объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-80-268

Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев

РАЗЛОЖЕНИЯ ПО ОБРАТНЫМ СТЕПЕНЯМ ТЕМПЕРАТУРЫ В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА

Направлено в ТМФ

1980

Как известно, одной из моделей квантовой теории, в которых структура частицы появляется вследствие ее взаимодействия с окружающим полем, является модель электрона в ионном кристалле /полярон/[1]. В большинстве исследований полярон изучался как квантовомеханическая система, т.е. при нулевой температуре. Основной задачей при этом было определение энергии основного состояния полярона и его эффективной массы.

Очевидно, что рассмотрение полярона как квантовостатистической системы при отличной от нуля температуре требует знания не только его основного, но и всех возбужденных уровней и является, вообще говоря, гораздо более трудной задачей. Впервые средняя энергия поляронной системы при конечных температурах была изучена в работах [2,3]. В [2] получена средняя энергия полярона при любых температурах в первом порядке теории возмущений.

В работе [3] применен вариационный метод оценки средней энергии, что позволило выйти за рамки теории возмущений в сторон больших значений константы связи.

Представляет интерес также исследование эффективной массы полярона в зависимости от температуры системы.

В настоящей статье мы рассматриваем разложение статистического оператора системы по обратным степеням температуры. Это позволяет изучить в первой части работы высокотемпературное поведение средней энергии. Во второй части работы дается определение эффективной массы полярона при температуре системы, отличной от нулевой; на основе этого определения изучено высоко температурное поведение эффективной массы.

Исследование проведено с помощью континуального представления для статистического оператора.

1. Средняя энергия системы

Итак, рассматриваем нерелятивистскую частицу, взаимодействующую с квантованным скалярным полем. Гамильтониан системы имеет вид

$$H=-\frac{\Delta}{2\mu}+\sum_{\vec{k}}\omega_k a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}}+g\sum_{\vec{k}}(A_k e^{i\vec{k}\vec{r}}a_{\vec{k}}+A^*_k e^{-i\vec{k}\vec{r}}a^+_{\vec{k}}). \qquad /1.1/$$

Здесь $a^+_{\vec{k}}$ и $a_{\vec{k}}$ - операторы рождения и уничтожения квантов скалярного поля /фононов/ с энергией ω_k и волновым вектором $\vec{k}$,

A_k - компоненты Фурье плотности источника. В теории полярона обычно полагают

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

так что

$$g^2 \sum_{\vec{k}} |A_k|^2 = \frac{\alpha\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2},$$

где α - безразмерная константа связи, а V - объем системы.

Статистическая сумма системы $Z = Sp\, e^{-\tau H}$ позволяет определить ее характеристики, в частности среднюю энергию E,

$$E = -\frac{\partial}{\partial\tau} \ln Sp\, e^{-\tau H} = \frac{Sp(H e^{-\tau H})}{Sp\, e^{-\tau H}},$$

где τ обратно пропорциональна температуре системы $(\tau = 1/k\theta)$.

Используя технику континуального интегрирования, можно получить для статистической суммы системы представление [1]

$$Z = Z_0 \cdot Z_{int}.$$

Здесь

$$Z_0 = V\left(\frac{\mu}{2\pi\tau}\right)^{3/2} \prod_k \frac{1}{1-e^{-\tau\omega}} \qquad /1.2/$$

является произведением статистических сумм свободной частицы и квантованного поля.

Взаимодействие частицы с полем отражено в статистической сумме Z_{int}:

$$Z_{int} = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)} \frac{\delta\vec{x}}{N}\, e^{S[\vec{x}]},$$

где

$$S[\vec{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 + \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int \frac{d\vec{k}}{k^2}\int_0^\tau ds_1 ds_2\, e^{-i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]}\, G_\omega(|s_1-s_2|), \qquad /1.3/$$

$$G_\omega(|s_1-s_2|) = \frac{ch\,\omega(\tau/2 - |s_1-s_2|)}{2\omega\; sh\,\omega\tau/2},$$

а константа нормировки N определяется из условия $Z_{int}(\alpha=0)=1$.

Имея в виду построение высокотемпературного разложения /малые τ / для Z_{int}, выполним в /1.3/ последовательно следующие замены переменных интегрирования:

$$s_i \to \tau s_i, \quad \vec{x}(s\tau) \to \sqrt{\tau}\,\vec{x}(s), \quad \vec{k} \to \vec{k}/\sqrt{\tau}.$$

после чего получим

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

$$\tilde{S}[\vec{x}] = -\frac{\mu}{2}\int\limits_0^1 \dot{\vec{x}}^2 + \frac{\alpha T^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int \frac{d\vec{k}}{k^2}\int\limits_0^1 ds_1 ds_2 e^{-i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]} G_T(|s_1-s_2|), \qquad /1.4/$$

$$T = \omega r, \qquad G_T = \frac{\mathrm{ch}\, T(1/2-|s_1-s_2|)}{2T\,\mathrm{sh}\, T/2}.$$

Разлагая G_T в ряд по степеням T, можно получить высокотемпературное разложение для статистической суммы Z_{int}. Мы хотим найти среднюю энергию E с точностью до членов, исчезающих в пределе высоких температур $(O(\sqrt{T}))$, для чего достаточно вычислить Z_{int} с точностью до членов $O(T^{3/2})$. Так как при малых T $G_T = \frac{1}{T^2}(1+O(T^2))$, нетрудно увидеть, что для достижения требуемой точности достаточно вычислить первые два члена обычной теории возмущений /при этом эффективным параметром разложения в случае высоких температур будет величина $\alpha T^{1/2}$ /.

Имеем, таким образом, разложение

$$Z_{int} = 1 + Z_1 + Z_2 + O(\alpha^3),$$

где член $O(\alpha^3)$ при малых T ведет себя как $T^{3/2}$, а

$$Z_1 = \frac{\alpha T^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int \frac{d\vec{k}}{k^2}\int\limits_0^1 ds_1 ds_2 G_T(|s_1-s_2|) J_1(\vec{k}),$$

$$Z_2 = \frac{\alpha^2 T^5}{16\mu\pi^4}\int \frac{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2}{k_1^2 k_2^2}\int\limits_0^1 ds_1 \ldots ds_4 G_T(|s_1-s_2|) G_T(|s_3-s_4|) J_2(\vec{k}_1;\vec{k}_2).$$

Здесь J_1 и J_2 обозначают функциональные интегралы

$$J_1(\vec{k}) = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \delta\vec{x}\, \exp\{-\frac{\mu}{2}\int\limits_0^1 \dot{\vec{x}}^2 - i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]\}, \qquad /1.5/$$

$$J_2(\vec{k}_1;\vec{k}_2) = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(1)} \delta\vec{x}\, \exp\{-\frac{\mu}{2}\int\limits_0^1 \dot{\vec{x}}^2 - i\vec{k}_1[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)] - i\vec{k}_2[\vec{x}(s_3)-\vec{x}(s_4)]\}.$$

Эти функциональные интегралы легко берутся, и мы можем привести выражения для Z_1 и Z_2 к виду

$$Z_1 = \frac{\alpha T^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^1 d\sigma \frac{G_T(\sigma)}{\sqrt{\sigma(1-\sigma)}} = \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2} T^{3/2}\frac{I_0(T/2)}{\mathrm{sh}\, T/2}, \qquad /1.6/$$

$$Z_2 = \frac{2a^2 T^5}{\pi} \int\limits_0^1 d\sigma_1 d\sigma_2 G_T(\sigma_1) G_T(\sigma_2)\, \theta(1-\sigma_1-\sigma_2) \times$$

$$\times \left\{ \frac{1-\sigma_1-\sigma_2}{\sigma_1\sigma_2} \arcsin\sqrt{\frac{\sigma_1\sigma_2}{(1-\sigma_1)(1-\sigma_2)}} + 2 \int\limits_0^{\sqrt{\frac{\sigma_1\sigma_2}{(1-\sigma_1)(1-\sigma_2)}}} \frac{dx}{x} \arcsin x \right\}. \qquad /1.7/$$

Напомним, что $G_T(\sigma) = \dfrac{\operatorname{ch} T(1/2-\sigma)}{2T \operatorname{sh} T/2}$.

В пределе высоких температур ($T \to 0$) из /1.6/, /1.7/ получаем

$$Z_1 = a\sqrt{\pi}\, T^{1/2}\, [1 + O(T^2)],$$

$$Z_2 = a^2 T \left[\frac{\pi^2}{3} - \ln 2 - 1\right] + O(T^2),$$

откуда для средней энергии взаимодействия

$$E_{int}/\omega = -\frac{\partial}{\partial T} \ln Z_{int} =$$

$$= -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{T}} \left[a + a^2 \frac{2\sqrt{T}}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{\pi^2}{3} - \frac{\pi}{2} - \ln 2 - 1\right)\right] = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{T}} [a + 0{,}029\sqrt{T}\, a^2 + O(T)]. \qquad /1.8/$$

Отметим, что выражение /1.6/ и, стало быть, средняя энергия в первом порядке по a были получены в работе [2]. В работе [3] средняя энергия взаимодействия при высоких температурах оценивалась на основе вариационного метода, приводящего, как известно, к завышенному значению. В результате численного расчета было получено выражение

$$E_{int}/\omega = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{T}} [a + 0{,}024 a^2 \sqrt{T} + O(T)].$$

Как видно, точное значение абсолютной величины коэффициента при $a^2\sqrt{T}$ примерно на 20% больше полученного из вариационного метода.

Выражения /1.6/, /1.7/ в пределе низких температур ($T \to \infty$) должны привести к результатам обычной квантовомеханической теории возмущений:

$$Z_1 = aT\left[1 + \frac{1}{4T} + O\left(\frac{1}{T^2}\right)\right],$$

$$Z_2 = \frac{a^2 T^2}{2} + a^2 \left[\ln \frac{3+2\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} - \frac{2\sqrt{2}-1}{4}\right] T + O(T^0),$$

откуда

$$E_{int}/\omega = -a - a^2 \left[\ln \frac{3+2\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right] + O(a^3) = -a - \left(\frac{a}{10}\right)^2 1{,}592 + \ldots \qquad /1.9/$$

Отметим, что проведенное в [5] вычисление энергии основного состояния полярона /совпадающего со средней энергией в пределе $T \to \infty$ / дало иное выражение:

$$E_{int}/\omega = -\alpha - \alpha^2 \frac{2}{3}\left(\frac{1}{8} - \frac{1}{3\pi}\right) = -\alpha - \left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 1{,}2598.$$

Наш результат указывает, что основной уровень энергии на самом деле лежит ниже /разница в коэффициентах при α^2 примерно на 26%/.

В заключение этого раздела заметим, что замена C_T на ее асимптотическое значение $1/T^2$ приводит к ошибкам порядка $O(T^{5/2})$ в Z_{int}, т.е. первые четыре члена разложения Z_{int} по полуцелым степеням T / $T^{1/2}$, T, $T^{3/2}$ и T^2 / определяются первыми членами разложения по константе связи α /α, α^2, α^3 и α^4 соответственно/ и лишь в член $\sim T^{5/2}$ дадут вклад члены, пропорциональные разным степеням α /α и α^5/. Можно поэтому считать, как уже говорилось, что для первых порядков эффективным параметром разложения является $\alpha\sqrt{T}$ и область применимости теории возмущений, таким образом, дается условием $\alpha\sqrt{T} \ll 1$. Наблюдение, что с повышением температуры сходимость разложений теории слабой связи улучшается и область применимости этой теории расширяется, было сделано еще в работе [2].

2. Эффективная масса полярона

Гамильтониан /1.1/ системы коммутирует с оператором $\hat{\vec{P}} = -i\vec{\nabla} + \sum \vec{k} a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}}$, что соответствует сохранению полного импульса системы. При нулевой температуре в системе нет реальных возбуждений, переносящих некоторую долю полного импульса, так что сохраняющийся полный импульс системы равен импульсу полярона. Поэтому, если найти энергию системы как функцию полного импульса $\vec{P}$ и разложить ее в ряд по степеням $\vec{P}$, мы сможем вычислить эффективную массу полярона $m_{эфф}$:

$$E(\vec{P}) = E(0) + \frac{P^2}{2m_{эфф}} + \ldots$$

Однако при отличной от нуля температуре в системе существуют реальные фононы, как взаимодействующие, так и не взаимодействующие с частицей. Эти фононы переносят определенную долю полного импульса системы; мы обозначили $\vec{P}_f$ средний импульс, переносимый ими. Тогда на долю собственно полярона остается импульс $\vec{P} - \vec{P}_f$, так что за массу полярона мы будем принимать коэффициент $m_{эфф}$, входящий в член вида $(\vec{P} - \vec{P}_f)^2/2m_{эфф}$ в выражении для средней энергии системы. Естественно, эффективная масса, вообще говоря, должна зависеть от температуры системы. Таким образом, основным вопросом становится процедура выделения из полного импульса системы той его части, которая переносится реальным полем.

Для определения поляронной массы перейдем от канонического распределения $\exp(-\tau H)$, использовавшегося в первом разделе работы, к большому каноническому распределению $\exp[-\tau(H-\vec{\lambda}\hat{\vec{P}})]$, которое соответствует фиксированию среднего импульса системы. Вводя статистическую сумму

$$Z(\lambda)=\mathrm{Sp}\exp[-\tau(H-\vec{\lambda}\hat{\vec{P}})],$$

мы можем найти в принципе фактор $\vec{\lambda}$ из уравнения

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial\vec{\lambda}}\ln Z(\vec{\lambda})=\vec{P}=\frac{\mathrm{Sp}\{\hat{\vec{P}}\exp[-\tau(H-\vec{\lambda}\hat{\vec{P}})]\}}{\mathrm{Sp}\exp[-\tau(H-\vec{\lambda}\hat{\vec{P}})]},$$

где $\vec{P}$ - средний импульс системы, т.е. С-число.

Исходя из того, что гамильтониан $H-\vec{\lambda}\hat{\vec{P}}$ унитарно эквивалентен гамильтониану $-\mu\vec{\lambda}^2/2+H(\omega_k\to\omega_k-\vec{\lambda}\vec{P})$, мы можем написать для $Z(\vec{\lambda})$ представление, аналогичное /1.2/, /1.3/:

$$Z(\vec{\lambda})=Z_0(\vec{\lambda})Z_{int}(\vec{\lambda}),$$

$$Z_0(\vec{\lambda})=V\left(\frac{\mu}{2\pi\tau}\right)^{3/2}e^{\frac{\tau\lambda^2\mu}{2}}\prod_{\vec{k}}\frac{1}{1-e^{-\tau(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})}}, \qquad /2.1/$$

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

$$S[\vec{x};\vec{\lambda}]=-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau\dot{\vec{x}}+\frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{k^2}\int_0^\tau ds_1ds_2\,e^{-i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]}G_{\omega-\vec{k}\vec{\lambda}}(|s_1-s_2|).$$

В формулах /2.1/

$$G_{\omega-\vec{k}\vec{\lambda}}=\frac{\mathrm{ch}[(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})(\tau/2-|s_1-s_2|)]}{2\omega\,\mathrm{sh}\frac{(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})\tau}{2}}=G_1(|s_1-s_2|)+ \qquad /2.2/$$

$$+G_2(|s_1-s_2|),$$

где

$$G_1=\frac{e^{-(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})|s_1-s_2|}}{2\omega},\qquad G_2=\frac{\mathrm{ch}[(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})|s_1-s_2|]}{\omega[e^{(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})\tau}-1]}. \qquad /2.3/$$

С другой стороны, статистическая сумма $Z(\vec{\lambda})$ по определению может быть записана в виде

$$Z(\vec{\lambda}) = \sum_{\{n_k\}} <\{n_k\}|\bar{Z}(\vec{\lambda})|\{n_k\}>,$$

где суммирование проводится по всем возбуждениям поля, а $\bar{Z}(\vec{\lambda})$ означает шпур оператора $\exp[-r(H-\vec{\lambda}\vec{P})]$ только по переменным частицы. Первый член этой суммы $<0|\bar{Z}(\vec{\lambda})|0>$ соответствует отсутствию реальных возбуждений в системе и может быть также записан через континуальный интеграл:

$$<0|\bar{Z}(\vec{\lambda})|0> = \bar{Z}_0(\vec{\lambda})\bar{Z}_{int}(\vec{\lambda}),$$

$$\bar{Z}_0(\vec{\lambda}) = V\left(\frac{\mu}{2\pi r}\right)^{3/2} e^{r\mu\lambda^2/2},$$

$$\bar{Z}_{int}(\vec{\lambda}) = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(r)} \frac{\delta\vec{x}}{N} \exp[\bar{S}(\vec{x};\vec{\lambda})], \qquad /2.4/$$

$$\bar{S}[\vec{x};\vec{\lambda}] =$$

$$= -\frac{\mu}{2}\int_0^r \dot{\vec{x}}^2 + \frac{a\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int \frac{d\vec{k}}{k^2}\int_0^r ds_1 ds_2\, e^{-i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]} G_1(|s_1-s_2|).$$

Сравнивая /2.4/ и /2.1/, убеждаемся, что учет реальных возбуждений приводит к появлению фактора $\prod_{\vec{k}} 1/(1-e^{-r(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})})$ в $Z_0(\vec{\lambda})$ и к появлению второго слагаемого G_2 в действии S, определяющем $Z_{int}(\vec{\lambda})$. Это наблюдение положено нами в основу определения массы полярона при конечной температуре.

Параметр $\vec{\lambda}$, как станет ясно из дальнейшего, связан со средней скоростью системы и пропорционален импульсу $\vec{P}$. Ограничиваясь рассмотрением лишь медленно движущихся поляронов, разложим $Z(\vec{\lambda})$ по степеням $\vec{\lambda}$ до членов порядка $O(\vec{\lambda}^3)$. Напомним, что при $\vec{\lambda}=0$ $Z_0(\vec{\lambda})$, $Z_{int}(\vec{\lambda})$ и $Z(\vec{\lambda})$ переходят соответственно в Z_0, Z_{int} и Z, определенные формулами /1.2/, /1.3/. Получаем в результате из /2.1/

$$Z_0(\vec{\lambda}) = Z_0[1+\frac{r\vec{\lambda}^2}{2}(\mu+m_0)] + O(\vec{\lambda}^4),$$

$$m_0 = -\frac{1}{3r}\frac{\partial^2}{\partial\vec{\lambda}^2}\sum_{\vec{k}}\ln[1-e^{-r(\omega-\vec{k}\vec{\lambda})}]|_{\vec{\lambda}=0};$$

$$Z_{int}(\vec{\lambda}) = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}(r)} \frac{\delta\vec{x}}{N} e^{S[\vec{x}]} + \frac{\vec{\lambda}^2}{2}\frac{a\omega^{5/2}}{6\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{q}}{\vec{q}^2}\int_0^r d\sigma_1 d\sigma_2 \quad .$$

$$\left[\frac{\partial^2 G_1}{\partial\vec\lambda^2}+\frac{\partial^2 G_2}{\partial\vec\lambda^2}\right]\Big|_{\vec\lambda=0}\cdot\int\limits_{\vec x(0)=\vec x(r)}\frac{\delta\vec x}{N}\,e^{S[\vec x]-i\vec q[\vec x(\sigma_1)-\vec x(\sigma_2)]}+O(\vec\lambda^4)=$$

$$=Z_{int}\left[1+\frac{r\vec\lambda^2}{2}(m_1+m_2)+O(\vec\lambda^4)\right],$$

где

$$m_i=\frac{\alpha\omega^{5/2}}{6\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\cdot\frac{1}{r}\cdot\int\frac{d\vec q}{\vec q^{\,2}}\int_0^r d\sigma_1\,d\sigma_2\frac{\partial^2 G_i}{\partial\vec\lambda^2}\Big|_{\vec\lambda=0}\ll e^{-i\vec q[\vec x(\sigma_1)-\vec x(\sigma_2)]}\gg$$

и введено обозначение

$$\ll e^{-i\vec q[\vec x(\sigma_1)-\vec x(\sigma_2)]}\gg=\int\limits_{\vec x(0)=\vec x(r)}\delta\vec x\,e^{S[\vec x]-i\vec q[\vec x(\sigma_1)-\vec x(\sigma_2)]}\Big/\int\limits_{\vec x(0)=\vec x(r)}\delta\vec x\,e^{S[\vec x]}.$$

Теперь статистическую сумму $Z(\vec\lambda)$ можно записать в виде

$$Z(\vec\lambda)=Z\left[1+\frac{r\vec\lambda^2}{2}(\mu+m_0+m_1+m_2)\right],\qquad /2.5/$$

так что

$$\ln Z(\vec\lambda)=\ln Z+\frac{r\vec\lambda}{2}(\mu+m_0+m_1+m_2)+O(\vec\lambda^4).$$

Вспоминая определение полного среднего импульса системы

$$\vec P=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vec\lambda}\ln Z(\vec\lambda),$$

получаем уравнение для $\vec\lambda$:

$$\vec P=\vec\lambda(\mu+m_0+m_1+m_2).\qquad /2.6/$$

Выше уже упоминалось, что m_0 и m_2 появляются лишь при учете реальных возбуждений, это позволяет нам отождествить $\vec\lambda(m_0+m_2)$ со средним импульсом $\vec P_r$, переносимым реальными фононами. Тогда из /2.6/ следуют представления для $\vec\lambda$:

$$\vec\lambda=\vec P_r/(m_0+m_2)=(\vec P-\vec P_r)/(\mu+m_1).\qquad /2.7/$$

Поскольку число реальных фононов зависит от температуры, величина $\vec\lambda$ также от нее зависит.

Используя определение энергии системы

$$E(\vec P)=\frac{\mathrm{Sp}\,He^{-r(H-\vec\lambda\vec P)}}{\mathrm{Sp}\,e^{-r(H-\vec\lambda\vec P)}}=-\frac{\partial}{\partial r}\ln Z(\vec\lambda)+\vec P\left(\vec\lambda+r\frac{\partial\vec\lambda}{\partial r}\right)$$

и формулы /2.5/ и /2.6/, получаем

$$E(\vec P)=E(0)+\frac{\vec\lambda^2}{2}\left[(\mu+m_0+m_1+m_2)-r\frac{d}{dr}(\mu+m_0+m_1+m_2)\right].$$

что можно с учетом /2.7/ записать в виде

$$E(\vec{P})=E(0)+\frac{(\vec{P}-\vec{P}_f)^2}{2}\frac{\mu+m_1-r\frac{dm_1}{dr}}{(\mu+m_1)^2}+\frac{P_f^2}{2}\frac{m_0+m_2-r\frac{d(m_0+m_2)}{dr}}{(m_0+m_2)^2},$$

где $E(0)$ - средняя энергия при нулевом импульсе, изученная в первой части работы.

Теперь очевидно, что мы имеем основания отождествить коэффициент при члене $(\vec{P}-\vec{P}_f)^2$ с эффективной массой полярона при конечной температуре.

Формулы, выписанные выше, приводят в итоге к выражению

$$m_{эфф}=\frac{(\mu+m_1)^2}{\mu+m_1-r\frac{dm_1}{dr}}, \qquad /2.8/$$

где

$$m_1=\frac{\alpha\omega^{3/2}}{12\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\frac{1}{r}\int d\vec{q}\int_0^r d\sigma_1 d\sigma_2\, e^{-\omega|\sigma_1-\sigma_2|}|\sigma_1-\sigma_2|^2 \ll e^{-i\vec{q}[\vec{x}(\sigma_1)-\vec{x}(\sigma_2)]}\gg. \qquad /2.9/$$

Мы получили континуальное представление для эффективной массы полярона. Выполняя масштабные преобразования переменных интегрирования, можно убедиться, как и в случае средней энергии, что высокотемпературные разложения $m_{эфф}$ могут быть получены из соответствующих порядков теории возмущений. Легко найти, в частности, что при $\alpha\to 0$

$$\ll e^{-i\vec{q}[\vec{x}(\sigma_1)-\vec{x}(\sigma_2)]}\gg \to J_1(\vec{q})=\exp[-\frac{\vec{q}^2}{2\mu}|\sigma_1-\sigma_2|(1-|\sigma_1-\sigma_2|)],$$

откуда получается выражение для m_1 в первом порядке теории возмущений

$$m_1=\mu\frac{\alpha T^{3/2}\sqrt{\pi}}{6}e^{-T/2}[I_0(T/2)-I_1(T/2)]. \qquad /2.10/$$

Подставляя /2.10/ в /2.8/, находим в первом порядке по α эффективную массу полярона

$$\frac{m_{эфф}}{\mu}=1+\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{6}T^{3/2}e^{-T/2}[I_0(T/2)(\frac{5}{2}-T)-I_1(T/2)(\frac{3}{2}-T)]. \qquad /2.11/$$

В пределе высоких температур $(T\to 0)$, как следует отсюда,

$$\frac{m_{эфф}}{\mu}=1+\frac{5}{12}\sqrt{\pi}\,\alpha T^{3/2}+O(T^{5/2}). \qquad /2.12/$$

Как и следовало ожидать, при повышении температуры полярон "раздевается" и его эффективная масса стремится к "голой" массе μ.

В обратном случае предельно низких температур формула /2.11/ дает

$$\frac{m_{эфф}}{\mu} = 1 + \frac{\alpha}{6}\left(1 - \frac{45}{32}\frac{1}{T^2}\right) + O(\alpha^2),$$

что переходит при нулевой температуре в известный результат

$m_{эфф}/\mu = 1 + \alpha/6$.

В заключение заметим, что, определяя эффективную массу как соответствующий коэффициент в свободной энергии системы $\ln Z(\vec{\lambda})$, мы придем вместо /2.8/ к выражению $\mu + m_1$, которое в предельных случаях имеет вид

$$\mu[1 + \frac{\alpha}{6}\sqrt{\pi}\, T^{3/2}], \qquad T \to 0$$

$$\mu[1 + \frac{\alpha}{6}(1 + \frac{3}{4T})], \qquad T \to \infty.$$

Авторы глубоко признательны Н.Н.Боголюбс   з интерес к работе и ценные советы.

Авторы благодарят С.П.Кулешова, В.А.Матвеева, В.А.Мещерякова, В.К.Федянина и К.Родригеса за полезные обсуждения.

Литература

1. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S. Phil.Mag., 1950, 41, pp.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, №1, с.3-15.
3. Кривоглаз М.А., Пекар С.И. Изв. АН СССР, сер,физ., 1957, т.XXI, №1, с.16-32.
4. Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
5. Haga F. Prog.Theor.Phys., 1954, 11, pp.449-469.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 апреля 1980 года.