объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P2-80-328

Е.А.Кочетов, М.А.Смондырев

ПОЛЯРОН ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Направлено в ТМФ

1980

Одной из классических задач в теории полярона является изучение его поведения в переменном электрическом поле. Основной интерес представляет при этом вычисление подвижности полярона и функций отклика /импеданса и адмиттанса/. Среди используемых методов наиболее фундаментален подход Н.Н.Боголюбова, основанный на обобщенном кинетическом уравнении электрон-фононной системы, переходящем при надлежащих аппроксимациях в уравнение Больцмана для полярона /1,2/. Иной подход был использован в /3/, где задача о подвижности полярона решалась с помощью приближенного вычисления фейнмановского интеграла по траекториям.

В настоящей работе мы изучаем реакцию поляронной системы при конечной температуре на постоянное электрическое поле. Не ставя задачу о нахождении подвижности или функций отклика, мы интересуемся сдвигом средней энергии системы вследствие ее взаимодействия с внешним полем. В слабых полях реакцию системы можно описать как следствие появления у полярона массы, зависящей от температуры. Мы вычисляем эту массу и сравниваем ее с эффективной массой полярона, определенной другими методами. Исследование проводится с помощью континуального представления для статистического оператора.

1. СЛАБАЯ СВЯЗЬ: ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Итак, рассмотрим полярон, помещенный в постоянное электрическое поле $\vec{E}$. Гамильтониан системы

$$H = H_{пол} - \vec{E}\vec{r},$$

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

В теории полярона обычно полагают

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

так что

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

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

Статистическая сумма системы $Z(\vec{E}) = \mathrm{Sp}\, e^{-\tau H}$ позволяет определить ее среднюю энергию:

$$\mathcal{E} = -\frac{\partial}{\partial \tau} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\tau H} = \frac{\mathrm{Sp}(H e^{-\tau H})}{\mathrm{Sp}\, e^{-\tau H}}. \qquad /1.1/$$

Здесь величина τ играет роль обратной температуры $\tau = 1/k\theta$; иногда мы будем пользоваться безразмерной величиной $T = \omega \tau$. Для статистической суммы $Z(\vec{E})$ можно написать выражение

$$Z(\vec{E}) = Z_0 \cdot \tilde{Z}(\vec{E}),$$

где

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

является статистической суммой системы, состоящей из свободной частицы и свободного квантованного поля.

Для $\tilde{Z}(\vec{E})$ существует представление в виде континуального интеграла:

$$\tilde{Z}(\vec{E}) = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)} \delta\vec{x}\, \exp\{S[\vec{x}] + \vec{E}\int_0^\tau \vec{x}\}, \qquad /1.3/$$

$$S[\vec{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 + \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int \frac{d\vec{k}}{\vec{k}^2}\int_0^\tau ds_1\, ds_2\, G_\omega(|s_1 - s_2|)\, e^{i\vec{k}[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2)]}, \qquad /1.4/$$

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

При этом следует отметить, что $\tilde{Z}(\vec{E})$ нормирована условием

$$\tilde{Z}(\vec{E})\big|_{\vec{E}=0,\alpha=0} = 1.$$

Периодические граничные условия $\vec{x}(0) = \vec{x}(\tau)$ в /1.3/ означают наличие в подынтегральном выражении δ-функции

$$\delta[\vec{x}(0) - \vec{x}(\tau)] = \int d\vec{r}\, \delta(\vec{x}(0) - \vec{r})\, \delta(\vec{x}(\tau) - \vec{r}). \qquad /1.5/$$

Сделав замену переменных $\vec{x}(s) \to \vec{x}(s) + \vec{r}$ и отметив, что поляронное действие $S[\vec{x}]$ при этом остается инвариантным, а из /1.5/ возникают новые граничные условия $\vec{x}(0) = \vec{x}(\tau) = 0$, приходим к выражениям

$$Z(\vec{E}) = Z_0 \cdot \tilde{Z}_0(\vec{E}) \cdot Z_{int}(\vec{E}),$$

$$\tilde{Z}_0(\vec{E}) = \frac{1}{V}\int d\vec{r}\, e^{\vec{E}\vec{r}\tau},$$

$$Z_{int}(\vec{E}) = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\, \exp\{S[\vec{x}] + \vec{E}\int_0^\tau \vec{x}\}. \qquad /1.6/$$

Здесь Z_0 определено в /1.2/, а $Z_{int}(\vec{E})$ нормировано прежним условием обращения в единицу при равенстве нулю поля $\vec{E}$ и константы связи α.

Таким образом, в /1.6/ мы выделили бесконечный множитель $Z_0 \cdot \tilde{Z}_0(\vec{E})$, связанный с инфинитностью движения. При вычислении средней энергии согласно /1.1/ этот множитель приведет к аддитивной добавке, связанной со средней энергией как частицы в постоянном электрическом поле $\vec{E}$, так и свободного квантованного поля. В дальнейшем нас будет интересовать лишь средняя энергия взаимодействия:

$$\mathcal{E}_{int} = -\frac{\partial}{\partial\tau} \ln Z_{int}(\vec{E}).$$

В этой части работы рассмотрим случай слабой связи ($\alpha \ll 1$). При $\alpha = 0$ статистическая сумма $Z^\circ_{int}(\vec{E})$ может быть вычислена сдвигом переменной $\vec{x}(s) \to \vec{x}(s) + \vec{x}_0(s)$:

$$Z^\circ_{int}(\vec{E}) = Z_{int}(\vec{E})\big|_{\alpha=0} = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\, \exp\{-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 + \vec{E}\int_0^\tau \vec{x}\} = \qquad /1.7/$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}\vec{E}\int_0^\tau \vec{x}_0\right),$$

где $\vec{x}_0(s)$ удовлетворяет уравнению

$$\mu\ddot{\vec{x}}_0 + \vec{E} = 0,$$
$$\vec{x}_0(0) = \vec{x}_0(\tau) = 0. \qquad /1.8/$$

В итоге

$$\vec{x}_0(s) = \frac{\vec{E}}{2\mu}\, s(\tau - s),$$

$$Z^\circ_{int}(\vec{E}) = \exp\left(\frac{\vec{E}^2\tau^3}{24\mu}\right), \qquad /1.9/$$

$$\mathcal{E}^\circ_{int} = -\frac{\vec{E}^2\tau^2}{8\mu}.$$

Рассмотрим теперь разложение $Z_{int}(\vec{E})$ в ряд по степеням константы связи α. Выполняя в выражении /1.6/ для Z_{int} ту же замену $\vec{x}(s) \to \vec{x}(s) + \vec{x}_0(s)$, нетрудно убедиться, что $Z^\circ_{int}(\vec{E})$ выделяется в виде отдельного множителя, так что разложение $Z_{int}(\vec{E})$

по теории возмущений можно записать как

$$Z_{int}(\vec{E}) = Z^{\circ}_{int}(\vec{E})\,[\,1 + Z^{(1)}_{int}(\vec{E}) + Z^{(2)}_{int}(\vec{E}) + \ldots\,].$$

Мы ограничимся лишь вычислениями в первом порядке по α, т.е. отбросим $Z^{(2)}_{int}(\vec{E})$ и все последующие члены. Имеем тогда

$$Z^{(1)}_{int}(\vec{E}) = \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{\vec{k}^2}\int_0^\tau ds_1 ds_2 G_\omega(|s_1 - s_2|)\,e^{i\vec{k}[\vec{x}_0(s_1) - \vec{x}_0(s_2)]} \times \qquad /1.10/$$

$$\times \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\,\exp\{-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 + i\vec{k}[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2)]\}.$$

Функциональный интеграл в /1.10/ легко вычисляется:

$$\int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\,\exp\{-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\vec{x}}^2 + i\vec{k}[\vec{x}(s_1) - \vec{x}(s_2)]\} =$$

$$= \exp\{-\frac{\vec{k}^2}{2\mu}|s_1 - s_2|\,(1 - \frac{|s_1 - s_2|}{\tau})\}. \qquad /1.11/$$

Подставив /1.11/ в /1.10/, получаем после некоторых преобразований $(E = |\vec{E}|)$

$$Z^{(1)}_{int}(E) = \frac{\alpha\omega^{3/2}\sqrt{2\mu}}{E\,\mathrm{sh}\frac{\omega\tau}{2}}\int_0^\tau\frac{d\sigma}{\sigma}\,\mathrm{ch}\,\omega(\frac{\tau}{2} - \sigma)\int_0^1\frac{d\xi}{\xi}\,\Phi\,[\frac{E\sqrt{\tau\sigma(\tau-\sigma)}}{2\sqrt{2\mu}}\,\xi\,], \qquad /1.12/$$

где $\Phi(z)$ - интеграл вероятности. Разложив /1.12/ до членов $O(E^2)$, находим, что в слабом поле

$$Z^{(1)}_{int} = \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{T^{3/2}}{\mathrm{sh}\,T/2}\,I_0(\frac{T}{2}) - \frac{\alpha\sqrt{\pi}\,T^{1/2}}{\mathrm{sh}\,T/2}\,I_1(\frac{T}{2})\,\frac{E^2\tau^3}{288\mu} + \ldots \,. \qquad /1.13/$$

При вычислении средней энергии взаимодействия $\mathcal{E}_{int}$ первый член в /1.13/ приводит к известному /4/ выражению для средней энергии полярона при конечных температурах. Второй член в /1.13/ вместе с $Z^{\circ}_{int}(\vec{E})$ дают квадратичную по полю $\vec{E}$ поправку:

$$\mathcal{E}_{int} = \mathcal{E}_{int}(\vec{E} = 0) + \Delta\mathcal{E}_{int} + \ldots,$$

$$\Delta\mathcal{E}_{int} = -\frac{E^2}{8\mu}[\,1 - \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{36}\,\frac{1}{T^2}\,\frac{d}{dT}(\frac{T^{7/2}}{\mathrm{sh}T/2}\,I_1(T/2))],$$

а $\mathcal{E}_{int}(\vec{E} = 0)$ - средняя энергия поляронной системы в отсутствие внешнего поля.

Напомним, что это выражение вычислялось лишь в первом порядке по α и поэтому может быть переписано в виде

$$\Delta\mathcal{E}_{int} = -\frac{E^2\tau^2}{8m},$$

$$m = \mu[\,1 + \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{36}\,\frac{1}{T^2}\,\frac{d}{dT}(\frac{T^{7/2}}{\mathrm{sh}T/2}\,I_1(T/2))]. \qquad /1.14/$$

Из /1.14/ и /1.9/ видно, что сдвиг средней энергии поляронного взаимодействия можно трактовать как следствие появления у полярона эффективной массы m, зависящей от температуры.

Для такой интерпретации существенно приближение слабого поля, не способного разрушить полярон как целостное структурное образование, характеризуемое определенной массой.

В пределе высоких температур $(T \to 0)$

$$m = \mu[\,1 + \frac{7\sqrt{\pi}}{144}\,\alpha T^{1/2} + \ldots\,] = \mu[\,1 + \alpha T^{1/2}\,0.0862 + \ldots\,], \qquad /1.15/$$

т.е. полярон "раздевается", а масса m стремится к "голой" массе μ

В обратном случае низких температур $(T \to \infty)$ формула /1.14/ приводит к

$$m \simeq \mu\,[\,1 + \frac{\alpha}{6}(1 - \frac{1}{2T})], \qquad /1.16/$$

что при нулевой температуре дает известный результат:

$m = \mu\,(1 + \alpha/6)$.

Если, наконец, считать поле E сильным, то влияние электрон-фононного взаимодействия проявится лишь в поправках к основному члену. Из /1.12/ можно получить, что при $E \to \infty$

$$Z^{(1)}_{int} \simeq \frac{\alpha\omega^{3/2}\sqrt{2\mu}}{E}\,\mathrm{cth}\frac{\omega\tau}{2}\,\ln^2\frac{E\tau^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}} + O(\frac{\ln E}{E}),$$

то есть

$$\Delta\mathcal{E}_{int} = -\frac{E^2\tau^2}{8\mu} + \frac{\alpha\omega^{5/2}\sqrt{2\mu}}{2E}\,\frac{1}{\mathrm{sh}^2\frac{\omega\tau}{2}}\,\ln^2\frac{E\tau^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}} + O(\frac{\ln E}{E}). \qquad /1.17/$$

Это выражение справедливо при не слишком больших температурах $(\omega\tau \gtrsim 1)$, когда поправочный член действительно можно считать малым. В случае же высоких температур справедливы формулы, полученные выше в приближении слабого поля $\vec{E}$.

2. ПРОИЗВОЛЬНАЯ СВЯЗЬ: ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Для вычисления $Z_{int}(\vec{E})$ при произвольных значениях константы связи α применим вариационный метод Фейнмана. В качестве аппроксимирующего действия S' выберем действие осцилляторного типа:

$$S'[\vec{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau} \dot{\vec{x}}^2 - \frac{\mu\Omega^2}{2}\int_0^{\tau} \vec{x}^2, \qquad /2.1/$$

где частота Ω будет рассматриваться как вариационный параметр. Выбор такого S' продиктован соображениями простоты. Мы используем представление /1.6/ с непериодическими граничными условиями, это значит, что подынтегральное выражение в /1.6/ перестало быть трансляционно-инвариантным и нет необходимости использовать трансляционно-инвариантное действие S', добавляя, например, к /2.1/ член вида $(\int_0^{\tau}\vec{x})^2$. Кроме того, использование более сложного действия оправдано при вычислениях во втором порядке теории возмущений по константе связи α. Поскольку энергия собственно полярона во втором порядке по α при любых температурах вычислена точно , а масса m нужна лишь с точностью до членов $\sim\alpha$, выбор действия /2.1/ представляется оправданным.

Выпишем ряд формул, которые будут использоваться в дальнейшем. Введем обозначение

$$\langle A\rangle = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\, e^{S'} A \Big/ \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0} \delta\vec{x}\, e^{S'},$$

где A - некоторый функционал $\vec{x}(s)$. Тогда

$$\langle e^{\int_0^{\tau}\vec{f}\vec{x}}\rangle = \exp\Big(\frac{1}{2\mu}\int_0^{\tau}\vec{f}\,\tilde{G}_{\Omega}\vec{f}\Big), \qquad /2.2/$$

где

$$\tilde{G}_{\Omega} = \frac{\mathrm{ch}\,\Omega(\tau-|s_1-s_2|) - \mathrm{ch}\,\Omega(\tau-s_1-s_2)}{2\Omega\,\mathrm{sh}\,\Omega\tau} \qquad /2.3/$$

Из /2.2/ и /2.3/ следует

$$\langle \exp(i\vec{k}[\vec{x}(\sigma_1)-\vec{x}(\sigma_2)])\rangle =$$

$$= \exp\Big\{-\frac{k^2}{2\mu\Omega\,\mathrm{sh}\,\Omega\tau}[\mathrm{ch}\,\Omega\tau - \mathrm{ch}\,\Omega(\tau-|\sigma_1-\sigma_2|) + \qquad /2.4/$$

$$+\mathrm{ch}\,\Omega(\tau-\sigma_1-\sigma_2)(1-\mathrm{ch}\,\Omega(\sigma_1-\sigma_2))]\Big\} = \exp\Big[-\frac{k^2\Delta(|\sigma_1-\sigma_2|)}{2\mu\Omega\,\mathrm{sh}\,\Omega\tau}\Big],$$

$$\langle\int_0^{\tau} x^2(s)ds\rangle = \frac{3\tau}{2\mu\Omega}\,\mathrm{cth}\,\Omega\tau - \frac{3}{2\mu\Omega^2},$$

$$\int\limits_{x(0)=x(\tau)=0}\delta x\, e^{S'} \Big/ \int\limits_{x(0)=x(\tau)=0}\delta x\, e^{-\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau}\dot{\vec{x}}^2} = \Big(\frac{\Omega\tau}{\mathrm{sh}\,\Omega\tau}\Big)^{3/2}.$$

Если мы применим аппроксимационную процедуру непосредственно к Z_{int} в форме /1.6/, то из-за того, что $\langle\int_0^{\tau}x\rangle = 0$, исчезнет зависимость от $\vec{E}$ Чтобы избежать этого, поступим следующим образом: используя метод вычисления Z°_{int} /формулы /1.7/-/1.9//, выполним в /1.6/ преобразование $\vec{x}(s) \to \vec{x}(s)+\beta\vec{x}_0(s)$, после чего получим

$$Z_{int}(\vec{E}) = \exp\Big[\frac{E^2\tau^3}{24\mu}\beta(1-\beta/2)\Big]\int\limits_{x(0)=x(\tau)=0}\frac{\delta x}{\mathrm{const}}\exp\Big\{\tilde{S} + \vec{E}(1-\beta)\int_0^{\tau}\vec{x}\Big\}, \qquad /2.5/$$

$$\tilde{S}[\vec{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^{\tau}\dot{\vec{x}}^2 + \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\,\pi^2}\int\frac{d\vec{k}}{\vec{k}^2}\int_0^{\tau}ds_1 ds_2\, G_{\omega}(|s_1-s_2|)\times \qquad /2.6/$$

$$\times\exp\{i\vec{k}[\vec{x}(s_1)-\vec{x}(s_2)] + i\beta\vec{k}[\vec{x}_0(s_1)-\vec{x}_0(s_2)]\}.$$

Здесь β - произвольное число. Пока /1.6/ и /2.5/ тождественны. После выполнения аппроксимации они уже не идентичны, и мы выберем β наилучшим образом, рассматривая его как второй вариационный параметр. Этот метод по своей идее аналогичен использованному в [5] при вычислении эффективной массы полярона при нулевой температуре.

Аппроксимационная процедура выполняется известным образом:

$$\int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0}\delta\vec{x}\, e^{\tilde{S}+\vec{E}(1-\beta)\int_0^{\tau}\vec{x}} = \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0}\delta\vec{x}\, e^{S'}\langle\exp[\tilde{S}-S'+\vec{E}(1-\beta)\int_0^{\tau}\vec{x}]\rangle \approx$$

$$\approx \int\limits_{\vec{x}(0)=\vec{x}(\tau)=0}\delta\vec{x}\, e^{S'}\exp[\langle\tilde{S}-S'+\vec{E}(1-\beta)\int_0^{\tau}\vec{x}\rangle].$$

При вычислении $\langle\tilde{S}-S'\rangle$ понадобятся формулы /2.4/. Получаем в результате для свободной энергии $F_{int} = -\ln Z_{int}(\vec{E})$

довольно сложное выражение, которое рассмотрим в случае слабого поля $\vec{E}$:

$$F_{int}(\vec{E}) = F^{\circ}_{int} + \Delta F_{int},$$

$$F^{\circ}_{int} = \frac{3}{2}\ln\frac{\operatorname{sh}\Omega r}{\Omega r} - \frac{3}{4}\Omega r \operatorname{cth}\Omega r + \frac{3}{4} - \qquad /2.7/$$

$$- \frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\Omega \operatorname{sh}\Omega r}\int_0^r ds_1\, ds_2 \frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1,s_2)]^{1/2}}.$$

$$\Delta F_{int} = \beta\left(\frac{\beta}{2}-1\right)\frac{\vec{E}^2 r^3}{12\mu} + \beta^2\frac{\vec{E}^2}{24\mu}\frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi}}(\Omega \operatorname{sh}\Omega r)^{3/2}\times \qquad /2.8/$$

$$\times\int_0^r ds_1\, ds_2 \frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1,s_2)]^{3/2}}(s_1-s_2)^2(r-s_1-s_2)^2.$$

Параметр β выберем из условия минимума ΔF_{int}. Тогда получим

$$\Delta F_{int} = -\frac{\vec{E}^2 r^3}{24\mu(1+\Gamma)},$$

откуда

$$\Delta\mathcal{E}_{int} = \frac{\partial}{\partial r}\Delta F_{int} = -\frac{\vec{E}^2 r^2}{8\mu}\,\frac{1+\Gamma-(r/3)\dfrac{d\Gamma}{dr}}{(1+\Gamma)^2} \qquad /2.9/$$

и, следовательно,

$$m = \mu\,\frac{(1+\Gamma)^2}{1+\Gamma-\dfrac{r}{3}\dfrac{d\Gamma}{dr}} \qquad /2.10/$$

В формулах /2.9/, /2.10/ мы обозначили

$$\Gamma = \frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi}\, r^3}(\Omega \operatorname{sh}\Omega r)^{3/2}\int_0^r ds_1\, ds_2 \frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1,s_2)]^{3/2}}(s_1-s_2)^2(r-s_1-s_2)^2, \qquad /2.11/$$

где $\Delta(s_1,s_2)$ определено в /2.4/.

Вариационный параметр Ω найдем из минимума свободной энергии F°_{int} поляронной системы в отсутствие внешнего поля.

Рассмотрим сначала случай слабой связи ($\alpha \ll 1$). Тогда Ω также мало ($\Omega \sim \sqrt{\alpha}$), и мы можем разложить выражение для F°_{int} по степеням Ω. Для вычислений в первом порядке по α достаточно просто положить $\Omega = 0$. Имеем тогда

$$F^{\circ}_{int} = -\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{T^{3/2}}{\operatorname{sh}T/2}\,I_0(T/2),$$

что соответствует первому члену в /1.13/. Для Γ получаем из /2.11/

$$\Gamma = \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{12}\,\frac{T^{1/2}}{\operatorname{sh}T/2}\,I_1(T/2). \qquad /2.12/$$

Так как Γ мало, то /2.10/ можно переписать в виде

$$m = \mu\left[1+\Gamma+\frac{r}{3}\frac{d\Gamma}{dr}\right] = \mu\left[1+\frac{1}{3T^2}\frac{d}{dT}(T^3\Gamma)\right],$$

что с учетом /2.12/ можно записать как /ср. с /1.14//

$$m = \mu\left[1+\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{36}\,\frac{1}{T^2}\,\frac{d}{dT}\left(\frac{T^{7/2}}{\operatorname{sh}T/2}I_1(T/2)\right)\right].$$

Таким образом, мы воспроизвели результаты предыдущего раздела.

Обратимся теперь к случаю сильной связи ($\alpha \gg 1$). Параметр Ω также велик ($\Omega \sim \alpha^2$). В этом пределе

$$F^{\circ}_{int} = \frac{3}{4}\Omega r - \frac{\alpha T^{1/2}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\Omega r} + \ldots,$$

откуда

$$\Omega r = \frac{4}{9\pi}\alpha^2 T.$$

Отсюда получаются известные выражения для энергии полярона [4]. Подставляя значение Ωr в /2.11/, найдем, что

$$\Gamma \approx \frac{16}{81\pi^2}\alpha^4\left[1+\frac{12}{T^2}-\frac{6}{T}\operatorname{cth}\frac{T}{2}\right]. \qquad /2.13/$$

С помощью /2.10/ и /2.13/ получаем окончательное выражение для m:

$$m = \mu\,\frac{16\alpha^4}{81\pi^2}\,\frac{\left(1+\dfrac{12}{T^2}-\dfrac{6}{T}\operatorname{cth}\dfrac{T}{2}\right)^2}{2-\operatorname{cth}^2\dfrac{T}{2}+\dfrac{20}{T^2}-\dfrac{8}{T}\operatorname{cth}\dfrac{T}{2}}. \qquad /2.14/$$

При низких температурах ($T \to \infty$)

$$m \approx \mu\,\frac{16\alpha^4}{81\pi^2}\left(1-\frac{6}{T}\right), \qquad /2.15/$$

при нулевой температуре эта формула переходит в известный фейнмановский результат $m \approx \mu(16\alpha^4/81\pi^2) \approx \mu\, 200(\frac{\alpha}{10})^4$

При высоких температурах $(T \to 0)$

$$m \approx \mu \frac{16\alpha^4}{81\pi^2} \frac{T^2}{20} \qquad /2.16/$$

Этот ответ справедлив, конечно, пока $m \gg \mu$ $(T \gg (10/\alpha)^2)$. При более высоких температурах следует пользоваться формулами слабой связи, выписанными выше, т.к. в этом случае возникает эффективный параметр разложения $\sim \alpha\sqrt{T}$.

И, наконец, при сильных полях $\vec{E}$ вариационный метод снова приводит к формуле /1.17/, т.е. эффективно поляронное взаимодействие можно считать малым.

3. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Определение эффективной массы полярона при конечной температуре можно дать исходя из общих термодинамических соотношений. Для этого надо рассмотреть зависимость средней энергии от импульса системы. При нулевом импульсе вклад в среднюю энергию дают как виртуальные, так и реальные фононы. При отличном от нуля полном импульсе системы $\vec{P}$ необходимо выделить в нем средний импульс $\vec{P}_f$ поля реальных фононов. Тогда $\vec{P}-\vec{P}_f$ будет средним импульсом собственно полярона, а эффективная масса определяется из разложения средней энергии:

$$\mathcal{E}(\vec{P}) = \mathcal{E}(0) + \frac{(\vec{P}-\vec{P}_f)^2}{2m_{эфф}} + \dots$$

Можно показать, что для отделения $\vec{P}_f$ необходимо, в частности, заменить G_ω /см. /1.4// на G_1:

$$G_1 = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|s_1-s_2|}$$

При высоких температурах получается результат

$$m_{эфф} = \mu[1 + \frac{5\sqrt{\pi}}{12}\alpha T^{3/2} + \dots] = \mu[1 + 0{,}7385\,\alpha T^{3/2} + \dots] \qquad /3.1/$$

Сравнивая $m_{эфф}$ с массой m из /1.15/, легко видеть, что законы стремления m и $m_{эфф}$ к μ качественно различаются.

Масса m является несколько иной величиной, нежели $m_{эфф}$. Она определяет реакцию поляронной системы на внешний потенциал. Поскольку m определена по сдвигу средней энергии, в ней учтен вклад реальных фононов. Кроме того, из-за разной реакции системы на различные возмущения масса m, вообще говоря, может зависеть от внешнего потенциала.

Сказанное можно проиллюстрировать примерами. Исключая реальные фононы заменой $G_\omega \to G_1$ в /1.6/, получим вместо /1.14/ выражение

$$\bar{m} = \mu\{1 + \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{36}\frac{1}{T^2}\frac{d}{dT}[T^{7/2}e^{-T/2}(I_0(T/2) + \frac{T-4}{T}I_1(T/2))]\}, \qquad /3.2/$$

которое при высоких температурах $(T \to 0)$ дает

$$\bar{m} = \mu[1 + \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{48}T^{3/2} + \dots] = \mu[1 + 0{,}0369\,\alpha T^{3/2} + \dots]. \qquad /3.3/$$

Качественно картины поведения m и $m_{эфф}$ совпадают, но в силу указанных причин остается различие в коэффициентах при $\alpha T^{3/2}$.

С другой стороны, массу можно определить как реакцию поляронной системы на осцилляторный внешний потенциал /мы обозначим эту массу через m'/. Не вдаваясь в подробности, приведем лишь результат вычислений:

$$m' = \mu[1 + \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{24}\frac{1}{T}\frac{d}{dT}(\frac{T^{5/2}I_1(T/2)}{\operatorname{sh} T/2})] \qquad /3.4/$$

или при $T \to 0$

$$m' = \mu[1 + \alpha\frac{5\sqrt{\pi}}{96}T^{1/2} + \dots] = \mu[1 + \alpha T^{1/2}0{,}0923 + \dots]. \qquad /3.5/$$

В этом случае замена $G_\omega \to G_1$ дает

$$\bar{m}' = \mu\{1 + \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{24}\frac{1}{T}\frac{d}{dT}[T^{5/2}e^{-T/2}(I_0(T/2) + \frac{T-4}{T}I_1(T/2))]\} \qquad /3.6/$$

и в пределе $T \to 0$

$$\bar{m}' \approx \mu[1 + \alpha T^{3/2}\frac{7\sqrt{\pi}}{192}] \approx \mu[1 + \alpha T^{3/2}\,0{,}0646]. \qquad /3.7/$$

Сравнение /3.4/-/3.5/ и /3.6/-/3.7/ с аналогичными выражениями /1.14/-/1.15/ и /3.2/-/3.3/ демонстрирует разницу в реакции системы на различные внешние потенциалы.

В обратном случае предельно низких температур разница между $m_{эфф}$, m и m' исчезает, что связано с "замораживанием" реальных фононов.

Авторы глубоко признательны Н.Н.Боголюбову за интерес к работе и ценные советы. Мы благодарим С.П.Кулешова, В.А.Матвеева и В.А.Мещерякова за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bogolubov N.N. JINR, E17-11822, Dubna, 1978.
2. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. /мл./. ЭЧАЯ, 1980, т.11, вып.2, с.245-300.
3. Feynman R.P. et al. Phys.Rev., 1962, 127, pp.1004-1017.
4. Кривоглаз М.А., Пекар С.И. Изв. АН СССР, сер.физ., 1957, т.XXI, №1, с.16-32.
5. Кочетов Е.А., Кулешов С.П., Смондырев М.А. Труды X Межд. школы молодых ученых, Баку, 1976. ОИЯИ, Д2-10533, Дубна, 1977, с.489-525.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 апреля 1980 года.