СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р2 - 10234

Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев

ПОЛЯРОН В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ

1976

P2 - 10234

Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев

ПОЛЯРОН В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОЛЕ

Кочетов Е.А., Кулешов С.П., Смондырев М.А. P2 - 10234

Полярон в потенциальном поле

Оценивается основной уровень энергии связанного состояния полярона в потенциальном поле.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Kochetov E.A., Kuleshov S.P.,
Smondyrev M.A. P2 - 10234

Polaron in Potential Field

The ground state energy of the bound state of polaron in potential field is evaluated.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

Электрон, помещенный в кристалл, поляризует окружающую среду и взаимодействует с наведенными зарядами, вследствие чего энергия его меняется. Другими словами, нерелятивистская частица (электрон) поляризует фононный вакуум, энергия её понижается, возникает сложное состояние (частица + фононное облако = полярон), обладающее некоторой эффективной массой m, большей, чем масса электрона.

В настоящей работе исследуется связанное состояние полярона, взаимодействующего не только с фононами, но и с некоторым внешним классическим полем. Интерес к этой задаче стимулируется несколькими соображениями. Во-первых, это практические соображения, ибо подобная система возникает, например, при внесении в среду стороннего заряда. Во-вторых, несомненный интерес представило бы исследование рассеяния поляронов и изучение зависимости амплитуды рассеяния от структуры сложной частицы. Решение задачи о поляроне в потенциальном поле является первым шагом в этом направлении.

В первой части работы получено континуальное представление функции Грина, во второй-оценивается основной уровень энергии системы.

I. Гамильтониан, описывающий взаимодействие полярона с внешним классическим потенциалом, имеет вид

$$H = -\frac{\Delta}{2\mu} + g\sum_k \left(A_k a_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + A_k^* a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right) + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + V(\vec{r}), \quad (I.I)$$

где a_k^+ и a_k - операторы рождения и уничтожения квантов скалярного поля (фононов) с энергией ω_k и волновым вектором $\vec{k}$, A_k - компоненты Фурье плотности источника, g - константа связи, $V(\bar{r})$ - внешний потенциал. Обычно считают ω_k не зависящим от $\vec{k}$ и вводят новую константу связи α:

$$gA_k = -\frac{i}{k}\left[\frac{2\sqrt{2}\,\alpha\pi\,\omega^{3/2}}{V\mu^{1/2}}\right],$$

где V - объем, в который помещена наша система. Переход от суммирования к интегрированию производится обычным образом:

$$\frac{1}{V}\sum_k F(\bar{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\bar{k}\,F(\bar{k}).$$

Выполним по переменной $\bar{r}$ преобразование Н.Н.Боголюбова/I/:

$$\begin{aligned} a_k &\to a_k e^{-i\bar{k}\bar{r}}, \\ a_k^+ &\to a_k^+ e^{i\bar{k}\bar{r}}, \\ -i\vec{\nabla}_{\bar{r}} &\to -i\vec{\nabla}_{\bar{r}} - \sum_k \vec{k}\,a_k^+ a_k, \end{aligned} \tag{I.2}$$

которое осуществляется оператором $S = \exp(-i\bar{r}\sum\bar{k}a_k^+a_k)$.
Гамильтониан (I.I) преобразуется в

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(-i\bar{\nabla}_{\bar{r}} - \sum\vec{k}a_k^+a_k\right)^2 + V(\bar{r}) + g\sum\left(A_k a_k + A_k^* a_k^+\right) + \sum\omega_k a_k^+ a_k. \tag{I.3}$$

Для построения функции Грина системы достаточно знать оператор

$$G(\tau) = e^{-\tau H}.$$

Ниже мы получим континуальное представление оператора $e^{-\tau H}$, линеаризуя выражения вида $\exp\left(-\int_0^1 ds\,\bar{A}_s^2\right)$ посредством введения функционального интеграла.

Подобная линеаризация основана на формуле:

$$1 = \int[\delta\bar{v}]_0^1\Big|_{\bar{v}\to\bar{v}-i\bar{A}} = \int[\delta\bar{v}]_0^1 \exp\left\{2i\int_0^1 ds\,\bar{v}(s)\bar{A}_s + \int_0^1 \bar{A}_s^2 ds\right\}.$$

Здесь

$$[\delta\bar{v}]_0^1 = \frac{\delta\bar{v}\,e^{-\int_0^1\bar{v}^2}}{\int\delta\bar{v}\,e^{-\int_0^1\bar{v}^2}}.$$

Отсюда получаем

$$\exp\left(-\int_0^1 ds\,\vec{A}_s^2\right) = \int[\delta\bar{v}]_0^1 \exp\left(2i\int_0^1 ds\,\bar{v}(s)\bar{A}_s\right). \tag{I.4}$$

Применяя (I,4) и используя упорядочивающий индекс s (см./2/), получаем для $G(\tau)$

$$G(\tau) = \exp(-\tau H) = T\exp\left(-\int_0^\tau ds\,H_s\right) =$$

$$= T\exp\left\{-\frac{1}{2\mu}\int_0^\tau ds\left(-i\bar{\nabla} - \sum\bar{k}a_k^+a_k\right)_s^2 - g\int_0^\tau ds\sum\left(A_k a_k + A_k^* a_k^+\right)_s - \int_0^\tau ds\sum\omega_k(a_k^+a_k)_s - \int_0^\tau V(\bar{r}_s)ds\right\} =$$

$$= \int [\delta \vec{v}]_0^\tau \, T\exp\Big\{ i\sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\int_0^\tau ds\, \vec{v}(s)\Big(i\vec{\nabla} + \sum \vec{k} a_k^+ a_k\Big)_s - g\int_0^\tau ds \sum \big(A_k a_k + A_k^* a_k^+\big)_s - \int_0^\tau ds \sum \omega_k \big(a_k^+ a_k\big)_s - \int_0^\tau V(\vec{r}_s)\, ds\Big\} =$$

$$= \int [\delta \vec{v}]_0^\tau \, e^{-\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{\nabla}\int_0^\tau ds\,\vec{v}(s)} \cdot g(\tau). \qquad (I.5)$$

В выражении $g(\tau)$ имеется T -экспонента. Для того чтобы снять ее, продифференцируем $g(\tau)$ по τ и учтем, что операторы при значениях упорядочивающего индекса $s = \tau$ должны занимать крайне левое положение. Получаем уравнение

$$\begin{cases} \dfrac{dg(\tau)}{d\tau} = \Big[i\sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\,\vec{v}(\tau)\sum \vec{k} a_k^+ a_k - g\sum\big(A_k a_k + A_k^* a_k^+\big) - \sum \omega_k a_k^+ a_k - V\Big(\vec{r} + \sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\int_0^\tau \vec{v}(s)\,ds\Big)\Big]\, g(\tau). \\ g(\tau = 0) = 1. \end{cases} \qquad (I.6)$$

Уравнение это легко решается, и вместо (I.5) мы приходим к выражению, уже не содержащему T -экспоненту:

$$G(\tau) = \int [\delta \vec{v}]_0^\tau \exp\Big(-\sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\,\vec{\nabla}\int_0^\tau ds\,\vec{v}(s)\Big)\exp\Big(-\int_0^\tau ds\, V\Big(\vec{r} + \sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\int_0^s \vec{v}\Big)\Big) \times$$

$$\times \exp\Big(-\sum a_k^+ a_k \int_0^\tau ds\Big(\omega_k - i\sqrt{\tfrac{2}{\mu}}\,\vec{k}\,\vec{v}(s)\Big)\Big)\cdot f_+ \cdot f_- \cdot R\,, \qquad (I.7)$$

где

$$f_+ = \exp\Big(g\sum A_k^* a_k^+ \int_0^\tau ds\, e^{s\omega_k - i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{k}\int_0^s \vec{v}}\Big),$$

$$f_- = \exp\Big(g\sum A_k a_k \int_0^\tau ds\, e^{-s\omega_k + i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{k}\int_0^s \vec{v}}\Big),$$

$$R = \exp\Big[g^2 \sum |A_k|^2 \int_0^\tau ds_1 \int_0^{s_1} ds_2\, e^{-(s_1 - s_2)\omega_k + i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{k}\int_{s_2}^{s_1}\vec{v}}\Big].$$

Мы будем исследовать процессы, когда в начальном и конечном состояниях не имеется свободных квантов. Для этого достаточно иметь вакуумное среднее $G(\tau)$:

$$\langle 0 |\, G(\tau)\, | 0 \rangle \equiv G_0(\tau) =$$

$$= \int [\delta \vec{v}]_0^\tau \, e^{-\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{\nabla}\int_0^\tau ds\,\vec{v}(s)} \; e^{-\int_0^\tau ds\, V\left(\vec{r} + \sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^s \vec{v}\right)} \times$$

$$\times \exp\Big\{ g^2 \sum |A_k|^2 \int_0^\tau ds_1 \int_0^{s_1} ds_2\, e^{-\omega_k(s_1 - s_2) + i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_{s_2}^{s_1}\vec{k}\,\vec{v}}\Big\}. \qquad (I.8)$$

П. Перейдем к оценке основного уровня энергии системы. Будем предполагать, что поляронная структура не разрушается из-за взаимодействия с полем $V(\vec{r})$, т.е. что полярон выступает по отношению к внешним полям как единая частица с вполне определенными характеристиками ($\mathcal{E}_0$ и m , где $\mathcal{E}_0$ - энергия полярона, m - его эффективная масса). Иными словами, мы будем решать задачу в случае, когда потенциал $V(\vec{r})$ не настолько силен, чтобы разорвать связь частицы с квантованным полем. Сделанное нами предположение может быть реализовано выделением в функции $G_0(\tau)$ члена, описывающего поведение свободного полярона. Это достигается введением функциональной δ -функции:

$$\delta(\vec{\alpha}(\eta)-\vec{v}(\eta)) = \int\limits_{\vec{x}(0)=0} \frac{\delta\vec{x}}{(2\pi)^3}\, e^{i\int_0^\tau d\eta\, \dot{\vec{x}}(\eta)[\vec{\alpha}(\eta)-\vec{v}(\eta)]} . \qquad (2.I)$$

С учетом (2.I) перепишем (I.8) следующим образом:

$$G_0(\tau) = \int\delta\vec{\alpha} \int\limits_{\vec{x}(0)=0} \frac{\delta\vec{x}}{(2\pi)^3}\, e^{i\int_0^\tau d\eta\, \dot{\vec{x}}\vec{\alpha}}\; e^{-\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{\nabla}\int_0^\tau\vec{\alpha}} \times$$

$$\times\, e^{-\int_0^\tau ds\, V(\vec{\tau}+\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^s\vec{\alpha})} \cdot G(\vec{x}) , \qquad (2.2)$$

где

$$G(\vec{x}) = \int[\delta\vec{v}]_0^\tau\, e^{-i\int_0^\tau \dot{\vec{x}}\vec{v}} \times$$

$$\times \exp\left\{ g^2\sum|A_k|^2\int_0^\tau ds_1\int_0^{s_1} ds_2\, e^{-\omega_k(s_1-s_2)+i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{k}\int_{s_2}^{s_1}\vec{v}} \right\} . \qquad (2.3)$$

В (2.3) сделаем замену переменной

$$\vec{v} \to \vec{v} - \frac{i\dot{\vec{x}}}{2} .$$

Тогда

$$G(\vec{x}) = e^{-\frac{1}{4}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2} \int[\delta\vec{v}]_0^\tau \exp\left\{ g^2\sum|A_k|^2\int_0^\tau ds_1\int_0^{s_1} ds_2 \times\right.$$

$$\left.\times\, e^{-\omega_k(s_1-s_2)}\; e^{+\frac{1}{\sqrt{2\mu}}\vec{k}\int_{s_2}^{s_1}\dot{\vec{x}} + i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{k}\int_{s_2}^{s_1}\vec{v}} \right\} . \qquad (2.4)$$

Но, как следует из работы[3], $G(\vec{x})$ есть функция, характеризующая поведение одного свободного полярона, причем роль поляронного импульса играет переменная $\vec{p}=\sqrt{\frac{\mu}{2}}\dot{\vec{x}}$. Это позволяет нам, в свою очередь, представить $G(\vec{x})$ при слабых внешних потенциалах (соответственно, при $|\dot{\vec{x}}|\ll 1$) в виде (см. работу[3]):

$$G(\vec{x}) = \exp\left\{-\int_0^\tau d\eta\left(\mathcal{E}_0+\frac{\vec{p}^2}{2m}\right)\right\} =$$

$$= \exp\left\{-\int_0^\tau d\eta\left(\mathcal{E}_0+\frac{\dot{\vec{x}}^2\mu}{4m}\right)\right\} , \qquad (2.5)$$

где $\mathcal{E}_0$ – основной уровень полярона, m – его эффективная масса.

Подставляя (2.5) в (2.2), получим

$$G_0(\tau) = e^{-\tau\mathcal{E}_0}\int\delta\vec{\alpha}\int\limits_{\vec{x}(0)=0}\frac{\delta\vec{x}}{(2\pi)^3}\, e^{i\int_0^\tau\dot{\vec{x}}\vec{\alpha}}\; e^{-\frac{\mu}{4m}\int_0^\tau\dot{\vec{x}}^2} \times$$

$$\times\, e^{-\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{\nabla}\int_0^\tau\vec{\alpha}}\; e^{-\int_0^\tau V(\vec{\tau}+\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^s\vec{\alpha})} . \qquad (2.6)$$

Сделав здесь сдвиг функциональной переменной

$$\dot{\vec{x}} \to \dot{\vec{x}} + \frac{4m}{\mu}\frac{i\vec{\alpha}}{2} ,$$

придем к

$$G_0(\tau) = e^{-\tau\mathcal{E}_0}\int\delta\vec{\alpha}\, e^{-\frac{m}{\mu}\int_0^\tau\vec{\alpha}^2}\cdot e^{-\sqrt{\frac{2}{\mu}}\vec{\nabla}\int_0^\tau\vec{\alpha}} \times$$

$$\times\, e^{-\int_0^\tau V(\vec{\tau}+\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^s\vec{\alpha})}$$

и после замены

$\vec{\alpha} \to \vec{\alpha}\sqrt{\frac{\mu}{m}}$ получим

$$G_0(\tau) = \int [\delta\vec{\alpha}]_0^\tau \, e^{-\tau\mathcal{E}_0} \, e^{-\sqrt{\frac{2}{m}}\,\vec{\nabla}\int_0^\tau \vec{\alpha}} \, e^{-\int_0^\tau V\left(\vec{r}+\sqrt{\frac{2}{m}}\int_0^s \vec{\alpha}\right)}.$$

Здесь $[\delta\vec{\alpha}]_0^\tau = \frac{\delta\vec{\alpha}}{\mathrm{const}}\, e^{-\int_0^\tau \vec{\alpha}^2}$. Нормировочная постоянная определяется переходом к пределу $V=0$. В этом случае должно быть $G_0(\tau) = \exp\left\{-\tau\left(\mathcal{E}_0 - \frac{\vec{\nabla}^2}{2m}\right)\right\}$, откуда

$$\mathrm{const} = \int \delta\vec{\alpha}\, e^{-\int_0^\tau \vec{\alpha}^2}.$$

Полученное для $G_0(\tau)$ функциональное представление означает, что $G_0(\tau)$ можно записать в виде

$$G_0(\tau) = e^{-\tau H_{\text{эфф}}},$$

где

$$H_{\text{эфф.}} = -\frac{\Delta}{2m} + V(\vec{r}) + \mathcal{E}_0. \tag{2.7}$$

Таким образом, в рассматриваемом нами случае слабого внешнего потенциала мы получили поправку на эффективную массу. Для нахождения основного уровня энергии связанного полярона нужно решить уравнение Шредингера с гамильтонианом $H_{\text{эфф}}$.

Выбирая, например, в качестве $V(\vec{r})$ кулоновский потенциал $V(\vec{r}) = -\beta/r$, получаем сразу же для основного уровня энергию E_0 в виде

$$E_0 = \mathcal{E}_0 - \frac{m\beta^2}{2}. \tag{2.8}$$

Используя выражения для эффективной массы m и энергии $\mathcal{E}_0$ полярона [3]

$$\left.\begin{aligned} \mathcal{E}_0 &= -\alpha\omega \\ m &= \mu\left(1+\frac{\alpha}{6}\right) \end{aligned}\right\} \alpha \ll 1, \qquad \left.\begin{aligned} \mathcal{E}_0 &= -\frac{\alpha^2\omega}{3\pi} \\ m &= \mu\,\frac{16\alpha^4}{81\pi^2} \end{aligned}\right\} \alpha \gg 1,$$

в рамках нашей модели $(\beta \ll \alpha)$ получаем

$$E_0 = -\alpha\omega - \frac{\beta^2\mu}{2}\left(1+\frac{\alpha}{6}\right), \alpha \ll 1, \tag{2.9}$$

$$E_0 = -\frac{\alpha^2\omega}{3\pi} - \mu\beta^2\,\frac{8\alpha^4}{81\pi^2}, \quad \alpha \gg 1. \tag{2.10}$$

Подчеркнем еще раз, что в обоих случаях больших и малых α константа связи β частицы с внешним полем предполагается небольшой. В случае же сильного потенциала $(\beta \gg 1)$ следует ожидать, что связь частицы с квантованным полем окажется почти разорванной. Другими словами, основной уровень будет близок к основному уровню потенциала $V(\vec{r})$, отличаясь от него членами, исчезающими при $\alpha \to 0$. Для кулоновского потенциала, например, должно получаться

$$E_0 \simeq -\mu\beta^2/2 + O(\alpha). \tag{2.11}$$

Качественная формула (2.11) подтверждается расчетами работы [4], посвященной исследованию связанного состояния полярона в кулоновском потенциале. В случаях же, описанных формулами (2.9), (2.10), в [4] получены аналогичные выражения, отличающиеся от наших заменой $\beta^2/2 \to \beta^2 \frac{4}{3\pi}$, что связано с фактическим применением вариационного метода к решению уравнения Шредингера, в то время как мы использовали его точное решение.

Аналогичным образом можно исследовать движение полярона в более сложных полях, например в электромагнитных, но эта задача выходит за рамки настоящей работы.

Авторы благодарны В.А.Матвееву и А.Н.Тавхелидзе за полезные обсуждения.

Литература

1. Н.Н.Боголюбов. Избранные труды, 2, 499, Киев, 1970.
2. R.P.Feynman, Phys.Rev., 84, 108, 1951.
3. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А.Смондырев. ТМФ, 25, 30, 1975.
4. P.M.Platzman. Phys.Rev., 125, 1961, 1962.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 ноября 1976 года.