и /2.3/.

Подставляя /2.2/ и /2.3/ в /2.1/ и вводя новые переменные интегрирования λ_i /$i = 1,2,\ldots,6$/ вместо прежних s_i и σ_i /$i = 1,2,3$/, можно переписать /2.1/ в виде:

$$Z_3 = \sum_{k=1}^{15} D_k,$$

$$D_k = \frac{\beta^{9/2}}{8\pi^6 \mathrm{sh}^3 \beta/2} \int \prod_{i=1}^{3} \frac{d\vec{k}_i}{k_i^2} \int \prod_{i=1}^{6} d\lambda_i \prod_{i=1}^{3} \mathrm{ch}\beta(1/2 - \lambda_i) \times$$

$$\times \exp\{-\sum_{i=1}^{3} \vec{k}_i^2 \lambda_i (1 - \lambda_i) - 2\vec{k}_1 \vec{k}_2 (\lambda_4 - \lambda_1 \lambda_2) - \qquad /2.4/$$

$$- 2\vec{k}_2 \vec{k}_3 (\lambda_5 - \lambda_2 \lambda_3) - 2\vec{k}_1 \vec{k}_3 (\lambda_6 - \lambda_1 \lambda_3)\} \cdot d_k.$$

Индекс k в /2.4/ обозначает порядковый номер одной из 15 оставшихся областей интегрирования по переменным s_i и σ_i, а соответствующий вклад D_k определяется интегралом по этой области:

$$d_k = \int_0^1 \prod_{i=1}^{3} (ds_i\, d\sigma_i\, \delta(\lambda_i - s_i + \sigma_i))\, \theta(k) \times$$

$$\times \delta(\lambda_4 + \frac{1}{2}(|s_1 - s_2| + |\sigma_1 - \sigma_2| - |s_1 - \sigma_2| - |s_2 - \sigma_1|)) \times$$

$$\times \delta(\lambda_5 + \frac{1}{2}(|s_2 - s_3| + |\sigma_2 - \sigma_3| - |s_2 - \sigma_3| - |s_3 - \sigma_2|)) \times \qquad /2.5/$$

$$\times \delta(\lambda_6 + \frac{1}{2}(|s_1 - s_3| + |\sigma_1 - \sigma_3| - |s_1 - \sigma_3| - |s_3 - \sigma_1|)).$$

Символом $\theta(k)$ здесь мы условно обозначили произведение θ-функций из /2.2/ и /2.3/ и θ-функций, определяющих данное конкретное расположение точек σ_i. Результаты вычисления функций d_k приведены в следующем параграфе.

§3. ФУНКЦИИ d_k

Благодаря присутствию шести δ-функций интегрирование для каждой конкретной области в /2.5/ выполняется до конца:

$k = 1$, область $1 > s_1 > \sigma_1 > s_2 > \sigma_2 > s_3 > \sigma_3 > 0$.

$$d_1 = \frac{1}{6}\delta(\lambda_4)\, \delta(\lambda_5)\, \delta(\lambda_6)\, \theta(\lambda_1)\, \theta(\lambda_2)\, \theta(\lambda_3)\, \theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\, (1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^3.$$

$k = 2$, область $1 > s_1 > \sigma_1 > s_2 > s_3 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$.

$$d_2 = 2 \cdot \frac{1}{2}\delta(\lambda_4)\, \delta(\lambda_6)\, \theta(\lambda_1)\, \theta(\lambda_5)\, \theta(\min(\lambda_2,\lambda_3) - \lambda_5)\, \theta(1-\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3+\lambda_5) \times$$

$$\times (1 - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 + \lambda_5)^2.$$

Вклад области интегрирования $1 > s_1 > s_2 > \sigma_1 > \sigma_2 > s_3 > \sigma_3 > 0$ отличается от предыдущего заменой $\lambda_4 \leftrightarrow \lambda_5$, $\lambda_1 \leftrightarrow \lambda_3$, при которой подынтегральное выражение /2.4/ остается инвариантным. Поэтому вклад этой области вычислять не требуется: он учтен нами дополнительным множителем 2 в выражении для d_2.

$k = 3$, область $1 > s_1 > \sigma_1 > s_2 > s_3 > \sigma_3 > \sigma_2 > 0$.

$$d_3 = 2\cdot\frac{1}{2}\delta(\lambda_4)\,\delta(\lambda_6)\,\delta(\lambda_5-\lambda_3)\,\theta(\lambda_1)\,\theta(\lambda_3)\,\theta(\lambda_2-\lambda_3)\,\theta(1-\lambda_1-\lambda_2)(\lambda_2-\lambda_3)(1-\lambda_1-\lambda_2)^2.$$

Множитель 2 учитывает здесь также и вклад области интегрирования $1 > s_1 > s_2 > \sigma_2 > \sigma_1 > s_3 > \sigma_3 > 0$.

$k = 4$, область $1 > s_1 > s_2 > \sigma_2 > s_3 > \sigma_3 > \sigma_1 > 0$.

$$d_4 = \frac{1}{2}\delta(\lambda_5)\,\delta(\lambda_4-\lambda_2)\,\delta(\lambda_6-\lambda_3)\,\theta(\lambda_2)\,\theta(\lambda_3)\,\theta(1-\lambda_1)\,\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)\,\times$$

$$\times(1-\lambda_1)(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3)^2.$$

$k = 5$, область $1 > s_1 > s_2 > \sigma_2 > s_3 > \sigma_1 > \sigma_3 > 0$.

$$d_5 = 2\cdot\delta(\lambda_5)\,\delta(\lambda_4-\lambda_2)\,\theta(\lambda_2)\,\theta(\lambda_6)\,\theta(\lambda_3-\lambda_6)\,\theta(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_6)\,\times$$

$$\times\theta(1-\lambda_1-\lambda_3+\lambda_6)(\lambda_1-\lambda_2-\lambda_6)(1-\lambda_1-\lambda_3+\lambda_6).$$

Множителем 2 здесь учтен вклад области $1 > s_1 > s_2 > \sigma_1 > s_3 > \sigma_3 > \sigma_2 > 0$.

$k = 6$, область $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_3 > \sigma_2 > \sigma_1 > 0$.

$$d_6 = \delta(\lambda_4-\lambda_2)\,\delta(\lambda_5-\lambda_3)\,\delta(\lambda_6-\lambda_3)\,\theta(1-\lambda_1)\,\theta(\lambda_1-\lambda_2)\,\theta(\lambda_2-\lambda_3)\,\theta(\lambda_3)\,\times$$

$$\times(1-\lambda_1)(\lambda_1-\lambda_2)(\lambda_2-\lambda_3).$$

$k = 7$, область $1 > s_1 > s_2 > \sigma_1 > s_3 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$.

$$d_7 = \delta(\lambda_6)\,\theta(\lambda_4)\,\theta(\lambda_5)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\lambda_3-\lambda_5)\,\theta(\lambda_2-\lambda_4-\lambda_5)\,\times$$

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

$k = 8$, область $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_3 > \sigma_1 > \sigma_2 > 0$.

$$d_8 = \delta(\lambda_5-\lambda_3)\,\delta(\lambda_6-\lambda_3)\,\theta(\lambda_3)\,\theta(\min(\lambda_1,\lambda_2)-\lambda_4)\,\theta(\lambda_4-\lambda_3)\,\times$$

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

$k = 9$, область $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3 > 0$.

$$d_9 = \delta(\lambda_6+\lambda_2-\lambda_4-\lambda_5)\,\theta(\lambda_4+\lambda_5-\lambda_2)\,\theta(\min(\lambda_1,\lambda_2)-\lambda_4)\,\times$$

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

$k = 10$, область $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_2 > \sigma_3 > \sigma_1 > 0$.

$$d_{10} = \delta(\lambda_4-\lambda_2)\,\delta(\lambda_6-\lambda_3)\,\theta(\lambda_5)\,\theta(\min(\lambda_2,\lambda_3)-\lambda_5)\,\theta(1-\lambda_1)\,\times$$

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

$k = 11$, область $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_1 > \sigma_3 > \sigma_2 > 0$.

$$d = 2\cdot\delta(\lambda_5-\lambda_3)\,\theta(\lambda_6)\,\theta(\lambda_1-\lambda_4)\,\theta(\min(\lambda_3,\lambda_4)-\lambda_6)\,\times$$

$$\times\theta(\lambda_2+\lambda_6-\lambda_3-\lambda_4)\,\theta(1-\lambda_1-\lambda_2+\lambda_4)(1-\lambda_1-\lambda_2+\lambda_4).$$

Множитель 2 в D_{11} учитывает такой же вклад области интегрирования $1 > s_1 > s_2 > s_3 > \sigma_2 > \sigma_1 > \sigma_3 > 0$.

Итак, мы выписали выражения d_k для всех 15 областей интегрирования. Из-за совпадения вкладов от четырех пар областей число различных интегралов уменьшилось до 11. Это число уже не представляется нам слишком большим. Выражения d_k надо подставить в формулу /2.4/, вычислить для каждого из 11 интегралов асимптотические разложения при больших β, а затем сложить все вклады, что и приведет к разложению /1.7/.

Полученное представление справедливо при любых температурах, но особенно оно удобно для нахождения асимптотики при больших β. Введем операцию P, симметризующую какую-то функцию переменных λ_1, λ_2 и λ_3 относительно замены $\lambda_i \to 1-\lambda_i$ одной или нескольких из них:

$$\begin{aligned} P f(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) &= f(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) + f(1-\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3) + f(\lambda_1,1-\lambda_2,\lambda_3) + \\ &+ f(\lambda_1,\lambda_2,1-\lambda_3) + f(1-\lambda_1,1-\lambda_2,\lambda_3) + f(1-\lambda_1,\lambda_2,1-\lambda_3) + \\ &+ f(\lambda_1,1-\lambda_2,1-\lambda_3) + f(1-\lambda_1,1-\lambda_2,1-\lambda_3). \end{aligned} \qquad /3.1/$$

Тогда произведение гиперболических косинусов в подынтегральном выражении /2.4/ может быть представлено в виде

$$\prod_{i=1}^{3}\frac{\mathrm{ch}\beta(1/2-\lambda_i)}{\mathrm{sh}\beta/2} = \frac{1}{(1-e^{-\beta})^3}\,P\exp[-\beta(\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3)]. \qquad /3.2/$$

При подстановке /3.2/ в /2.4/ и соответствующей замене переменных λ_1, λ_2 и λ_3 действие операции P может быть переброшено на оставшуюся часть подынтегрального выражения:

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

$$\times \exp\left[-\sum_{i=1}^{3} \vec{k}_i^2 \lambda_i (1-\lambda_i)\right] \cdot P\{d_k \exp[-2\vec{k}_1\vec{k}_2(\lambda_4 - \lambda_1\lambda_2) - \qquad /3.3/$$

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

Теперь ясно, что в пределе больших β нам надо исследовать только область, где переменные λ_1, λ_2 и λ_3 находятся вблизи нуля. Из выражений для d_k видно, что тогда значения прочих переменных интегрирования λ_4, λ_5 и λ_6 будут находиться также вблизи нуля или единицы. Такие свойства намного облегчают исследование асимптотики указанных интегралов, хотя соответствующие выкладки по упрощению выражений для коэффициентов при явно выделенных зависимостях от β могут быть все еще достаточно громоздкими.

Представление /3.3/ и выражения для функций d_k завершают первую часть расчетов энергии полярона в третьем порядке теории возмущений. Вычислению выписанных интегралов посвящена наша следующая работа. Сейчас мы упомянем только ее конечный результат, имеющий предварительный характер: $E_3 = -0{,}9 \cdot 10^{-3}$.

В заключение мы благодарим В.П.Гердта, И.Гочева, Д.И.Казакова, В.Н.Плечко и Д.Пушкарова за полезные обсуждения и ценные советы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Надо вычислить

$$J_n = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \frac{\delta\vec{x}}{N} \exp\{-\frac{1}{2}\int_0^1 \dot{\vec{x}}^2 - i\sqrt{2}\sum_{i=1}^{n} \vec{k}_i [\vec{x}(s_i) - \vec{x}(\sigma_i)]\}.$$

Сначала рассмотрим континуальный интеграл, соответствующий гармоническому осциллятору:

$$I = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \frac{\delta\vec{x}}{N_1} \exp\{-\frac{1}{2}\int_0^1 \dot{\vec{x}}^2 - \frac{\epsilon^2}{2}\int_0^1 \vec{x}^2 + \int_0^1 \vec{f}\vec{x}\}.$$

Нормировочная константа N_1 здесь выбрана так, что $I = 1$ при $\vec{f} = 0$.

Ответ для интеграла I хорошо известен:

$$I = \exp\{\frac{1}{2}\int_0^1 ds\, d\sigma\, \vec{f}(s)\, \vec{f}(\sigma)\, G(s-\sigma)\},$$

где G - функция Грина гармонического осциллятора, удовлетворяющая нужным граничным условиям:

$$(\partial^2/\partial s^2 - \epsilon^2)\, G(s-\sigma) = -\delta(s-\sigma), \qquad G|_{s=0} = G|_{s=1},$$

$$\frac{\partial G}{\partial s}\Big|_{s=0} = \frac{\partial G}{\partial s}\Big|_{s=1}.$$

Решение этих уравнений легко находится и также давно известно:

$$G(s-\sigma) = \frac{\mathrm{ch}\,\epsilon(1/2 - |s-\sigma|)}{2\epsilon\,\mathrm{sh}\,\epsilon/2}.$$

Подставляя в интеграл I выражение $\vec{f} = -i\sqrt{2}\sum_{i=1}^{n} \vec{k}_i [\delta(s-s_i) - \delta(s-\sigma_i)]$, получаем

$$I_n(\epsilon) = \exp\{-\sum_{i,j} \vec{k}_i\vec{k}_j [G(s_i - s_j) + G(\sigma_i - \sigma_j) -$$

$$- G(s_i - \sigma_j) - G(s_j - \sigma_i)]\}.$$

Значение интеграла I при указанном выборе $\vec{f}$ мы обозначили здесь $I_n(\epsilon)$. В пределе $\epsilon \to 0$ интеграл $I_n(\epsilon)$ переходит в искомый интеграл J_n : $I_n(0) = J_n$. В этом пределе функция Грина принимает вид

$$G(s-\sigma) = \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{1}{8} - \frac{1}{2}|s-\sigma|(1-|s-\sigma|) + O(\epsilon^2).$$

При подстановке этого разложения в выражение для $I_n(\epsilon)$ растущие члены взаимно сокращаются и мы немедленно приходим к формулам /1.2/. По-видимому, изложенный метод представляет собой самый короткий путь к представлению /1.1/ и /1.2/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S. Phil.Mag., 1950, vol.41, p. 221-242; Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, М., 1951.
2. Кривоглаз М.А., Пекар С.И. Изв. АН СССР, сер.физ., 1957, т. XXI, с. 3-15.
3. Кочетов Е.А., Смондырев М.А. ОИЯИ, Р2-80-268, Дубна, 1980; ТМФ, 1981, т. 47, с. 375-386.

4. Höhler G., Müllensiefen A. Z.Phys., 1959, vol. 157, p.159-165.
5. Röseler S. phys.stat.sol., 1968, vol. 25, p. 311-316.
6. Haga F. Prog.Theor.Phys., 1954, vol. 11, p. 449-469.
7. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир", М., 1968; Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
8. Feynman R.P. Phys.Rev., 1955, vol. 97, p. 660-665.
9. Тулуб А.В. ЖЭТФ, 1961, т. 41, с. 1828-1838.
10. Боголюбов Н.Н. /мл./, Плечко В.Н. ОИЯИ, Р17-84-689, Дубна, 1984.
11. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. /мл./, ОИЯИ, Р17-81-65, Дубна, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 января 1985 года.

Селюгин О.В., Смондырев М.А. Р17-85-9

Третий порядок теории возмущений в модели полярона. Общий подход

В работе изложена первая часть исследования третьего порядка теории возмущений в модели полярона. Получено представление для статистической суммы системы при конечной температуре, которое преобразовано к виду, удобному для дальнейших вычислений и, в первую очередь, для определения энергии основного состояния полярона в третьем порядке теории возмущений.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Seljugin O.V., Smondyrev M.A. P17-85-9

The Third Order of the Perturbation Theory in the Polaron Model. General Approach

The first part of the calculations of the polaron ground state energy in the third order of the perturbation theory is presented. Our starting point is the representation of the partition function in the form of the path integral, from which one easily obtains the expressions for the expansion coefficients in arbitrary order. But in the higher orders these general expressions are not of the practical use because of the large number of integrations. To overcome such a problem the new representation for the partition function which is more convenient in the investigation of the limit of zero temperature is derived.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985