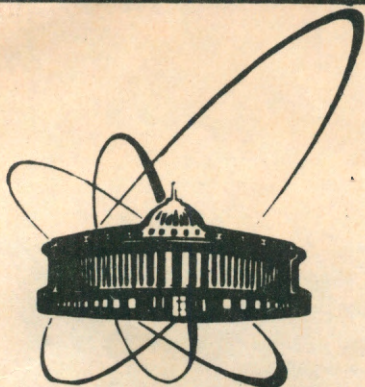


89-250



Объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
Дубна

C 51

P17-89-250

М. А. Смондырев

НЕСТАНДАРТНАЯ МАТЕМАТИКА  
ДЛЯ ПОЛЯРОНА ФРЕЛИХА

Направлено на Рабочее совещание  
"Возбужденные поляронные состояния  
в конденсированных средах",  
Пушино, 14-16 февраля 1989 г.

1989

## 1. Введение

Сначала о названии доклада. Речь пойдет не об экзотике, но об известных методах квантовой теории. Нестандартность означает, что они применялись к полярону редко (если вообще), и что их использование в данной системе порождает свою специфику. Нечетные параграфы можно рассматривать как лирические отступления от главной темы.

Мы исходим из гамильтониана Фрелиха для оптического полярона в представлении, где полный импульс системы  $P$  есть  $c$ -число:

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= \left( W - \sum_k k a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k a_k^+ a_k, \\ H_1 &= -i(4\pi\alpha/V)^{1/2} \sum_k \frac{1}{k} (a_k - a_k^+). \end{aligned} \quad (1.1)$$

Энергия выражена в единицах частоты  $\omega$  LO-фононов, эффективная масса  $m$  - в единицах "голой" массы  $\mu$ , а  $W = P/\sqrt{2\mu\omega}$  - безразмерный импульс системы. При малых  $W$  энергия полярона принимает вид

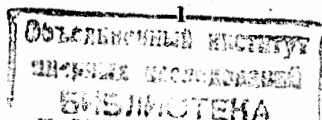
$$\varepsilon = E + W^2/m + o(W^2). \quad (1.2)$$

Для исследования энергии полярона  $E$ , его эффективной массы  $m$  и среднего числа фононов  $N$  традиционно применяют два метода - разложение сильной связи, восходящее к классической работе Боголюбова <sup>1)</sup>, и различные вариационные оценки. Я расскажу о применении к полярону паде-приближений и  $1/N$ -разложения, но начну с диаграммной техники для энергии основного состояния. Как ни странно, до недавнего времени последовательная теория возмущений для полярона не была построена, хотя модель имеет богатую историю.

## 2. Диаграммы для полярона

Изложение основано на нашей работе <sup>2)</sup> Развитая там диаграммная техника опирается на представление (1.1) и квантово-механическую теорию возмущений, причем  $n$ -й порядок разложения по степеням константы связи  $\alpha$  соответствует  $2n$ -му порядку теории возмущений по степеням  $H_1$ . Правила Фейнмана вытекают из ряда Бриллюэна-Вигнера, переразложение которого по степеням  $\alpha$  дает обычный ряд Рэлея-Шредингера. Приведем сводку правил, подчеркивая лишь их специфику.

Диаграммы для энергии движущегося полярона аналогичны диаграммам теории поля типа  $\psi\psi\phi$ . Электронный пропагатор имеет вид



$$P(k_1, k_2, \dots, k_n) = - \left[ n - 2W \sum_{i=1}^n k_i + \left( \sum_{i=1}^n k_i \right)^2 \right]^{-1}, \quad (2.1)$$

где  $n$  - число виртуальных фононов над данной электронной линией, а  $k_i$  - их импульсы. Особенностью является зависимость пропагатора от его положения в диаграмме. Фононный пропагатор равен  $1/k^2$ , а электрон-фононной вершине соответствует фактор  $(\alpha/2\pi^2)^{1/2}$ . Кроме того, имеется еще один тип вершины, которую мы изображаем точкой на электронной линии и которой соответствует множитель  $-1$ . Ее роль ограничивается изменением степени данного электронного пропагатора.

Электронное поле не квантуется, и потому нет диаграмм с электронными петлями. Нет и слабосвязанных диаграмм, разделяемых на две части разрезанием электронного пропагатора, т.к. в квантово-механических выражениях для поправок по теории возмущений в суммах пропускается состояние, к энергии которого ищется поправка. Зато есть несвязанные диаграммы - произведения диаграмм низшего порядка, куда добавлено такое число точечных вершин, чтобы совпало количество электронных пропагаторов в связанных и несвязанных диаграммах. Эта особенность следует из переразложения ряда Бриллюэна-Вигнера.

В нулевом приближении энергии полярона есть кинетическая энергия  $W^2$  электрона. В 1-м порядке имеется одна связанная диаграмма:

$$\epsilon_1 = -(\alpha/2\pi^2) \int \frac{dk}{k^2} P(k). \quad (2.2)$$

Во 2-м порядке имеется одна связанная и две несвязанных диаграммы, сумма которых может быть записана в виде:

$$\epsilon_2 = (\alpha^2/2\pi^4) \int \frac{dq dk}{q^2 k^2} (qk) P^2(q) P(k) P(q, k). \quad (2.3)$$

Из уравнений (2.2) и (2.3) следуют известные выражения для энергии и массы полярона во втором порядке по степеням  $\alpha$ .

В 3-м порядке имеем 8 различных связанных диаграмм и 6 несвязанных. В работе <sup>2)</sup> мы отдельно вычисляли их вклады, что привело к потере точности при сложении результатов. При  $W = 0$  было получено, что  $E_3 = -(0.8061 \pm 0.0004) 10^{-3}$ . Суммируя диаграммы в аналитическом виде, мы нашли в работе <sup>3)</sup> выражение, позволившее вычислить  $E_3$  с большей точностью, т.к. часть вкладов отдельных диаграмм сократилась уже в аналитической форме. В результате получено, что

$$E_3 = -0.806070048 10^{-3}. \quad (2.4)$$

Диаграммная техника позволяет найти энергию и эффективную массу полярона. Для среднего же числа  $N = \langle \sum a_{k+}^+ a_k \rangle$  фононов в поляроне Фрелиха было выведено соотношение <sup>2)</sup>

$$N = \left( 1 - \frac{3}{2} \alpha (\partial/\partial \alpha) - \frac{W}{2} (\partial/\partial W) \right) \epsilon, \quad (2.5)$$

следующее из теоремы Фейнмана-Хеллмана. Поэтому исследование среднего числа фононов в поляроне Фрелиха не представляет труда.

При тривиальном изменении правил Фейнмана диаграммная техника применима к поляронам других типов (акустическим и т.п.). Отметим также нашу работу <sup>4)</sup>, где с ее помощью исследован  $N$ -мерный полярон.

### 3. Известные результаты (отступление первое)

Мы прерываем основную линию доклада, чтобы привести известные на сегодняшний день результаты разложений сильной и слабой связи для энергии покоящегося полярона, которые имеют вид:

$$E(\alpha) = \sum_{n \geq 1} E_n \alpha^n, \quad (3.1a)$$

$$E(\alpha) = \sum_{n \geq 1} A_n \alpha^{2-n}, \quad A_{2k+1} = 0. \quad (3.1b)$$

Для приближенного вычисления  $E_n$  и  $A_n$  широко применялись вариационные методы во всем многообразии возможных вариантов. Характерным недостатком многих из них была ограниченность применимости областью либо сильной, либо слабой связи. Более изощренные варианты описывают характеристики полярона при любых  $\alpha$ . Из них выделен метод Фейнмана <sup>5)</sup>, дающий неплохие результаты при сравнительной простоте расчетов. Как известно, он использует континуальное представление статсуммы, где число  $N$  пространственных измерений произвольно:

$$Z_{int} = \int_{x(0)=x(\beta)} \frac{Dx}{const} e^S.$$

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{x}^2(s) ds + \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \iint_0^\beta \frac{ds_1 ds_2}{|x(s_1) - x(s_2)|} G_{12}.$$

$$G_{ij} = \frac{\text{ch}(\beta/2 - |s_i - s_j|)}{\text{sh}(\beta/2)}. \quad (3.2)$$

Здесь  $\beta = \omega/\theta$ , где  $\theta$  - температура системы. Нормировочная константа в интеграле по путям определена условием  $Z_{int}(\alpha=0) = 1$ . В пределе нулевых температур ( $\beta \rightarrow \infty$ ) имеем  $Z_{int} \approx \exp[-\beta E(\alpha)]$ , где  $E(\alpha)$  - энергия основного состояния полярона.

Метод Фейнмана, дающий для нее верхнюю оценку  $E_F(\alpha)$ , использует неравенство Йенсена и квадратичное аппроксимирующее действие

$$S_F = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \dot{x}^2(s) ds - \frac{c}{2} \iint_0^\beta ds_1 ds_2 e^{-W|s_1 - s_2|} [x(s_1) - x(s_2)]^2, \quad (3.3)$$

где  $c$  и  $W$  - вариационные параметры. Важное усовершенствование метода предложил Саито <sup>6)</sup>, заменивший  $\exp(-W|s_1 - s_2|)$  в действии (3.3) на про-

извольную функцию  $p(|s_1 - s_2|)$ , по которой производится вариация. Метод Сайто дает лучшую из верхних оценок, получаемых с помощью квадратичного действия. Для иллюстрации можно сравнить результаты Сайто с расчетами при очевидном обобщении метода Фейнмана

$$p(|s_1 - s_2|) = \sum_{i=1}^n C_i \exp(-W_i |s_1 - s_2|),$$

которые были проделаны при  $n=2$  в работе <sup>7)</sup> и при  $n=3$  в работе <sup>8)</sup>

Ни в методе Фейнмана, ни в методе Сайто не удалось получить аналитического выражения для энергии полярона. Однако для нее можно построить разложения слабой и сильной связи. Значения первых коэффициентов разложений (3.1) в приближениях Фейнмана и Сайто приведены в таблице 1. Здесь же даны немногие точные результаты.

Таблица 1

Первые коэффициенты разложений слабой и сильной связи для энергии трехмерного полярона

	Фейнман	Сайто	Точный результат
$-E_2$	$\frac{1}{81} = 1.2346 \cdot 10^{-2}$	$\frac{1}{12} - \frac{2}{9\pi} = 1.2598 \cdot 10^{-2}$	$\ln(1 + \frac{3\sqrt{2}}{4}) - \frac{\sqrt{2}}{2} = 1.59196 \cdot 10^{-2}$
$-E_3$	$8(7\sqrt{7}-18)/3^8 = .634366 \cdot 10^{-3}$	$\frac{5}{216} - \frac{68}{135\pi} + \frac{\sqrt{3}}{4\pi} = .6465 \cdot 10^{-3}$	$.806070048 \cdot 10^{-3}$
$-A_0$	$\frac{1}{3\pi} = .106103$	$\frac{1}{3\pi}$	$.108513$
$-A_2$	$3 \ln 2 + \frac{3}{4} = 2.829$	$3 \ln 2 + \frac{3}{4}$	$2.836$

Помимо сказанного, таблица требует небольших комментариев. Для коэффициента  $E_2$  приближение Сайто дает результат, полученный некогда Хага <sup>9)</sup> в другом подходе. Численно коэффициент  $E_2$  был найден Хелером и Мюллензифеном <sup>10)</sup> и точно - Резелером <sup>11)</sup>. Значения для  $A_0$  и  $A_2$  получены Мийяке <sup>12)</sup> и подтверждены Лакно, Пузыниным и др. Коэффициенты  $E_3$  и  $A_2$  в приближении Сайто рассчитаны нами.

Оценки Фейнмана и Сайто довольно близки друг к другу и неплохо описывают энергию полярона во всей области изменения  $\alpha$ . Так, общее для обоих приближений значение коэффициента  $A_0$  отличается от точного всего на 2.2%. В разложении слабой связи точно воспроизводится коэффициент  $E_1 = -1$ , но  $E_2$  уже заметно отличается от точного (на 22.4% для полярона Фейнмана и на 20.9% для оценки Сайто).

В работе <sup>4)</sup> мы рассматривали разложения слабой связи для  $N$ -мерно-го полярона и высказали догадку о связи оценки Сайто с разложением по обратным степеням  $N$ . Мы привели аргументы в пользу того, что резуль-

тат Сайто совпадает с главным членом  $1/N$ -разложения. Впоследствии наша догадка подтвердилась <sup>3)</sup> заодно стало ясно, почему столь хороши вариационные результаты Фейнмана и Сайто: последние оказались асимптотически точными в пределе больших  $N$ .

#### 4. $1/N$ -разложение для полярона Фрелиха

В этом разделе мы изложим схему построения  $1/N$ -разложения и приведем полученные результаты <sup>3)</sup>. Мы исходим из выражения (3.2) для  $Z_{int}$ , в котором переопределяем константу связи:

$$\alpha = 2\sqrt{2} N^{3/2} a. \quad (4.1)$$

Это позволяет получить разложение для энергии полярона в виде

$$E^{(N)}(\alpha) = N \epsilon_0(a) + \epsilon_1(a) + O(1/N). \quad (4.2)$$

На следующем этапе используем представление Фейнмана <sup>13)</sup> для континуальной  $\delta$ -функции:

$$\mathcal{F}(|x(s_1) - x(s_2)|^2) = \quad (4.3)$$

$$= \int D\sigma \int \left(\frac{Dp}{2\pi}\right) \mathcal{F}\{\sigma\} \exp\left\{i \int_0^\beta ds_1 ds_2 p(s_1, s_2) [\sigma(s_1, s_2) - |x(s_1) - x(s_2)|^2]\right\}.$$

Здесь  $\mathcal{F}$  - некий функционал, а отличие от стандартных формул связано с тем, что интегрирование выполняется по функциям двух переменных  $p(s_1, s_2)$  и  $\sigma(s_1, s_2)$ . Если применить (4.3) к (3.2), то интеграл по векторной функции  $x(s)$  превратится в  $N$ -ю степень аналогичного интеграла по одной из ее компонент  $x(s)$ . В результате получаем:

$$Z_{int} = \int D\sigma \int \left(\frac{Dp}{2\pi}\right) e^{S'}, \quad S' = i \int_0^\beta ds_1 ds_2 p \sigma + a N^{3/2} \int_0^\beta ds_1 ds_2 C_{12} \sqrt{\sigma} +$$

$$+ N \ln \left\{ \int_{x(0)=x(\beta)} \frac{Dx}{const} \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^\beta ds \dot{x}^2(s) - i \int_0^\beta ds_1 ds_2 p(s_1, s_2) [x(s_1) - x(s_2)]^2\right)\right\}. \quad (4.4)$$

Далее заменяем переменные интегрирования  $(\sigma, p) \rightarrow (y, z)$ :

$$\sigma = N \Sigma + i \sqrt{N} \Sigma y, \quad p = -i P - iz / (\sqrt{N} \Sigma). \quad (4.5)$$

Функции  $\Sigma(s_1, s_2)$  и  $P(s_1, s_2)$  определяются уравнениями для стационарной точки  $\delta S' / \delta \sigma = \delta S' / \delta p = 0$ . В конечном итоге получаем:

$$Z_{int} = \exp(NS_0) \int Dy \int \left(\frac{Dz}{2\pi}\right) \exp \bar{S}. \quad (4.6)$$

Отфакторизовавшийся член, дающий главное приближение по  $1/N$ , не зависит от переменных интегрирования  $y(s_1, s_2)$  и  $z(s_1, s_2)$ :

$$S_0 = \int_0^\beta \int_0^\beta ds_1 ds_2 P\Sigma + a \int_0^\beta \int_0^\beta \frac{ds_1 ds_2}{\sqrt{\Sigma}} G_{12} + \ln I, \quad (4.7)$$

$$I = \int_{x(\sigma)=x(\beta)} \frac{Dx}{c_{\text{const}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\beta ds X^2(s) - \int_0^\beta \int_0^\beta ds_1 ds_2 P(s_1, s_2) [x(s_1) - x(s_2)]^2 \right\}.$$

Нормировочная постоянная в выражении для  $I$  определяется из условия  $I|_{P=0} = 1$ . Гауссов континуальный интеграл в принципе вычисляется, а уравнения для функций  $P(s_1, s_2)$  и  $\Sigma(s_1, s_2)$  оказываются практически идентичными соотношениям, полученным Сайто <sup>7)</sup>. В пределе нулевых температур их можно упростить:

$$P(\xi) = a e^{-\xi/\Sigma^{3/2}(\xi)},$$

$$\Sigma(\xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx \frac{1 - \cos x\xi}{x^2 + 4 \int_0^\infty d\sigma P(\sigma) (1 - \cos x\sigma)}. \quad (4.8)$$

Выражение для главного члена  $1/N$ -разложения имеет вид:

$$\varepsilon_0(a) = -a \int_0^\beta \frac{d\xi}{\sqrt{\Sigma(\xi)}} e^{-\xi} (3-2\xi). \quad (4.9)$$

Уравнения (4.8) могут быть решены только численно, и потому мы ограничились исследованием случаев слабой и сильной связи:

$$\varepsilon_0(a) = -2\sqrt{\pi} a - (\pi-8/3) a^2 - \sqrt{\pi} (18\sqrt{3} + 5\pi/3 - 544/15) a^3 + \dots,$$

$$\varepsilon_0(a) = -4 a^2 - (\ln 2 + 1/4) + O(1/a^2). \quad (4.10)$$

Все поправки к главному члену  $1/N$ -разложения содержатся в действии  $\tilde{\Sigma}$ , выражение для которого можно найти в работе <sup>3)</sup>. Уже для первой поправки вычисления довольно сложны. Мы получили:

$$\varepsilon_1(a) = - (3\sqrt{\pi}/2) a - (88/5 - 21\pi/4) a^2 + O(a^3),$$

$$\varepsilon_1(a) = - (19 - 4\sqrt{10}) a^2 + O(a^0). \quad (4.11)$$

Найденные выражения могут служить источником различных приближений. Переопределяя в (4.1) константу связи, мы выделили ее асимптотику по  $N$ . В принципе можно еще умножить  $\alpha$  на произвольную функцию от  $N$  с условием, чтобы она в пределе больших  $N$  стремилась к конечному пределу. Встает вопрос, как выбрать эту функцию? Поступим следующим образом. Выражение

$$E^{(m)}(\alpha) = \frac{m}{N} E^{(N)} \left( \alpha N \frac{\Gamma(N/2)\Gamma(m/2-1/2)}{\Gamma(m/2)\Gamma(N/2-1/2)} \right) \quad (4.12)$$

превращается в тождество, если положить  $m=N$  (индекс указывает на размерность пространства). Мы же сначала разложим правую часть (4.12) в ряд по степеням  $1/N$ , а затем положим  $m=N$ , получив тем самым приближенное выражение для энергии  $N$ -мерного полярона. Аргумент функции  $E^{(N)}$  в (4.12) выбран так, чтобы уже в главном приближении по  $1/N$  правильно воспроизводился первый коэффициент разложения слабой связи. Разлагая (4.12) по  $1/N$ , получаем:

$$E^{(m)}(\alpha) = m \varepsilon_0(a) + \frac{m}{N} \varepsilon_1(a) + O(1/N^2). \quad (4.13)$$

Необходимо учесть также модификацию соотношения (4.1):

$$a = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \frac{N}{N^{3/2}} \frac{\Gamma(N/2)}{\Gamma(N/2-1/2)} \frac{\Gamma(m/2-1/2)}{\Gamma(m/2)} = a_0 (1 - 3/4N - 7/32N^2 + \dots), \quad (4.14)$$

где

$$a_0 = \alpha \frac{\Gamma(m/2-1/2)}{4m \Gamma(m/2)}. \quad (4.15)$$

Подставляя (4.14) в (4.13), получаем окончательно при  $m=N$ :

$$E^{(N)}(\alpha) = N \varepsilon_0(a_0) + [\varepsilon_1(a_0) - \frac{3}{4} a_0 \varepsilon_0'(a_0)] + O(1/N). \quad (4.16)$$

Теперь можно использовать результаты (4.10), (4.11). Для первых коэффициентов разложения слабой связи получаются выражения

$$E_1 = - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\Gamma(N/2-1/2)}{\Gamma(N/2)},$$

$$E_2 = - \left( \frac{\Gamma(N/2-1/2)}{4N \Gamma(N/2)} \right)^2 [N(\pi-8/3) + (108/5 - 27\pi/4) + O(1/N)],$$

$$E_3 = - \left( \frac{\Gamma(N/2-1/2)}{4N \Gamma(N/2)} \right)^3 [N\sqrt{\pi} (5\pi/3 - 544/15 + 18\sqrt{3}) + O(N^0)]. \quad (4.17)$$

Как мы и хотели,  $E_1$  воспроизведен точно <sup>14)</sup>. Обратимся к пределу сильной связи. Имеем из (4.16), (4.10) и (4.11):

$$A_0 = - \left( \frac{\Gamma(N/2-1/2)}{4N \Gamma(N/2)} \right)^2 [4N + (13 - 4\sqrt{10}) + O(1/N)],$$

$$A_2 = - N (\ln 2 + 1/4) + O(N^0). \quad (4.18)$$

Некоторые численные результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2  
Результаты 1/N-разложения для энергии полярона

	Главный член	+ поправка	Точный результат
N = 3			
-E <sub>2</sub>	$\frac{1}{12} - \frac{2}{9\pi} =$ $= 1.2598 \cdot 10^{-2}$	$-\frac{5}{48} + \frac{17}{45\pi} =$ $= 1.608373 \cdot 10^{-2}$	$\ln(1 + \frac{3\sqrt{2}}{4}) - \frac{\sqrt{2}}{2} =$ $= 1.59196 \cdot 10^{-2}$
-A <sub>0</sub>	$\frac{1}{3\pi} = .106103$	$\frac{25-4\sqrt{10}}{36\pi} = .109206$	.108513
-----			
N = 2			
-E <sub>2</sub>	$\pi(\frac{\pi}{32} - \frac{1}{12}) =$ $= .046626$	$\frac{\pi}{32}(\frac{122}{15} - \frac{19\pi}{8}) =$ $= .065978$	.063974
-A <sub>0</sub>	$\frac{\pi}{8} = .3927$	$\frac{\pi(21-4\sqrt{10})}{64} = .4099$	.4047

Коэффициент E<sub>2</sub> для объемного полярона (N=3) в главном приближении по 1/N равен соответствующему коэффициенту в разложении Сайто (см. таблицу 1). Учет поправки приводит к значению, отличающемуся от точного всего на 1%. Для сильной связи результат Фейнмана и Сайто A<sub>0</sub> = -1/3π (N=3) также получается как главное приближение по 1/N. Учет поправки приводит к значению, отличающемуся от точного результата Мийяке всего на 0.6%. Видно, что учет поправки порядка O(N<sup>0</sup>) заметно улучшает приближения, приводя к оценке снизу, в то время как главный член 1/N-разложения дает оценку сверху.

В таблице 2 приведены результаты для поверхностного (N=2) полярона. Естественно, чем больше N, тем лучше приближения. Точные значения E<sub>2</sub> и A<sub>0</sub> для двумерного полярона получены в работах [15, 16].

Заметим, что 1/N-разложение применимо для оценки энергии связанного состояния биполярона. Ранее такая оценка была нами получена методом Фейнмана [17]. В заключение этой части отметим также, что 1/N-разложение обычным образом связано с диаграммами: главному члену соответствует планарное приближение, когда в электронных пропагаторах приравниваются нулю произведения импульсов разных фононов.

#### 5. 1/N-разложение в квантовой механике (отступление второе)

Построение 1/N-разложения из интегралов по путям возможно и в квантовой механике (обычно для этого используют уравнение Шредингера). Там тоже имеется связь 1/N-разложения с вариационным методом. Энергия основного состояния частицы, описываемой гамильтонианом

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + N V(r/\sqrt{N}) , \quad (5.1)$$

разлагается в ряд по обратным степеням N :

$$E = N \epsilon_0 + \epsilon_1 + O(1/N) ,$$

$$\epsilon_0 = 1/8 r_0^2 + V(r_0) , \quad \epsilon_1 = (\sqrt{R} - 1)/2 r_0^2 ,$$

$$R = 3/4 + r_0^4 V''(r_0) , \quad (5.2)$$

где r<sub>0</sub> определено как решение уравнения

$$V'(r_0) = 1/4 r_0^3 , \quad R > 0 . \quad (5.3)$$

Существование решения уравнений (5.3) есть условие минимума по r<sub>0</sub> выражения ε<sub>0</sub> в (5.2) и условие существования 1/N-разложения.

Заметим, что 1/N-разложение дает нижнюю оценку для энергии основного состояния в потенциалах определенного класса. Действительно, если гамильтониан разбить на сумму H = H<sub>1</sub> + H<sub>2</sub>, то для основного уровня энергии справедлива оценка снизу E ≥ E<sub>1</sub> + E<sub>2</sub>, где E<sub>1</sub> - энергии основных состояний гамильтонианов H<sub>1</sub> соответственно. Представим гамильтониан (5.1) в виде такой суммы, где

$$H_1 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\omega^2 r^2}{2} , \quad H_2 = -\frac{\omega^2 r^2}{2} + N V(r/\sqrt{N}) , \quad (5.4)$$

а ω - вариационный параметр. Отсюда следует, что E<sub>1</sub> = Nω/2, а E<sub>2</sub> равно минимуму H<sub>2</sub> по переменной r. Получаем оценку

$$E \geq N (\omega/2 - \omega^2 r_0^2/2 + V(r_0)) , \quad (5.5)$$

где r<sub>0</sub>(ω) есть решение уравнений

$$V'(r_0) = \omega^2 r_0 , \quad V''(r_0) > \omega^2 . \quad (5.6)$$

Для получения лучшей нижней оценки найдем максимум по ω правой части выражения (5.5). Это дает уравнение для ω :

$$\omega = 1/2 r_0^2 . \quad (5.7)$$

Подставляя (5.7) в (5.5) и (5.6), получаем E ≥ N ε<sub>0</sub>, где ε<sub>0</sub> определено уравнениями (5.2), а r<sub>0</sub> - уравнениями (5.3) с условием R>1. Т.о., лидирующий член 1/N-разложения дает оценку снизу для энергии основного состояния в потенциалах, где R>1.

Вводя вместо r<sub>0</sub> параметр W = 1/2 r<sub>0</sub><sup>2</sup>, получаем для лидирующего члена 1/N-разложения выражение, где по W ищется минимум:

$$E_{1/N} = N [W/4 + V(1/\sqrt{2W})] . \quad (5.8)$$

Для оценки сверху используем вариационный метод Ритца с волновой функцией основного состояния N-мерного осциллятора. Получаем

$$E_{\text{var}} = N [c/4 + \pi^{-N/2} \int dr e^{-r^2} V(r/\sqrt{Nc})] , \quad (5.9)$$

где по c ищется минимум.

Наконец, из 1/N-разложения с помощью скейлинга, аналогичного

(4.12), можно получить еще одно приближенное выражение для энергии основного состояния. Для этого разобьем потенциал на сумму

$$\begin{aligned} V(r) &= V_0(r) + V_1(r), \\ V_0(r) &= \Omega^2 r^2 / 2 + a, \\ V_1(r) &= V(r) - \Omega^2 r^2 / 2 - a. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Параметры  $\Omega$  и  $a$  пока произвольны. Налагая дополнительное условие, чтобы точно воспроизводился первый член теории возмущений по степеням  $V_1$ , получаем в итоге

$$E_S = N[a(1-A) + \omega/4 + \Omega^2(1-A)/4\omega + AV(1/\sqrt{2\omega})], \quad (5.11)$$

где минимум ищется по параметру  $\omega$ . Здесь введено обозначение:

$$A = \frac{\pi^{-N/2} \int_0^{\infty} dr e^{-r^2} V(r/\sqrt{N\Omega}) - a - \Omega/4}{V(1/\sqrt{2\Omega}) - a - \Omega/4}. \quad (5.12)$$

Разные  $\Omega$  и  $a$  приводят к различным приближениям. Выбирая

$$a = \pi^{-N/2} \int_0^{\infty} dr e^{-r^2} V(r/\sqrt{N\Omega}) - \Omega/4, \quad (5.13)$$

получаем  $A = 0$ . Тогда из (5.11) следует, что минимум по  $\omega$  достигается при  $\omega = \Omega$ . Наилучший выбор  $\Omega$  определяется минимумом получившегося для  $E_S$  выражения, которое в точности совпадает (при  $\Omega = \epsilon$ ) с вариационной оценкой сверху. Отметим, что для потенциалов вида

$$V(r) = m^2 r^2 / 2 + \lambda r^p \quad (5.14)$$

требование воспроизведения первого порядка теории возмущений по  $\lambda$  (т.е. выбор  $a = 0$  и  $\Omega = m$ ) также приводит к совпадению  $E_S$  и  $E_{var}$ .

Наконец, выбор  $\Omega$  таким образом, чтобы из (5.12) следовало  $A=1$ , ведет к совпадению  $E_S$  и  $E_{1/N}$  при любых  $a$  (может оказаться, что  $\Omega \rightarrow \infty$ ). Надо помнить, что  $1/N$ -разложение не всегда дает нижнюю оценку энергии основного состояния. Примером служит кулоновский потенциал. Однако  $1/N$ -разложение для него существует, и т.к. потенциал степенной, то описанный скейлинг ведет к вариационной оценке. По-видимому, аналогичное явление происходит и в системе полярона.

#### 6. Паде-приближение для полярона

Изучая оптический полярон Фрелиха, многие пришли к выводу, что при некотором значении  $\alpha = \alpha_c$  энергия основного состояния имеет излом, а среднее число фононов терпит скачок. Это интерпретировалось как указание на фазовый переход из состояния свободно движущегося полярона слабой связи в самолокализованное состояние полярона сильной связи. Здесь не имеется в виду фазовый переход в точном смысле. Правильнее было бы говорить о перестройке поляронного состояния или о нестабильности системы, но мы сохраним верность традиционной терминологии, отражающей формальную аналогию с истинными фазовыми переходами.

"Переход" для полярона всегда обнаруживался в рамках того или иного приближения. Критические значения  $\alpha_c$ , найденные различными авторами, лежат в широкой области от 3 до 10, что само по себе не внушает доверия. Девриз и Питерс провели критический анализ проблемы<sup>18)</sup> и пришли к выводу, что определенных данных о существовании фазового перехода для полярона пока не получено. Мы также проанализировали ряд работ, вышедших после появления<sup>18)</sup>, и убедились, что в каждом конкретном случае "фазовый переход" является артефактом сделанных приближений. Но критика - это половина дела. Встает вопрос, какими соображениями можно обосновать гладкость  $E(\alpha)$ , используя имеющуюся точную информацию о ее свойствах?

Нам известны первые коэффициенты разложений слабой и сильной связи. Для экстраполяции в область промежуточных значений  $\alpha$  мы применили недиагональное двухточечное паде-приближение<sup>19)</sup>:

$$E(n, n-1) = -\alpha \frac{1 + a_1 \alpha + \dots + a_n \alpha^n}{1 + b_1 \alpha + \dots + b_{n-1} \alpha^{n-1}}, \quad n \geq 2. \quad (6.1)$$

Для определения коэффициентов  $a_i$  и  $b_i$  нам нужно  $(2n-1)$  уравнений. Желая использовать в равной степени информацию о разложениях  $E(\alpha)$  в точках  $\alpha=0$  и  $\alpha=\infty$ , мы приходим к двум альтернативным вариантам (6.1). В первом из них воспроизводятся  $n$  коэффициентов  $E_2 + E_{n+1}$  и  $n-1$  коэффициентов  $A_0 + A_{n-2}$ . Это паде-приближение обозначаем  $E_w(n, n-1)$ , отражая в индексе избыток информации о разложении слабой связи. Второй вариант получаем, потребовав воспроизведения  $n-1$  коэффициентов  $E_2 + E_n$  и  $n$  коэффициентов  $A_0 + A_{n-1}$ . Эту аппроксимацию обозначаем  $E_s(n, n-1)$ .

Для примера мы рассмотрели сначала фейнмановский полярон, где нам удалось с помощью программы аналитических вычислений на ЭВМ определить коэффициенты разложений слабой и сильной связи вплоть до  $E_{12}$  и  $A_{10}$  соответственно. Это позволило построить паде-приближения  $E_w(n, n-1)$  при  $n = 2 + 11$  и  $E_s(n, n-1)$  при  $n = 2 + 12$ . Был обнаружен интересный факт. Для данного  $\alpha$  аппроксимация Паде  $E_w(n, n-1)$  с ростом  $n$  приводила к все более низким значениям энергии, оставаясь при этом выше фейнмановского решения (в данном примере оно играет роль точного). Это означает, что  $E_w(n, n-1)$  дает для  $E_F$  верхнюю оценку. Аналогичным образом мы убедились, что аппроксимация  $E_s(n, n-1)$  приводит к оценке  $E_F$  снизу. Знание высших порядков разложений слабой и сильной связи позволило заметно сузить щель между оценками: максимальная разница между ними составила лишь 0.4% для промежуточных значений  $\alpha$ . Естественно, при малых и больших  $\alpha$  обе оценки практически совпали. Таким образом, решение Фейнмана оказалось лежащим между двумя гладкими функциями. Почти такие же результаты получены для среднего числа фононов и эффективной массы.

Предполагая, что энергии фейнмановского и реального поляронов принадлежат к одному классу функций в смысле получения верхних и ниж-

них оценок с помощью аппроксимаций Паде, мы применили этот подход к реальному случаю. Результаты расчетов представлены в таблице 3, где приведена также фейнмановская оценка  $E_F$ .

Таблица 3.

Верхняя и нижняя оценки энергии основного состояния и среднего числа фононов для полярона Фрелиха

$\alpha$	0.5	1	3	5	7	9	11
$-E_S(3,2)$	0.5041	1.0175	3.2122	5.7767	8.8832	12.654	17.165
$-E_F$	0.5032	1.0130	3.1333	5.4401	8.1127	11.486	15.710
$-E_W(2,1)$	0.5041	1.0167	3.1645	5.4945	8.0406	10.834	13.905
$N_S(3,2)$	0.2587	0.5409	2.1888	5.2383	10.034	16.643	25.062
$N_W(2,1)$	0.2583	0.5346	1.8594	3.6236	5.9345	8.8875	12.568

К сожалению, здесь нам известно не слишком много коэффициентов разложений (3.1): данные таблицы 1 позволяют построить лишь паде-приближения  $E_W(2,1)$  и  $E_S(3,2)$ . Видно, что при  $\alpha \leq 6$   $E_W(2,1)$  дает лучшую оценку сверху, чем  $E_F$ . В пределе сильной связи предпочтительнее фейнмановское решение. Это не удивительно, т.к. при построении  $E_W(2,1)$  не использовалось даже нулевое значение коэффициента  $A_1$  в разложении (3.1b). Следующая аппроксимация Паде  $E_W(3,2)$  улучшила бы описание режима сильной связи, но для ее построения необходим коэффициент  $E_4$ . Тем не менее  $E_F$  и  $E_W(2,1)$  дают нам независимые верхние оценки для  $E(\alpha)$ . Аппроксимация  $E_S(3,2)$  приводит к нижней оценке для  $E(\alpha)$ , которая намного лучше единственных известных нижних оценок Либа и Ямазаки<sup>20)</sup> и Ларсена<sup>21)</sup>. (Последняя, к тому же, справедлива лишь для малых  $\alpha$ ).

Оценки для энергии различаются не более чем на 10% во всей области значений  $\alpha$ . Примерно с такой же точностью аппроксимируется  $\partial E/\partial \alpha$ , что ведет к значительно большей щели между оценками для среднего числа фононов. И все же можно сделать определенные выводы о величине гипотетического скачка  $\Delta N \approx (N_S - N_W)/2$ . Так, наиболее "популярны" критические значения  $\alpha_c \approx 7+9$ . Видно, что в этих точках  $\Delta N \approx 2+4$ , что исключает "фазовые переходы" со скачками  $\Delta N \approx 10+14$ , существование которых подозревалося ранее.

Итак, характеристики полярона лежат между гладкими функциями. Конечно, отсюда не следует, что они тоже гладкие (хотя я склонен так думать). С другой стороны, мы не нашли намеков на фазовый переход (по крайней мере в указанных численных пределах) и исключили слишком большие скачки  $\Delta N$ , если фазовый переход все же возможен.

### 7. Ряды Стильтьеса (отступление третье)

Приведем некоторые математические сведения, имеющие отношение к

получению верхних и нижних оценок с помощью паде-приближений. Функция Стильтьеса определяется представлением<sup>22)</sup>:

$$f(z) = \int_0^{\infty} \frac{d\phi(u)}{1+zu}, \quad (7.1)$$

где  $\phi(u)$  - ограничена, не убывает при  $u \geq 0$ , принимает бесконечно много различных значений и имеет конечные вещественные моменты

$$f_i = \int_0^{\infty} u^i d\phi(u), \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (7.2)$$

Из определения следует, что  $f(z)$  - положительная и монотонно убывающая функция. Разложение (7.1) приводит к ряду Стильтьеса

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i (-z)^i \quad (7.3)$$

с положительными коэффициентами  $f_i$ . Ряд (7.3) может расходиться при всех  $z$ , исключая точку  $z=0$ . Если  $\phi(u)$  постоянна при  $\lambda \leq u < \infty$ , то интегрирование в (7.1) и (7.2) распространяется от 0 до  $\lambda$ . В этом случае функция  $f(z)$  определена в плоскости с разрезом по лучу  $-\infty < z \leq \lambda^{-1}$  и ее разложение в ряд (7.3) сходится в круге  $|z| < \lambda^{-1}$ .

Независимо от конечности радиуса сходимости ряда (7.3) с помощью аппроксимаций Паде можно исследовать функцию  $f(z)$  и вычислять ее значения. Именно для функций Стильтьеса доказано большинство теорем о свойствах паде-приближений.

Введем обозначение (L/M) для одноточечной аппроксимации Паде, в числителе и знаменателе которой стоят полиномы степени L и M соответственно. При  $L \geq M-1$  эти аппроксимации ряда Стильтьеса существуют. Для вещественных положительных  $z$  справедливы неравенства:

$$(M-1/M) < (M/M+1), \quad (M/M) > (M+1/M+1), \quad (M/M) > (M-1/M). \quad (7.4)$$

Кроме того, для ряда Стильтьеса доказаны теоремы о сходимости последовательности аппроксимаций Паде  $(M+J/M)$  ( $J \geq -1, M \rightarrow \infty$ ). В совокупности с неравенствами (7.4) это приводит к выводу, что одноточечные аппроксимации  $(M/M+1)$  дают оценку снизу, а  $(M/M)$  - сверху.

Многоточечным паде-приближениям посвящена работа Барнсли<sup>23)</sup>. Оттуда, в частности, следуют результаты для двухточечных паде-приближений, воспроизводящих разложения сильной и слабой связи. Пусть для функции Стильтьеса  $f(z)$  задано N порций информации о разложении слабой связи (7.3), т.е. известны коэффициенты  $f_i$  для  $i = 0+N-1$ . Построим аппроксимацию Паде  $f_N$  с полиномом степени  $[(N-1)/2]$  в числителе и степени  $[N/2]$  в знаменателе (квадратные скобки обозначают целую часть числа). При  $N=2M$   $f_N$  представляет собой аппроксимацию  $(M-1/M)$ , дающую оценку снизу. При  $N=2M+1$   $f_N$  является аппроксимацией  $(M/M)$  и дает оценку сверху. Напомним, что все это заведомо верно для рядов Стильтьеса.

Пусть даны еще и J порций информации о разложении в точке  $z=\infty$ :



$$f(z) = \sum_{i=0}^{J-1} F_i z^{-i}. \quad (7.5)$$

Построим аппроксимацию паде  $f_{N(J)}$ , являющуюся отношением полиномов степеней  $[(N+J-3)/2]$  и  $[(N+J-1)/2]$ . Результат Барнсли: при любом  $J$  свойства  $f_{N(J)}$  в смысле получения верхней или нижней оценок для функций Стильтьеса таковы, как у аппроксимации  $f_N$ .

Для иллюстрации можно рассмотреть две модельные функции:

$$f^{(1)} = (1 + z^2)^{-1/2},$$

$$f^{(2)} = e^{\int_0^1 \frac{d(e^{-1/u})}{1+zu}} = 1 + ze^{z+1} \text{Ei}(-z-1). \quad (7.6)$$

Первая из них не является функцией Стильтьеса. Разложения (7.3) и (7.5) этих функций аналогичны по форме соответствующим разложениям величины  $-\alpha/E(\alpha)$  для полярона. Паде-приближение для них имеет вид:

$$f(m, m+1) = \frac{1 + b_1 z + \dots + b_m z^m}{1 + a_1 + \dots + a_{m+1} z^{m+1}}. \quad (7.7)$$

Аппроксимация  $f_S(m, m+1)$  получается при определении  $m+1$  коэффициентов  $a_i$  и  $b_i$  из разложения сильной связи и  $m$  коэффициентов - из разложения слабой связи. Т.к. в (7.7) уже учтены известные значения первых коэффициентов обоих разложений ( $f_0 = 1$  и  $F_0 = 0$ ), получаем, что  $f_S(m, m+1)$  соответствует  $f_{N(J)}$  в обозначениях Барнсли при  $N=m+1$  и  $J = m+2$ . Отсюда следует, что  $f_S(m, m+1)$  при нечетных  $m$  приводит к оценке снизу, а при четных - к оценке сверху. Аналогично аппроксимация  $f_W(m, m+1)$  эквивалентна  $f_{N(J)}$  с  $N=m+2$  и  $J=m+1$ . Поэтому оценка снизу получится здесь при четных  $m$ , а сверху - при нечетных  $m$ .

Расчеты показали, что это верно для  $f^{(2)}$ . Однако для  $f^{(1)}$ , не являющейся функцией Стильтьеса, аппроксимация  $f_S(m, m+1)$  при любых  $m$  дает оценку снизу, а  $f_W(m, m+1)$  - сверху. С таким же явлением мы столкнулись при изучении характеристик полярона. При этом оценочные свойства одноточечного паде-приближения для  $f^{(1)}$  оказались теми же, что и для функций Стильтьеса. Это значит, что нарушена установленная Барнсли связь между аппроксимациями  $f_N$  и  $f_{N(J)}$ .

Число примеров легко умножить. Они показывают, что кроме функций Стильтьеса существуют и иные функции, для которых аппроксимации паде имеют вполне определенные оценочные свойства. Этот класс функций нуждается в чисто математическом исследовании.

#### 8. Заключение

В качестве резюме напомним основные полученные результаты.

1) Построена диаграммная техника, в рамках которой энергия полярона вычислена на трехпетлевом уровне. Возможны обобщения на поляроны различных видов.

2) Построено разложение по обратным степеням размерности пространства, позволяющее описать характеристики полярона во всей области изменения константы связи. Возможно обобщение для биполярона. Найдена связь  $1/N$ -разложения с вариационным методом. Она не специфична для полярона, но имеет достаточно общий характер. К чисто математическому результату можно отнести метод получения  $1/N$ -разложения из интегралов по путям.

3) Недиагональное двухточечное паде-приближение ведет к верхней и нижней оценкам для характеристик полярона. Этот вывод также имеет общематематическое значение, поскольку распространяется на широкий класс функций. В таком подходе получены указания на отсутствие фазового перехода полярона в самолокализованное состояние.

#### Литература

- 1) Н.Н. Боголюбов. Избранные труды, Наукова думка, т.2, с.499, Киев, 1970.
- 2) М.А. Смондырев. ТМФ 68 (1987) 29.
- 3) О.В. Селюгин, М.А. Смондырев. Межд. симпозиум по избранным проблемам статистической механики, ОИЯИ, D17-88-95, Дубна, с.344, 1988.
- 4) O.V.Selyugin, M.A.Smondyrev. Physica A142 (1987) 555.
- 5) R.P.Feynman. Phys.Rev. 97 (1955) 660.
- 6) M.Saitoh. J.Phys.Soc.Jap. 49 (1980) 878.
- 7) K.Okamoto, R.Abe. J.Phys.Soc.Jap. 31 (1971) 1337; 33 (1972) 343.
- 8) Н.Н. Боголюбов (мл.), А.Н. Киреев, А.М. Курбатов. ТМФ 67 (1986) 115.
- 9) E.Haga. Prog. Theor. Phys. 11 (1954) 449.
- 10) G.Höhler, A.Müllensiefen. Z.Phys. 157 (1959) 159.
- 11) J.Röseler. phys. stat. sol. 25 (1968) 311.
- 12) S.Miyake. J.Phys.Soc.Jap. 38 (1975) 181; 41 (1976) 747.
- 13) R.P.Feynman. Phys.Rev. 84 (1951) 108.
- 14) F.M.Peeters, X.Wu, J.T.Devreese. Phys.Rev. B33 (1986) 3926.
- 15) S.Das Sarma, B.A.Mason. Ann.Phys. 163 (1985) 78.
- 16) F.M.Peeters, X.Wu, J.T.Devreese. Phys.Rev. B31 (1985) 3420.
- 17) Е.А. Кочетов, С.П. Кулешов, В.А. Матвеев, М.А. Смондырев. ТМФ 30 (1977) 183.
- 18) J.T. Devreese, F.M. Peeters. phys. stat. sol. (b) 112 (1982) 219.
- 19) O.V.Selyugin, M.A.Smondyrev. JINR E17-87-335, Dubna, 1987. M.A.Smondyrev. In: Lecture Notes in Physics, 285, Physics of Phonons, p. 477. Ed. T.Paszkievicz. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1987.
- 20) E. Lieb, K. Yamazaki. Phys. Rev. 111 (1958) 728.
- 21) D. Larsen. Phys. Rev. 172 (1968) 967.
- 22) Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис. Аппроксимации Паде. М., Мир, 1986.
- 23) M.Barnsley. J. Math. Phys. 14 (1973) 299.

Рукопись поступила в издательский отдел

11 апреля 1989 года.