Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. В. Тулуб, Комментарий к теории полярон-фононного
рассеяния, *ТМФ*, 2015, том 185, номер 1, 199–212

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8946>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.174.16.151

26 апреля 2023 г., 15:50:03

© 2015 г.

А. В. Тулуб*

КОММЕНТАРИЙ К ТЕОРИИ ПОЛЯРОН-ФОНОННОГО РАССЕЙНИЯ

Трансляционно-инвариантная волновая функция полярона, выраженная через классическое и квантовое поля, используется для вычисления сечения рассеяния фонона на поляроне. Величина резонансного импульса определяется асимптотическими значениями ряда интегралов. Вычисление последних с учетом параметров кристалла ведет к ограничениям на максимально допустимые значения постоянных связи. Утверждается, что область применимости приближения сильной связи близка к нулю.

Ключевые слова: рассеяние, облаченная частица, трансляционная инвариантность, структура волновой функции в терминах классического и квантового поля.

DOI: 10.4213/tmf8946

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория полярона как пример облаченной частицы завоевала широкую известность в физике твердого тела и в теории поля. Электрон,двигающийся в зоне проводимости, вызывает поляризацию ионного кристалла, которая следует за перемещением электрона [1]. Первоначальная модель строения нуклона была основана на подобной же модели с заменой облака скалярных бозе-частиц в кристалле на облако псевдоскалярных бозе-частиц мезонного поля. Проблема описания такого рода облаченной частицы была в центре внимания работ Ю. В. Новожилова, по крайней мере в начале его научной карьеры [2].

Пекар [1] представил волновую функцию полярона $\Psi(r, Q)$, следуя Борну и Фоку [3], в виде произведения электронной волновой функции адиабатического приближения ψ на функцию $\Phi(Q)$, описывающую продольные оптические колебания в полярном кристалле:

$$\Psi(r, Q) \approx \psi(r)\Phi(Q). \quad (1)$$

Каждая из этих функций полагалась квадратично-интегрируемой. В противоположность этому делокализованная функция уподобляется плоской волне: $|\Psi(r, Q)|^2 = \text{const}$. Предполагается, что поляронный эффект вызывает смещение дна зоны проводимости, и уже в силу этого обстоятельства теория должна иметь

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.
E-mail: tulub@nk7099.spb.edu

трансляционно-инвариантный вид. Совместимость локализованного и делокализованного описаний предполагалось возможной уже в первых работах по теории полярона [4]–[6].

Трансляционная инвариантность достигается путем исключения из оператора Гамильтона координаты электрона, что было выполнено, например, Фоком [7] в случае квантованного электромагнитного поля со ссылкой на Гейзенберга [8]. В теории полярона это преобразование использовали Ли, Лоу и Пайнс [9] для построения волновой функции полярона. Лоу и Пайнс [10] использовали эту функцию для вычисления амплитуды рассеяния фонона на поляроне в пределе слабой и отчасти промежуточной связи.

Вычисление энергии полярона первоначально выполнялось в приближении сильной связи с функцией (1), затем – в приближении слабой связи в работах [5], [10]. Оба этих асимптотических предела были впервые получены Фейнманом [11] методом континуального интегрирования. Теория рассеяния в этом методе была рассмотрена в работе [12] с примечанием, что численные значения отличны от данных [10]. В пределе слабой связи волновая функция полярона с очевидностью делокализована, адиабатическое же приближение (1) основано на идее локализации электрона. Отсюда возник вопрос о возможности своего рода фазового перехода между этими состояниями при изменении постоянной связи. Ответ на этот вопрос отрицательный, фазового перехода нет [13].

Последовательная теория должна включать в себя вычисление не только энергии, но и сечения рассеяния. Последнее может быть достигнуто лишь в рамках трансляционно-инвариантной теории путем развития теории Ли–Лоу–Пайнса, что и явилось предметом работ [14], [15] в широком интервале констант связи. Насколько известно, вычисление сечения рассеяния более не предпринималось, сама же задача представляется весьма важной ввиду появления новых задач. Упомянем проводимость полимерного типа, наблюдаемую для молекулярных цепочек, в их числе и молекулы ДНК, биполяронную модель высокотемпературной сверхпроводимости (см. обзор [16]). Появились и критические замечания, которые требуют разъяснений. Последнее будет выполнено после краткого обзора основных канонических преобразований в трансляционно-инвариантной теории.

2. КАНОНИЧЕСКИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Оператор энергии в теории полярона носит название оператора Фрёлиха и имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_k \hbar\omega_k a_k^+ a_k + g \sum_k V_k [a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_k^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}], \quad (2)$$

где m – зонная масса электрона, a_k, a_k^+ – операторы бозе-поля, $[a_k, a_{k'}^+] = \delta_{kk'}$. Константа связи $\alpha = g^2$ выражается через диэлектрическую постоянную ε и показатель преломления n согласно соотношениям

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{e^2}{\hbar\omega_k^0 l_0}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega^0}}, \quad (3)$$

где ω^0 – длинноволновая предельная частота продольных оптических колебаний. Функцию V_k в (2) можно принять вещественной, полагая нормировочный объем $L^3 = 1$,

$$V_k = k^{-1} \hbar\omega^0 \sqrt{4\pi\alpha l_0}. \quad (4)$$

В теории поля оператор энергии (2) описывает взаимодействие нерелятивистской частицы с квантованным скалярным полем, константа связи является заданной величиной, которую можно, тем не менее, варьировать в широких, формально бесконечных пределах. Интеграл по абсолютным значениям импульса вычисляется в бесконечных пределах $|k| \in [0, +\infty)$. В противоположность этому в теории кристаллов верхний предел интегрирования конечен и ограничен импульсом Дебая. Теоретико-полевой подход представляется на первом этапе предпочтительным.

Исключение координат электрона в операторе энергии (2) достигается подстановкой

$$\psi(r, Q) = U_1 \tilde{\Psi}(Q), \quad U_1 = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) \mathbf{r} \right], \quad (5)$$

где $\mathbf{P}$ – полный импульс системы. Амплитуда рассеяния вычисляется между собственными функциями оператора Гамильтона (2), отвечающими начальным $(\mathbf{P}_0, \mathbf{k}_0)$ и конечным $(\mathbf{P}, \mathbf{k})$ импульсам полярона и фонона. Интегрирование по времени ведет к сохранению полной энергии

$$\langle \mathbf{P}, \mathbf{k} | S - 1 | \mathbf{P}_0, \mathbf{k}_0 \rangle = -2\pi i \delta(E_i - E_f) R, \quad (6)$$

интегрирование по пространственным координатам осуществляется на основе соотношения

$$U^{-1}(H - E - \omega^0 - i\varepsilon)^{-1}U = (U^{-1}(H - E - \omega^0)U)^{-1}$$

и позволяет записать амплитуду рассеяния в виде

$$\langle P, k | S - 1 | P_0, k_0 \rangle = -i(2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\mathbf{P}_0 + \mathbf{k}_0 - \mathbf{P} - \mathbf{k}) T_{if}. \quad (7)$$

Трансформированный оператор энергии $U_1^{-1} H U_1 = \tilde{H}$ равен

$$\tilde{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \sum_k \left(\hbar \omega_k^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar \mathbf{P} \mathbf{k}}{m} \right) a_k^+ a_k + g \sum_k V_k (a_k + a_k^+) + \frac{\hbar}{2m} \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}. \quad (8)$$

Следующее унитарное преобразование ставит своей задачей разделение исходного поля на его классическую и квантовую составляющие, что достигается представлением функции $\tilde{\Psi}(Q)$ в (5) в виде [6], [7]

$$\tilde{\psi} = U_2 \Phi = \exp \left[\sum_k (a_k^+ f_k - a_k f_k^*) \right] \Phi, \quad (9)$$

$$U_2^{-1} a_k U_2 = a_k + f_k, \quad U_2^{-1} a_k^+ U_2 = a_k^+ + f_k^*. \quad (10)$$

Далее будем считать функцию f_k вещественной. При замене функции Φ в (9) на вакуумную функцию Φ_0 , $a_k \Phi_0 = 0$, выражение $\tilde{\Psi} = U_2 \Phi_0$ будет определять известное в квантовой оптике когерентное состояние [17].

После последовательного применения канонических преобразований (5) и (9) оператор полной энергии (8) может быть представлен суммой слагаемых

$$H = H_0 + H_I, \quad (11)$$

где оператор H_0 есть с точностью до константы квадратичная форма операторов поля, записанных в виде нормального произведения (полагаем $m = 1$ и $\hbar = 1$ в (12) и (13))

$$H_0 = E_0 \{f_k\} + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') f_k f_{k'} [a_k^+ a_{k'}^+ + a_k^+ a_{k'} + a_{k'}^+ a_k + a_k a_{k'}]. \quad (12)$$

Остальные слагаемые объединены в оператор H_I :

$$H_I = \sum_k (V_k + f_k \omega_k) (a_k + a_k^+) + \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') f_{k'} (a_k^+ a_{k'}^+ a_k + a_k^+ a_k a_{k'}) + \frac{1}{2} \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') a_k^+ a_{k'}^+ a_k a_{k'}. \quad (13)$$

Функционал $E_0\{f_k\}$ и энергия $\hbar\omega_k = \hbar\omega_k(P)$ имеют вид

$$E\{f_k\} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k \left(\hbar\omega_k^0 - \frac{\hbar \mathbf{P} \mathbf{k}}{m} \right) f_k^2 + \frac{1}{2m} \left(\sum_k \hbar \mathbf{k} f_k^2 \right)^2, \quad (14)$$

$$\hbar\omega_k = \hbar\omega^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar \mathbf{k} \mathbf{P}}{m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \sum_{k'} \hbar \mathbf{k}' f_k^2. \quad (15)$$

Сумма (11) совпадает с выражением, полученным в работе [9], для оператора энергии, однако ее разделение на слагаемые (12) и (13) выполнено иным путем. Из соображений размерности и сохранения полного импульса полагаем

$$\sum_k \hbar \mathbf{k} f_k^2 = \eta \mathbf{P}. \quad (16)$$

Согласно (14)–(16) перенормированная масса полярона есть $m^* = m/(1 - \eta)$.

Амплитуда рассеяния в теории Ли–Пайнса была записана по аналогии с теорией возмущений в виде суммы слагаемых

$$R = R(\omega^0) + R(-\omega^0), \quad (17)$$

где

$$R(\omega^0) = V_{k_0} V_k \int \langle \Psi_P | e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}} (H - E - \omega^0 - i\varepsilon)^{-1} | e^{i \mathbf{k}_0 \mathbf{r}} \Psi_{P_0} \rangle d\nu. \quad (18)$$

Если функции начального Ψ_{P_0} и конечного Ψ_P состояний электрона в (18) являются плоскими волнами с указанными величинами импульсов, то резонансный импульс в теории возмущений определяется из очевидного условия

$$\frac{\hbar^2 k_r^2}{2m} = \hbar\omega^0. \quad (19)$$

Лоу и Пайнс предложили сохранить структуру амплитуды рассеяния R как сумму слагаемых (17) и понимать под Ψ_{P_0} и Ψ_P в (18) функции облаченной частицы, т. е. выражение

$$\Psi_P(r) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) r \right] U_2 \Phi_0. \quad (20)$$

Амплитуда T_{if} имеет резонансное поведение, согласно [10] резонанс наступает при условии

$$\hbar\omega^0 = \frac{\hbar^2 k_r^2}{2m} \left(\frac{1 - I_1}{1 + I_1} \right), \quad (21)$$

где I_1 – вещественная часть некоторого интеграла I , этот интеграл приводится ниже. Такого рода поведение амплитуды рассеяния согласно [12] находится в противоречии с ожидаемым, имеется в виду знаменатель в функции Лоренца

$$\frac{\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}.$$

Заметим, однако, что в случае электромагнитного поля высокой интенсивности знаменатель функции Лоренца требует некоторой модификации, величину E_0 следует заменить разностью $E_0 - \Delta E$. В оптике ΔE – это штарковское смещение уровня энергии E_0 , в квантовой электродинамике после перенормировки ΔE – это лэмбовское смещение. Если интеграл I_1 в (21) мал, то и поправки того же рода.

Уточнение теории Ли–Лоу–Пайнса заключается в диагонализации квадратичной формы (12), которая близка по структуре к формуле для энергии в парной мезонной теории [18], [19], отличие заключается в множителе $(\mathbf{k}\mathbf{k}')$ при произведении функций $f_k f_{k'}$.

Рассмотрим хорошо известные из теории гармонического осциллятора операторы координаты и импульса

$$q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega^0}}(a_k + a_k^+), \quad p_k = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega^0}{2}}(a_k - a_k^+), \quad [p_k, q_{k'}] = -i\hbar\delta_{kk'}.$$

Исходя из уравнений движения для операторов a и a^+ с оператором (12) находим

$$\dot{q} = \frac{p_k}{m}, \quad \dot{p}_k = -m\omega_k^2 q_k - 2 \sum_{k'} (\mathbf{k}\mathbf{k}') \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} f_k f_{k'} q_{k'}.$$

Пусть H^λ есть оператор Гамильтона, который при $\lambda = 1$ приводит к приведенным уравнениям движения

$$H^\lambda = \sum_k \left(\frac{p_k^2}{2m} + \frac{m\omega_k^2 q_k^2}{2} \right) + \lambda \sum_{k,k'} (\mathbf{k}\mathbf{k}') \sqrt{\omega_k \omega_{k'}} f_k f_{k'} q_k q_{k'} = h_0 + \lambda h_I.$$

Ниже примем, следуя сложившейся традиции, систему единиц $\hbar = 1$, $m = 1$ и $\omega^0 = 1$. В случае $\mathbf{P} = 0$ энергия (15) составит величину $\omega_k = 1 + k^2/2$, безразмерный импульс равен $\chi = k\sqrt{\hbar/2m\omega^0}$. Введем функцию Грина

$$G_{kk'}(t) = i\langle T[q_k(t), q_{k'}(0)] \rangle, \quad (22)$$

фурье-компоненты которой удовлетворяют уравнению

$$(\omega_k^2 - \omega^2) G_{kk'}^\lambda(\omega) + 2\lambda \sum_{k''} (\mathbf{k}\mathbf{k}'') \sqrt{\omega_k \omega_{k''}} f_k f_{k''} G_{k''k'}^\lambda(\omega) = \delta_{kk'}. \quad (23)$$

Находим при $\lambda = 0$

$$\langle \mathbf{k} | G_\pm^0(\omega) | \mathbf{k}' \rangle = \frac{\delta_{kk'}}{\omega_k^2 - \omega^2 \mp i\varepsilon}.$$

Решение уравнения (23) при $\mathbf{P} = 0$ имеет вид

$$\langle \mathbf{k} | G_\pm^\lambda(\omega) | \mathbf{k}' \rangle = \frac{\langle \mathbf{k} | G_\pm^0(\omega) | \mathbf{k}' \rangle}{D^\lambda(\omega^2)}, \quad (24)$$

$$D^\lambda(s) = 1 - \frac{2\lambda}{3(2\pi)^3} \int \frac{\omega_k k^2 f_k^2}{s - \omega_k^2} d\mathbf{k} = 1 - \lambda \Sigma(s).$$

Функция $D(s)$, как функция комплексного переменного s , обладает следующими свойствами: 1) $D(s)$ имеет разрез вдоль вещественной оси при $s \in [1, \infty)$; 2) $D^*(s) = D(s^*)$; 3) в пределе $s \rightarrow \infty$ функция $sD(s)$ возрастает не медленнее s .

Введем операторы α и α^+ , которые преобразуют квадратичную форму (12) к диагональному виду:

$$H_0 = \sum_k \hbar \nu_k \alpha_k^+ \alpha_k + \Delta E, \quad (25)$$

где ν_k – новые частоты. Исходные и новые операторы рождения и уничтожения связаны каноническим преобразованием

$$a_k = (M_+)_{kk'} \alpha_{k'} + (M_-^*)_{kk'} \alpha_{k'}^+, \quad (26)$$

$$a_k^+ = (M_+^*)_{kk'} \alpha_{k'}^+ + (M_-)_{kk'} \alpha_{k'}, \quad (27)$$

где подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Структура матриц M_+ и M_- в терминах асимптотических состояний в теории рассеяния следующая:

$$(M_{\pm})_{kk'} = \frac{1}{2} \frac{\omega_k \pm \omega_{k'}}{(\omega_k \omega_{k'})^{1/2}} \langle \mathbf{k} | \Omega_{\pm} | \mathbf{k}' \rangle, \quad (28)$$

$$\langle \mathbf{k} | \Omega_{\pm} | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{2(\mathbf{k}\mathbf{k}') f_k f_{k'} (\omega_k \omega_{k'})^{1/2}}{(\omega_{k'}^2 - \omega_k^2 \pm i\varepsilon) D_{\pm}(\omega_k^2)}. \quad (29)$$

Матрицы Мёллера Ω унитарны, $\Omega^+ \Omega = 1$. Унитарность преобразования (26) может быть проверена и непосредственным вычислением коммутаторов [19], [14] с учетом упомянутых аналитических свойств функции $D(s)$.

Волновая функция облаченной частицы Λ_0 определяется из условия

$$\alpha_k \Lambda_0 = 0 \quad (30)$$

и имеет вид

$$\Lambda_0 = \text{const} \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2} \iint a_k^+ A_{kk'} a_{k'}^+ dk dk' \right\} \Phi_0 = R \Phi_0, \quad (31)$$

где Φ_0 – математический вакуум, матрица A равна $A = (M_- M_+^{-1})^*$.

В итоге облаченная, трансляционно-инвариантная волновая функция основного состояния полярона приобретает вид

$$\Psi_P(r, Q) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathbf{P} - \sum_k \hbar \mathbf{k} a_k^+ a_k \right) \mathbf{r} \right] \exp \left[\sum_k f_k (a_k - a_k^+) \right] \Lambda_0. \quad (32)$$

Математическое ожидание поправки к энергии $\langle \Psi | H_I | \Psi \rangle$ с волновой функцией (32) обращается в нуль при $\mathbf{P} = 0$ [14].

Движения электрона в квазиодномерных системах описывается моделью Хольштейна, близкой по структуре к поляронной модели. Трансляционно-инвариантная теория для этой модели была недавно развита Лахно [20].

3. ЭНЕРГИЯ ПОЛЯРОНА

Энергия ΔE в (25) определяется разностью энергий нулевых колебаний поля и может быть выражена через оператор h_1^λ согласно

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (\nu_k - \omega_k) = \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle h_1^\lambda \rangle. \quad (33)$$

Величина $\langle h_1^\lambda \rangle$ выражается через предельное (при $t \rightarrow +0$) значение функции Грина (22):

$$\langle h_1^\lambda \rangle = \frac{3}{4\pi i} \lim_{t \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \frac{\lambda \Sigma(\omega^2)}{1 - \lambda \Sigma(\omega^2)} d\omega.$$

Выражение (33) после интегрирования по λ и подстановки $s = \omega^2$ примет вид

$$\Delta E = -\frac{3}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 - \Sigma(\omega^2)) d\omega = -\frac{3}{8\pi i} \int_C \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s) ds. \quad (34)$$

Контур интегрирования C охватывает чередующиеся нули и полюсы функции $D(s)$ на вещественной оси. После интегрирования по угловым переменным и интегрирования по частям выражение для ΔE можно записать в более удобном для численных расчетов виде:

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} \omega_k k^4 f_k^2 F(\omega_k) dk, \quad F(\omega_k) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\sqrt{s}}{(s - \omega_k^2)^2} \frac{ds}{D(s)}. \quad (35)$$

Полная энергия при равенстве нулю полного импульса будет определяться функционалом

$$E = \Delta E + 2 \sum_k V_k f_k + \sum_k f_k^2. \quad (36)$$

Функции f_k описывают классическое поле и находятся из условия минимума энергии (36), однако решение экстремальной задачи для функционала (36) в общем случае достаточно сложно. В области слабой связи функция f_k совпадает с выражением в теории Ли–Лоу–Пайнса. Энергия в этой области в основных чертах воспроизводится правильно и совпадает с приведенной в работе [7], в единицах $\hbar\omega_0$:

$$E = -\alpha - 1.26 \left(\frac{\alpha}{10} \right)^2.$$

Коэффициент при α^2 нуждается в некотором исправлении [21], число -0.0126 следует заменить, принимая оператор H_I как оператор возмущения, на -0.0159 , что согласуется с результатом, полученным в рамках теории возмущений [22].

В области сильной связи волновая функция выбиралась в работах [14], [15] в виде соответствующей теории Пекара с включением в нее вариационного параметра a :

$$f_k = -V_k e^{-k^2/2a^2}. \quad (37)$$

Недавно была предложена двухпараметрическая функция того же типа, что и выше [23]:

$$f_k = -NV_k e^{-k^2/2a^2}, \quad (38)$$

которая обеспечивает при $N = \sqrt{2}$ известное вириальное соотношение в теории полярона [1].

Нам понадобятся вещественная и мнимая части функции (24), при $N = 1$ имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} D(\omega_k^2) &= 1 + \lambda \nu(y), & \operatorname{Im} D(\omega_k^2) &= \frac{k^3 f_k^2}{6\pi}, & y &= \frac{k}{a}, \\ \nu(y) &= 1 - y e^{-y^2} \int_0^y e^{t^2} dt - \xi(y) e^{-\xi^2(y)} \int_{\xi(y)}^{\infty} e^{-t^2} dt, \\ \xi(y) &= \sqrt{y^2 + \frac{4}{a^2}}, & \lambda &= \frac{4g^2 a}{3\sqrt{2}\pi}. \end{aligned}$$

После преобразований формула для полной энергии принимает вид

$$E = \frac{3}{16} a^2 \left[1 + q \left(\frac{1}{\lambda} \right) \right] - \frac{g^2 a}{\sqrt{\pi}} \left(2 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \quad (39)$$

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-y^2}(1 - \Omega(y))}{(1/\lambda) + \nu(y)^2 + \pi y^2 e^{-2y^2}/4} dy, \quad (40)$$

$$\Omega(y) = 2y^2 \left\{ (1 + 2y^2) y e^{y^2} \int_y^\infty e^{-t^2} dt - y^2 \right\}.$$

По поводу функции $q(1/\lambda)$ в работе [15] было сделано следующее примечание “Интересно отметить, что при $\lambda \rightarrow \infty$ подынтегральная функция в (40) при $y^4 = 3\lambda/4$ имеет резкий максимум, однако при учете фактической ограниченности области интегрирования по y и для рассматриваемых ниже значений $g^2 < 10$ эта область не возникает”, что явилось в дальнейшем предметом критики [24].

Представляется целесообразным разделить задачу о поляроне на две части: 1) теоретико-полевая теория (математический полярон); 2) задача о движении медленных электронов в полярных кристаллах (физический полярон).

Единую функцию f_k , одинаково приемлемую как в области сильной, так и в области слабой связи, вряд ли можно найти в простой форме. Тем не менее путем численного интегрирования можно проследить за изменением полной энергии $E = E(\alpha)$ с функцией (38) и вне предполагаемой области сильной связи. Эта зависимость представлена на рис. 1 и описывается плавной кривой. При $\alpha \approx 10$ полная энергия совпадает с величиной, отвечающей приближению сильной связи. Если даже положить вне “опасной области” $1/\lambda = 0$, и в этом случае получается разумная оценка для энергии в области констант связи $\alpha \sim 7 - 9$. Линейная зависимость полной энергии в области малых значений α не является неожиданностью, в этой области функция f_k не соответствует теории возмущения, согласно [9]: $f_k = -V_k/(1 + k^2/2)$. В работе [23] было получено асимптотическое выражение для $E(\alpha)$ с корректной зависимостью от константы связи в области сильной связи $E = \text{const} \cdot \alpha^2$, которое удовлетворяет известному вириальному соотношению [1] при выборе постоянной $N = \sqrt{2}$ в формуле (38).

В работе [26] был предложен другой подход, в функции вида (38) величина a полагалась зависящей от безразмерного импульса согласно

$$a(k) = \frac{a}{2} \left[1 + \text{th} \left(\frac{k_b - k}{a} \right) \right], \quad k_b \in [a, k_{\text{oc}}], \quad k_{\text{oc}} = \alpha \sqrt{\frac{3\lambda}{4}}.$$

Выражение для $q(1/\lambda)$ в пределе больших параметров a приняло вид

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) \approx 5.75 + 6 \left(\frac{a}{k_b} \right) e^{-k_b^2/a^2}.$$

В пределе $(k_b/a) \rightarrow \infty$ возвращаемся к приведенному в [15] числу $q(0) = 5.75$.

Суммируя, можно заключить, что трансляционно-инвариантная теория корректно описывает энергию “математического полярона”.

Переходим к рассмотрению “физического полярона”. Процедура ограничения верхнего предела интегрирования по импульсам приводит к появлению дополнительного слагаемого в выражении для энергии, что явилось предметом дискуссии в работе [27]. Функция $D(s)$ имеет ту же структуру, что и функция диэлектрической восприимчивости электронной плазмы (см., например, обзорную статью [28]). Полнота системы функций достигается путем учета как функций сплошного, так и функции дискретного спектра и этот дискретный уровень, известный как энергия плазменных колебаний, следует учитывать при преобразовании контура интегрирования. При ограничении верхнего предела интегрирования по импульсам возникает,

Рис. 1. Зависимость энергии полярона $E = E(\alpha)$ от константы связи. Функция E_p получена минимизацией функционала (36) с двухпараметрической функцией [25]. E_{ps} – приближение $1/\lambda = 0$, $E_p = -0.1257873\alpha^2$, функция $E'_{ps} = -0.31769\alpha^{4/3}$ согласно Климину и Девризу [24].

как это было отмечено в [21], дополнительное слагаемое в выражении для энергии. К “математическому полюрону” это замечание, следовательно, не относится, при устремлении верхнего предела интегрирования к бесконечности вклад от дополнительных слагаемых стремится к нулю. Что же касается реального полярона (ионные кристаллы), то здесь следует предварительно задать разумный верхний предел интегрирования, что можно установить из задачи о рассеянии. В работе [15] верхний предел выбран таким, что область “резонанса” в $q(1/\lambda)$ не достигается, а тогда и поправку вводить не следует.

Упомянем об описании локализованного состояния с позиции делокализованной волновой функции. Этот вопрос был разъяснен в работе [9]. Рассмотрим преобразование (5), в котором вместо координаты r введена другая переменная r_0 . После подстановки волновой функции $\Psi(r_0)$ в выражение для математического ожидания энергии взаимодействия

$$\left\langle \Psi(r_0) \left| \sum_k V_k [a_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] \right| \Psi(r_0) \right\rangle$$

преобразованный оператор энергии взаимодействия будет содержать разность координат в показателе экспонент:

$$\sum_k V_k [a_k e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} + a_k^\dagger e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}],$$

и это последнее выражение после усреднения по полевым переменным можно рассматривать как потенциал, удовлетворяющий уравнению Пуассона. Окончательная

формула при выборе функции f_k в виде (37) после перехода к размерным единицам имеет вид

$$r_p = \frac{2.18}{a} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega^0}}, \quad (41)$$

где a – вариационный параметр, что отвечает теории Пекара–Фейнмана.

4. СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ

Обратимся к виду оператора энергии H_I . Согласно (13) первое слагаемое в нем содержит операторы рождения и уничтожения фотона, следующее слагаемое содержит один оператор уничтожения, два оператора рождения и эрмитово-сопряженное выражение. Эти слагаемые ответственны за нелинейные эффекты в теории рассеяния, подобные нелинейным оптическим эффектам. Последнее слагаемое в (13) относится к нелинейному эффекту – процессу поглощения и рождения двух фононов. Ниже нас будет интересовать процесс упругого рассеяния фонона на поляроне, который и определяет длину свободного пробега.

В показателе экспоненты в (18) возникает произведение функций $e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}\Psi_{P_0}$, где теперь Ψ_{P_0} – волновая функция (32), к импульсу полярона $\mathbf{P}_0$ добавляется импульс фонона $\mathbf{k}_0$: $\mathbf{P}_0 \rightarrow \mathbf{P}_0 + \mathbf{k}_0$. После интегрирования по пространственным координатам находим

$$T_{\text{if}} = T_{\text{if}}(\omega^0) + T_{\text{if}}(-\omega^0),$$

$$T_{\text{if}}(\omega^0) = V_{k_0} V_k \int \langle \Lambda_0 | (\tilde{H}_0 + \tilde{H}_I - E - \omega^0 - i\varepsilon^{-1} |\Lambda_0\rangle) d\nu. \quad (42)$$

Ниже будет сохранена затравочная масса электрона m . Отличие от соответствующей формулы Лоу и Пайнса [10] состоит в замене вакуумной функции Φ_0 на волновую функцию Λ_0 в приближении сильной связи. Помеченные тильдой операторы энергии в (42) возникают из операторов (12) и (13) заменой в них $\mathbf{P}_0 \rightarrow \mathbf{P}_0 + \mathbf{k}_0$. Имеем

$$\tilde{H}_0 = H_0 + \frac{\mathbf{P}\mathbf{k}}{m^*} + \frac{k_0^2}{2m}, \quad \tilde{H}_I = H_I - \frac{1}{m} \sum_k (\mathbf{k}_0\mathbf{k}) a_k^+ a_k - \frac{1}{m} \sum_k (\mathbf{k}_0\mathbf{k}) f_k (a_k^+ + a_k). \quad (43)$$

Рассмотрим выражение (42) и возникающую в нем функцию Ω :

$$c\Omega = (\tilde{H}_0 + \tilde{H}_I - E - \omega^0 - i\varepsilon)^{-1} |\Lambda_0\rangle, \quad c = \left(\frac{k_0^2}{2m} + \frac{P_0 k_0}{m^*} - \omega^0 - i\varepsilon \right)^{-1}, \quad (44)$$

которая удовлетворяет интегральному уравнению

$$\Omega = \Lambda_0 - (\tilde{H}_0 - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} \tilde{H}_I \Omega. \quad (45)$$

Решение уравнения (45) можно представить в виде ряда, в виде суммы одночастичного, двухчастичного и т. д. вкладов согласно

$$\Omega = u\Lambda_0 + \sum_k \nu_k \alpha_k^+ \Lambda_0 + \sum_{k,k'} w_{kk'} \alpha_k^+ \alpha_{k'}^+ \Lambda_0 + \dots \quad (46)$$

Отметим, что согласно (32)

$$a_k \Lambda_0 = \int A_{kk'} a_{k'}^+ dk' \Lambda_0.$$

Рис. 2. Контур интегрирования $C + \rho$.

В одночастичном приближении (это первые два слагаемых в правой части (46)) возникает система зацепляющихся уравнений

$$u = 1 - c \sum_k \nu_k \phi_k, \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \delta E_k \nu_k &= -u \phi_k - \frac{1}{m} \sum_{k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') f_k f_{k'} \nu_{k'} - u \sum_{k'} A_{kk'} \phi_{k'} - \\ &\quad - \frac{u}{m} \sum_{k, k'} (\mathbf{k} \mathbf{k}') A_{kk'} f_{k'} - \frac{1}{m} \sum_{k', k''} A_{kk'} (\mathbf{k}' \mathbf{k}'') f_{k'} f_{k''} \nu_{k''}, \\ \delta E_k &= \frac{(k - k_0)^2}{2m} + \frac{\mathbf{P}_0(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})}{m^*} - i\varepsilon, \\ \phi_k &= -(\mathbf{k} \mathbf{k}_0) \frac{f_k}{m} + V_k + f_k \omega_k \equiv -(\mathbf{k} \mathbf{k}_0) \frac{f_k}{m} + \Phi_k. \end{aligned} \quad (48)$$

Первые два слагаемых в уравнении для функции ν_k совпадают с приведенными в работе [10], остальные отражают структуру поляронной функции.

Наибольшую сложность вызывает оценка тех интегралов, которые содержат матричные элементы матрицы A , так как в знаменателе (29) появляется довольно сложная для интегрирования функция $D(s)$.

Преобразуем функцию $D(s)$ к виду

$$D(s) = D(1) + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2 dk}{(\omega_k^2 - 1)(\omega_k^2 - s)},$$

причем $D(1) = 1 + Q$, где

$$Q = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2 dk}{\omega_k^2 - 1}.$$

Функция $1/(s-1)D(s)$ может быть представлена в виде контурного интеграла:

$$\frac{1}{(s-1)D(s)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{C+\rho} \frac{ds'}{(s'-1)(s'-s)D(s')},$$

контур интегрирования приведен на рис. 2.

В результате находим

$$\frac{1}{D(s)} = \frac{1}{1+Q} + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2 dk}{(\omega_k^2 - 1)(s - \omega_k^2) |D(\omega_k^2)|^2}.$$

Оценим интеграл Q , выбирая, как и выше, функцию f_k в виде (37). Имеем

$$Q = \frac{4g^2a}{3\pi\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-y^2} \frac{1 + (ay)^2/2}{1 + (ay)^2/4} dy. \quad (49)$$

Дробь под знаком интеграла является медленно меняющейся функцией от параметра a , она изменяется в пределах от единицы до двух с ростом параметра a . Можно полагать, что величина Q имеет порядок g^2a , т. е. в области сильной связи $Q \gg 1$. Интеграл Q известен в парной мезонной теории, он определяет перенормировочную константу

$$\bar{g} = \frac{g}{1 + gQ}.$$

Для оценки интегралов запишем аппроксимацию $1/D(s) \approx 1/Q$, тогда

$$A_{kk'} \approx -\frac{(\mathbf{k}\mathbf{k}')f_k f_{k'}}{Q(\omega_k + \omega_{k'})}. \quad (50)$$

Общий вид коэффициента u в (46) был приведен в работе [15]. Рассмотрим наиболее существенные интегралы, мнимые части которых пропорциональны полному импульсу полярона P_0 , который полагается малым (медленные электроны):

$$I = \sum_k \frac{(\mathbf{k}\mathbf{k}_0)f_k^2}{mk_0^2\delta E_k}, \quad N = \frac{1}{\omega^0} \sum_k \frac{(V_k + f_k\omega_k)^2}{\delta E_k}.$$

Асимптотические значения вещественной части интегралов I и N следующие:

$$\operatorname{Re} I(x) = \frac{g^2a}{3x^2\sqrt{2\pi}}, \quad \operatorname{Re} N(x) = \frac{3}{16\sqrt{2\pi}} \frac{g^2a^2}{x^2} \left(1 + \frac{8}{3a^2} + O\left(\frac{1}{a^4}\right)\right). \quad (51)$$

Приведем оценку остальных интегралов из работы [15], это интегралы T , L , M , S

$$\frac{\operatorname{Re} T}{\operatorname{Re} N} \approx \frac{1}{g^4}, \quad \frac{\operatorname{Re} S}{\operatorname{Re} I} \approx \frac{1}{g^8}, \quad \frac{\operatorname{Re} M}{\operatorname{Re} I} \approx \frac{1}{g^4}, \quad \operatorname{Re} L = \frac{g^2}{3ax^4\sqrt{2\pi}}.$$

Оставляя в конечных формулах лишь наиболее существенные интегралы, получим формулу для вероятности рассеяния W в однофотонном приближении

$$W = \frac{1}{\tau} = \frac{m^*P_0}{8\pi^4} \int \bar{n} V_{k_0} \left| \frac{\mathbf{k}_0^2}{2m} \frac{1-I}{1+I} - \omega^0 N \right|^{-2} d\mathbf{k}_0. \quad (52)$$

Множитель $\bar{n} = [e^{\hbar\omega/kT} - 1]^{-1}$ определяет равновесное число фононов при температуре T , $m^* = m/(1 - \eta)$ параметр η определен в (16).

Согласно [9] в формуле (52) следует разделить вещественную и мнимую части и перейти к пределу

$$\lim_{P_0 \rightarrow 0} \frac{P_0}{A^2 + B^2 P_0^2} = \frac{\pi}{B} \delta(A). \quad (53)$$

Согласно (52) и (53) резонансный импульс будет определен соотношением

$$k_r^2 \frac{\hbar}{2m\omega^0} (1 - I_1) = N(1 + I_1),$$

в котором левая часть является безразмерной величиной. После подстановки асимптотических значений (51) интегралов N и I находим

$$k_r \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega^0}} = a \left(\frac{g^2a}{6\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{27\sqrt{2\pi}}{8g^2a} + O(g^{-8}) \right]. \quad (54)$$

Если принять в качестве постоянной решетки минимально возможную длину волны продольных оптических колебаний $\lambda_{\min}$ и взять далее типичные значения частот этих колебаний, то левая часть в (54) составит величину порядка 10–14 для зонной массы m , равной массе свободного электрона. Это условие ограничивает максимальные величины констант связи (правая часть (54)), они составят в этом случае величины порядка $\alpha = g^2 \approx 8\text{--}10$.

Будет ли оправданным приближение сильной связи при оценке интегралов? Примем во внимание результаты численного интегрирования полной энергии (см. рис. 1). Полная энергия при $\alpha \approx 9\text{--}10$ оказалась практически совпадающей (единицы $\hbar\omega$) с величиной $E_0 = -0.106\alpha^2$, известной из теории Фейнмана для сильной связи.

Вклад от двукратно возбужденных амплитуд $w_{kk'}$ в разложении (46) может быть учтен с помощью уравнений, связывающих эти амплитуды с амплитудами u и v_k ,

$$\left[\omega^0 + \frac{1}{2m}(\mathbf{k} + \mathbf{k}' - \mathbf{k}_0)^2 \right] w_{kk'} = -\frac{u}{2m}[(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\mathbf{k}_0 - (\mathbf{k}\mathbf{k}')]A_{kk'} - \\ - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{k}')}{2m}(\nu_k f_{k'} + \nu_{k'} f_k) - \frac{1}{2}(\nu_k \phi_{k'} + \nu_{k'} \phi_k). \quad (55)$$

Рассмотрим импульс k_0 , приближающийся к резонансному импульсу $k_0 \approx k_T$, который в области больших значений констант связи согласно (54) достаточно велик. Левая часть соотношения (55) содержит параметр k_0 во второй степени, а в правой части он присутствует только в первой степени. Вклад амплитуд $w_{kk'}$ может быть оценен после их включения в правые части уравнений (47) и (48) и путем дальнейшей оценки их интегрального вклада. Оказывается, что главный вклад в сечение упругого рассеяния возникает от рассмотренных выше амплитуд u и v .

Измерение подвижности поляронов сталкивается с известными экспериментальными проблемами [12]. Более наблюдаемой является система из двух поляронов с различными зарядами (экситон Мотта). В случае нарушения трансляционной инвариантности при условии равенства масс электрона и дырки длина свободного пробега обращается в бесконечность [29], в трансляционно-инвариантной теории она остается конечной и в этом случае [30]. В этой задаче важно учесть возбуждение энергетических уровней экситона в ходе поглощения и излучения оптического фотона, что особенно существенно для больших квантовых чисел. Последнее достижение в этой области относится к наблюдению водородоподобного спектра в кристаллах Cu_2O вплоть до главного квантового числа $n = 25$ [31].

Наше основное внимание было сосредоточено на задаче рассеяния кванта поля на облаченной частице. Многочисленные примеры проявления поляронного эффекта можно найти в недавно выпшедших книгах [32], [33].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Трансляционно-инвариантная теория полярона основывается на построении волновой функции в виде, включающем как классическое, так и квантовое поле. Теория позволяет трансформировать идею о локализованном электронном состоянии в ее теоретико-полевое описание, в котором поле оказывается распространенным на весь кристалл, возникает дуализм типа частица–волна. Теоретико-полевое описание позволяет правильно вычислить энергию полярона как в приближении сильной, так и в приближении слабой связи и определить сечение рассеяния. С ростом постоянной связи эффективные размеры полярона уменьшаются, сечение рассеяния

определяется фононами все меньшей длины волны. В результате возникают ограничения на предельные величины постоянной связи с учетом реальных кристаллов. Область применимости приближения сильной связи фактически сводится к нулю для физического полярона.

Благодарности. Я с благодарностью вспоминаю своих учителей В. А. Фока и Ю. В. Новожилова. Для меня были важны беседы в 1960 г. на кафедре теоретической физики Гамбургского и Мюнхенского университетов с Г. Леманом, В. Циммерманом, Г. Хёлером, а также в дальнейшем с С. В. Тябликовым и Г. Фрёлихом. Я благодарен В. Д. Лахно и Н. И. Каширину за многочисленные дискуссии и помощь в работе в последнее время.

Список литературы

- [1] С. И. Пекар, *ЖЭТФ*, **19** (1949), 796–806.
- [2] Ю. В. Новожилов, А. В. Тулуб, *УФН*, **61**:1 (1957), 53–102.
- [3] M. Born, V. A. Fock, *Z. Phys.*, **51**:3–4 (1928), 165–180.
- [4] H. Fröhlich, H. Pelzer, S. Zienau, *Phil. Mag.*, **41**:7 (1950), 221–227.
- [5] С. В. Тябликов, *ЖЭТФ*, **25** (1953), 688–697.
- [6] E. P. Gross, *Phys. Rev.*, **100**:6 (1955), 1571–1578.
- [7] V. A. Fock, *Phys. Z. Sowjetunion*, **6** (1934), 425–469.
- [8] W. Heisenberg, *Z. Phys.*, **65**:1–2 (1930), 4–13.
- [9] T. D. Lee, F. Low, D. Pines, *Phys. Rev.*, **90**:2 (1953), 297–302.
- [10] F. Low, D. Pines, *Phys. Rev.*, **98**:2 (1953), 414–418.
- [11] R. P. Feynmann, *Phys. Rev.*, **97**:3 (1955), 660–665.
- [12] T. D. Schultz, *Phys. Rev.*, **116**:3 (1959), 526–543.
- [13] B. Gerlach, H. Löwen, *Rev. Modern Phys.*, **63**:1 (1991), 63–90.
- [14] А. В. Тулуб, *Вестн. Ленингр. гос. ун-та. Сер. 4. Физика. Химия*, **15**:22 (1960), 104–118.
- [15] А. В. Тулуб, *ЖЭТФ*, **41**:6 (1962), 1828–1838.
- [16] Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, *УФН*, **180**:3 (2010), 449–473.
- [17] R. Glauber, *Phys. Rev.*, **131**:6 (1963), 2766–2788.
- [18] G. Wentzel, *Helv. Phys. Acta*, **15** (1942), 111–126.
- [19] A. Klein, B. H. McCormic, *Phys. Rev.*, **98**:5 (1955), 1428–1445.
- [20] V. D. Lakhno, *Progr. Theoret. Exp. Phys. (PTEP)*, **7** (2014), 073101, 13 pp.
- [21] M. Porsch, J. Röseler, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **23**:1 (1967), 365–376.
- [22] G. Höhler, A. Mullensiefen, *Z. Phys.*, **157**:2 (1959), 159–165.
- [23] Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, А. В. Тулуб, *ЖЭТФ*, **141**:5 (2012), 994–996.
- [24] S. N. Klimin, J. T. Devreese, *Solid State Commun.*, **152**:16 (2012), 1601–1603.
- [25] N. I. Kashirina, *Ukr. J. Phys.*, **59**:11 (2014), 1088–1092.
- [26] В. Д. Лахно, *ЖЭТФ*, **143**:6 (2013), 1033–1038.
- [27] S. N. Klimin, J. T. Devreese, *Solid State Commun.*, **153**:1 (2013), 58–59.
- [28] N. Fukuda, Y. Wada, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **15** (1960), 61–139.
- [29] M. Porsch, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **8**:1 (1965), 207–212.
- [30] А. В. Тулуб, *ЖЭТФ*, **39**:6 (1959), 1859–1865.
- [31] T. Kazimierzczuk, D. Fröhlich, S. Scheel, H. Stolz, M. Bayer, *Nature*, **514** (2014), 343–347.
- [32] D. Emin, *Polarons*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2013.
- [33] Н. И. Каширина, В. Д. Лахно, *Математическое моделирование автолокализованных состояний в конденсированных средах*, Физматлит, М., 2013.