«ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА»,
1982, том 13, вып. 3

УДК 539.12

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ МОДЕЛЕЙ ПОЛЯРОННОГО ТИПА

Е. А. Кочетов, С. П. Кулешов, М. А. Смондырев
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Изложен общий подход к исследованию поляронной системы на основе техники континуального интегрирования. Основу подхода составляет функциональный вариационный метод, обобщающий фейнмановский на случай отличного от нуля импульса системы. Исследованы характеристики свободного полярона и поведение системы при слабых внешних возмущениях. Рассмотрены вопросы, связанные с термодинамикой полярона. Изучены высокотемпературное поведение средней энергии и массы полярона и реакция поляронной системы при конечных температурах на внешнее возмущение.

In this paper we present the general approach to the investigation of the polaron system within the path integral technique. The essence of the approach lies in developing the functional variational method which generalizes that of Feynman to the case of nonzero momentum of the system. We study both the characteristics of the free polaron and the behaviour of the polaron system in weak external fields. The problems of polaron thermodynamics are also under consideration. We study high-temperature behaviour of the average energy and polaron mass, and the reaction of the system at finite temperature on the external perturbations.

ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание уделяется построению динамических моделей составных частиц. Тенденция рассматривать адроны как сложные образования с элементарными составляющими (кварки, партоны) возродила интерес к моделям теории поля, в которых структура частицы появляется в результате ее взаимодействия с окружающим полем.

Представления о сложной структуре частиц и наличии у частицы возбужденных состояний всегда были основной чертой теории сильной связи. Подчеркнем, что трудности теории сильной связи обусловлены необходимостью с самого начала оперировать понятиями, сильно отличающимися от представлений теории свободных полей, на что впервые было обращено внимание в основополагающей работе Н. Н. Боголюбова [1] (см. также [2]), посвященной исследованию задачи о взаимодействии нерелятивистской частицы с квантованным скалярным полем в пределе адиабатической связи.

Впервые задача о взаимодействии нерелятивистской частицы с квантованным скалярным полем была привлечена Фрёлихом для исследования так называемой *проблемы поляронов* [3]. Проблема поляронов заключается в изучении поведения медленного электрона проводимости в полярном кристалле. Кулоновское поле электрона, помещенного в кристалле, смещает ионы от их положений равновесия; в свою очередь, ионная поляризация, действуя на электрон, понижает его энергию. Двигаясь через кристалл, электрон переносит вместе с собой область искажения решетки. Электрон вместе с сопровождающим его самосогласованным полем поляризации можно рассматривать как некую квазичастицу, называемую обычно поляроном *. Отметим, что концепция полярона была введена Пекаром [5], который рассмотрел случай предельно сильного электрон-решеточного взаимодействия, используя методы полуклассического описания поляронной системы.

Применяя лагранжеву формулировку теории поля и затем стандартную процедуру квантования, Фрёлих получил гамильтониан поляронной системы в виде [3]:

$$H = -\frac{\Delta}{2\mu} + \sum_k \omega_k a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \\ + g\sum_k \left(A_k a_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{kr}) + A_k^* a_{\mathbf{k}}^+ \exp(-i\mathbf{kr})\right), \tag{I}$$

где $a_{\mathbf{k}}^+$ и $a_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения квантов скалярного поля (фононов) с энергией ω_k и волновым вектором $\mathbf{k}$; A_k — компоненты Фурье плотности источника; g — константа связи.

Рассматривая идеализированную задачу, которая отражает не только и не столько поведение электрона в реальном кристалле, сколько сам по себе эффект взаимодействия частицы с полем, обычно полагают

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

где α — безразмерная константа связи; V — объем системы.

Так как точное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом вида (I) не найдено, были использованы различные приближенные методы, которые для слабой связи ($\alpha < 1$) сводятся или к стандартной теории возмущений [3], или к различным вариационным подходам [6—7], являющимся по существу теми или иными модификациями приближения Хартри — Фока.

* В статье Аппеля [4] подробно обсуждается физическое содержание поляронной задачи и приводится обзор работ по поляронам, которые были выполнены до 1975 г.

Результаты этих исследований показывают, что энергия покоящегося электрона понижается на $E = -\alpha\omega$, интерпретируемую как собственную энергию полярона. Кроме того, меняется масса электрона

$$m_{эф} = \mu (1 - \alpha/6)^{-1}.$$

Для слабого электрон-фононного взаимодействия полярон можно представить в первом приближении как частицу (электрон), окруженную облаком некоррелированных квантов фононного поля, среднее число которых пропорционально константе связи α.

Отметим, что в работах [8—10] приведены строгие математические результаты, касающиеся корректного определения гамильтониана Фрелиха и доказательства его самосопряженности и полуограниченности снизу. Кроме того, в работе [10] доказана сходимость ряда теории возмущений в модели Фрелиха для достаточно малых α.

Физически наиболее интересен случай сильного взаимодействия частицы с полем. Сильное электрон-фононное взаимодействие приводит к существенной поляризации фононного вакуума, что проявляется в конечном итоге в приобретении частицей определенной структуры. Любая вычислительная схема должна моделировать эту структуру уже в первом приближении как основной эффект сильного электрон-фононного взаимодействия. Однако математическая реализация этой идеи далеко не проста. Дело в том, что наряду с моделированием структуры частицы любое приближение к собственному вектору системы должно реализовывать представление группы симметрии задачи.

На примере поляронной задачи обсудим более подробно такого рода трудности. Исходя из вида гамильтониана H, можно заключить, что переменные $\mathbf{r}$ и $a_{\mathbf{k}}$ реализуют представление абелевой группы трансляций $\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \mathbf{q}$, $a_{\mathbf{k}} \to a_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{qk})$. Оператор полного импульса системы

$$\mathbf{P} = -i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \Sigma k a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}}$$

коммутирует с H, что соответствует сохранению полного импульса системы. Для слабой связи ($\alpha \ll 1$) первое приближение к вектору состояния с гамильтонианом H дается собственным вектором оператора энергии невзаимодействующей системы

$$H_0 = -\frac{\Delta}{2\mu} + \Sigma\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{+} a_{\mathbf{k}},$$

такой вектор автоматически является собственным вектором оператора полного импульса $\mathbf{P}$. В этом случае можно развивать стандартную теорию возмущений.

Положение радикально меняется для сильной связи ($\alpha \gg 1$), когда оператор взаимодействия необходимо учитывать уже в первом приближении. Вектор состояния, который будем рассматривать или как первое приближение к состоянию системы (теория возмущений), или как пробное состояние (вариационные расчеты), должен удовлетворять двум требованиям: 1) моделировать структуру частицы и 2) реализовывать представление группы симметрии.

Как уже отмечалось, строгое и последовательное решение этой проблемы дано в работе Н. Н. Боголюбова об адиабатической связи [1], где с помощью канонического преобразования гамильтониана (I) трансляционная инвариантность системы была учтена до построения теории возмущений по обратной константе связи. Результаты этой работы показывают, что, во-первых, существует большая классическая составляющая бозонного поля, ответственная за создание потенциальной ямы для частицы. Во-вторых, радиус-вектор частицы $\mathbf{r}$ разбивается на две части: $\mathbf{r} = \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{q}$, причем $\mathbf{q}$ описывает трансляционное движение потенциальной ямы как целого, а вектор $\boldsymbol{\lambda}$ трансляционно инвариантен и описывает колебательное движение частицы внутри потенциальной ямы.

Создание Н. Н. Боголюбовым инвариантной теории возмущений по обратной константе связи вскрыло важную роль законов сохранения в задачах о сильном взаимодействии и стимулировало широкое изучение различных квантовополевых моделей с сильной связью.

Отметим здесь, прежде всего, работы А. Н. Тавхелидзе, Е. П. Солодовниковой и О. А. Хрусталева [11—13], в которых преобразование Боголюбова было обобщено на произвольную n-параметрическую непрерывную группу Ли. В частности, было показано, что в результате сильной связи частицы с полем возникают осцилляторные потенциалы со сдвинутым аргументом, причем сдвиг отражает квантовые флуктуации. В работе [14] была исследована задача двух тел в адиабатической и сильной связи.

В работах [15—17] метод Боголюбова был применен к изучению квантовополевых систем с конкретными группами симметрии [$SU(2)$, $SU(3)$]; была также рассмотрена задача о движении частицы со спином в квантовом поле с сильной связью. Обобщению преобразования Боголюбова на задачи рассеяния посвящены работы [18—21]. Отметим также задачи о взаимодействии двух источников [22], исследование с помощью техники Боголюбова задачи трех тел в теории сильной связи [23] и доказательство существования частицеподобных решений в модели о взаимодействии скалярной частицы с квантованным полем [24]. Результаты последней работы подтверждаются исследованием [25], в котором для волновой функции электрона получено нелинейное уравнение Шредингера, имеющее солитонные решения.

Отметим также работу Гросса [26], в которой развивается трансляционно-инвариантная теория возмущений по $1/\alpha$. Как и в теории Н. Н. Боголюбова, первоначально выделяется положение центра инерции поляризационной ямы $\mathbf{q}(t)$, причем в дальнейшем скорость $\dot{\mathbf{q}}(t)$ выступает как множитель Лагранжа, с помощью которого фиксируется полный импульс системы $\mathbf{P}$.

Будучи физически ясным и математически безупречным, метод Боголюбова с точки зрения вычислительной является довольно трудоемким — необходимо решить сложные нелинейные уравнения. Поэтому были предприняты попытки использовать иные математические приближения. В основном они сводились к вариационному методу Ритца. Характерная черта этих подходов — справедливость полученных формул в области не слишком больших α [7], либо, наоборот, лишь для очень больших α [27, 28]. Отметим, в частности, что авторы работы [28] используют вариационный подход, основанный на применении давно известного в ядерной физике метода производящих координат [29]. В рамках такого метода в качестве пробного вектора состояния берется трансляционно-инвариантное выражение и затем решается стандартная задача на условный экстремум для определения энергии основного уровня системы при дополнительном условии постоянства полного импульса. Авторам удается получить поправки к сильной связи в терминах $1/\alpha$. Отметим, что использование техники неопределенных множителей Лагранжа, с помощью которой фиксируется импульс системы, сближает исследования, выполненные в [26, 28].

Интересно также отметить, что применение идеи об учете трансляционной инвариантности до проведения каких-либо приближений позволило автору работы [30] на основе вариационного метода получить уравнения, приводящие к правильным ответам для энергии в области больших и малых констант связи.

Особое место среди приближенных методов решения данной задачи занимает предложенный Фейнманом [31] функциональный вариационный метод, основанный на приближенном вычислении функциональных интегралов. Однако, удачно решая первую часть сформулированной выше проблемы сильной связи: моделирование структуры частицы, метод Фейнмана совершенно игнорирует ее вторую часть — необходимость строгого учета инвариантности системы. В результате подход Фейнмана дает правильное выражение для энергии основного (невырожденного) состояния системы и не столь хорошо обоснованное выражение для энергии состояния, близкого к основному, но трансляционно вырожденного. Как следствие может получаться неправильное выражение для эффективной массы полярона.

В данном обзоре изложен общий подход к исследованию поляронной системы на основе техники континуального интегрирования. Основу подхода составляет функциональный вариационный метод, обобщающий фейнмановский на случай отличного от нуля импульса системы. Являясь в достаточной степени универсальным, этот метод позволяет исследовать как характеристики свободного полярона, так и поведение поляронной системы при слабых внешних возмущениях.

Далее в обзоре рассматриваются вопросы, связанные с термодинамикой поляронной системы. Исследуется высокотемпературное поведение средней энергии и эффективной массы полярона и изучается реакция поляронной системы при конечной температуре на внешнее возмущение.

1. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

Континуальное представление матрицы плотности. Для определения всех характеристик поляронной системы достаточно знать оператор

$$G(\tau) = \exp(-\tau H),$$

где H — гамильтониан поляронной системы (1). Закон сохранения импульса системы $\mathbf{P}$ позволяет с помощью канонического преобразования $S = \exp(-i\mathbf{r}\sum \mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}})$ получить следующее представление для гамильтониана системы:

$$H \to SHS^{\dagger} = \frac{1}{2\mu}(\mathbf{P} - \Sigma\mathbf{k}a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}})^2 + g\Sigma(A_k a_{\mathbf{k}} + A_k^{*}a_{\mathbf{k}}^{+}) + \Sigma\omega_k a_{\mathbf{k}}^{+}a_{\mathbf{k}}, \qquad (1)$$

где вектор $\mathbf{P}$ является уже c-числом.

Континуальное представление оператора $\exp(-\tau H)$ можно получить, линеаризуя выражение вида $T_s \exp\left\{-\int\limits_0^1 ds\, \mathbf{A}_s^2\right\}$ посредством введения функционального интеграла

$$T\exp\left(-\int\limits_0^1 ds\mathbf{A}_s^2\right) = \int [\delta\mathbf{v}]_0^1\, T\exp\left(2i\int\limits_0^1 \mathbf{v}(s)\,\mathbf{A}_s\, ds\right).$$

Здесь

$$[\delta\mathbf{v}]_0^1 = \frac{\delta\mathbf{v}\exp\left(-\int\limits_0^1 \mathbf{v}^2\, ds\right)}{\int \delta\mathbf{v}\exp\left(-\int\limits_0^1 \mathbf{v}^2\, ds\right)}. \qquad (2)$$

Применяя (2) и используя упорядочивающий индекс s [32], получаем

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

$$= T\exp\left(-\frac{1}{2\mu}\int_0^\tau ds\,(\mathbf{P} - \Sigma\mathbf{k}a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k})_s^2 -\right.$$

$$\left. - g\int_0^\tau ds\Sigma\,(A_k a_\mathbf{k} + A_k^* a_\mathbf{k}^+)_s - \int_0^\tau ds\Sigma\omega_k\,(a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k})_s\right) =$$

$$= \int [\delta\mathbf{v}]_0^\tau\, T\exp\left\{-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^\tau ds\mathbf{v}(s)\,(\mathbf{P} - \Sigma\mathbf{k}a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k})_s -\right.$$

$$\left. - g\int_0^\tau ds\Sigma\,(A_k a_\mathbf{k} + A_k^* a_\mathbf{k}^+)_s - \int_0^\tau ds\Sigma\omega_k\,(a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k})_s\right\} =$$

$$= \int [\delta\mathbf{v}]_0^\tau \exp\left\{-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_0^\tau \mathbf{v}(s)\,\mathbf{P}\,ds -\right.$$

$$\left. - \Sigma a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k}\int_0^\tau ds\left(\omega - \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\mathbf{v}\right)\right\} g(\tau). \tag{3}$$

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

$$\frac{dg(\tau)}{d\tau} = \left[-g\Sigma A_k a_\mathbf{k}\exp\left(-\tau\omega_k + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\int_0^\tau \mathbf{v}\,ds\right) -\right.$$

$$\left. - g\Sigma A_k^* a_\mathbf{k}^+ \exp\left(\tau\omega_k - \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\int_0^\tau \mathbf{v}\,ds\right)\right] g(\tau);$$

$$g(\tau = 0) = 1.$$

Уравнение это легко решается, и вместо (3) приходим к выражению, уже не содержащему T-экспоненту [33]:

$$G(\tau) = \int [\delta\mathbf{v}]_0^\tau \exp\left(-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{P}\int_0^\tau \mathbf{v}\,ds\right) \times$$

$$\times \exp\left(-\Sigma a_\mathbf{k}^+ a_\mathbf{k}\int_0^\tau ds\left(\omega_k - \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\mathbf{v}(s)\right)\right) f_+ f_- R, \tag{4}$$

где

$$f_+ = \exp\left(g\Sigma A_k^* a_k^+ \int_0^\tau ds \exp\left(s\omega_k - i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\int_0^s \mathbf{v}\right)\right);$$

$$f_- = \exp\left[g\Sigma A_k a_k \int_0^\tau ds \exp\left(-s\omega_k + i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\int_0^s \mathbf{v}\right)\right];$$

$$R = \exp\left[g^2\Sigma \mid A_k\mid^2 \int_0^\tau ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \exp\left[-(s_1 - s_2)\,\omega_k\right] \times \right.$$

$$\left. \times \exp\left(i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{kv}(\eta)\,d\eta\right)\right].$$

Будем исследовать процессы, когда в начальном и конечном состояниях не имеется свободных квантов. Для этого достаточно иметь вакуумное среднее $G(\tau)$ *, которое при учете (4) принимает вид

$$G_0(\tau) \equiv \langle 0 \mid G(\tau) \mid 0\rangle = \int [\delta\mathbf{v}]_0^\tau \exp\{g^2\Sigma \mid A_k\mid^2 \int_0^\tau ds_1 \times$$

$$\times \int_0^{s_1} ds_2 \exp\left\{-\omega_k(s_1 - s_2) + \frac{\mathbf{kP}}{\mu}(s_1 - s_2) - \right.$$

$$\left. - i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{k}\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{v}(\eta)\,d\eta\right\}\} \exp\left(-i\sqrt{\frac{2}{\mu}}\mathbf{P}\int_0^\tau \mathbf{v}\right). \quad (5)$$

Принимая во внимание соотношение

$$G_0(\tau) = \sum_n \langle 0 \mid \exp(-\tau H) \mid \varphi_n\rangle\langle\varphi_n \mid 0\rangle \xrightarrow[\tau\to\infty]{} \exp\left[-\tau\mathscr{E}_0(\mathbf{P})\right] \mid \langle\varphi_0 \mid 0\rangle \mid^2, \quad (6)$$

будем в дальнейшем работать с величиной $G_0(\tau)$, получая из нее все нужные нам результаты.

В соотношении (6) $\mid \varphi_n(\mathbf{P})\rangle$ — полный набор собственных функций оператора H с энергией $\mathscr{E}_n$, а $\mathscr{E}_0(\mathbf{P})$ — основной уровень энергии системы при фиксированном полном импульсе $\mathbf{P}$:

$$\mathscr{E}_0(\mathbf{P}) = E_0 + \mathbf{P}^2/2m_{\text{эф}} + \ldots \quad (7)$$

* Заметим, что рассмотрение вакуумного среднего оператора $\exp(-\tau H)$ достаточно для исследования поляронной системы при нулевой температуре. Исследование термодинамики полярона требует перейти от вакуумного среднего $\langle 0 \mid \exp(-\tau H) \mid 0\rangle$ к сумме по всем состояниям, т. е. к статсумме $Z = \mathrm{Sp}\exp(-\tau H)$.

Аппроксимация Фейнмана. Точное вычисление функционального интеграла (5) невозможно. Для слабой связи можно использовать так называемое $\eta_i\eta_j$-приближение [34, 35], воспроизводящее обсуждавшиеся во Введении результаты теории возмущений по константе связи α и соответствующее распространению частицы почти по прямолинейной траектории. Сильное взаимодействие частицы с окружающим полем существенным образом меняет характер движения частицы, вследствие чего требуется более сложная аппроксимация функциональных интегралов.

Такая аппроксимация, учитывающая отклонение траектории частицы от прямолинейной как основной эффект сильного взаимодействия, была предложена Фейнманом [31] (см. также [36]).

Возвращаясь к формуле (5), с помощью замены функциональной переменной

$$\mathbf{v}(s) \to \mathbf{x}(s) = \sqrt{\frac{2}{\mu}} \int_0^s \mathbf{v}(\eta)\, d\eta$$

перепишем выражение для $G_0(\tau)$ в виде:

$$G_0(\tau) = \int\limits_{x(0)=0} \frac{\delta \mathbf{x}}{\mathrm{const}} \exp\{S[\mathbf{x};\, \mathbf{P}]\};$$

$$S[\mathbf{x};\, \mathbf{P}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\, ds + i\mathbf{P}\mathbf{x}(\tau) + g^2\Sigma\, |A_k|^2 \int_0^\tau ds_1 \times$$

$$\times \int_0^{s_1} ds_2 \exp\{-(s_1 - s_2)\,\omega_k - i\mathbf{k}\,[\mathbf{x}(s_1) - \mathbf{x}(s_2)]\};$$

$$\mathrm{const} = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=0} \delta x \exp\left(-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\, ds\right). \qquad (8)$$

Идея вариационного метода Фейнмана заключается в выборе некоторого аппроксимирующего действия S' и последующем перенесении усреднения в экспоненту:

$$\int \delta\mathbf{x} \exp S = \int \delta\mathbf{x} \exp S' \exp(S - S') \geqslant \int \delta\mathbf{x} \exp S' \exp\langle S - S'\rangle,$$

где

$$\langle A\rangle = \int \delta\mathbf{x} \exp(S')\, A \Big/ \int \delta\mathbf{x} \exp(S'), \qquad (9)$$

причем при выводе соотношения (9), основанном на неравенстве Йенсена, предполагается вещественность действия S и положительность меры усреднения [37, 38].

В качестве аппроксимирующего действия S' Фейнман выбирает действие вида

$$S'_F = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}\, ds -$$

$$-\frac{C\mu}{2}\int_0^\tau ds_1\, ds_2 \exp(-W\,|s_1 - s_2|)\,[\mathbf{x}(s_1) - \mathbf{x}(s_2)]^2, \tag{10}$$

т. е. предлагает такую модель, где электрон связан «пружиной» с другой частицей. Фактически метод аппроксимации Фейнмана заключается в замене фононной системы фиктивной частицей, упруго связанной с электроном. После исключения координат этой частицы получается квадратичный по электронным переменным пробный функционал вида (10). В действии (10) C и W рассматриваются как вариационные параметры, зависящие от упругости пружины и массы фиктивной частицы.

Вычисления с действием S'_F дают для энергии основного состояния в пределе сильной связи при равном нулю импульсе системы [31]:

$$E_0 = -\alpha^2/3\pi = -0{,}1061\alpha^2. \tag{11}$$

Заметим, что точное выражение для коэффициента при α^2 равно 0,108513 [39]. Если же использовать для оценки интеграла (8) действие кулоновского типа, то вместо (11) получим [40]:

$$E_0 = -25\alpha^2/256 = -0{,}098\alpha^2.$$

Обобщение аппроксимации Фейнмана на случай отличного от нуля импульса системы. Как видно из (11), аппроксимация Фейнмана дает блестящую оценку для энергии основного уровня поляронной системы при равном нулю импульсе. Однако непосредственное применение метода Фейнмана к интегралу (8) при $\mathbf{P} \neq 0$ не позволяет получить разумного ответа для эффективной массы системы. В связи с этим высказывалось утверждение [4], что невозможно построить вариационный принцип, который учитывал бы сохранение полного импульса системы.

Были предприняты попытки получить выражение для массы полярона в рамках техники континуального интегрирования, рассматривая те или иные объекты, вообще не содержащие импульса системы. Характерна в этом отношении работа [41], в которой массу полярона определяли из сравнения координатных представлений матриц плотности поляронной системы и свободной частицы. Общий недостаток такого рода подходов — зависимость определения массы полярона от вычислительной схемы, привлекаемой для решения задачи.

Ниже покажем, что возможно обобщение метода Фейнмана на случай неравного нулю импульса системы, при этом масса полярона определяется совершенно строго и однозначно как соответствующий коэффициент в разложении энергии системы по степеням импульса (7). Наше наблюдение основано на том, что аппроксимация (10) не отражает свойств трансляционной инвариантности системы. Действительно, в действии (10) не отражено то обстоятельство, что перемещение потенциальной ямы, захватившей частицу, должно происходить в соответствии с законом сохранения полного импульса системы **P**.

Будем поэтому рассматривать переменную $\mathbf{x}(s)$ в (10) как отклонение от движения системы со средней скоростью $i\boldsymbol{\lambda} = i\mathbf{P}/M$. Появление мнимой единицы связано с использованием нами мнимого времени $\exp(-\tau H)$ вместо $\exp(i\tau H)$. Параметр M, фиксирующий среднюю скорость трансляционного перемещения потенциальной ямы, будет определен ниже. Таким образом, вместо (10) выбираем в качестве аппроксимирующего действия [33]:

$$S'[\mathbf{x};\boldsymbol{\lambda}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau (\dot{\mathbf{x}} - i\boldsymbol{\lambda})^2\,ds - \frac{C\mu}{2}\int_0^\tau ds_1\,ds_2 \times$$
$$\times \exp(-W\,|s_1 - s_2|)\,[\mathbf{x}(s_1) - \mathbf{x}(s_2) - i\boldsymbol{\lambda}(s_1 - s_2)]^2. \qquad (12)$$

Использование в (9) в качестве аппроксимирующего действия S' функционала $S'[\mathbf{x};\boldsymbol{\lambda}]$ дает для основного уровня системы некоторую оценку $\mathscr{E}(\mathbf{P};\boldsymbol{\lambda})$. Подчеркнем, что выражение $\mathscr{E}(\mathbf{P};\boldsymbol{\lambda})$ будет оценкой сверху лишь при $\mathbf{P} = 0$. При отличном от нуля импульсе системы вследствие комплексности действий (8) и (12) неравенство (9) несправедливо. При $\mathbf{P} \neq 0$ используем аппроксимацию Фейнмана с действием $S'[\mathbf{x};\boldsymbol{\lambda}]$ для приближенного вычисления эффективной массы системы, в то время как для энергии основного уровня при $\mathbf{P} = 0$ мы получаем из (9) оценку сверху.

Перейдем теперь к выводу условия, фиксирующего параметр $\boldsymbol{\lambda}$. В соответствии с представлением (12) считаем, что вектор $\boldsymbol{\lambda}$ — средняя скорость трансляционного перемещения системы как целого. Но именно такой смысл имеет неопределенный множитель Лагранжа в соответствующей задаче на условный экстремум при дополнительном условии постоянства полного импульса системы **P**, т. е. параметр $\boldsymbol{\lambda}$ определяется из условия

$$\partial\tilde{\mathscr{E}}/\partial\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{P} - c\text{-число}, \qquad (13)$$

где $\tilde{\mathscr{E}}(\boldsymbol{\lambda})$ соответствующий уровень энергии гамильтониана $\tilde{H} = H + \boldsymbol{\lambda}\mathbf{P}$ [26, 28, 42]. В силу очевидного соотношения $\mathscr{E}(\mathbf{P};\boldsymbol{\lambda}) = \tilde{\mathscr{E}}(\mathbf{P};\boldsymbol{\lambda}) - \mathbf{P}\boldsymbol{\lambda}$ условие (13) эквивалентно соотношению

$$\partial\mathscr{E}/\partial\boldsymbol{\lambda} = 0, \qquad (14)$$

из которого и определяется параметр λ, фигурирующий в (12). Таким образом, можно считать, что именно условие (14) фиксирует λ в (12) как среднюю скорость поступательного движения системы как целого.

Непосредственные вычисления с действием $S'[\mathbf{x};\lambda]$, данные в работе [33], приводят к результату

$$\begin{gathered}\mathscr{E}(\mathbf{P};\lambda)=E_0+\mathbf{P}\lambda-(\mu\lambda^2/2)(1+B)+O(P^3);\\ E_0\equiv\mathscr{E}(P=0);\\ \lambda_0=\mathbf{P}/\mu(1+B),\end{gathered}\tag{15}$$

откуда находим [33, 46]:

$$\begin{gathered}\mathscr{E}(\mathbf{P})=E_0+\mathbf{P}^2/2m_{\text{эф}}+O(\mathbf{P}^3);\\ m_{\text{эф}}=\mu(1+B).\end{gathered}\tag{16}$$

Здесь

$$E_0=\frac{3}{4}\frac{(V-W)^2}{V}-g^2\Sigma\,|A_k|^2\int\limits_0^\infty d\sigma\exp(-\omega\sigma)\exp\left\{-\frac{\mathbf{k}^2}{2\mu V^2}F(\sigma)\right\}\tag{17}$$

дает оценку сверху для основного уровня энергии системы E_0:

$$F(\sigma)=W^2\sigma+[(V^2-W^2)/V](1-\exp(-V\sigma));\quad V^2=W^2+4C/W;$$

$$B=\frac{g^2}{3\mu}\Sigma\,|A_k|^2\,\mathbf{k}^2\int\limits_0^\infty d\sigma\sigma^2\exp(-\omega\sigma)\exp[(-\mathbf{k}^2/2\mu V^2)F(\sigma)].$$

Минимизируя (17) по параметрам V и W и подставляя экстремальные значения параметров в (16), можно получить выражение для основного уровня энергии и эффективной массы при произвольных значениях константы связи частицы с полем. В частности, для слабой связи имеем выражения, приведенные во Введении. Для сильной же связи частицы с полем для эффективной массы найдем [33, 46]:

$$m_{\text{эф}}=\mu\,(16\alpha^4/81\pi^2),$$

а для энергии основного уровня выражение (11). Сравнение этих результатов с численными, найденными по теории Боголюбова, дано в [43]; установлено достаточно хорошее согласие.

Развитый выше подход непосредственно обобщается на задачу о связанном состоянии двух поляронов, обменивающихся квантами скалярного поля. Соответствующий гамильтониан имеет вид:

$$\begin{gathered}H=-\frac{1}{2\mu}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)+g\Sigma A_k a_{\mathbf{k}}[\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_1)+\exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_2)]+\\ +g\Sigma A_k^* a_{\mathbf{k}}^+[\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_1)+\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_2)]+\Sigma\omega_k a_{\mathbf{k}}^+a_{\mathbf{k}}.\end{gathered}$$

В качестве аппроксимирующего действия используем следующее обобщение действия (12):

$$S' = S'[\mathbf{x}_1;\ \lambda] + S'[\mathbf{x}_2;\ \lambda] + S'_{\text{вз}}[\mathbf{x}_1;\ \lambda] + S'_{\text{вз}}[\mathbf{x}_2;\ \lambda], \tag{18}$$

где $S'[\mathbf{x}_i;\ \lambda]$ дается соотношением (12); $S'_{\text{вз}} = -\mathscr{K}/2\int\limits_0^\tau (\mathbf{x}_i - i\lambda s)^2\, ds$, причем параметр $\mathscr{K}$ регулирует интенсивность фононного обмена между частицами.

Результаты вычислений таковы [44]:

слабая связь ($\alpha \ll 1$)

$$\tilde{E}_0 = 2E_0 + \Delta E;\quad \Delta E = -0{,}65\alpha^2\omega;$$

$$\tilde{m}_{\text{эф}} = 2m_{\text{эф}} + \Delta m;\quad \Delta m = 0{,}27\alpha^2\mu;$$

сильная связь ($\alpha \gg 1$)

$$\tilde{E}_0 = 4\,(2E_0);\quad \tilde{m}_{\text{эф}} = 16\,(2m_{\text{эф}}).$$

Видно, что интенсивное взаимодействие частиц за счет фононного обмена приводит к тому, что структуры частиц перекрываются, трансформируясь в новую квазичастицу с внутренней энергией $\tilde{E}_0$ и массой $\tilde{m}_{\text{эф}}$.

Отметим также, что использование действия со сдвинутым аргументом (12), (18) вполне согласуется с выводом, следующим из теории Боголюбова — Тавхелидзе, о том, что в результате сильной связи частицы с полем возникают потенциалы со сдвинутым аргументом, причем сдвиг отражает квантовые флуктуации [11, 45].

Таким образом, из примеров, рассмотренных выше, следует, что последовательный учет трансляционной инвариантности системы, как и в теории Боголюбова, приводит к естественному разбиению координаты частицы на трансляционную и флуктуационную части. При этом квантовые флуктуации координаты частицы, обусловленные ее взаимодействием с облаком виртуальных фононов, ответственны за образование у частицы определенной структуры. Для сильного электрон-фононного взаимодействия эта структура, как видно из (12), (18), моделируется потенциалом осцилляторного типа, что указывает на когерентную природу вектора состояния системы.

2. ПОЛЯРОН ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Выше на основе функционального вариационного метода были исследованы характеристики поляронного состояния — внутренняя энергия полярона E_0 и его эффективная масса $m_{\text{эф}}$. Теперь перейдем к изучению эффектов, связанных с явным проявлением поляронной структуры. Можно ожидать, что структура полярона проявится при изучении взаимодействий, нарушающих трансляционную инвариантность поляронной системы, например при наложении на поляронную систему слабого внешнего поля.

Система полярон во внешнем поле $V(\mathbf{r})$ описывается гамильтонианом

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \tag{19}$$

где H_0 — гамильтониан поляронной системы, определяемый формулой (1). В частном случае кулоновского потенциала $V(\mathbf{r}) = -\beta/r$, задача об определении энергии связанной системы (19) исследована в рамках различных подходов. В работах [47—49] развита теория возмущений по константе связи электрон-фононного взаимодействия α и приведены оценки на сдвиг ΔE энергии системы при включении слабого электрон-фононного взаимодействия. Платцман [50] для оценки энергии основного состояния системы (19) применил вариационный метод Фейнмана с аппроксимирующим действием гауссова вида. Использование в качестве аппроксимирующего действия кулоновского типа [40] дает результаты, близкие к результатам Платцмана. В дальнейшем задачу (19) исследовали и с помощью вариационных методов, не опирающихся на технику континуального интеграла [51, 52]. Однако следует подчеркнуть, что в рамках техники континуального интеграла получаем оценку на энергию системы, справедливую при любых соотношениях между константами связи α и β.

Ниже покажем, что некоторая модификация вариационного метода, основанного на использовании аппроксимирующего действия (12), позволяет исследовать задачу о поведении полярона в произвольном слабом внешнем поле, не способном разрушить структуру полярона. Тем самым на примере этой задачи удается проследить эффекты явного проявления структуры сложной частицы — полярона.

Итак, будем исходить из гамильтониана вида (19). Так как внешний потенциал $V(\mathbf{r})$ нарушает трансляционную инвариантность системы, величина $G_0(\tau) = \langle 0 \mid \exp(-\tau H) \mid 0 \rangle$ в пределе $\tau \to \infty$ дает не основной уровень энергии, как это было в (6), а некоторый эффективный гамильтониан $H_{\text{эф}}$, являющийся оператором по переменной $\mathbf{r}$:

$$G_0(\tau) \xrightarrow[\tau\to\infty]{} \exp(-\tau H_{\text{эф}}).$$

Для оператора $G_0(\tau)$ можно получить континуальное представление [53]:

$$G_0(\tau) = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=0} \frac{\delta\mathbf{x}}{\text{const}} \exp[\nabla_{\mathbf{r}}\mathbf{x}(\tau)] \exp\Big[-\frac{\mu}{2}\int\limits_0^\tau \dot{x}^2\,ds\Big] \times$$

$$\times \exp\left[-\int_0^\tau V(\mathbf{r}-\mathbf{x}(s))\,ds\right]\exp\left[g^2\Sigma\mid A_k\mid^2\int_0^\tau ds_1\times\right.$$
$$\left.\times\int_0^{s_1} ds_2 \exp\{-\omega_k(s_1-s_2)-i\mathbf{k}[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)]\}\right]. \qquad (20)$$

Для того чтобы к (20) можно было бы применить изложенный выше вариационный метод, введем в это представление упорядочивающий индекс s и запишем $G_0(\tau)$ в виде T-экспоненты:

$$G_0(\tau)=T\int_{\mathbf{x}(0)=0}\frac{\delta\mathbf{x}}{\text{const}}\exp\left[-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\,ds-\frac{1}{2\mu}\int_0^\tau \mathbf{p}_s^2\,ds-\int_0^\tau V(\mathbf{r}_s)\,ds+\right.$$
$$+g^2\Sigma\mid A_k\mid^2\int_0^\tau ds_1\int_0^{s_1} ds_2\exp[-\omega_k(s_1-s_2)]\times$$
$$\left.\times\exp\left\{\frac{\mathbf{k}}{\mu}\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{p}_s\,ds-i\mathbf{k}[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)]\right\}\right],\quad p=-i\nabla_r. \qquad (21)$$

Легко видеть, что при $V(\mathbf{r})=0$ выражение (21) переходит в вакуумное среднее матрицы плотности свободной системы (8). Под знаком T-экспоненты переменные $\mathbf{p}_s$ и $\mathbf{r}_s$ можно считать c-числовыми функциями упорядочивающего индекса s.

Применим теперь к (21) функциональный вариационный метод с действием (12). Учитывая, что полный импульс $\mathbf{P}$ заменен теперь на функцию $\mathbf{p}_s$ под знаком T-экспоненты, заменим в аппроксимирующем действии (12) постоянный вектор средней скорости квазичастицы $\lambda=\mathbf{P}/M$ на функцию $\lambda_s=\mathbf{p}_s/M$, характеризующую отклонение в движении полярона от прямолинейного и равномерного. В результате приходим к выражению [33]:

$$G_0(\tau)=T\exp\left\{-\frac{1}{2\mu}\left(1-\frac{\mu^2}{M^2}\right)\int_0^\tau \mathbf{p}_s^2\,ds-\right.$$
$$-\int_0^\tau V(\mathbf{r}_s)\,ds-\frac{3}{4}\tau\frac{(V-W)^2}{V}+g^2\Sigma\mid A_k\mid^2\int_0^\tau ds_1\int_0^{s_1}ds_2\times$$
$$\times\exp[-\omega_k(s_1-s_2)]\exp[-(k^2/2\mu V^2)F(\mid s_1-s_2\mid)]\times$$
$$\left.\times\exp\left[\frac{\mathbf{k}}{\mu}\left(1+\frac{\mu}{M}\right)\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{p}_s\,ds\right]\right\}. \qquad (22)$$

Если потенциал равен нулю, что может происходить на больших расстояниях от его минимума, то имеем свободный полярон, в силу чего величины M, V и W определяются параметрами свободного поляронного состояния E_0 и $m_{эф}$, задаваемыми соотношениями (16) и (17). С учетом этих соотношений перепишем (22) в следующем виде:

$$G_0(\tau) = T\exp\left\{-\frac{1-\mu/2m_{эф}}{m_{эф}}\int_0^\tau ds\mathbf{p}_s^2 - \int_0^\tau V(\mathbf{r}_s)\,ds - \tau E_0 + \right.$$
$$+ g^2\Sigma\,|A_k|^2\int_0^\tau ds_1\int_0^{s_1} ds_2 \exp\left[-\omega_k(s_1-s_2) - \frac{\mathbf{k}^2}{2\mu V^2}F(|s_1-s_2|)\right]\times$$
$$\left.\times\left[\exp\left[\frac{\mathbf{k}}{m_{эф}}\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{p}_s\,ds\right]-1\right]\right\}, \qquad (23)$$

где m и E_0 — эффективная масса и энергия свободного полярона, определенные выражениями (16) и (17). Теперь осталось лишь снять T-упорядочивание в формуле (23) и перейти к пределу $\tau\to\infty$.

Будем предполагать, что поляронная структура не разрушается из-за взаимодействия с полем $V(\mathbf{r})$, т. е. что полярон выступает по отношению к внешним полям как единая частица с вполне определенными характеристиками (E_0 и $m_{эф}$). Иными словами, будем решать задачу для случая, когда потенциал не настолько силен, чтобы разорвать связь частицы с квантованным полем. В этом случае импульс полярона мал и почти сохраняется, т. е. функция $\mathbf{p}_s \approx \mathrm{const}$. Заметим также, что в пределе $\tau\to\infty$ основную роль в интеграле $\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{p}_s\,ds$ в (23) играет область $s_1\sim s_2$. Тогда сможем вынести $\mathbf{p}_s$ из-под интеграла в какой-нибудь точке, например s_1:

$$\int_{s_2}^{s_1}\mathbf{p}_s\,ds \to \mathbf{p}_{s_1}(s_1-s_2). \qquad (24)$$

Подставляя (24) в (23), раскладывая затем экспоненту в (23) до членов порядка $O(\mathbf{p}_s^2)$ и переходя к пределу $\tau\to\infty$, получаем [33]:

$$G_0(\tau) = T\exp\left\{-\tau E_0 - \int_0^\tau V(\mathbf{r}_s)\,ds - \frac{1}{2m_{эф}}\int_0^\tau ds\mathbf{p}_s^2\times\right.$$
$$\times\left[2-\frac{\mu}{m_{эф}}\left(1+\frac{1}{3\mu}g^2\Sigma\,|A_k|^2\mathbf{k}^2\int_0^\infty d\sigma\sigma^2\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\left.\times\exp\left(-\omega_k\sigma - \frac{\mathbf{k}^2F(\sigma)}{2\mu V^2}\right)\right)\right]\right\}. \qquad (25)$$

Учитывая выражение (16) для эффективной массы, видим, что сомножитель в квадратной скобке в (25) равен единице, т. е.

$$G_0(\tau) \approx \exp(-\tau H_{\text{эф}}); \quad H_{\text{эф}} = -\frac{\Delta}{2m_{\text{эф}}} + V(\mathbf{r}) + E_0. \tag{26}$$

Таким образом, из этой формулы следует, что электрон, взаимодействующий с колебаниями кристаллической решетки, ведет себя в слабом внешнем поле как некоторая квазичастица с внутренней энергией E_0 и эффективной массой $m_{\text{эф}}$.

Чтобы найти основной уровень энергии связанного полярона, необходимо теперь решить уравнение Шредингера с гамильтонианом $H_{\text{эф}}$. Выбирая в качестве $V(\mathbf{r})$ кулоновский потенциал $V(\mathbf{r}) = -\beta/r$, получаем сразу же для основного уровня энергию $\widetilde{E}_0$ в виде:

$$\widetilde{E}_0 = E_0 - \frac{m_{\text{эф}}\beta^2}{2} \tag{27}$$

или

$$\left.\begin{aligned} \widetilde{E}_0 &= -\alpha\omega - \frac{\beta^2\mu}{2}\left(1 + \frac{\alpha}{6}\right), \quad \alpha \ll 1; \\ \widetilde{E}_0 &= -\frac{\alpha^2\omega}{3\pi} - \mu\beta^2\frac{8\alpha^4}{81\pi^2}, \quad \alpha \gg 1. \end{aligned}\right\} \tag{28}$$

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

$$\widetilde{E}_0 = -\mu\beta^2/2 + O(\alpha). \tag{29}$$

Качественно эта формула подтверждается расчетами работы [50], посвященной исследованию связанного состояния полярона в кулоновском потенциале. В случаях же, описанных формулами (28), получаются аналогичные выражения, отличающиеся от наших заменой $\beta^2/2 \to \beta^2(4/3\pi)$, что связано с фактическим применением вариационного метода к решению уравнения Шредингера, в то время как мы использовали его точное решение (27).

Рассеяние полярона внешним полем. В качестве второго примера, иллюстрирующего эффекты проявления поляронной структуры, изучим зависимость амплитуды рассеяния полярона во внешнем поле от его структуры. Гамильтониан системы по-прежнему задается соотношением (19). Задачу о рассеянии полярона внешним полем удобно решать, если использовать формализм стационарной теории рассеяния, базирующийся на двух операторах —

функции Грина системы G и операторе рассеяния T, связанных соотношением

$$G = G_0 + G_0 T G_0, \tag{30}$$

где G_0 — 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.

Если обозначить $|\chi(p)|^2$ значение вычета функции Грина поляронной системы $G_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}; E)$ при $E \to \mathscr{E}_0(p) = \mathscr{E}_0(q)$ *:

$$G_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \delta_{\mathbf{pq}} |\chi(p)|^2 / [\mathscr{E}_0(\mathbf{p}) - E], \quad E \to \mathscr{E}_0(\mathbf{p}),$$

то амплитуда рассеяния полярона внешним полем, соответствующая переходу основного состояния поляронной системы опять в основное, имеет вид [54]:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \lim_{E \to \mathscr{E}_0(\mathbf{p}) = \mathscr{E}_0(\mathbf{q})} (\mathscr{E}_0(\mathbf{p}) - E)(\mathscr{E}_0(\mathbf{q}) - E) \times$$
$$\times \frac{m_{\text{эф}}}{2\pi} \frac{1}{|\chi(p)|^2} G_{\text{Б}}^{\text{int}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \tag{31}$$

где $G_{\text{Б}}^{\text{int}} = G_{\text{Б}} - G_0$. Мы рассматриваем амплитуду рассеяния в борновском приближении, потому что рассеяние полярона как единого структурного объекта имеет смысл рассматривать лишь в слабых внешних полях, не способных разрушить поляронное состояние.

Для $G_{\text{Б}}^{\text{int}}$ можно получить континуальное представление [54]:

$$G_{\text{int}}^{\text{Б}} = -\int_0^\infty d\tau\, d\sigma \exp\left\{-\tau\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - E\right) - \sigma\left(\frac{\mathbf{q}^2}{2\mu} - E\right)\right\} \times$$
$$\times \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{r}(\mathbf{p} - \mathbf{q})] \int_{\mathbf{x}(0)=0} \frac{\delta \mathbf{x}}{\text{const}} \exp\left\{-\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\, ds + \right.$$
$$+ \frac{\alpha\omega^{3/2}}{4\sqrt{2\mu}\,\pi^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2} \int_{-\sigma}^{\tau} d\sigma_1\, d\sigma_2 \exp(-\omega|\sigma_1 - \sigma_2|) \times$$
$$\left. \times \exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{x}(\sigma_1) - \mathbf{x}(\sigma_2)]\} \exp\left[-\frac{\mathbf{k}}{\mu}\int_{\sigma_2}^{\sigma_1} \mathbf{a}(\eta)\, d\eta\right]\right\}, \tag{32}$$

где $\mathbf{a}(\eta) = \mathbf{p}\theta(\eta) + \mathbf{q}\theta(-\eta)$.

---

* Здесь $\mathscr{E}_0(\mathbf{p})$ — энергия основного состояния поляронной системы при фиксированном импульсе $\mathbf{p}$, определяемая соотношением (7):

$$\mathscr{E}_0(\mathbf{p}) = E_0 + \mathbf{p}^2/2m_{\text{эф}} + \ldots$$

Имея в виду, что вектор **a** (η) при $\eta \to \pm\infty$ переходит в импульс конечного или начального асимптотически свободных состояний, модифицируем аппроксимирующее действие (12), заменив в нем импульс полярона **P** на вектор **a** (η), т. е. введем аппроксимирующее действие

$$S'[\mathbf{x};\ \mathbf{a}] = -\frac{\mu}{2}\int_{-\sigma}^{\tau}\left(\dot{\mathbf{x}}+\frac{i}{M}\mathbf{a}\right)^2 ds -$$

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

где C и W — вариационные параметры, определяемые из минимума энергии асимптотически свободного поляронного состояния (7). Аппроксимируя функциональный интеграл (32) действием $S'[\mathbf{x};\ \mathbf{a}]$, получаем, что в борновском приближении рассеяние полярона потенциалом $V(\mathbf{r})$ сводится к рассеянию частицы массы $m_{эф}$ на сглаженном потенциале [54, 55]

$$V_{эф}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\rho)^{3/2}}\int d\mathbf{r}_1 V(\mathbf{r}_1)\exp\left[-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)^2}{2\rho}\right],$$

где ρ — некоторая функция параметров задачи:

$$\rho = \begin{cases} \alpha/24\omega\mu, & \alpha \ll 1; \\ 1/2\omega m_{эф}, & \alpha \gg 1. \end{cases}$$

Отметим, что сглаживание потенциала $V(\mathbf{r})$ вследствие существования у частицы определенной структуры приводит к некоторому повышению энергии связи частицы в поле $V_{эф}(\mathbf{r})$ по сравнению с энергией связи частицы в поле $V(\mathbf{r})$. В частности, если $V(\mathbf{r}) = -\beta/r$ — кулоновский потенциал, то $V_{эф}(\mathbf{r}) = -\beta/r \times \Phi(r/\sqrt{2\rho})$, где $\Phi(x)$ — функция ошибок, и основной уровень энергии частицы массы $m_{эф}$ поднимается в потенциале $V_{эф}(\mathbf{r})$ по сравнению с кулоновским потенциалом $-\beta/r$ на величину $\Delta E = 4m_{эф}^3\beta^4\rho + O(\rho^{3/2})$, где учтено, что $\rho \ll 1$.

Таким образом, можно заключить, что функциональный вариационный метод применим и к исследованию систем с нарушенной трансляционной симметрией при условии, что квазичастица не разрушается внешним воздействием. В основе метода лежит выделение из координаты частицы слагаемого, описывающего перемещение квазичастицы (полярона) как целого; накладывающиеся же на это движение флуктуации ответственны за образование у частицы определенной структуры.

3. РАЗЛОЖЕНИЯ ПО ОБРАТНЫМ СТЕПЕНЯМ ТЕМПЕРАТУРЫ В МОДЕЛИ ПОЛЯРОНА

Выше полярон изучали как квантовомеханическую систему, т. е. при нулевой температуре. Ниже полярон будем рассматривать при температуре, отличной от нуля, т. е. как квантовостатистическую систему. Поясним прежде всего, в чем состоит отличие в определении характеристик полярона при нулевой и ненулевой температуре.

При нулевой температуре поляронная система описывается чистым состоянием, характеризуемым определенными значениями полного импульса $\mathbf{P}$ и энергии системы $\mathscr{E}$. Если теперь кристалл с находящейся в нем частицей поместить в термостат при фиксированной температуре, то такая система будет описываться уже не чистым, а смешанным состоянием, в силу чего можно говорить только о средних (по ансамблю) значениях наблюдаемых величин (например, энергии и импульса).

При температуре кристалла, отличной от нулевой, частица взаимодействует с виртуальными и с реальными возбуждениями поля, причем именно взаимодействие с реальными фононами приводит к установлению в системе состояния термодинамического равновесия, которое мы только и будем рассматривать в дальнейшем. При нулевой температуре все реальные фононы «заморожены», флуктуации термодинамических наблюдаемых исчезают и полярон описывается некоторым квантовомеханическим состоянием. Для температуры, отличной от нуля, зависимость среднего числа реальных фононов от температуры приводит к зависимости от температуры средней энергии и эффективной массы полярона.

Впервые характеристики полярона как функции температуры были рассмотрены в работах [56—58]. Все эти работы объединяет общая идея, которая состоит в попытке прямого обобщения квантовополевых подходов, применявшихся к решению данной задачи при нулевой температуре, на случай температуры системы, неравной нулю. Характерным в этом смысле является выбор в рамках теории возмущений в качестве первого приближения к вектору состояния системы состояния с определенным числом фононов. Энергетический уровень системы $E(\mathbf{P}, \{n_\mathbf{k}\})$ зависит от чисел заполнения фононов $n_\mathbf{k}$. Обычная процедура состоит в замене чисел заполнения $n_\mathbf{k}$ на их термодинамические средние $\bar{n}_\mathbf{k}(\theta)$, зависящие от температуры θ. Такая замена, вообще говоря, необоснована и, более того, неоднозначна [59]. Например, возможны два «температурных варианта» метода промежуточной связи Ли, Лоу, Пайнса [7], которые дают противоречащие друг другу результаты [59].

Средняя энергия поляронной системы. Так как поляронная система при отличной от нуля температуре описывается, как уже отмечалось выше, не чистым, а смешанным состоянием, имеет смысл рассматривать лишь средние значения наблюдаемых величин, в частности среднюю энергию системы. Впервые средняя энергия поляронной системы как функция температуры была изучена в [60, 61]. Средняя энергия полярона при любых температурах в первом порядке теории возмущений получена в [60]. В [61] применен вариационный метод оценки средней энергии, что позволило выйти за рамки теории возмущений в сторону больших значений константы связи.

Поляронная система при ненулевой температуре исследуется с помощью статистической суммы $Z = \mathrm{Sp}\exp(-\tau H)$, которая заменяет вакуумное среднее $\langle 0 \mid \exp(-\tau H) \mid 0 \rangle$, использованное ранее при изучении поляронного состояния при нулевой температуре. Статистическая сумма системы позволяет определить все ее характеристики, в частности среднюю энергию:

$$\mathscr{E} = -\frac{\partial}{\partial\tau}\ln \mathrm{Sp}\exp(-\tau H) = \frac{\mathrm{Sp}\,[H\exp(-\tau H)]}{\mathrm{Sp}\exp(-\tau H)},$$

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

Используя технику континуального интегрирования, можно получить для статистической суммы системы представление [36]:

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

Здесь

$$Z_0 = V\left(\frac{\mu}{2\pi\tau}\right)^{3/2}\prod_{\mathbf{k}} 1/[1-\exp(-\tau\omega_k)] \qquad (33)$$

— произведение статистических сумм свободной частицы и квантованного поля.

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

$$Z_{\mathrm{int}} = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)} \frac{\delta\mathbf{x}}{N}\exp(S[\mathbf{x}]).$$

где

$$S[\mathbf{x}] = -\frac{\mu}{2}\int\limits_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\,ds + \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\pi^2}\int\frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2}\times$$

$$\times\int\limits_0^\tau ds_1\,ds_2\exp\{-i\mathbf{k}[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)]\}\,G_\omega(|s_1-s_2|);$$

$$G_\omega(|s_1-s_2|) = [\mathrm{ch}\,\omega(\tau/2-|s_1-s_2|)]/[2\omega\,\mathrm{sh}(\omega\tau/2)]; \qquad (34)$$

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

Имея в виду построение высокотемпературного разложения (малые τ) для Z_{int}, выполним в (34) последовательно следующие замены переменных интегрирования $s_i \to \tau s_i$, $\mathbf{x}(s\tau) \to \sqrt{\tau}\mathbf{x}(s)$, $\mathbf{k} \to \mathbf{k}/\sqrt{\tau}$, после чего получим:

$$\left.\begin{aligned} &Z_{\text{int}} = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(1)} \frac{\delta\mathbf{x}}{\tilde{N}} \exp(\tilde{S}[\mathbf{x}]);\\ &\tilde{S}[\mathbf{x}] = -\frac{\mu}{2}\int\limits_0^1 \dot{\mathbf{x}}^2\,ds + \frac{\alpha\beta^{5/2}}{2\sqrt{2\mu\pi^2}}\int \frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2}\times\\ &\times \int\limits_0^1 ds_1\,ds_2 \exp\{-i\mathbf{k}[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)]\} G_\beta(|s_1-s_2|);\\ &\beta = \omega\tau;\quad G_\beta = [\operatorname{ch}\beta(1/2-|s_1-s_2|)]/[2\beta\operatorname{sh}\beta/2]. \end{aligned}\right\} \qquad (35)$$

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

Имеем, таким образом, разложение

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

где член $O(\alpha^3)$ при малых β ведет себя как $\beta^{3/2}$, а Z_1 и Z_2 выражаются через функциональные интегралы гауссова типа, вычисление которых дает [62]:

$$Z_1 = \frac{\alpha\beta^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^1 d\sigma \frac{G_\beta(\sigma)}{\sqrt{\sigma(1-\sigma)}} = \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\beta^{3/2}\frac{I_0(\beta/2)}{\operatorname{sh}\beta/2}; \qquad (36)$$

$$Z_2 = \frac{2\alpha^2\beta^5}{\pi}\int\limits_0^1 d\sigma_1\,d\sigma_2\,G_\beta(\sigma_1)\,G_\beta(\sigma_2)\,\Theta(1-\sigma_1-\sigma_2)\times$$

$$\times\left\{\frac{1-\sigma_1-\sigma_2}{\sigma_1\sigma_2}\arcsin\sqrt{\frac{\sigma_1\sigma_2}{(1-\sigma_1)(1-\sigma_2)}} + \right.$$

$$\left. + 2\int\limits_0^{\sqrt{\frac{\sigma_1\sigma_2}{(1-\sigma_1)(1-\sigma_2)}}} \frac{dx}{x}\arcsin x\right\}. \qquad (37)$$

В пределе высоких температур ($\beta \to 0$) из (36), (37) получаем

$$\mathscr{E}_{\text{int}}/\omega = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{\text{int}} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta}}\left(\alpha + \alpha^2\frac{2\sqrt{\beta}}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\pi^2}{3} - \frac{\pi}{2} - \right.\right.$$

$$\left.\left. - \ln 2 - 1\right) + O(\beta)\right) = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta}}\left[\alpha + 0{,}029\sqrt{\beta}\,\alpha^2 + O(\beta)\right]. \quad (38)$$

Отметим, что выражение (36) и, следовательно, средняя энергия в первом порядке по α были получены в [60].

В работе [61] средняя энергия взаимодействия при высоких температурах оценена на основе вариационного метода, приводящего, как известно, к завышенному значению. В результате численного расчета было получено выражение

$$\mathscr{E}_{\text{int}}/\omega = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\beta}}\left[\alpha + 0{,}024\alpha^2\sqrt{\beta} + O(\beta)\right].$$

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

В пределе низких температур ($\beta \to \infty$) из (36), (37) имеем

$$\mathscr{E}_{\text{int}}/\omega = -\alpha - \alpha^2\left[\ln\frac{3+2\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{2}}{2}\right] + O(\alpha^3) =$$

$$= -\alpha - \left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 1{,}592 + O(\alpha^3),$$

результат, впервые полученный численно в [63] и в аналитическом виде с помощью вариационного метода в [75].

Исследование свойств высокотемпературного разложения для средней энергии показывает [62], что первые члены разложения Z_{int} по полуцелым степеням β определяются первыми членами разложения по константе связи α, и лишь в член $\sim\beta^{5/2}$ дадут вклад члены, пропорциональные разным степеням α (α и α^5). Можно поэтому считать, что для первых порядков эффективным параметром разложения является $\alpha\sqrt{\beta}$, и область применимости теории возмущений, таким образом, дается условием $\alpha\sqrt{\beta} \ll 1$. Наблюдение, что с повышением температуры сходимость разложений теории слабой связи улучшается и область применимости этой теории расширяется, было сделано еще в [60].

Эффективная масса полярона. Переходя к исследованию зависимости эффективной массы полярона от температуры, необходимо подчеркнуть, что существующие методы расчета поляронной массы при конечных температурах обоснованы недостаточно строго. Как правило, само определение эффективной массы полярона дается в рамках той или иной вычислительной схемы, привлекаемой для решения задачи (см., например, [64]). Поэтому прежде всего определим массу полярона, исходя из общих термодинамических соотношений, а затем перейдем к исследованию ее высокотемпературного поведения.

При нулевой температуре в системе нет реальных возбуждений, переносящих некоторую долю полного импульса, так что сохраняющийся полный импульс системы равен импульсу полярона. Поэтому в разложении (7) энергии системы по степеням импульса коэффициент при $\mathbf{P}^2$ можно принять за массу полярона при нулевой температуре. Однако при отличной от нуля температуре в системе существуют реальные фононы как взаимодействующие, так и невзаимодействующие с частицей. Эти фононы переносят определенную долю полного импульса системы. Обозначим $\mathbf{P}_f$ средний импульс, переносимый ими. Тогда на долю собственно полярона остается импульс $\mathbf{P} - \mathbf{P}_f$, так что за массу полярона при конечной температуре будем принимать коэффициент $m_{эф}$, входящий в член вида $(\mathbf{P} - \mathbf{P}_f)^2/2m_{эф}$ в выражении для средней энергии системы.

Для фактического определения поляронной массы перейдем от канонического распределения $\exp(-\tau H)$, используемого выше для определения средней энергии $\mathscr{E}$, к большому каноническому распределению $\exp(-\tau(H - \lambda\hat{\mathbf{P}}))$, которое соответствует фиксированию среднего импульса системы *. Следует отметить, что необоснованная замена распределения $\exp(-\tau(H - \lambda\hat{\mathbf{P}}))$ на микроскопическое по импульсу распределение $\exp(-\tau H)|\mathbf{P}\rangle\langle\mathbf{P}|$ приводит к неверному выражению для средней энергии покоящейся системы [65].

Вводя статистическую сумму

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

можно найти фактор λ из уравнения

$$\frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial\lambda}\ln Z = \mathbf{P} = \frac{\mathrm{Sp}\{\hat{\mathbf{P}}\exp\{-\tau(H-\lambda\hat{\mathbf{P}})\}\}}{\mathrm{Sp}\exp\{-\tau(H-\lambda\hat{\mathbf{P}})\}}, \tag{39}$$

где $\mathbf{P}$ — средний импульс системы, т. е. c-число. Параметр λ, как станет ясно ниже, пропорционален импульсу $\mathbf{P}$. Ограничимся здесь рассмотрением лишь медленно движущихся поляронов и будем использовать разложение $Z(\lambda)$ по степеням λ до членов порядка $O(\lambda^3)$.

Для статистической суммы $Z(\lambda)$ можно получить континуальное представление вида

$$Z(\lambda) = Z_0(\lambda) Z_{\mathrm{int}}(\lambda), \tag{40}$$

где $Z_0(\lambda) = \exp(\tau\mu\lambda^2/2) Z_0(\omega_k \to \omega_k - \lambda\mathbf{k})$, а статистическая сумма $Z_{\mathrm{int}}(\lambda)$ получается из Z_{int} заменой в (34) функции G_ω

* О том, что импульс полярона при конечной температуре не совпадает с импульсом системы, утверждается еще в [57].

на выражение

$$G_{\omega;\lambda}=G^{(1)}_{\omega;\lambda}+G^{(2)}_{\omega;\lambda};$$

$$G^{(1)}_{\omega;\lambda}(s_1-s_2)=(1/2\omega)\exp\left[-\omega|s_1-s_2|+\mathbf{k}\lambda(s_1-s_2)\right]; \tag{41}$$

$$G^{(2)}_{\omega;\lambda}(s_1-s_2)=\exp\left[-\omega(s_1-s_2)+\mathbf{k}\lambda(s_1-s_2)\right]/\omega\left(\exp\left[\tau(\omega-\mathbf{k}\lambda)\right]-1\right).$$

С другой стороны, статистическую сумму $Z(\lambda)$, по определению, можно записать в виде

$$Z(\lambda)=\sum_{\{n_\mathbf{k}\}}\langle\{n_\mathbf{k}\}\,|\overline{Z}(\lambda)|\{n_\mathbf{k}\}\rangle,$$

где суммирование проводят по всем возбуждениям поля, а $\overline{Z}(\lambda)$ означает шпур оператора $\exp\{-\tau(H-\lambda\hat{\mathbf{P}})\}$ только по переменным частицы. Первый член этой суммы $\overline{Z}_0\equiv\langle 0\mid\overline{Z}(\lambda)\mid 0\rangle$ соответствует отсутствию реальных возбуждений в системе и его можно представить континуальным интегралом (40), в котором опущен фактор $\prod_\mathbf{k} 1/1-\exp\left[-\tau(\omega-\mathbf{k}\lambda)\right]$ и произведена замена функции $G_{\omega;\lambda}$ на $G^{(1)}_{\omega;\lambda}$.

Представив статистическую сумму системы $Z(\lambda)$ в виде

$$Z(\lambda)=\overline{Z}_0(\lambda)\,Z_f(\lambda);\quad Z_f(\lambda)\equiv Z(\lambda)/\overline{Z}_0(\lambda), \tag{42}$$

получим из (39) следующие соотношения для определения параметра λ:

$$\mathbf{P}-\mathbf{P}_f=\lambda(\mu+m);\quad \mathbf{P}_f=\lambda\Delta m. \tag{43}$$

Здесь

$$m=\frac{\alpha\omega^{3/2}}{12\sqrt{2\mu\pi^2\tau}}\int d\mathbf{k}\int_0^\tau ds_1\,ds_2\exp\left(-\omega|s_1-s_2|\right)(s_1-s_2)^2\times$$
$$\times\langle\langle\exp\{i\mathbf{k}\left[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)\right]\}\rangle\rangle+$$
$$+\frac{\alpha^2\omega^3}{96\mu\pi^4\tau}\int\frac{d\mathbf{k}\,d\mathbf{q}}{\mathbf{k}^2\mathbf{q}^2}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}\int_0^\tau ds_1\,ds_2\,d\sigma_1\,d\sigma_2\exp\left(-\omega|s_1-s_2|-\right.$$
$$\left.-\omega|\sigma_1-\sigma_2|\right)(s_1-s_2)(\sigma_1-\sigma_2)\langle\langle\exp\{i\mathbf{k}\left[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)\right]+$$
$$+i\mathbf{q}\left[\mathbf{x}(\sigma_1)-\mathbf{x}(\sigma_2)\right]\}\rangle\rangle \tag{44}$$

и введено обозначение

$$\langle\langle A\rangle\rangle=\int\limits_{x(0)=x(\tau)}\delta\mathbf{x}\exp(S_1)\,A\Big/\int\limits_{x(0)=x(\tau)}\delta\mathbf{x}\exp(S_1),$$

причем S_1 получается из (34) заменой функции G_ω на $G^{(1)}_{\omega;\lambda=0}$.

Средний импульс, переносимый реальными фононами $\mathbf{P}_f$, определяется соотношением $\mathbf{P}_f=\dfrac{1}{\tau}\dfrac{\partial}{\partial\lambda}\ln Z_f(\lambda)$ и для массы Δm, входящей в (43), можно получить континуальное представление, аналогичное (44).

Используя определение средней энергии системы

$$\mathscr{E}(P)=\frac{\operatorname{Sp} H \exp[-\tau(H-\lambda\hat{\mathbf{P}})]}{\operatorname{Sp}\exp[-\tau(H-\lambda\hat{\mathbf{P}})]}=-\frac{\partial}{\partial\tau}\ln Z(\lambda)+\mathbf{P}\left(\lambda+\tau\frac{\partial\lambda}{\partial\tau}\right),$$

получаем из (40), (43):

$$\mathscr{E}(\mathbf{P})=\mathscr{E}(0)+\frac{(\mathbf{P}-\mathbf{P}_f)^2}{2}\frac{\mu+m-\tau\dfrac{\partial m}{\partial\tau}}{(\mu+m)^2}+\frac{\mathbf{P}_f^2}{2}\frac{\Delta m-\tau\dfrac{\partial\Delta m}{\partial\tau}}{(\Delta m)^2}. \quad (45)$$

На основании представления (45) отождествляем коэффициент при члене $(\mathbf{P}-\mathbf{P}_f)^2$ с эффективной массой полярона при конечной температуре:

$$m_{\text{эф}}=(\mu+m)^2/(\mu+m-\tau\partial m/\partial\tau). \quad (46)$$

Выполняя масштабные преобразования переменных интегрирования в (44), можно убедиться, как и для средней энергии, что высокотемпературные разложения $m_{\text{эф}}$ можно получить из соответствующих порядков теории возмущений. Легко найти, в частности, что при $\alpha\to 0$ [62]:

$$\frac{m_{\text{эф}}}{\mu}=1+\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{6}\beta^{3/2}\exp(-\beta/2)\times$$
$$\times\left[I_0(\beta/2)\left(\frac{5}{2}-\beta\right)-I_1(\beta/2)\left(\frac{3}{2}-\beta\right)\right]+O(\alpha^2).$$

В пределе высоких температур $\beta\to 0$

$$m_{\text{эф}}/\mu=1+(5/12)\sqrt{\pi}\alpha\beta^{3/2}+O(\beta^{5/2}).$$

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 (44) дает:

$$\frac{m_{\text{эф}}}{\mu}=1+\frac{\alpha}{6}\left(1-\frac{45}{32}\frac{1}{\beta^2}\right)+$$
$$+\alpha^2\left[\frac{7}{36}-\frac{5}{8}\sqrt{2}+\frac{2}{3}\ln\frac{3+2\sqrt{2}}{2}\right]+O\left(\frac{\alpha^2}{\beta}\right),$$

что переходит при нулевой температуре в

$$\frac{m_{\text{эф}}}{\mu}=1+\frac{\alpha}{6}+\alpha^2\left[\frac{7}{36}-\frac{5}{8}\sqrt{2}+\frac{2}{3}\ln\frac{3+2\sqrt{2}}{2}\right]=$$
$$=1+\frac{\alpha}{6}+\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 2{,}362\,763.$$

Этот результат впервые получен численно в [63], а в аналитическом виде с помощью вариационного метода в [75].

Заметим, что, определяя эффективную массу как соответствующий коэффициент в свободной энергии системы $\ln Z(\lambda)$, придем вместо (46) к выражению $\mu + m$, которое в предельных случаях имеет вид (см. также [66]):

$$\mu\left(1+\frac{\alpha}{6}\sqrt{\pi}\beta^{3/2}\right), \quad \beta\to 0;$$

$$\mu\left(1+\frac{\alpha}{6}\left(1+\frac{3}{4\beta}\right)+\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 2{,}362\,763\right), \quad \beta\to\infty.$$

4. ПОЛЯРОН ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Значительную информацию о свойствах поляронной системы можно извлечь, исследуя ее реакцию на внешнее возмущение. Подчеркнем в связи с этим, что 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 адмитанса). Среди используемых методов наиболее фундаментален подход Н. Н. Боголюбова, основанный на обобщенном кинетическом уравнении электрон-фононной системы [67, 68]. Иной подход был использован в [69], где задачу о подвижности полярона решали с помощью приближенного вычисления фейнмановского интеграла по траекториям.

Выше была определена масса полярона, исходя из общих термодинамических соотношений. Однако известно, что массу системы можно определить и по ее реакции на слабое внешнее возмущение. Не ставя задачу о нахождении подвижности или функций отклика, мы интересуемся сдвигом средней энергии системы вследствие ее взаимодействия с постоянным электрическим полем. В слабых полях сдвиг средней энергии можно трактовать как следствие появления у частицы массы, зависящей от температуры.

Континуальное представление для статистической суммы системы. Гамильтониан поляронной системы, взаимодействующей с постоянным электрическим полем $\mathbf{E}$, имеет вид:

$$H = H_{\text{пол}} - \mathbf{E}\mathbf{r},$$

где $H_{\text{пол}}$ задан соотношением (1).

Для статистической суммы системы $Z(\mathbf{E}) = \operatorname{Sp}\exp(-\tau H)$ можно написать выражение

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

где Z_0 — статистическая сумма невзаимодействующей системы (33).

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

$$\tilde{Z}(\mathbf{E}) = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)} \delta\mathbf{x} \exp\left\{S[\mathbf{x}] + \mathbf{E}\int\limits_0^\tau \mathbf{x}\right\}; \tag{47}$$

здесь $S[\mathbf{x}]$ — действие поляронной системы (34). Отметим, что $\tilde{Z}(\mathbf{E})$ нормировано условием $\tilde{Z}(\mathbf{E})\mid_{\mathbf{E}=0,\alpha=0} = 1$.

Периодические граничные условия $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\tau)$ в (47) означают наличие в подынтегральном выражении δ-функции:

$$\delta[\mathbf{x}(0) - \mathbf{x}(\tau)] = \int d\mathbf{r}\, \delta(\mathbf{x}(0) - \mathbf{r})\delta(\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{r}). \tag{48}$$

Делая замену переменных $\mathbf{x}(s) \to \mathbf{x}(s) + \mathbf{r}$ и замечая, что поляронное действие $S[\mathbf{x}]$ при этом остается инвариантным, а из (48) возникают новые граничные условия $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\tau) = 0$, приходим к выражениям:

$$\left.\begin{aligned} Z(\mathbf{E}) &= Z_0\tilde{Z}_0(\mathbf{E})\, Z_{\text{int}}(\mathbf{E}); \\ \tilde{Z}_0(\mathbf{E}) &= \frac{1}{V}\int d\mathbf{r} \exp(\mathbf{E}\mathbf{r}\tau); \end{aligned}\right\} \tag{49}$$

$$Z_{\text{int}}(\mathbf{E}) \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0} \delta\mathbf{x} \exp\left\{S[\mathbf{x}] + \mathbf{E}\int\limits_0^\tau \mathbf{x}\right\}, \tag{50}$$

причем $Z_{\text{int}}(\mathbf{E})$ нормировано прежним условием обращения в единицу при равенстве нулю поля $\mathbf{E}$ и константы связи α.

Таким образом, в (49) выделили бесконечный множитель $Z_0\tilde{Z}_0(\mathbf{E})$, связанный с инфинитностью движения. При вычислении средней энергии $\mathscr{E} = -\frac{\partial}{\partial\tau}\ln Z(\mathbf{E})$ этот множитель приведет к аддитивной добавке, связанной со средней энергией частицы в постоянном электрическом поле $\mathbf{E}$ и свободного квантованного поля.

Поскольку реакция поляронной системы на внешнее возмущение определяется по сдвигу средней энергии системы при включении электрон-фононного взаимодействия, будем рассматривать в дальнейшем лишь среднюю энергию взаимодействия

$$\mathscr{E}_{\text{int}} = -\frac{\partial}{\partial\tau}\ln Z_{\text{int}}(\mathbf{E}).$$

При равной нулю константе связи частицы с полем функциональный интеграл в (50) можно вычислить сдвигом переменной $\mathbf{x}(s) \to \mathbf{x}(s) + \mathbf{x}_0(s)$:

$$Z_{\text{int}}(\mathbf{E})|_{\alpha=0} = \exp\left(\frac{1}{2}\mathbf{E}\int\limits_0^\tau \mathbf{x}_0\, ds\right),$$

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

$$\mu\ddot{\mathbf{x}}_0(s) + \mathbf{E} = 0;\ \mathbf{x}_0(0) = \mathbf{x}_0(\tau) = 0.$$

В итоге

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{x}_0(s) = (\mathbf{E}/2\mu)\, s\,(\tau - s);\ Z_{\text{int}}(\mathbf{E})|_{\alpha=0} = \exp[\mathbf{E}^2\tau^3/(24\,\mu)];\\ &\mathscr{E}_{\text{int}}|_{\alpha=0} = -\mathbf{E}^2\tau^2/8\mu. \end{aligned}\right\} \tag{51}$$

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

$$S'[\mathbf{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\,ds - \frac{\mu\Omega^2}{2}\int_0^\tau \mathbf{x}^2\,ds, \tag{52}$$

где частота Ω будет рассматриваться как вариационный параметр. Выбор такого S' продиктован соображениями простоты. В силу того что подынтегральное выражение в (50) трансляционно-неинвариантно, нет необходимости использовать трансляционно-инвариантное действие S', добавляя к (52) член вида $\left(\int_0^\tau \mathbf{x}\right)^2$. 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 [62], а масса системы нужна лишь с точностью до членов $\sim\alpha$, выбор действия (52) представляется оправданным.

Если применить аппроксимационную процедуру непосредственно к Z_{int} в форме (50), то из-за того, что $\left\langle \int_0^\tau \mathbf{x} \right\rangle = 0$, исчезнет зависимость от $\mathbf{E}$ *. Чтобы избежать этого, поступим следующим образом: используя метод вычисления $Z_{\text{int}}|_{\alpha=0}$, выполним в (50) преобразование $\mathbf{x}(s) \to \mathbf{x}(s) + \gamma\mathbf{x}_0(s)$, после чего получим

$$Z_{\text{int}}(\mathbf{E}) = \exp\left[\frac{\mathbf{E}^2\tau^3}{24\mu}\,\gamma(1-\gamma/2)\right]\times$$

$$\times \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0} \frac{\delta\mathbf{x}}{\text{const}} \exp\left\{\tilde{S} + \mathbf{E}(1-\gamma)\int_0^\tau \mathbf{x}\right\}; \tag{53}$$

---

* В этой части работы используем обозначение

$$\langle A\rangle = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0} \delta\mathbf{x}\,\exp(S')\,A \Big/ \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0} \delta\mathbf{x}\,\exp(S').$$

$$\widetilde{S}[\mathbf{x}] = -\frac{\mu}{2}\int_0^\tau \dot{\mathbf{x}}^2\,ds + \frac{\alpha\omega^{5/2}}{2\sqrt{2\mu}\pi^2}\int\frac{d\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2}\int_0^\tau ds_1\,ds_2\,G_\omega(|s_1-s_2|)\times$$
$$\times\exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{x}(s_1)-\mathbf{x}(s_2)] + i\gamma\mathbf{k}[\mathbf{x}_0(s_1)-\mathbf{x}_0(s_2)]\}. \qquad (54)$$

Здесь γ — произвольное число. Пока (50) и (53) тождественны. После выполнения аппроксимации они уже не идентичны и выберем γ наилучшим образом, рассматривая его как второй вариационный параметр. Так как функция $\mathbf{x}_0(s)$ описывает движение квазичастицы как целого в постоянном электрическом поле, этот метод по своей идее аналогичен подробно обсужденному выше функциональному вариационному подходу.

Аппроксимационная процедура выполняется известным образом (9):

$$\int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0}\delta\mathbf{x}\exp\left[\widetilde{S}+\mathbf{E}(1-\gamma)\int_0^\tau\mathbf{x}\right]\equiv$$
$$\equiv\int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0}\delta\mathbf{x}\exp(S')\left\langle\exp\left[\widetilde{S}-S'+\mathbf{E}(1-\gamma)\int_0^\tau\mathbf{x}\right]\right\rangle\approx$$
$$\approx\int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\tau)=0}\delta\mathbf{x}\exp(S')\exp\left[\left\langle\widetilde{S}-S'+\mathbf{E}(1-\gamma)\int_0^\tau\mathbf{x}\right\rangle\right].$$

В результате для свободной энергии $F_{\text{int}} = -\ln Z_{\text{int}}(\mathbf{E})$ и слабого поля $\mathbf{E}$ получаем [70]:

$$F_{\text{int}}(\mathbf{E}) = F_{\text{int}}(\mathbf{E}=0) + \Delta F_{\text{int}}; \qquad (55)$$

$$\left.\begin{aligned}
&F_{\text{int}}(\mathbf{E}=0) = \frac{3}{2}\ln\frac{\operatorname{sh}\Omega\tau}{\Omega\tau} - \frac{3}{4}\Omega\tau\operatorname{cth}\Omega\tau + \frac{3}{4} -\\
&-\frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\Omega\operatorname{sh}\Omega\tau}\int_0^\tau ds_1\,ds_2\,\frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1s_2)]^{1/2}};\\
&\Delta F_{\text{int}} = \gamma\left(\frac{\gamma}{2}-1\right)\frac{\mathbf{E}^2\tau^3}{12\mu} +\\
&+\gamma^2\frac{\mathbf{E}^2}{24\mu}\frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi}}(\Omega\operatorname{sh}\Omega\tau)^{3/2}\times\\
&\times\int_0^\tau ds_1\,ds_2\,\frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1s_2)]^{3/2}}(s_1-s_2)^2(\tau-s_1-s_2)^2;
\end{aligned}\right\} \qquad (56)$$

где

$$\Delta = \operatorname{ch}\Omega\tau - \operatorname{ch}\Omega(\tau-|s_1-s_2|) + \operatorname{ch}\Omega(\tau-s_1-s_2)[1-\operatorname{ch}\Omega(s_1-s_2)].$$

Минимизация ΔF_{int} по γ дает

$$\Delta F_{\mathrm{int}} = -\mathbf{E}^2\tau^3/[24\mu\,(1+\Gamma)], \tag{57}$$

откуда

$$\Delta\mathscr{E}_{\mathrm{int}} = \frac{\partial}{\partial\tau}\Delta F_{\mathrm{int}} = -\frac{\mathbf{E}^2\tau^2}{8\mu}\,\frac{1+\Gamma-\dfrac{\tau}{3}\dfrac{d\Gamma}{d\tau}}{(1+\Gamma)^2}. \tag{58}$$

В формулах (57), (58) мы обозначили

$$\Gamma = \frac{\alpha\omega^{5/2}}{\sqrt{\pi\tau^3}}\,(\Omega\,\mathrm{sh}\,\Omega\tau)^{3/2}\int\limits_0^\tau ds_1\,ds_2\,\frac{G_\omega(|s_1-s_2|)}{[\Delta(s_1,s_2)]^{3/2}}\,(s_1-s_2)^2\,(\tau-s_1-s_2)^2. \tag{59}$$

Из сравнения (58) и (51) видно, что сдвиг средней энергии поляронного взаимодействия в слабом внешнем поле можно трактовать как следствие появления у полярона некоторой массы m, зависящей от температуры:

$$m = \mu\,(1+\Gamma)^2\Big/\left(1+\Gamma-\frac{\tau}{3}\frac{d\Gamma}{d\tau}\right), \tag{60}$$

Масса m в силу существования в системе реальных возбуждений не совпадает с эффективной массой полярона $m_{\text{эф}}$, а характеризует реакцию поляронной системы как целого на внешнее возмущение; в частности, в ней отражено изменение структуры полярона при наложении электрического поля.

Определяя вариационный параметр Ω из минимума свободной энергии F_{int} ($\mathbf{E}=0$) поляронной системы в отсутствие внешнего поля и подставляя затем экстремальное значение Ω в (60), определим массу m.

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

$$F_{\mathrm{int}}(\mathbf{E}=0) = -\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{\beta^{3/2}}{\mathrm{sh}\,\beta/2}\,I_0(\beta/2); \tag{61}$$

$$m = \mu\left[1+\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{36}\,\frac{1}{\beta^2}\,\frac{d}{d\beta}\left(\frac{\beta^{7/2}}{\mathrm{sh}\,\beta/2}\,I_1(\beta/2)\right)\right]. \tag{62}$$

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

$$m = \mu\left[1+\frac{7\sqrt{\pi}}{144}\,\alpha\beta^{1/2}+\ldots\right].$$

В обратном случае низких температур ($\beta \to \infty$) формула (62) приводит к

$$m = \mu\,\{1+(\alpha/6)\,[1-(1/2\beta)]\},$$

что при нулевой температуре дает известный результат $m = \mu [1 + \alpha/6]$.

Отметим, что формулы (61) и (62) воспроизводят результаты первого порядка теории возмущений по константе связи [70]. Для сильной связи ($\alpha \gg 1$) параметр Ω также велик ($\Omega \sim \alpha^2$) и из (56) следует, что

$$(\Omega\tau)_{\text{мин}} = \frac{4}{9\pi}\alpha^2\beta.$$

Отсюда получаем известные соотношения для средней энергии полярона [61], а для массы системы (60) находим [70]:

$$m = \mu\frac{16\alpha^4}{81\pi^2}\frac{(1+(12/\beta^2)-(6/\beta)\operatorname{cth}(\beta/2))^2}{2-\operatorname{cth}^2(\beta/2)+(20/\beta^2)-(8/\beta)\operatorname{cth}(\beta/2)}. \tag{63}$$

При низких температурах ($\beta \to \infty$):

$$m = \mu\frac{16\alpha^4}{81\pi^2}\left(1 - \frac{6}{\beta}\right),$$

что переходит при нулевой температуре в известный фейнмановский результат $m = \mu\,(16\alpha^4/81\pi^2) \approx 200\mu\,(\alpha/10)^4$. При высоких температурах ($\beta \to 0$):

$$m = \mu\frac{16\alpha^4}{81\pi^2}\frac{\beta^2}{20}.$$

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

Если считать поле E сильным, то влияние электрон-фононного взаимодействия проявится лишь в поправках к основному члену. Вариационный метод дает для сдвига энергии

$$\Delta\mathscr{E}_{\text{int}} = -\frac{E^2\tau^2}{8\mu} + \frac{\alpha\omega^{5/2}\sqrt{2\mu}}{2E}\frac{1}{\operatorname{sh}^2\frac{\beta}{2}}\ln^2\frac{E\tau^{3/2}}{2\sqrt{2\mu}} + O\left(\frac{\ln E}{E}\right),$$

что воспроизводит результаты теории возмущений по константе связи α [70].

Задачу о поведении поляронной системы в однородном постоянном электрическом поле исследовали также в [71]. Автор этой работы использовал метод, идейно схожий с обсужденным выше вариационным методом, и получил результаты, близкие к результатам работы [70].

Масса m, как уже отмечалось, является несколько иной величиной, чем $m_{\text{эф}}$. Она определяет реакцию поляронной системы как целого на внешний потенциал. Поскольку m определяется по сдвигу средней энергии, в ней учтен вклад реальных фононов. Кроме того, из-за разной реакции системы на различные возмущения масса m может зависеть от вида и структуры внешнего возмущения [70, 72—74]. Однако следует подчеркнуть, что для предельно низких температур разница между m и $m_{эф}$ исчезает, что связано с замораживанием реальных фононов.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность Н. Н. Боголюбову и А. Н. Тавхелидзе за внимание к работе и ценные замечания, а также В. А. Матвееву, В. А. Мещерякову и В. К. Федянину за плодотворные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Боголюбов Н. Н.** Избранные труды. Т. 2. Киев, Наукова думка, 1970,
2. **Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл).** Сообщение ОИЯИ Р17-81-65. Дубна, 1981.
3. **Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S.**— Phil. Mag., 1950, v. 41, p. 221.
4. **Аппель Дж.** Поляроны.— В кн.: Поляроны. М., Наука, 1975.
5. **Пекар С. И.** Исследования по электронной теории кристаллов. М., Гостехтеориздат, 1951.
6. **Lee T. D., Pines D.**— Phys. Rev., 1952, v. 88, p. 960.
7. **Lee T. D., Low F.E., Pines D.**— Phys. Rev., 1953, v. 90, p. 297.
8. **de Dormale B., Bader G.**— Can. J. Phys., 1976, v. 54, p. 1613.
9. **de Dormale B., Bader G.**— Can. J. Phys., 1978, v. 56, p. 175.
10. **de Dormale B.**— Can. J. Phys., 1979, v. 57, p. 114.
11. **Солодовникова Е. П., Тавхелидзе А. Н., Хрусталев О. А.**— ТМФ, 1972, т. 10, с. 162.
12. **Солодовникова Е. П., Тавхелидзе А. Н., Хрусталев О. А.**— ТМФ, 1972, т. 11, с. 317.
13. **Солодовникова Е. П., Тавхелидзе А. Н., Хрусталев О. А.**— ТМФ, 1972, т. 12, с. 164.
14. **Солодовникова Е. П., Тавхелидзе А. Н.**— ТМФ, 1974, т. 21, с. 13.
15. **Тюрин Н. Е., Шургая А. В.**— ТМФ, 1973, т. 18, с. 197.
16. **Толстенков А. Н., Тюрин Н. Е., Шургая А. В.**— ТМФ, 1974, т. 19, с. 208.
17. **Шургая А. В.**— ТМФ, 1976, т. 28, с. 223.
18. **Архипов А. А., Тюрин Н. Е.**— ТМФ, 1973, т. 17, с. 57.
19. **Тюрин Н. Е., Хрусталев О. А.**— ТМФ, 1974, т. 20, с. 3.
20. **Семенов С. В., Тимофеевская О. Д., Тюрин Н. Е.**— ТМФ, 1974, т. 21, с. 201.
21. **Разумов А. В., Тимофеевская О. Д.**— ТМФ, 1976, т. 27, с. 163.
22. **Тимофеевская О. Д., Тюрин Н. Е., Шургая А. В.**— ТМФ, 1973, т. 17, с. 79.
23. **Семенов С. В.**— ТМФ, 1974, т. 18, с. 353.
24. **Шургая А. В.**— ТМФ, 1978, т. 34, с. 267.
25. **Федянин В. К., Юшанхай В. Ю.**— ТМФ, 1978, т. 35, с. 240.
26. **Gross E. P.**— Ann. Phys., 1976, v. 99, p. 1.
27. **Huybrechts W. J.**— J. Phys. C, 1976, v. 9, p. L211.
28. **da Providencia J.**— Ann. Phys., 1975, v. 91, p. 366.
29. **Griffin J., Wheeler J.**— Phys. Rev., 1957, v. 108, p. 311.
30. **Cahill K.**— Phys. Lett. B, 1975, v. 56, p. 275.
31. **Feynman R. P.**— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 660.
32. **Feynman R. P.**— Phys. Rev., 1951, v. 84, p. 108.
33. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.**— В кн.: Труды X Международной школы молодых ученых. Баку, 1976. ОИЯИ, Д2-10533, 1977.
34. **Кулешов С. П. и др.** — ЭЧАЯ, 1974, т. 5, вып. 1, с. 3.

35. **Кулешов С. П. и др.** Препринт ОИЯИ Р2-6937, Дубна, 1973.
36. **Фейнман Р.** Статистическая механика. Пер. с англ. М., Мир, 1975.
37. **Фейнман Р., Хибс А.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. Пер. с англ. М., Мир, 1968.
38. **Гельфанд И. М., Яглом А. М.**— УМН, т. XI, 1956, с. 77.
39. **Miyake S. J.**— J. Phys. Soc. Japan, 1975, v. 38, p. 181.
40. **Lukes T.**— J. Phys. A, 1975, v. 8, p. 1706.
41. **Sa-Yakanit V.**— Phys. Rev. B, 1979, v. 19, p. 2377.
42. **Hattori K.**— J. Phys. Soc. Japan, 1975, v. 39, p. 625.
43. **Schultz T. D.**— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 526.
44. **Кочетов Е. А. и др.**— ТМФ, 1977, т. 30, с. 183.
45. **Matveev V. A., Tavkhelidze A. N.**— Comm. JINR E2-5141, Dubna, 1970.
46. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.**— ТМФ, 1975, т. 25, с. 30.
47. **Fedoseyev V. G.**— Solid State Comm., 1976, v. 19, p. 569.
48. **Mitra T. K.**— J. Phys. C, 1978, v. 11, p. 4523.
49. **Mukhopadhyay S., Mitra T. K.**— J. Phys. C, 1980, v. 13, p. 3193.
50. **Platzman P. M.**— Phys. Rev., 1962, v. 125, p. 1961.
51. **Lépine Y., Bader G., Matz D.**— Phys. Stat. Sol. B, 1978, p. 53.
52. **Huybrechts W. J.**— Solid State Comm., 1978, v. 27, p. 45.
53. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.** Сообщение ОИЯИ Р2-10234, Дубна, 1976.
54. **Кочетов Е. А.** Сообщение ОИЯИ Р2-80-305, Дубна, 1980.
55. **Кулешов С. П., Смондырев М. А.**— ТМФ, 1978, т. 34, с. 291.
56. **Тябликов С. В.**— ЖЭТФ, 1951, т. 21, с. 16.
57. **Yokota T.**— Ann. Inst. Stat. Mech., 1954, v. 5, p. 107.
58. **Fulton T.**— Phys. Rev., 1956, v. 103, p. 1712.
59. **Whitfield G., Engineer M.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 12, p. 5472.
60. **Кривоглаз М. А., Пекар С. И.**— Изв. АН СССР, Сер. физ., 1957, т. XXI, с. 3.
61. **Кривоглаз М. А., Пекар С. И.**— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1957, т. XXI, с. 16.
62. **Кочетов Е. А., Смондырев М. А.** Препринт ОИЯИ Р2-80-268, Дубна, 1980.
63. **Höhler G., Müllensiefen A.**— Z. Phys., 1959, Bd 157, S. 159.
64. **Osaka Y.**— Prog. Theor. Phys., 1959, v. 22, p. 437.
65. **Hattori K.**— J. Phys. Soc. Japan, 1975, v. 38, p. 351.
66. **Родригес К., Федянин В. К.** Препринт ОИЯИ Р17-81-8, Дубна, 1981.
67. **Bogolubov N. N.**— Comm. JINR E17-11822, Dubna, 1978.
68. **Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.).**— ЭЧАЯ, 1980, т. 11, вып. 2, с. 245.
69. **Feynman R. P. e.a.**— Phys. Rev., 1962, v. 127, p. 1104.
70. **Кочетов Е. А., Смондырев М. А.** Препринт ОИЯИ Р2-80-328, Дубна, 1980.
71. **Saitoh M.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, p. 878.
72. **Saitoh M.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, p. 886.
73. **Клюканов А. А., Покатилов Е. П.**— ЖЭТФ, 1971, т. 60, с. 312.
74. **Балмуш Н. И., Покатилов Е. П., Клюканов А. А.**— ФТТ, 1974, т. 16, с. 3131.
75. **Rössler J.**— Phys. Status Solidi, 1968, v. 25, p. 311.