сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-80-305

Е.А.Кочетов

РАССЕЯНИЕ ПОЛЯРОНА ВНЕШНИМ ПОЛЕМ

1980

Как известно, одной из моделей квантовой теории, в которых структура частицы проявляется вследствие ее взаимодействия с окружающим полем, является модель электрона в ионном кристалле /I/. Поляризация электроном фононного вакуума приводит к образованию сложной квазичастицы - полярона, обладающей некоторой внутренней энергией E и массой m, большей, чем масса электрона. Можно ожидать, что структура полярона явным образом проявится в его реакции на слабое внешнее возмущение, не способное разрушить квазичастицу. В частности, оценка основного уровня связанного состояния полярона в потенциальном поле показывает, что электрон, взаимодействующий с колебаниями кристаллической решетки, ведет себя в слабом внешнем поле как некоторая квазичастица с внутренней энергией E и эффективной массой m /2/. В настоящей работе исследуется задача о рассеянии полярона слабым внешним полем и изучается зависимость амплитуды рассеяния от структуры квазичастицы.

Гамильтониан, описывающий взаимодействие полярона с внешним классическим потенциалом $V(\bar{r})$, имеет вид

$$H = H_0 + V(\bar{r}), \qquad (I)$$

где H_0 - гамильтониан поляронной системы:

$$H_0 = -\frac{\Delta}{2\mu} + g\sum_{(\bar{k})}\left(A_k a_{\bar{k}} e^{i\bar{k}\bar{r}} + A_k^* a_{\bar{k}}^+ e^{-i\bar{k}\bar{r}}\right) + \sum_{(\bar{k})}\omega_k a_k^+ a_k .$$

Здесь $a_{\bar{k}}^+$ и $a_{\bar{k}}$ - 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

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

так что

$$g^2 \sum_{(k)} |A_k|^2 \longrightarrow \frac{\alpha\, \omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\, \bar{k}^2} \int \frac{d\bar{k}}{k^2} ,$$

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

Задачу о рассеянии полярона внешним полем удобно решать, используя формализм стационарной теории рассеяния, базирующийся, как известно, на двух операторах – функции Грина системы G и операторе рассеяния T, связанных соотношением

$$G = G_0 + G_0 T G_0 , \tag{2}$$

где G_0 есть функция Грина поляронной системы H_0. Заметим, что G_0 имеет в общем случае отличные положения полюса и значения вычета по сравнению с функцией Грина свободной частицы, в силу чего выражение амплитуды рассеяния структурного объекта (полярона) через функцию Грина отличается от соответствующего выражения для точечной частицы.

Перейдем теперь непосредственно к определению амплитуды рассеяния. Пусть $|\Phi_m(\vec{p})\rangle$ есть полный набор собственных состояний гамильтониана H_0:

$$H_0 |\Phi_m(\vec{p})\rangle = E_m(\vec{p}) |\Phi_m(\vec{p})\rangle .$$

Отметим, что в силу трансляционной инвариантности H_0 энергия поляронного состояния $E_m(\vec{p})$ есть функция полного импульса системы $\vec{p}$. Обозначив далее $|0;\vec{p}\rangle \equiv e^{i\vec{p}\vec{r}}|0\rangle$, где $|0\rangle$ – вакуумное состояние, получим из (2)

$$\langle 0;\vec{p}|G|0;\vec{q}\rangle \equiv G(\vec{p},\vec{q}) =$$

$$= \sum_{\vec{p}',n;\vec{q}',m} \langle 0;\vec{p}|\Phi_n(\vec{p}')\rangle\langle\Phi_n(\vec{p}')|G_0|\Phi_m(\vec{q}')\rangle\langle\Phi_m(\vec{q}')|0;\vec{q}\rangle +$$

$$+ \sum_{\vec{p}',n;\vec{q}',m} \langle 0,\vec{p}|\Phi_n(\vec{p}')\rangle\langle\Phi_n(\vec{p}')|G_0 T G_0|\Phi_m(\vec{q}')\rangle\langle\Phi_m(\vec{q}')|0;\vec{q}\rangle = \tag{3}$$

$$= \sum_{\vec{p}',n;\vec{q}',m} \frac{\langle 0;\vec{p}|\Phi_n(\vec{p}')\rangle\langle\Phi_n(\vec{p}')|0;\vec{q}\rangle}{E_n(\vec{p}') - E}\, \delta_{n,m}\, \delta_{\vec{p}',\vec{q}'} +$$

$$+ \sum_{\vec{p}',n;\vec{q}',m} \frac{\langle 0,\vec{p}|\Phi_n(\vec{p}')\rangle\langle\Phi_n(\vec{p}')|T|\Phi_m(\vec{q}')\rangle\langle\Phi_m(\vec{q}')|0;\vec{q}\rangle}{(E_n(\vec{p}') - E)(E_m(\vec{q}') - E)} .$$

Матрица рассеяния $\langle\Phi_n(\vec{p})|T|\Phi_m(\vec{q})\rangle$ на энергетической поверхности известным образом связана с амплитудой рассеяния $f^{n,m}(\vec{p},\vec{q})$:

$$f^{n,m}(\vec{p},\vec{q}) = -(2\pi)^3 m \langle\Phi_n(\vec{p})|T(E_p + i0)|\Phi_m(\vec{q})\rangle, \tag{4}$$
$$E_p = E_q .$$

В дальнейшем мы будем интересоваться переходом основного состояния поляронной системы опять же в основное, т.е. изучать функцию $f^{0,0}(\vec{p},\vec{q})$. Из выражений (3) и (4) вытекает, что

$$f^{0,0}(\vec{p},\vec{q}) = \lim_{E \to E_0(p) = E_0(q)} (E_0(p) - E)(E_0(q) - E)\, \frac{m}{2\pi}\, \frac{1}{|\chi(|\vec{p}|)|^2} \cdot \tag{5}$$

$$\cdot\, G^{int}(\vec{p},\vec{q}),$$

где $G^{int} = G - G_0$, и учтено, что в силу трансляционной инвариантности гамильтониана H_0 $\langle 0,\vec{p}|\varphi_0(\vec{p}')\rangle = \delta_{\vec{p}\vec{p}'}\chi(|\vec{p}|)$, где функция $\chi(|\vec{p}|)$ определяется, как это следует из (3), соотношением

$$\delta_{\vec{p},\vec{q}}\,|\chi(p)|^2 = \lim_{E\to E_0(p)} \big(E_0(p) - E\big)\, G_0(\vec{p},\vec{q}). \qquad (6)$$

Для функции Грина системы $G(\vec{p},\vec{q})$ можно получить следующее представление через функциональный интеграл/2/:

$$G(\vec{p},\vec{q}) = \int d\vec{\tau}\, d\vec{\tau}' \langle 0|G(\vec{\tau},\vec{\tau}')|0\rangle\, e^{i\vec{p}\vec{\tau} - i\vec{q}\vec{\tau}'} = \qquad (7)$$

$$= \int d\vec{\tau}\, e^{i\vec{\tau}(\vec{p}-\vec{q})} \int_0^\infty d\tau\, e^{\tau E} \int_{\vec{x}(0)=0} \frac{\delta\vec{x}}{const} \exp\Big\{ -\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau} \dot{\vec{x}}^2 ds + i\vec{p}\vec{x}(\tau) -$$

$$- \int_0^{\tau} ds\, V\big(\vec{\tau} + \vec{x}(s)\big) + \frac{\alpha\,\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int \frac{d\vec{\kappa}}{\kappa^2} \int_0^{\tau} ds_1 \int_0^{s_1} ds_2\, e^{-\omega(s_1 - s_2)} \times$$

$$\times\, e^{i\vec{\kappa}[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2)]} \Big\},$$

$$(H - E)\, G(\vec{\tau},\vec{\tau}') = \delta(\vec{\tau} - \vec{\tau}').$$

Из (7) имеем для функции Грина поляронной системы $G_0(\vec{p},\vec{q})$:

$$G_0(\vec{p},\vec{q}) \equiv G(\vec{p},\vec{q}; V=0) =$$

$$= \delta_{\vec{p}\vec{q}} \int_0^\infty d\tau\, e^{-\tau\left(\frac{p^2}{2\mu} - E\right)} \int_{\vec{x}(0)=0} \frac{\delta\vec{x}}{const} \exp\Big\{ -\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau} \dot{\vec{x}}^2 + \qquad (8)$$

$$+ \frac{\alpha\,\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int \frac{d\vec{\kappa}}{\kappa^2} \int_0^{\tau} ds_1 \int_0^{s_1} ds_2\, e^{-(s_1 - s_2)\left(\omega + \frac{\vec{\kappa}\vec{p}}{\mu}\right) + i\vec{\kappa}[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2)]} \Big\}.$$

Используя развитый в работе/2/ вариационный подход для оценки основного уровня энергии полярона, аппроксимируем функциональный интеграл в (8) действием

$$S'(\vec{x};\vec{p}) = -\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau} \Big(\dot{\vec{x}} + \frac{i\vec{p}}{M}\Big)^2 - \frac{C\mu}{2}\int_0^{\tau} ds_1\, ds_2\, e^{-W|s_1 - s_2|} \times$$

$$\times \Big[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2) + \frac{i\vec{p}}{M}(s_1 - s_2)\Big]^2, \qquad (9)$$

моделирующим картину равномерного движения структурной частицы. В результате получим/2/:

$$G_0(\vec{p},\vec{q}) = \frac{\delta_{\vec{p}\vec{q}} \cdot R(|\vec{p}|)}{E_0(p) - E}, \qquad (10)$$

где $E_0(p)$ – энергия поляронного состояния с импульсом $\vec{p}$:

$$E_0(p) = E_0 + \vec{p}^2/2m, \qquad (11)$$

а внутренняя энергия полярона $E_0 \equiv E_0(\vec{p}=0)$ и его эффективная масса m равны соответственно

$$E_0 = \frac{3}{4}\frac{(V-W)^2}{V} - \frac{\alpha\,\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int \frac{d\vec{\kappa}}{\kappa^2} \int_0^\infty d\sigma\, e^{-\sigma\omega - \frac{\kappa^2}{2\mu V^2}F(\sigma)}, \qquad (12)$$

$$m = \mu\Big[1 + \frac{1}{3\mu}\frac{\alpha\,\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int d\vec{\kappa} \int_0^\infty d\sigma\, e^{-\omega\sigma}\sigma^2 e^{-\frac{\kappa^2}{2\mu V^2}F(\sigma)}\Big], \qquad (13)$$

здесь $F(\sigma) = W^2\sigma + \frac{V^2 - W^2}{V}\big(1 - e^{-V\sigma}\big)$, $V^2 = W^2 + \frac{4C}{W}$.

Определив минимум E_0 по параметрам V и W и подставив экстремальные значения параметров в выражение для m, получим оценку для энергии полярона $E_0(p)$.

Исходя из (I0) и (6), определяем $|\chi(p)|^2$:

$$|\chi(p)|^2 = R(|\vec{p}|) = \exp\{-\rho_1 - 3\vec{p}^2\rho_2\},$$

где

$$\rho_1 = \frac{\alpha\omega^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{k^2}\,\frac{e^{-k^2\Lambda}}{\Omega_k^2},$$

$$\vec{p}^2\rho_2 = \frac{\alpha\omega^{3/2}}{2m^2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{k^2}\,\frac{e^{-k^2\Lambda}}{\Omega_k^4}(\vec{k}\vec{p})^2,$$

$$\Omega_k = \omega + k^2/2m, \quad \Lambda = \frac{1}{2\omega\sqrt{m\mu}}\left(1 - \mu/m\right).$$

Исходя из того, что рассеяние полярона как единого структурного образования имеет смысл рассматривать лишь в слабых внешних полях, не способных разрушить поляронное состояние, будем строить амплитуду рассеяния $f^{00}(\vec{p},\vec{q})$ в первом борновском приближении:

$$f^{00}_{Б}(\vec{p},\vec{q}) = \lim_{E\to E_0(p)=E_0(q)}\left(E_0(p)-E\right)\left(E_0(q)-E\right)\frac{m}{2\pi|\chi|^2}\,G^{int}_{Б} \qquad (I4)$$

где для $G^{int}_{Б}$ из (7) и (8) получаем представление

$$G^{int}_{Б}(\vec{p},\vec{q}) = -\int_0^\infty d\tau\, d\sigma\, \exp\left[-\tau\left(\frac{p^2}{2\mu}-E\right)-\sigma\left(\frac{q^2}{2\mu}-E\right)\right]\times$$

$$\times\int d\vec{r}\, e^{i\vec{r}(\vec{p}-\vec{q})}V(\vec{r})\int_{\vec{x}(0)=0}\frac{\delta\vec{x}}{\mathrm{const}}\exp\left\{-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 ds\, +\right.$$

$$+\frac{\alpha\omega^{3/2}}{4\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{k^2}\int_{-\sigma}^{\tau} ds_1\, ds_2\, e^{-\omega|s_1-s_2| + i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)]}\times \qquad (I5)$$

$$\left.\times\, e^{-\frac{\vec{k}}{\mu}\int_{s_2}^{s_1}\vec{a}(\eta)\,d\eta}\right\},$$

где

$$\vec{a}(\eta) = \vec{p}\,\theta(\eta) + \vec{q}\,\theta(-\eta). \qquad (I6)$$

Имея в виду, что вектор $\vec{a}(\eta)$ при $\eta\to\pm\infty$ переходит в импульс конечного или начального асимптотически свободных состояний, модифицируем аппроксимирующее действие (9), заменив в нем импульс полярона $\vec{p}$ на вектор $\vec{a}(\eta)$, т.е. введем вместо (9) аппроксимирующее действие

$$S^1(\vec{x};\vec{a}) = -\frac{\mu}{2}\int_{-\sigma}^{\tau} ds\left(\dot{\vec{x}} + \frac{i}{M}\vec{a}(s)\right)^2 -$$

$$-\frac{C\mu}{2}\int_{-\sigma}^{\tau} ds_1\, ds_2\, e^{-W|s_1-s_2|}\left[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)+\frac{i}{M}\int_{s_2}^{s_1}\vec{a}(\eta)\,d\eta\right]^2, \qquad (I7)$$

где по-прежнему M, C и W - вариационные параметры, определяемые из минимума энергии асимптотически свободного поляронного состояния (соотношения (II)-(I3)).

Аппроксимируя функциональный интеграл в (I5) действием $S^1(\vec{x};\vec{a})$, получим для амплитуды рассеяния в первом борновском приближении

$$f^{00}_{Б}(\vec{p},\vec{q}) = -\frac{m}{2\pi}\int d\vec{r}\,\bar{V}(\vec{r})\,e^{i\vec{r}(\vec{p}-\vec{q})}\,e^{-\frac{\rho_2(\vec{p}-\vec{q})^2}{2}},$$

$$\rho_2 = \frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}\,\omega\sqrt{\mu m}}\,\Psi\left(3/2,-3/2,2m\omega\Lambda\right) = \qquad (I8)$$

$$= \begin{cases} \dfrac{\alpha}{24\omega\mu}, & \alpha \ll 1 \\ \dfrac{1}{2\omega m}, & \alpha \gg 1. \end{cases}$$

Из (I8) следует, что рассейние поларона на слабом потенциале эффективно сводится к рассеянию частицы массы m на сглаженном потенциале:

$$V_{eff}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\rho_2)^{3/2}} \int d\vec{r}_1 V(\vec{r}_1) \exp\left[-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_1)^2}{2\rho_2}\right]. \quad (19)$$

Отметим, что сглаживание потенциала $V(\vec{r})$ приводит к некоторому повышению энергии связи частицы в поле $V_{eff}(\vec{r})$ по сравнению с энергией связи частицы в поле $V(\vec{r})$. В частности, если $V(\vec{r}) = -\beta/r$ - кулоновский потенциал, то $V_{eff} = -\beta/r\, \Phi\left(\frac{r}{\sqrt{2\rho_2}}\right)$, где $\Phi(x)$ -функция ошибок, и основной уровень энергии частицы массы m поднимается в потенциале $V_{eff}(\vec{r})$ по сравнению с кулоновским потенциалом $-\beta/r$ на величину $\Delta E = 4m^3\beta^4\rho_2 + O(\rho_2^{3/2})$, где учтено, что $\rho_2 \ll 1$.

В заключение автор благодарит С.П.Кулешова, В.А.Матвеева, М.А.Смондырева и А.Н.Тавхелидзе за полезные обсуждения.

Литература

1. H.Fröhlich, H.Pelzer, S.Ziemau. Properties of Slow Electrons in Polar Materials. Phil.Mag., 41, pp.221-242, 1950 ; С.И.Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, 1951.
2. Е.А.Кочетов, С.П.Кулешов, М.А. Смондырев. Полярон как модель протяженной частицы. В кн.: "X Международная школа молодых ученых по физике высоких энергий". ОИЯИ, Д2-10533, Дубна, 1977, стр. 489-525.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 апреля 1980 года.