

Ленинградский ордена Ленина Государственный
Университет имени А.А.Жданова

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра теоретической физики

ТУЛУБ А.В.

К ТЕОРИИ ЭЛЕКТРОННО-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Д и с с е р т а ц и я
на соискание учёной степени кандидата
физико-математических наук

ЛЕНИНГРАД

- 1960 -

О Г Л А В Л Е Н И Е

	Стр.
В В Е Д Е Н И Е	I
ГЛАВА I. Учёт отдачи в нерелятивистской квантовой теории поля	13
§ 1. Постановка задачи	13
§ 2. Энергия основного состояния гамильтониана ..	16
§ 3. Решение уравнений для операторов поля в случае сплошного спектра в "к" про- странстве.....	20
§ 4. Собственные функции H_0 ; вариационный принцип для функций f_k	27
§ 5. Вычисление энергии в случае слабой и про- межуточной связи	33
§ 6. Энергия полярона в приближении сильной связи	40
§ 7. Теория подвижности поляронов.....	55
ГЛАВА II. Влияние взаимодействия электрона с колеба- ниями кристаллической решетки на частоту циклотронного резонанса. В в е д е н и е	80
§ 1. Исключение переменных фононного поля из оператора энергии.....	82
§ 2. Вычисление констант, определяющих перенор- мировку массы	86
§ 3. Об одном методе вычисления статистической матрицы и поправка к диамагнитной восприим- чивости.....	91

ГЛАВА III. Теория взаимодействия экситона с колеба-	
ниями кристаллической решетки.....	97
§ 1. Потенциал фононного взаимодействия электрона	
и дырки в экситоне	97
§ 2. Энергия основного состояния экситона	
Ванье-Мотта	113
§ 3. Длина свободного пробега экситона	119
З а к л ю ч е н и е	
П р и л о ж е н и е	
К главе I.	
К главе II.	
К главе III.	
ЛИТЕРАТУРА	

ВВЕДЕНИЕ

Исследование движения носителей тока в полярных кристаллах привлекло внимание физиков в последние десять — пятнадцать лет. Интерес к этим вопросам возник в связи с работами С.И.Пекара, [1] который указал на ряд своеобразных особенностей в характере взаимодействия между носителями тока и поляризационными колебаниями кристаллической решетки и построил первую теорию этого взаимодействия.

Если под влиянием возбуждения электрон ^{x)} переходит из валентной зоны на низко расположенный уровень энергии в зоне проводимости, то кулоновское поле — поле лишнего электрона вызывает относительное смещение и поляризацию ионов; возникновение поляризации в кристалле приводит в свою очередь к обратному воздействию среды на электрон: вокруг электрона образуется потенциальная яма, внутри которой электрон движется по стационарной орбите.

Таким образом, электрон захватывается тем полем, которое он сам создал. На существование таких автолокализованных состояний, названных С.И.Пекаром поляронами, впервые обратил внимание Л.Д.Ландау [2]. Перемещаясь по кристаллу, электрон "тянет" за собой поляризационную яму, или, выражаясь языком

x) Материал излагается в терминах электронной проводимости, все выводы, разумеется, сохраняют силу и в том случае, когда носителями тока являются не электроны, а дырки.

теории поля, перемещается вместе с собственным фононным полем, которое образует вокруг электрона фононное облако.

Подавляющее большинство электронов в полярных кристаллах находится в поляронном состоянии и поэтому исследование этих состояний, особенно в полярных полупроводниках, представляет значительный интерес.

Поляронный эффект существует также в теории F центров и в теории экситона; эти вопросы рассматриваются в третьей главе настоящей работы.

В математическом отношении теория полярона эквивалента скалярной теории поля. Задача заключается в последовательном учёте эффектов отдачи при излучении электроном виртуальных фононов для произвольных значений констант связи. Эта задача представляет для теории поля и самостоятельный интерес как модель, на примере которой можно выяснить влияние отдачи на физические характеристики системы (собственную энергию, перенормированную массу).

Теория полярона также часто используется для иллюстрации различных методов квантовой теории поля. Так, например, метод континуального интегрирования привлёк к себе также всеобщее внимание лишь после того как Фейнману удалось вычислить весьма изящным способом собственную энергию и массу полярона [3]. (См. также недавно появившиеся работы [4], [5], [6]).

Рассмотрим теперь основные положения сформулированной С.Я. Пекаром теории полярона.

1. Взаимодействие лишнего электрона в зоне проводимости с кристаллом, поляризованным кулоновским полем этого электро-

на, описывается известной формулой электростатики

$$V(r) = e \int \frac{(\bar{r} - \bar{r}') \bar{\mathcal{P}}(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|^3} d\bar{r}' = -e \int \frac{\text{div} \bar{\mathcal{P}}(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d\bar{r}' \quad (1)$$

где $\bar{\mathcal{P}}$ — вектор поляризации. Вектор $\bar{\mathcal{P}}$ входит в выражение (1) в виде $\text{div} \bar{\mathcal{P}}$, поэтому под $\bar{\mathcal{P}}$ следует подразумевать вектор продольной поляризации; взаимодействием же с поперечным оптическим колебанием можно следовательно пренебречь.

2. Предполагается, что минимум поверхности постоянной энергии находится в $\bar{\kappa}$ пространстве в точке $\kappa = 0$ и что периодическое поле решетки может быть учтено заменой истинной массы электрона на эффективную. Для кристаллов с кубической симметрией эффективная масса m является скаляром; это случай рассматривается в дальнейшем.

3. Энергия продольных оптических колебаний диэлектрического континуума $H_{\text{опн}}$ может быть записана в виде [1], [2]

$$H_{\text{опн}} = \frac{2\pi}{c} \int \left(\bar{\mathcal{P}}^2(r) + \frac{1}{\omega_k^2} \dot{\bar{\mathcal{P}}}^2(r) \right) dv \quad (2)$$

где $c = \frac{1}{n^2} - \frac{1}{\epsilon}$

ϵ — статическая диэлектрическая постоянная,

n — показатель преломления света,

ω_k — частота продольных оптических колебаний.

Обычно в качестве ω_k берут предельную (не зависящую от волнового числа) частоту. Последнее предположение, впрочем, не является принципиальным.

4. Электрон в полярных кристаллах взаимодействует, вообще говоря, как с оптической так и с акустическими ветвями колебаний. Основную роль играют оптические колебания. Однако и акустические колебания в известных случаях, например, в вопросе о подвижности носителей тока, могут быть также существенны. Влияние акустических колебаний на собственную энергию и на эффективную массу полярона рассмотрено в [8].

Таким образом, оператор энергии для задачи о полироне имеет на основании (1), (2) следующий вид $x)$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + H_{\text{опт}} \quad (3)$$

Разложим вектор продольной поляризации $\vec{\Phi}$ в ряд Фурье

$$\vec{\Phi}(r) = \sum_k \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \left(\frac{c\hbar\omega}{8\pi L^3} \right)^{1/2} (a_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}}) \quad (4)$$

L^3 — величина нормировочного объёма. Подставляя (4) в (1), (2) получим с учётом

$$\int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}'}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dv' = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (5)$$

x) В дальнейшем энергия отсчитывается от дна зоны проводимости, в связи с чем в (3) отсутствует аддитивная константа.

следующее выражение для $V(r)$ и $H_{\text{опн}}$

$$V(r) = \sum_k (V_k e^{i\vec{k}\vec{r}} a_k + V_k^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_k^+) \quad (1a)$$

$$H_{\text{опн}} = \sum_k \hbar \omega_k a_k^+ a_k \quad (2a)$$

где V_k имеет вид

$$V_k = - \frac{i\hbar\omega}{k} \left(\frac{2\pi c e^2}{\hbar \omega_k L^3} \right)^{1/2} \quad (6)$$

Вводя безразмерный параметр $g^2 \equiv \alpha$, играющий роль константы связи в теории полярона, перепишем (6) в виде

$$V_k = - \frac{i\hbar\omega}{k} g \left(\frac{4\pi}{u L^3} \right)^{1/2}; \quad u \equiv \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \quad (6a)$$

$$g^2 = \frac{1}{2} \frac{e^2 u}{\hbar \omega} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\epsilon} \right) \quad (7)$$

В таблице I приведены значения g^2 для некоторых полярных кристаллов в предположении, что эффективная масса электрона в зоне проводимости m равна массе электрона m_e в вакууме.^{x)}

x) Если $\hbar\omega$ выразить в e.v., то константа g_0^2 равняется

$$g_0^2 = \frac{3,695}{\sqrt{\hbar\omega}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\epsilon} \right)$$

Таблица I

	ξ	n^2	$\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\xi}$	$\omega_1 \cdot 10^{13}$	$\omega = \left(\frac{\xi}{n^2}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_1$	$\hbar \omega$ e.v.	g_0^2
В.Е	5,62	2,25	0,266	3,09	4,88	0,0321	5,48
В.Б	5,99	2,62	0,215	2,52	3,81	0,0251	5,01
В.Г	6,6	2,91	0,192	2,20	3,32	0,0219	4,79
В.Д	6,0	1,74	0,408	4,64	8,63	0,0569	6,48
В.З	4,68	2,13	0,255	2,67	3,95	0,0260	5,83
В.В	4,78	2,33	0,220	2,13	3,05	0,0201	5,72
В.Д	4,94	2,69	0,170	1,85	2,52	0,0166	4,87
В.Е	5,0	2,19	0,257	2,22	3,35	0,0221	6,38
В.Б	5,0	2,33	0,229	1,65	2,43	0,0160	6,68
В.Г	5,0	2,68	0,180	1,45	2,00	0,0132	5,78
В.Д	9,27	1,92	0,413	5,78	12,72	0,0838	5,26
В.Е	7,20	2,60	0,246	1,85	3,08	0,020	6,37
В.Б	6,51	2,78	0,206	1,41	2,16	0,014	6,38

	ε	n^2	$\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon}$	$\omega_1 \cdot 10^{13}$	$\omega = \left(\frac{\varepsilon}{n^2}\right)^{\frac{1}{2}} \omega_1$	$\hbar\omega$ e.v.	g_0^2
2.2	31,9	5,10	0,165	1,61	4,08	0,027	3,73
2.3	29,8	5,10	0,162	1,16	2,80	0,0105	4,39
2.4	10	3,5	0,180	3,56	5,96	0,039	3,35
2.5	8	4,08	0,120	3,81	4,68	0,0805	2,54
2.6	12,3	4,04	0,167	1,94	3,39	0,022	4,12
2.7	13,1	4,62	0,140	1,44	2,42	0,017	4,10
2.8	9,8	2,95	0,237	10,9	19,9	0,013	7,66
2.9	11,8	3,28	0,220	6,88	13,05	0,086	2,77
3.0	13,3	3,81	0,327	4,01	8,04	0,053	5,28
3.5	8,3	5,07	0,0762	5,71	7,30	0,018	1,29
3.6	12	4	0,167	6,28	10,9	0,072	2,30
3.5	17,3	15,3	0,0918	2,355	2,54	0,017	0,263

Истинное значение g^2 получается из приведенной в таблице I умножением на множитель $\left(\frac{m}{m_e}\right)^{1/2}$: $g^2 = g_0^2 \left(\frac{m}{m_e}\right)^{1/2}$.

Рассмотрим вопрос об эффективной массе.

Наиболее прямой путь для определения эффективной массы является исследование подвижностей носителей тока. Эти эксперименты были проведены на ряде кристаллов (PbS , $PbSe$, $PbTe$ [10], Tl_2O , $AgCl$, $AgBr$ [11]).

Однако "классические" полярные кристаллы типа $NaCl$ обладают очень малой проводимостью и подвижности определить не удается. Поэтому для нахождения эффективных масс было предложено использовать косвенные данные об электронных переходах в F центрах. Последние характеризуются множественным рождением фононов (порядка двадцати-тридцати) С.И. Пекар [12], Хуан и Рис [13] построили теорию этих переходов и получили формулы для полуширины полос поглощения, сравнивая которую с экспериментальной можно определить величину m .

Следует, однако, иметь в виду следующие обстоятельства. В галогенно-галогенидных кристаллах поляризационный радиус $r_{\text{поляризации}}$ очень мал. Так, согласно расчёту И.В. Абаренкова [14] максимум плотности вероятности $\rho(r) = r^2 |\Psi(r)|^2$ для основного и первого возбужденного состояний ($1s$ и $2p$ в водородно-подобной модели F центра) находится в кристалле $NaCl$ соответственно на расстояниях от центра 3,7 ат.ед. и 4,6 ат.ед., в то время как постоянная решетки в атомных единицах составляет в случае $NaCl$ 5,19 ат.ед. Таким образом, как основное так и первое возбужденное состояние имеет "радиус орбиты" меньше чем постоянная

1) Для $AgCl$ было, например, получено $m = 0,29 m_e$ [15].

решетки. Аналогичная ситуация имеет место в рассчитанном в [14] кристалле *Yic*. Следовательно, приближенная замена кристалла электрическим континуумом является слишком грубой.

В связи со сказанным возникает вопрос, почему теория много-уровневых переходов Пекара-Хуана-Риса приводит тем не менее к хорошему согласию с опытом формой линий поглощения? Можно предположить (см. [14]), что за ширину линий поглощения ответственны не кристаллические, а локальные колебания решетки вблизи дефекта. Теория же поглощения света ∇ центрами остается и в этом случае в силе, т.к. последняя основана на взаимодействии электрона с системой осцилляторов произвольной природы.

Интересно также отметить, что и в приближении сплошной среды имеются несколько противоречивые данные относительно центров. Так, например, Симпсон [15] вычислил основной и первый возбужденный уровень ∇ центра, используя приближение пригодное для промежуточной связи и получил, что теоретические и экспериментальные данные могут быть хорошо согласованы, если считать $m = m_c$, в то время как С.Н. Пекар получил для m величину $m = 2,78 m_c$ [1].

Кроме того учёт дисперсии оптических фононов и взаимодействие с акустическими фононами могут оказать свое влияние на m .¹⁾

Мнение авторов, таким образом, сводится к тому, что из теории ∇ центров нельзя получить в приближении сплошной среды достаточно точные данные относительно эффективной массы эле-

1) Согласно М.Ф. Дейгону и В.Л. Виницкому [8] в щелочно-галогидных кристаллах влияние акустических колебаний незначительно; однако для закиси меди величина m уменьшается вдвое.

трона m . При составлении таблицы I поэтому было взято для ориентировки $m = m_e$; приведенные цифры, следовательно, лишь ориентировочны.

Значение эффективной массы m является весьма важной величиной для теории полярона, т.к. при заданных n^2 , ϵ , ω вопрос о применимости сильной или промежуточной связи определяется величиной m .

Что же касается обычной теории возмущений, то она заведомо неприменима к полярным кристаллам (за исключением, может быть, $P\&S$; значение ϵ для $P\&S$, приведенное в таблице I подверглось, однако, сомнению [16]).

Взаимодействие электрона с продольными оптическими фонами приводит к смещению энергии на величину $E = E(q)$ и к изменению (перенормировке) массы. Задачей теории является вычисление этих величин как функций константы связи. Кроме того теория должна дать ответ о величине подвижности носителей тока в зоне проводимости. Величина подвижности позволяет в свою очередь судить о природе рассеивающего механизма.

В полярных кристаллах рассеяние на оптических колебаниях решетки играет существенную роль в вопросах о подвижности носителей тока. [10], [12], [17], [18]

Впервые подвижность была вычислена Фрелихом-Моттом [19], (см. также [20]) и Давыдовым и Шмушкевичем. [19] При выводе однако использовалось первое приближение теории возмущений, т.е. то приближение, которое как раз неоправдано для полярных кристаллов.

Поскольку эффективная масса носителей тока в периодическом поле решетки m фактически неизвестна, то необходимо развить теорию подвижности для широкого диапазона констант связи. Теория в этом случае позволит из экспериментальных данных найти значения эффективной массы m .

При построении обычной теории подвижности полагают, что простейшими процессами взаимодействия электрона с фононом являются процессы поглощения и излучения фононов. Однако в случае полярных кристаллов есть основания считать, что в действительности основными процессами являются процессы второго порядка, процессы типа комптоновского рассеяния (Лоу и Райс [21], Шульц [22]).^x

В области слабой связи процессом второго порядка приводят к тем же результатам, что и обычное рассмотрение, так что развитая ранее и вошедшая во все учебники по теории твердого тела теория рассеяния остаётся в силе. Теория же рассеяния в области сильной и промежуточной связи требует уточнения.

Для вычисления сечения рассеяния следует исходить из такого математического аппарата, который учитывает, что начальные и конечные состояния принадлежат облаченным частицам-электронам. Таким математическим аппаратом является, например, известный из теории поля метод Лоу [23].^{xx} Для применения

x) Эта точка зрения в настоящее время поддерживается также многими другими авторами. См., например, книгу Зимана [24] и [10].

xx) После окончания настоящей работы была опубликована работа Шульца [22], в которой задача рассеяния была решена методом континуального интегрирования Фейнмана. Хотя применённый в [22] математический аппарат совершенно от используемого ниже, тем не менее полученные результаты и физическая интерпретация очень близки.

этого метода требуется знание явного вида собственных функций начального и конечного состояний медленного полупрона.

В связи с этим в первой части настоящей работы развивается метод построения собственных функций операторов энергии (3), который удобен для решения задач рассеяния и который отличен от известных методов С.И.Пекара и Фейнмана. Одновременно получены формулы для энергии и перенормированной массы в области слабой и промежуточной связи, исследуется приближение сильной связи и вычисляется эффективный радиус полупрона.

В основу решения задачи положено каноническое преобразование, применённое Т.Д.Ли, Ф.Лоу и Д.Пайнсом [9].

Интересно отметить, что в уравнении Шредингера с оператором энергии (3) координаты частицы $\vec{r}$ могут быть выделены (см. главу I) с помощью канонического преобразования. Однако во всех работах, в которых исследовалось приближение сильной связи, это преобразование, соответствующее классическому методу разделения переменных, выполнено не было. Если же не сделать это преобразование, то уравнения поля будут нелинейными и фактически речь идет о способе учёта нелинейных членов, содержащих произведение четырех операторов поля. Аналогичные задачи встречаются в теории многих тел и развиваемые в главе I метод может быть применён и к этим задачам.

В главе II рассматривается влияние взаимодействия электрона с колебаниями кристаллической решетки на частоту циклотронного резонанса, в главе III — теория экситона.

Постановка задачи и обзор литературы обсуждаются в вводной части каждой главы.

ГЛАВА I.

УЧЁТ ОТДАЧИ В НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ПОЛЯ

§ 1. Постановка задачи

Исследование отдачи в нерелятивистской скалярной теории представляет интерес с двух точек зрения. Во-первых, скалярная теория является простейшей моделью, на примере которой можно выяснить как влияют члены, учитывающие отдачу, на величину собственной энергии и на величину перенормированной массы. Во-вторых, рассмотрение эффектов отдачи представляет интерес для теории твёрдого тела.

Рассмотрим нерелятивистскую частицу, взаимодействующую с полем нейтральных бозонов. Оператор энергии этой системы может быть записан, согласно уравнению (I) введения, в ви-

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_k \omega_k^0 a_k^+ a_k + g \sum_k (V_k e^{i\vec{k}\vec{r}} a_k + V_k^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_k^+) \quad (I.1)$$

Для упрощения обозначений произведем следующую замену операторов

$$\begin{aligned} a_k &\rightarrow -i a_k \\ a_k^+ &\rightarrow i a_k^+ \end{aligned} \quad [a_k, a_k^+] \rightarrow [a_k, a_k^+]$$

после чего гамильтониан (I.1) примет вид

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_k \omega_k^0 a_k^+ a_k + g \sum_k V_k (a_k e^{i\vec{k}\vec{r}} + a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{r}}) \quad (I.1a)$$

Здесь и в дальнейшем в Главе I положено $\hbar=1$, $m=1$.

$$V_k = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{2}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\omega_k^0}{k}$$

Хорошо известно, что координаты частицы z могут быть выражены из (1.1) с помощью канонического преобразования

$$S = \exp \left\{ i \left(\bar{P} - \sum_k \bar{k} a_k^+ a_k \right) \bar{z} \right\} \quad (1.2)$$

где $\bar{P}$ — полный импульс системы: $\bar{P} = -i\nabla + \sum_k \bar{k} a_k^+ a_k$

В результате преобразования (1.2) оператор энергии примет вид

$$S^{-1} a_k S = a_k e^{-i\bar{k}\bar{z}}, \quad S^{-1} a_k^+ S = a_k^+ e^{i\bar{k}\bar{z}}$$

$$S^{-1} H S = \frac{1}{2} \left(\bar{P} - \sum_k \bar{k} a_k^+ a_k \right)^2 + \sum_k \omega_k^0 a_k^+ a_k + g \sum_k V_k (a_k + a_k^+) \quad (1.3)$$

Следуя Ли, Лоу и Пейнсу [9], произведем еще одно каноническое преобразование

$$U = \exp \left\{ \sum_k f_k (a_k - a_k^+) \right\} \quad (1.4)$$

$$U^{-1} a_k U = a_k + f_k$$

где f_k некоторая, пока произвольная функция от k и $(\bar{k}\bar{P})$, вид которой будет указан в дальнейшем. После преобразования (1.4) оператор энергии может быть записан в виде

$$H = H_0 + H_I$$

$$H_0 = \frac{P^2}{2} + 2g \sum_k V_k f_k + \sum_k (\omega_k^0 - \bar{k}\bar{P}) f_k^2 + \quad (1.5)$$

$$+ \frac{1}{2} \left(\sum_k \bar{k} f_k^2 \right)^2 + \sum_k \left(\omega_k^0 - \bar{k}\bar{P} + \frac{k^2}{2} + \bar{k} \sum_{k'} \bar{k}' f_{k'}^2 \right) a_k^+ a_k +$$

а) Преобразование (1.2) было впервые применено в теории поля — рона Н.Н.Боголюбовым и С.В.Тябликовым [25] [26]

б) Аргумент P будет для краткости письма опущен.

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} [a_{\kappa} a_{\kappa'} + a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'}^{\dagger} + a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'} + a_{\kappa} a_{\kappa'}^{\dagger}]$$

$$H_I = \sum_{\kappa} \left(g V_{\kappa} + f_{\kappa} \left(\omega_{\kappa}^0 - \bar{\kappa} \bar{P} + \frac{\kappa^2}{2} + \bar{\kappa} \sum_{\kappa'} \bar{\kappa}' f_{\kappa'}^2 \right) \right) (a_{\kappa} + a_{\kappa}^{\dagger})$$

$$+ \sum_{\kappa \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} (a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} a_{\kappa'} + a_{\kappa'}^{\dagger} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}) + \quad (1.6)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'}^{\dagger} a_{\kappa} a_{\kappa'}$$

Для трудности исследования уравнения (1.3) заключается в нелинейном члене

$$\frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'}^{\dagger} a_{\kappa} a_{\kappa'} \quad (1.7)$$

который определяет асимптотику решения в области сильной связи. Каноническое преобразование (1.4) преследует цель "отцепить" от оператора (1.7) группу членов, которую можно включить в H_0 . Связанные функции последнего описывают уже не "голую", а одетую частицу. Следует также отметить, что задача об учёте в операторе энергии членов, содержащих произведение четырёх операторов поля $\delta(p_1 + p_2 - \kappa_1 - \kappa_2) a_{p_1}^{\dagger} a_{p_2}^{\dagger} a_{\kappa_1} a_{\kappa_2}$ является основной задачей теории многих тел и рассматриваемый нами способ вычисления энергии может быть применен и к этим вопросам.

На первый взгляд может показаться, что оператор энергии (1.5), (1.6) имеет более сложную структуру по сравнению с (1.3). Однако это только кажущееся усложнение, т.к. введенный выше оператор H_0 может быть приведен к диагональной форме. Диа-

реализация осуществляется тем же методом, что и в обычной первой мезонной теории [27].

Если представить поле как набор осцилляторов, то взаимодействие поля с источником приводит: во-первых, к смещению положений этих осцилляторов, во-вторых, к изменению частот нормальных колебаний и в-третьих - к появлению в полной энергии членов, приводящих к анигармоничности. Преобразование (1.4) учитывает первое из указанных выше искажений собственных функций лишь за счет взаимодействия.

§ 2. Энергия основного состояния гамильтониана H_0

Рассмотрим задачу о вычислении энергии основного состояния оператора H_0 . Введем оператор $\mathcal{H}$, соответствующий двум выделенным суммам в (1.5)

$$\mathcal{H} = \sum_{\kappa} \omega_{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} + \frac{1}{2} \sum_{\kappa \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} (a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'}^{\dagger} + a_{\kappa} a_{\kappa'} + a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'} + a_{\kappa'}^{\dagger} a_{\kappa}) \quad (2.1)$$

Если положить

$$q_{\kappa} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\kappa}}} (a_{\kappa} + a_{\kappa}^{\dagger}) \quad ; \quad p_{\kappa} = -i\sqrt{\frac{\omega_{\kappa}}{2}} (a_{\kappa} - a_{\kappa}^{\dagger})$$

$$\bar{Z}_{\kappa} = \bar{\kappa} f_{\kappa} \sqrt{2\omega_{\kappa}} \quad (2.2)$$

то (2.1) примет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\kappa} (p_{\kappa}^2 + \omega_{\kappa}^2 q_{\kappa}^2) + \frac{1}{2} \left(\sum_{\kappa} \bar{Z}_{\kappa} q_{\kappa} \right)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\kappa} \omega_{\kappa} \quad (2.3)$$

Из уравнений движения

$$\dot{q}_k = p_k$$

$$\dot{p}_k = -\omega_k^2 q_k - \bar{Z}_k \sum_{k'} \bar{Z}_{k'} q_{k'}$$

получается следующее уравнение для оператора q_k :

$$\ddot{q}_k + \omega_k^2 q_k = -\bar{Z}_k \sum_{k'} \bar{Z}_{k'} q_{k'} \quad (2.5)$$

Предположим, следуя Вентцели [27], что существуют такие координаты ξ_k и η_k , в которых $\mathcal{H}$ имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_k (\eta_k^2 + \nu_k \xi_k^2) - \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \quad (2.6)$$

где ν_k частоты нормальных колебаний. Положим

$$q_k(t) = \sum_{k'} \Omega_{kk'} \xi_{k'}(t) \quad (2.7)$$

тогда матрица $\Omega_{kk'}$ будет удовлетворять уравнению

$$(\nu_k^2 - \omega_k^2) \Omega_{kk'} = \bar{Z}_k \sum_{k''} \bar{Z}_{k''} \Omega_{k''k'} \quad (2.8)$$

Рассмотрим вместо (2.8) систему уравнений

$$(\zeta - \omega_k^2) \Omega_{kk'} = \bar{Z}_k \sum_{k''} \bar{Z}_{k''} \Omega_{k''k'} \quad (2.9)$$

где ζ некоторая величина, отличная вообще говоря от ν_k^2 .

При исследовании системы (2.9) выделим из неё произвольно

любое, но конечное число уравнений, полагая, что индекс "k"

принимает в (2.9) лишь конечное число значений. Для получен-
ной таким путем усечённой системы уравнений можно вычислить
изменение

$$\Delta(s) = \frac{\prod_k (s - \nu_k^2)}{\prod_k (s - \omega_k^2)}, \quad (2.10)$$

которое определяет изменение энергии системы за счёт взаимо-
действия:

$$\Delta E = \frac{1}{2} \sum_k (\nu_k - \omega_k) = - \frac{1}{8\pi i} \int_c \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \Delta(s) \quad (2.11)$$

Путь интегриро-
вания приведен
на рис. I. Опреде-
ление усеченной
системы уравнений
(2.9) равен

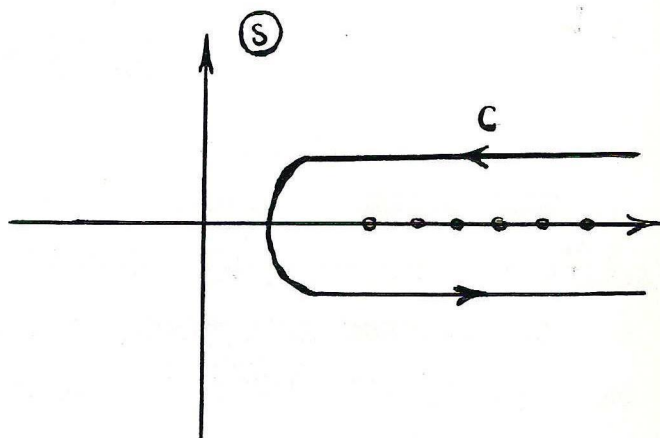


Рис. I.

$$\det |(s - \omega_k^2) \delta_{kk'} - \bar{Z}_k \bar{Z}_{k'}| = \prod_k (s - \nu_k^2) =$$

$$\prod_k (s - \omega_k^2) \left\{ 1 - \sum_k \frac{\bar{Z}_k^2}{s - \omega_k^2} + \frac{1}{2} \sum_{kk'} \frac{\bar{Z}_k^2 \bar{Z}_{k'}^2 - (\bar{Z}_k \bar{Z}_{k'})^2}{(s - \omega_k^2)(s - \omega_{k'}^2)} + \right.$$

$$\left. - \frac{1}{6} \sum_{kk'k''} \frac{[(\bar{Z}_k \bar{Z}_{k'})^2 \bar{Z}_{k''}^2 + (\bar{Z}_k \bar{Z}_{k''})^2 \bar{Z}_{k'}^2 + (\bar{Z}_{k'} \bar{Z}_{k''})^2 \bar{Z}_k^2 - (\bar{Z}_k \bar{Z}_{k'} \bar{Z}_{k''})^2]}{(s - \omega_k^2)(s - \omega_{k'}^2)(s - \omega_{k''}^2)} \right\} \quad (2.12)$$

$$- \bar{Z}_\kappa^2 \bar{Z}_{\kappa'}^2 \bar{Z}_{\kappa''}^2 - 2 (\bar{Z}_\kappa \bar{Z}_{\kappa'}) (\bar{Z}_{\kappa'} \bar{Z}_{\kappa''}) (\bar{Z}_{\kappa''} \bar{Z}_\kappa)] \}$$

в том случае, когда $\bar{Z}$ зависит от аргументов

$$\bar{Z} = \bar{Z}(\kappa; (\bar{\kappa} \bar{E}))$$

выражение (2.12) упрощается:

$$\Delta(s) = \mathcal{D}^{(1)}(s) \mathcal{D}^{(2)}(s) \mathcal{D}^{(3)}(s)$$

(2.12a)

$$\mathcal{D}^{(i)}(s) = 1 - \sum_{\kappa} \frac{Z_{\kappa}^{(i)2}}{s - \omega_{\kappa}^2}$$

Если в общем случае функции $Z_{\kappa}^{(i)}$ являются компонентами n -мерного вектора, то число членов в фигурных скобках в (2.12) равно $n+1$. Так, например, для двумерного вектора Z_{κ} в фигурных скобках останутся первые три члена, для одномерного — первые два. Если теперь составить отношение $\prod_{\kappa} (s - \nu_{\kappa}^2) / \prod_{\kappa} (s - \omega_{\kappa}^2)$ то согласно (2.12) множители $\prod_{\kappa} (s - \omega_{\kappa}^2)$ сократятся и в полученной величине можно перейти к пределу, суммируя по всем κ вплоть до бесконечности. Ниже будет рассмотрен тот случай, когда внешний импульс $\bar{E} = 0$. Функция f_{κ} будет при этом сферически-симметричной, т.е. при $\bar{E} = 0$ нет выделенного направления в пространстве. Выражение (2.10) для $\Delta(s)$ примет вид

$$\Delta(s) = \mathcal{D}^3(s) \tag{2.13}$$

$$\mathcal{D}(s) = 1 - \frac{1}{3} \sum_{\kappa} \frac{\bar{Z}_{\kappa}^2}{s - \omega_{\kappa}^2} \tag{2.14}$$

Подставляя (2.13) в (2.11) получим, с учётом (2.3), следующее выражение для энергии основного состояния E оператора H_0 .

$$E = \Delta E + 2g \sum_k V_k f_k + \sum_k \omega_k^2 f_k^2$$

$$\Delta E = -\frac{3}{8\pi i} \int_c \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln D(s) \quad (2.15)$$

Переход от суммирования к интегрированию в (2.15) осуществляется обычным путём

$$\sum_k (\dots) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int (\dots) d\bar{k} \quad (2.16)$$

Что же касается собственных функций оператора $\mathcal{H}$, то переход от дискретного спектра в " k " пространстве к непрерывному меняет собственные функции $\mathcal{H}$ нетривиальным образом.

§ 3. Решение уравнений для операторов поля в случае сплошного спектра в " k " пространстве

Вернемся к уравнению (2.5). Представим функцию $q(k, t)$

$$q(\bar{k}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} q(\bar{k}, k_0) e^{-ik_0 t} dk_0$$

$$q(k, -k_0) = q^*(k, k_0) \quad (3.1)$$

функция $q(\bar{k}, \kappa_0)$ будет удовлетворять уравнению

$$(\omega_{\bar{k}}^2 - \kappa_0^2) q(\bar{k}, \kappa_0) = - \bar{Z}(\bar{k}) \int \bar{Z}(\bar{k}') q(\bar{k}', \kappa_0) d\bar{k}' \quad (3.2)$$

Из (3.2) следует

$$q(\bar{k}, \kappa_0) = q_{\pm}^0(\bar{k}, \kappa_0) - \frac{\bar{Z}(\bar{k}) \int \bar{Z}(\bar{k}') q(\bar{k}', \kappa_0) d\bar{k}'}{\omega_{\bar{k}}^2 - \kappa_0^2 \mp i\varepsilon} \quad (3.3)$$

Функция $q_{\pm}^0(\bar{k}, \kappa_0)$ является решением однородного уравнения при $\bar{Z}=0$.

Знаменное $\pm i\varepsilon$ в знаменателе (3.3) указывает правило обхода полюса. Операторы поля "in" и "out" в формализме Янга-Ландау [28] соответствуют значкам $\pm$ для $q_{\pm}^0(\bar{k}, \kappa_0)$

$$q_{\text{out}}^0(\bar{k}, \kappa_0) \equiv q_{+}^0(\bar{k}, \kappa_0)$$

Положим полный импульс $\bar{P}$ равным нулю. Вектор $\bar{Z}$ будет в этом случае только функцией от $|\bar{k}|$. Положим

$$\bar{X}(\kappa_0) = \int \bar{Z}(\bar{k}) q(\bar{k}, \kappa_0) d\bar{k} \quad (3.4)$$

Из (3.3) примет вид

$$q(\bar{k}, \kappa_0) = q_{\pm}^0(\bar{k}, \kappa_0) + \frac{\bar{Z}(\bar{k}) \bar{X}(\kappa_0)}{\kappa_0^2 - \omega_{\bar{k}}^2 \pm i\varepsilon} \quad (3.5)$$

28) В явном виде слагаемое $\pm i\varepsilon$ определяет запаздывающую или опережающую функцию Грина для волнового уравнения.

29) Решение уравнений (2.5) при $\bar{P} \neq 0$ приведено в приложении.

Подставляя (3.3a) в (3.4) получим

$$\bar{X}(\kappa_0) = \int \bar{Z}(\bar{\kappa}') q_{\pm}^0(\bar{\kappa}', \kappa_0) d\bar{\kappa}' + \int \frac{\bar{Z}(\bar{\kappa}') (\bar{Z}(\bar{\kappa}') \bar{X}(\kappa_0))}{\kappa_0^2 - \omega_{\kappa'}^2 \pm i\varepsilon} d\bar{\kappa}' \quad (3.5)$$

Интеграл в (3.5) можно заменить на

$$\alpha \bar{X}(\kappa_0)$$

равняется

$$\alpha = \frac{1}{3} \int \frac{\bar{Z}^2(\bar{\kappa}')}{\kappa_0^2 - \omega_{\kappa'}^2 \pm i\varepsilon} d\bar{\kappa}'$$

Из (3.3a), (3.5) следует для $q(\kappa, \kappa_0)$

$$q_{\pm}(\kappa, \kappa_0) = q_{\pm}^0(\bar{\kappa}, \kappa_0) + \frac{\bar{Z}(\bar{\kappa}) \int \bar{Z}(\bar{\kappa}') q_{\pm}^0(\bar{\kappa}', \kappa_0) d\bar{\kappa}'}{(\kappa_0^2 - \omega_{\kappa}^2 \pm i\varepsilon) \mathcal{D}_{\pm}(\kappa_0^2)}, \quad (3.6)$$

функция $\mathcal{D}_{\pm}(\kappa_0^2)$ имеет вид

$$\mathcal{D}_{\pm}(\kappa_0^2) = 1 - \frac{1}{3} \int \frac{\bar{Z}^2(\bar{\kappa}')}{\kappa_0^2 - \omega_{\kappa'}^2 \pm i\varepsilon} d\bar{\kappa}' \quad (3.7)$$

Используя связь между $\bar{Z}(\kappa)$ и f_{κ} перепишем (3.7) в виде

$$\mathcal{D}_{\pm}(\omega_{\kappa}^2) = 1 - \frac{2}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega_{\kappa'} \kappa'^2 f_{\kappa'}^2}{\omega_{\kappa}^2 - \omega_{\kappa'}^2 \pm i\varepsilon} d\bar{\kappa}' \quad (3.8)$$

Теперь

$$q_{\pm}(\bar{k}, \kappa_0) = \alpha_{\text{out}}^{\pm} \cdot \delta(\kappa_0^2 - \omega_{\bar{k}}^2) \quad (3.9)$$

Временно-частотную часть оператора $q(\kappa, \kappa_0)$ можно на основании (3.9) записать в виде

$$q_{\pm}(\kappa, \kappa_0) = \int \frac{(\bar{k} | \Omega_{\pm} | \bar{k}')}{\sqrt{2\omega_{\bar{k}'}}} \delta(\kappa_0 - \omega_{\bar{k}'}) \alpha_{\text{in}}^{\pm}(\bar{k}', \kappa_0) d\bar{k}' \quad (3.10)$$

$$(\bar{k} | \Omega_{\pm} | \bar{k}') = \delta(\bar{k} - \bar{k}') + \frac{(\bar{z}(\bar{k}) \bar{z}(\bar{k}'))}{(\omega_{\bar{k}'}^2 - \omega_{\bar{k}}^2 \pm i\varepsilon) \mathfrak{D}_{\pm}(\omega_{\bar{k}'}^2)} \quad (3.11)$$

Гейзенберговские операторы поля $\varphi(x)$ и $\pi(x)$

$$\varphi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int q(\kappa, t) e^{i\bar{k}\bar{x}} d\bar{k}$$

на основании (3.1), (3.10), равны

$$\varphi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iint d\bar{k} d\bar{k}' \frac{e^{i\bar{k}\bar{x}}}{\sqrt{2\omega_{\bar{k}'}}} \left\{ (\bar{k} | \Omega_{+} | \bar{k}') e^{-i\omega_{\bar{k}'}t} \alpha_{\bar{k}'} + (\bar{k} | \Omega_{-} | \bar{k}') e^{i\omega_{\bar{k}'}t} \alpha_{\bar{k}'}^{\dagger} \right\} \quad (3.12)$$

$$\bar{T}(x) = -i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iint d\bar{k} d\bar{k}' \sqrt{\frac{\omega_{\bar{k}}}{2}} e^{-i\bar{k}\bar{x}} \left\{ (\bar{k}|\Omega_+|\bar{k}') e^{-i\omega_{\bar{k}}t} \alpha_{\bar{k}'} + \right. \\ \left. - (\bar{k}|\Omega_-|\bar{k}') e^{i\omega_{\bar{k}}t} \alpha_{\bar{k}'}^+ \right\} \quad (3.13)$$

Выражения (3.12), (3.13) для $\varphi(x)$ и $\bar{T}(x)$ имеют тот же вид, что и в обычной парной мезонной теории. Отличие от последней заключается лишь в виде функций $(\bar{k}|\Omega_{\pm}|\bar{k}')$ и $\mathcal{D}_{\pm}(\omega_{\bar{k}}^2)$. В парной мезонной теории формулы (3.12), (3.13) были получены А. Дайном и Мак-Кормиком [30].

Перейдем к вычислению энергии для того случая когда суммирование в "k" пространстве заменено интегрированием. Для этой цели функцию Грина

$$G(x, x_0) = G^{\circ}(x, x_0) - \iint (\bar{k}|G|\bar{k}') \bar{Z}(\bar{k}) \bar{Z}(\bar{k}') G^{\circ}(x, x_0) d\bar{k}' d\bar{k} \quad (3.14)$$

из (3.14) получим следующее уравнение для функции Грина

$$(\omega_{\bar{k}}^2 - \kappa_0^2)(\bar{k}|G|\bar{k}') = \delta(\bar{k}-\bar{k}') - \bar{Z}(\bar{k}) \int \bar{Z}(\bar{k}') (\bar{k}'|G|\bar{k}') d\bar{k}' \quad (3.15)$$

или

$$(\bar{k}|G_{\pm}|\bar{k}') = \delta(\bar{k}-\bar{k}') \frac{1}{\omega_{\bar{k}}^2 - \kappa_0^2 \mp i\varepsilon} = \delta(\bar{k}-\bar{k}') G_{\pm}^{\circ}(\bar{k}, \kappa_0) \quad (3.16)$$

перепишем (3.15) в виде

$$G(\bar{k}) = (\bar{k}|G_{\pm}^{\circ}(\kappa_0)|\bar{k}') - \iint d\bar{k}'' d\bar{k}''' (\bar{k}|G_{\pm}^{\circ}|\bar{k}'') (\bar{Z}(\bar{k}'') \bar{Z}(\bar{k}''')) \cdot (\bar{k}'''|G_{\pm}|\bar{k}') \quad (3.17)$$

Известное последнее уравнение для $(\bar{\kappa} | G | \bar{\kappa}')$ имеет вид

$$(\bar{\kappa} | G_{\pm} | \bar{\kappa}') = \delta(\bar{\kappa} - \bar{\kappa}') G_{\pm}(\kappa, \kappa_0) \quad (3.18)$$

$$G_{\pm}(\kappa, \kappa_0) = \frac{G_{\pm}^0(\kappa, \kappa_0)}{1 + \frac{1}{3} \int \bar{Z}^2(\kappa) G_{\pm}^0(\kappa) d\bar{\kappa}}$$

Энергия основного состояния может быть получена из динамического принципа Швингера [3]. Рассмотрим, следуя [4], функции преобразования $(0t_1 | 0t_2)$ для перехода из вакуума в вакуум

$$\begin{aligned} Z(0t_1 | 0t_2) &= i (0t_1 | \delta W_{12} | 0t_2) = \\ &= -\frac{i}{2} (0t_1 | \delta \int_{t_2}^{t_1} dx dx' \varphi(x) (x | V | x') \varphi(x') | 0t_2) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Здесь следующие: $dx = d\bar{x} dt$ — элемент четырехмерного объема; $(x | V | x') = \delta(t - t') (\bar{Z}(x), \bar{Z}(x'))$

Объектом вариации в (3.19) являются функции $\bar{Z}(x)$.

Можно представить в (3.19) гейзенберговские операторы поля

$$\varphi(x) = \exp(iHt) \varphi(\bar{x}, 0) \exp(-iHt)$$

и ввести функцию Грина

$$G(x, 0; x', 0) = i \frac{(0t_1 | T \varphi(x) \varphi(x') | 0t_2)}{(0t_1 | 0t_2)}$$

после интегрирования по dt, dt_2 и перехода к пространственным импульсам выражение (3.19) будет равно

$$Z(0t_1 | 0t_2) = -(t_1 - t_2) (0t_1 | 0t_2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa_0 \int d\bar{\kappa} G_+(\kappa, \kappa_0) \delta \frac{\bar{Z}^2(\kappa)}{2} \quad (3.20)$$

Первая часть (3.20) может быть на основании (3.18) представ-
лена в виде

$$-(t_1 - t_2)(0t_1, 0t_2) = \frac{-3i}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa_0 \delta \ln \left[1 + \frac{1}{3} \int \bar{Z}^2(\kappa) G_+^0(\kappa, \kappa_0) d\bar{\kappa} \right] \quad (3.21)$$

С другой стороны функция преобразования $(0t_1, 0t_2)$
имеет вид $\exp \{-i\Delta E(t_1, -t_2)\}$. Из (3.21), следовательно,
можно получить приведенное выше выражение (2.15), для энергии
 E , если положить в (3.21) $S = \kappa^2$

§ 4. Собственные функции $\mathcal{H}$: вариационный принцип для функции f_{κ} .

Из приведенных выше выражений (3.12) и (3.13) для гейзен-
берговских операторов поля $\varphi(x)$ и $\pi(x)$ следует на основании
(3.2), что гейзенберговский оператор поля $a(\kappa)$ имеет вид

$$a(\kappa) = d(\kappa) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} d\kappa' d\bar{\kappa}'}{(\omega_{\kappa'} - \omega_{\kappa} + i\varepsilon) \mathcal{D}_+(\omega_{\kappa'}^2)} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} d\kappa' d\bar{\kappa}'}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}) \mathcal{D}_-(\omega_{\kappa'}^2)} \quad (4.1)$$

$$\bar{a}(\kappa) = d^+(\kappa) + \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} d\kappa' d\bar{\kappa}'}{(\omega_{\kappa'} - \omega_{\kappa} - i\varepsilon) \mathcal{D}_-(\omega_{\kappa'}^2)} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} d\kappa' d\bar{\kappa}'}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}) \mathcal{D}_+(\omega_{\kappa'}^2)}$$

Унитарность преобразования, связывающего операторы a и
 $\bar{a}$ может быть проверена непосредственным вычислением комму-
татора $[a_{\kappa}, a_{\kappa'}^+]$. Положим, что операторы $d(\kappa)$ и $d^+(\kappa)$
подчиняются обычным правилам коммутации $[d(\kappa), d^+(\kappa')] = \delta(\bar{\kappa} - \bar{\kappa}')$

Эти перестановочные соотношения для a_{κ} и $a^{\dagger}_{\kappa'}$ примут вид:

$$[a_{\kappa}, a^{\dagger}_{\kappa'}] = \delta(\bar{\kappa} - \bar{\kappa}') + \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{\omega_{\kappa} - \omega_{\kappa'} - i\varepsilon} \frac{1}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{\mathfrak{D}_-(\omega_{\kappa}^2)} - \frac{1}{\mathfrak{D}_+(\omega_{\kappa'}^2)} \right) - \frac{1}{3} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} \int_0^{\infty} \frac{\kappa''^2 f_{\kappa''}^2 d\kappa''}{\mathfrak{D}_+(\omega_{\kappa''}^2) \mathfrak{D}_-(\omega_{\kappa''}^2)} - \left(\frac{1}{(\omega_{\kappa} - \omega_{\kappa'} + i\varepsilon)} \frac{1}{(\omega_{\kappa''} - \omega_{\kappa'} - i\varepsilon)} - \frac{1}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}) (\omega_{\kappa'} + \omega_{\kappa''})} \right) \quad (4.2)$$

Интеграл в правой части выражения (4.2) может быть представлен, после некоторых алгебраических преобразований (см. [3]) в виде:

$$[a_{\kappa}, a^{\dagger}_{\kappa'}] = \delta(\bar{\kappa} - \bar{\kappa}') + \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{\omega_{\kappa} - \omega_{\kappa'} - i\varepsilon} \left(\frac{1}{\mathfrak{D}_-(\omega_{\kappa}^2)} - \frac{1}{\mathfrak{D}_+(\omega_{\kappa'}^2)} \right) - \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{\omega_{\kappa} - \omega_{\kappa'} - i\varepsilon} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} ds \frac{1}{\mathfrak{D}(s)} \left[\frac{1}{s - \omega_{\kappa}^2 + i\varepsilon} - \frac{1}{s - \omega_{\kappa'}^2 - i\varepsilon} \right] \quad (4.3)$$

Путь интегрирования C_1 приведен на рис. 2.

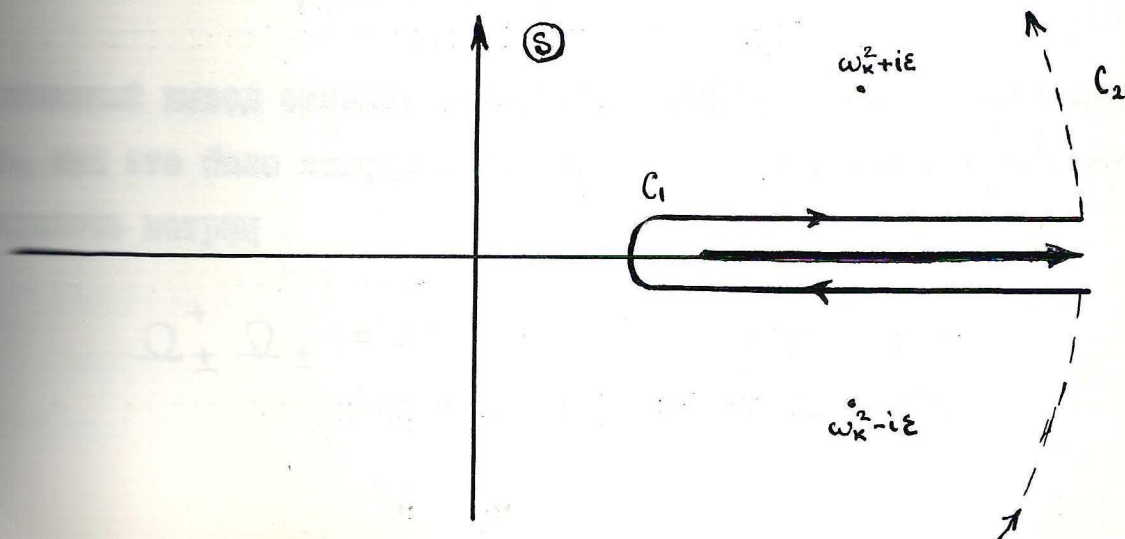


рис 2

Преобразуем контур интегрирования C_1 в контур C_2 (рис.2).
 Следовательно из вида функции $\mathcal{D}(s)$ (выражение (3.8)) сле-
 дует, что нули $\mathcal{D}(s)$ расположены на вещественной оси справа
 от минимальной частоты ω_0 . Поэтому подынтегральная функция
 в (4.3) имеет полюсы только в точках

$$s = \omega_k^2 \pm i\varepsilon,$$

Принимая во внимание, что

$$\mathcal{D}_{\pm}(\omega_k^2) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{D}(\omega_k^2 \pm i\varepsilon) \quad (4.4)$$

$$[a(k), a^+(k')] = \delta(k - k')$$

Аналогичным же образом можно показать, что

$$[a(k), a(k')] = \frac{(k \bar{k}') f_k f_{k'}}{\omega_k + \omega_{k'}} \left(\frac{1}{\mathcal{D}_-(\omega_{k'}^2)} - \frac{1}{\mathcal{D}_-(\omega_k^2)} \right)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} (k \bar{k}') f_k f_{k'} \int_{C_1} ds \frac{1}{\mathcal{D}(s)} \left(\frac{1}{(s - \omega_{k'}^2 + i\varepsilon)(s + \omega_{k'})} - \frac{1}{(s - \omega_k^2 + i\varepsilon)(s + \omega_k)} \right)$$

Преобразуя так же как и выше контур C_1 в C_2 получим

$$[a(k), a(k')] = 0 \quad (4.5)$$

Следующий вывод относительно нулей функции $\mathcal{H}$ обеспечива-
 ющий, как это было показано А.Клейном и Мак-Кормиком [4], уни-
 тарность матриц

$$\Omega_{\pm}^+ \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} \Omega_{\pm}^+ = 1 \quad (4.6)$$

Перейдем к вопросу о собственных функциях оператора H_0 .

Используя матричные обозначения, запишем выражение (4.1)

в виде:

$$\begin{aligned} a &= M_1 \alpha + M_2^* \alpha^+ \\ \alpha^+ &= M_1^* \alpha^+ + M_2 \alpha \end{aligned} \quad (4.7)$$

где M_1 и M_2 следующие матрицы [30]

$$(\bar{k}|M_1|\bar{k}') = \frac{1}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} (\omega_k + \omega_{k'}) (\bar{k}|\Omega_+|\bar{k}') \quad (4.8)$$

$$(\bar{k}|M_2|\bar{k}') = \frac{1}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} (\omega_k - \omega_{k'}) (\bar{k}|\Omega_+|\bar{k}')$$

Из свойства унитарности преобразования (4.7) следует

$$M_2 M_1^+ = M_1^* M_2^T$$

$$(M_1^+)^{-1} = M_1 - M_2^* (M_1^*)^{-1} M_2 \quad (4.9)$$

Преобразование операторов обратное (4.7) имеет на основании (4.9) следующий вид

$$\begin{aligned} \alpha &= a M_1^* - \alpha^+ M_2^* \\ \alpha^+ &= \alpha^+ M_1 - \alpha^+ M_2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Функционал основного состояния оператора $\mathcal{H}$ определяется из соотношения

$$\alpha \Psi_0 = 0 \quad (4.11)$$

Рассмотрим представление Фока для функционала Ψ_0 . В представлении Фока оператору рождения α^+ соответствует оператор умножения на вспомогательную функцию $\bar{a}$, а оператору поглощения — оператор функциональной производной по $\bar{a}$ [33][34].

Пологая $\Psi_0 = \Lambda \Phi_0$ — где Φ_0 — функционал математического вакуума $\alpha \Phi_0 = 0$ получим из (4.10) следующее выражение

для Ψ_0 :

$$\Psi_0 = \Lambda \Phi_0 = c \exp \left\{ \frac{1}{2} \bar{a} A a \right\} \Phi_0 \quad (4.12)$$

$$A = A^T = (M_z^*) (M_1^*)^{-1}$$

Постоянная c определяется из условия нормировки,

Таким образом в рассмотренном выше приближении собственный функционал оператора энергии имеет на основании (1.2), (1.4), (4.12) следующий вид:

$$\Psi_0 \sim e^{i(P - \sum_k \bar{k} a_k^+ a_k) \bar{a}} e^{\sum_k f_k (a_k - a_k^+) \frac{1}{2} \iint (\bar{k} l m | \bar{k}) a_k^+ a_l^+ d\bar{k} d\bar{k}'} \Phi_0 \quad (4.13)$$

Если обозначить

$$|n\rangle = |k_1, k_2, \dots, k_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_n}^+ \Phi_0$$

то можно показать, что отличными от нуля будут лишь те матричные элементы оператора Λ , которые ответственны за изменение числа квантов на четное число: $(n' | \Lambda | n) \neq 0$,

$$\text{если } n' = n, n \pm 2, n \pm 4 \quad \text{и т.д.}$$

Вычислим математическое ожидание от оператора H_I с собственными функциями Ψ_0 оператора H_0 . Рассмотрим выражение

$$(\Psi_0, a_k \Psi_0) = \sum_n (\Phi_0, \Lambda^+ \Phi_n) (\Phi_n, a_k \Lambda \Phi_0) \quad (4.14)$$

Первый из сомножителей в (4.14) отличен от нуля при четном n , другой при нечетном. Поэтому (4.14) равняется нулю. Аналогичным же образом можно убедиться в равенстве нулю математи-

математического ожидания от произведения трех операторов поля в H_I .
Рассмотрим математическое ожидание

$$\frac{1}{2} \iint (\bar{\kappa}, \bar{\kappa}') (\Psi_0, a_{\bar{\kappa}}^+ a_{\bar{\kappa}'}^+ a_{\kappa} a_{\kappa'} \Psi_0) d\bar{\kappa} d\bar{\kappa}' \quad (4.15)$$

функции $f(\kappa, \kappa') = (\Psi_0, a_{\bar{\kappa}}^+ a_{\bar{\kappa}'}^+ a_{\kappa} a_{\kappa'} \Psi_0)$ представляет норму вектора $a_{\kappa} a_{\kappa'} \Psi_0$ и будет положительно определенной при всех значениях κ и κ' . Если в (4.15) заменить $\bar{\kappa} \rightarrow -\bar{\kappa}$, то все выражение изменит свой знак, и поэтому (4.15) также равно нулю.

Определим теперь вид функции f_{κ} из требования минимума энергии E_0 , определяемой выражением (2.15). Приравняв нулю функциональную производную $\delta E_0 / \delta f_{\kappa}$ получим:

$$f_{\kappa} = -g \frac{V_{\kappa}}{1 + \frac{\kappa^2}{2\mu(\kappa)}} \quad (4.16)$$

где функция $\mu^{-1}(\kappa)$ будет удовлетворять следующему интегральному уравнению

$$\mu^{-1}(\kappa) = \frac{\omega_{\kappa}}{2\pi i} \int \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_{\kappa}^2) \left(1 - \frac{2}{3} \sum_{\kappa'} \frac{\omega_{\kappa'} \kappa'^2 f_{\kappa'}^2}{s - \omega_{\kappa'}^2}\right)} \quad (4.17)$$

Интегрирование в комплексной плоскости s в (4.17) и в (2.15) может быть сведено к интегрированию вдоль вещественной оси.

Если положить

$$\Phi_+(z) = \Phi(z + iz) = \varphi_1(z) + i\varphi_2(z)$$

то для φ_1 и φ_2 получим согласно (3.8)

$$\varphi_1(\omega_k^2) = 1 + \frac{1}{3\pi^2} \text{v.p.} \int \frac{\omega_{k'} \kappa'^4 f_{k'}^2}{\omega_{k'}^2 - \omega_k^2} dk' \quad (4.18)$$

$$\varphi_2(\omega_k^2) = \frac{\kappa^3 f_k^2}{6\pi} \quad (4.19)$$

Имеем

$$\ln \frac{\mathcal{D}_+(\omega_k^2)}{\mathcal{D}_-(\omega_k^2)} = 2i \arctg \frac{\kappa^3 f_k^2}{6\pi \varphi_1(\omega_k^2)} \quad (4.20)$$

Подставляя выражение (4.20) в (2.15) получим

$$E_0 = \frac{3}{2\pi} \int_0^\infty dk \cdot k \cdot \arctg \frac{\kappa^3 f_k^2}{6\pi \varphi_1(\omega_k^2)} + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty k^2 (2g V_k f_k + f_k^2) dk \quad (4.21)$$

Функция μ^{-1} может быть записана в виде:

$$\mu^{-1}(k) = \frac{\varphi_1(\omega_k^2)}{\varphi_1^2(\omega_k^2) + \varphi_2^2(\omega_k^2)} + \frac{2\omega_k}{\pi} \text{v.p.} \int dk' k' \frac{\varphi_2(\omega_{k'}^2)}{\varphi_1^2(\omega_{k'}^2) + \varphi_2^2(\omega_{k'}^2)} \quad (4.22)$$

$$\frac{1}{\omega_k^2 - \omega_{k'}^2}$$

Выражение (4.22) можно получить непосредственно из (4.21), если приравнять нулю полную функциональную производную от энер-

гии по функциям f_k

$$\frac{\delta E_0}{\delta f_k} = \frac{\delta' E_0}{\delta' f_k} + \int \frac{\delta E_0}{\delta \varphi_1(x')} \frac{\delta \varphi_1(x')}{\delta f_k} d\bar{x}' = 0$$

где через $\delta' E / \delta' f_k$ обозначена явная функциональная производная. При практическом вычислении по теории возмущений выражения (4.21), (4.22) однако, менее удобны чем (2.15), (4.17).

Решение интегрального уравнения (4.22) в общем случае, по-видимому, получить невозможно. Поэтому, если теория возмущений неприменима, то энергию проще всего вычислять прямым вариационным методом.

§ 5. Вычисление энергии в случае слабой и промежуточной связи.

Решение уравнения (4.20) и вычисление энергии (2.15) по теории возмущений может быть произведено разложением подинтегральных функций (4.20), (2.15) в ряд по константе связи. Существенно при этом отметить, что после интегрирования по S функция μ^1 и энергия E_0 не содержит сингулярных членов. Например, если вычислить первые четыре члена разложения в формуле (2.15), то для энергии E_0 получится, после алгебраических преобразований, следующее выражение

$$E_0 = \sum_k \left(\omega_k^0 + \frac{\kappa^2}{2} \right) f_k^2 + 2g \sum_k V_k f_k - \frac{1}{6} \sum_{k,k'} \frac{\kappa^2 f_k^2 \kappa'^2 f_{k'}^2}{\omega_k + \omega_{k'}} +$$

$$+ \frac{2}{27} \sum_{k,k',k''} \frac{\kappa^2 f_k^2 \kappa'^2 f_{k'}^2 \kappa''^2 f_{k''}^2 (\omega_k + \omega_{k'} + \omega_{k''})}{(\omega_k + \omega_{k'}) (\omega_{k'} + \omega_{k''}) (\omega_{k''} + \omega_k)} -$$

(5.1)

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{27} \sum_{\kappa, \kappa', \kappa'', \kappa'''} \frac{\kappa^2 f_{\kappa}^2 \dots \kappa'''^2 f_{\kappa'''}^2 \left\{ (\omega_{\kappa}^2 + \omega_{\kappa'}^2 + \omega_{\kappa''}^2 + \omega_{\kappa'''}^2) (\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'} + \omega_{\kappa''} + \omega_{\kappa'''}) \right. \\
 & \left. - (\omega_{\kappa}^3 + \omega_{\kappa'}^3 + \omega_{\kappa''}^3 + \omega_{\kappa'''}^3) + 2 (\omega_{\kappa} \omega_{\kappa'} \omega_{\kappa''} + \omega_{\kappa} \omega_{\kappa'} \omega_{\kappa'''} + \right. \\
 & \left. + \omega_{\kappa} \omega_{\kappa''} \omega_{\kappa'''} + \omega_{\kappa'} \omega_{\kappa''} \omega_{\kappa'''}) \right\}}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}) (\omega_{\kappa'} + \omega_{\kappa''}) (\omega_{\kappa''} + \omega_{\kappa'''}) (\omega_{\kappa'''} + \omega_{\kappa'}) (\omega_{\kappa'''} + \omega_{\kappa''}) (\omega_{\kappa''} + \omega_{\kappa})}
 \end{aligned}$$

функция μ^{-1} и, следовательно, функция f_{κ} могут быть пред-
 ставлены рядом по константе связи. В соответствии с выбранным
 приближением относительно g следует подставлять функции f_{κ}
 в различные члены разложения (5.1) с различной точностью. Рас-
 смотрим в качестве примера теорию поляронов. Положим для крат-
 кости письма, что частота продольных оптических колебаний кри-
 сталлической решетки ω_{κ}^0 равна единице. Функции V_{κ} и ω_{κ} бу-
 дут для этой задачи равняться

$$V_{\kappa} = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{2}} \right)^{1/2} \frac{1}{\kappa}, \quad \omega_{\kappa} = 1 + \frac{\kappa^2}{2} \quad (5.2)$$

Вычислим энергию с точностью до членов g^6 включительно.
 Запишем μ^{-1} в виде

$$\mu^{-1} = 1 + g^2 \mu_1 + g^4 \mu_2$$

В первые два члена (5.1) следует, вообще говоря, подставить μ^{-1}
 с точностью до g^4 , в третий с точностью до g^2 и, наконец,
 в последнем члене ограничиться функциями нулевого приближения

$$\mu_0 = 1, \quad f_{\kappa}^0 = -g \frac{V_{\kappa}}{1 + \frac{\kappa^2}{2}} \quad (5.3)$$

Однако члены с $\mu_2 g^4$ в сумме $\sum_{\kappa} (1 + \frac{\kappa^2}{2}) f_{\kappa}^2 + \sum_{\kappa} V_{\kappa} f_{\kappa}$

взаимно уничтожаются. Поэтому для вычисления энергии в приближении g^6 достаточно знать μ^{-1} с точностью до g^2 :

$$\mu^{-1}(\kappa) = 1 - \frac{2}{3} g^2 \frac{1}{(\sqrt{2 + \frac{\kappa^2}{2}} + 1)^2} \quad (5.4)$$

Четвертый член в разложении (5.1) может быть, на основе симметрии подинтегральной функции, заменен на следующий

$$\frac{1}{9} \sum_{\kappa} \kappa^2 f_{\kappa}^2 \left(\sum_{\kappa'} \frac{\kappa'^2 f_{\kappa'}^2}{\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}} \right)^2$$

Выражая E_0 через f_{κ}^0 получим

$$E_0 = \sum_{\kappa} (1 + \frac{\kappa^2}{2}) f_{\kappa}^{02} + 2g \sum_{\kappa} V_{\kappa} f_{\kappa}^0 - \frac{1}{6} \sum_{\kappa \kappa'} \frac{\kappa^2 f_{\kappa}^{02} \kappa'^2 f_{\kappa'}^2}{\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}} + \frac{g^6}{9} \sum_{\kappa} \frac{\kappa^2 f_{\kappa}^{02}}{(\sqrt{2 + \frac{\kappa^2}{2}} + 1)^4} \left(1 - \frac{\kappa^2}{1 + \frac{\kappa^2}{2}} \right) \quad (5.5)$$

Первые два члена в (5.5) равняются

$$E_0 = -g^2 - \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} - \frac{4}{3\pi} \right) g^4$$

третий член равен нулю. Однако (5.5) еще не дает правильного выражения для членов порядка g^6 , т.к. еще необходимо принять во внимание оператор H_I .

Действительно, рассмотрим в H_I члены линейные по a_{κ} . С точностью до g^3 функция f_{κ} на основании (5.4) равна

$$f_{\kappa} = -g \frac{V_{\kappa}}{1 + \frac{\kappa^2}{2}} \left(1 + \frac{g^2}{3} \frac{\kappa^2}{(1 + \frac{\kappa^2}{2})} \frac{1}{(\sqrt{2 + \frac{\kappa^2}{2}} + 1)^2} \right) \quad (5.6)$$

Если подставить (5.6) в указанные члены в H_I , то получим

$$H_I^{(1)} = -\frac{1}{3} g^3 \sum_k v_k (a_k + a_k^+) \quad (5.7)$$

$$v_k = \frac{\kappa^2 V_k}{(1 + \frac{\kappa^2}{2}) (\sqrt{2 + \frac{\kappa^2}{2}} + 1)^2}$$

Рассмотрим (5.7) во втором приближении теории возмущений. При суммировании по промежуточным состояниям следует, вообще говоря, пользоваться собственными функциями Ψ_n оператора $\mathcal{H}$.

Последние, в свою очередь могут быть разложены в ряд по константе связи. Так как $H_I^{(1)}$ уже содержит множитель g^3 , то очевидно, достаточно взять в качестве волновых функций промежуточных состояний собственные функции оператора $H_0 = \sum_k \omega_k a_k^+ a_k$

Таким образом получаем следующую поправку к энергии

$$\begin{aligned} -g^6 \frac{1}{18\pi^2} \int_0^\infty \frac{V_k^2 \kappa^6 d\kappa}{(1 + \frac{\kappa^2}{2})^3 (\sqrt{2 + \frac{\kappa^2}{2}} + 1)^4} &= -g^6 \frac{1}{9\pi} \left(\frac{11\pi}{16} - \frac{32}{15} \right) \\ &= -0.9376 \left(\frac{g^2}{10} \right)^3 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Рассмотрим, далее, следующие два члена в

$$H_I^{(2)} = \sum_{kk'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} (a_k^+ a_k a_{\kappa'} + a_{\kappa'}^+ a_k^+ a_k)$$

Функция основного состояния с точностью до членов порядка g^2 будет на основании (4.15), (4.16) равняться

$$\Psi_0 \approx \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{kk'} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{\omega_k + \omega_{\kappa'}} a_k^+ a_{\kappa'}^+ \right) \Phi. \quad (5.9)$$

Рассмотрим функцию

$$\Psi_{1g} = \left(1 - \frac{1}{2} \sum_{kk'} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{\omega_k + \omega_{\kappa'}} a_k^+ a_{\kappa'}^+ \right) a_g^+ \Phi. \quad (5.10)$$

которая является приближенной собственной функцией $\mathcal{H}$, соответствующей собственному значению $E_q = E_0 + \omega_q$.

Имеем:

$$H_I^{(2)} \Psi_0 = - \sum_{\kappa, \kappa'} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}')^2 f_{\kappa} f_{\kappa'}^2}{\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}} a_{\kappa}^+ \Phi_0 - \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} \sum_{\kappa, \kappa''} \frac{(\kappa \kappa'') f_{\kappa} f_{\kappa''}}{\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa''}} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'}^+ a_{\kappa''}^+ \Phi_0.$$

В нижнем приближении теории возмущений матричный элемент

$(\Psi_{1q}, H_I^{(2)} \Psi_0)$ может быть заменен на

$$(\Psi_{1q}, H_I^{(2)} \Psi_0) = - \sum_{\kappa} \frac{(q \kappa)^2 f_q f_{\kappa}^2}{\omega_{\kappa} + \omega_q}$$

Ограничиваясь при суммировании по промежуточным состояниям функцией Ψ_{1q} , получим поправку к энергии

$$- \sum_q \frac{1}{\omega_q} \left(\sum_{\kappa} \frac{(\bar{q} \bar{\kappa})^2 f_q f_{\kappa}^2}{\omega_q + \omega_{\kappa}} \right)^2, \quad (5.11)$$

которая численно равна (5.8).

Таким образом искомое разложение для энергии имеет вид

$$E_0 = -g^2 - 1,26 \left(\frac{g^2}{10} \right)^2 - 1,875 \cdot \left(\frac{g^2}{10} \right)^3 \quad (5.12)$$

Методом континуального интегрирования Фейнман [3] получил для энергии основного состояния E выражение

$$E = -g^2 - 1,23 \left(\frac{g^2}{10} \right)^2 - 0,64 \left(\frac{g^2}{10} \right)^3 \quad (5.13)$$

Ли, Лоу и Пайнс [9] использовали для вычисления энергии метод промежуточной связи Томонага и получили первый член в (5.12). Таким образом приближение промежуточной связи содержится в качестве нулевого приближения в наших формулах. Используя обычную теорию возмущений, Хага [35] вычислил второй член в (5.12). Результат Хага в точности совпадает с приведенным в (5.12).

Приведем для сравнения значения энергии, вычисленные по формуле (5.12) и по методу континуального интегрирования Фейнмана для ряда значений констант связи. Значения энергии по методу Фейнмана взяты из работы Шульца [22], который минимизировал на вычислительной машине энергию относительно параметров u и v теории Фейнмана. Во второй строке таблицы приведены результаты автора, в последней строке — полученные С.И. Некаром [17], Н.Н. Боголюбовым [25] и С.В. Тябликовым [26].

$E \backslash g^2$	3	5	7	9	11
E_Φ	-3,1333	-5,4401	-8,1127	-11,486	-15,710
E_T	-3,164	-5,549	-8,26	-11,39	-15,02
$E_{\text{пвт}}$			-6,83	-10,81	-14,7

Приведем также некоторые значения энергии из недавней работы Е.А. Гросс [36] (в последней строке результаты автора)

$E \backslash g^2$	5,96	6,20	6,75	9,55
E_Γ	-6,03	-6,28	-7,08	-11,8
E_T	-6,80	-7,13	-7,9	-12,33

Из приведенной выше таблицы следует, что вплоть до значений $g^2 = 8$ вычисленная по формуле (5.12) энергия оказывается меньшей чем энергия, найденная по методу континуального интегрирования. При больших значениях g^2 начинает уже играть отброшенный в (5.12) член порядка g^8 , и поэтому энергия по методу Фейнмана оказывается меньшей чем по формуле (5.12).

Вычисление перенормированной эффективной массы m^* проводится в принципе так же как и вычисление энергии с той лишь разницей, что для E следует брать не выражение (2.15) а формулу (А.7) приложения:

$$E = \frac{p^2}{2} - \frac{i}{8\pi} \int \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \prod_{i=1}^3 D_i(s) + 2g \sum_k V_k f_k + \sum_k \{ \omega_k^0 - (\bar{\kappa} \bar{E}) \} f_k^2 + \frac{1}{2} \left(\sum_k \bar{\kappa} f_k^2 \right)^2$$

Вычисления ^{х)} приводят к следующему значению m^*

$$\begin{aligned} \frac{m^*}{m} &= 1 + \frac{g^2}{6} + 2 \left(2 + \frac{3\pi}{4} \right) \frac{g^2}{9\pi} \\ &= 1 + 1,67 \left(\frac{g^2}{10} \right) + 2,24 \left(\frac{g^2}{10} \right)^2 \end{aligned}$$

х) Эти вычисления выполнены в дипломной работе Е.А.Павловой на кафедре теоретической физики ЛГУ.

§ 6. Энергия полярона в приближении сильной связи

Обратимся к уравнению (4.17) для функции μ . Это уравнение можно представить в виде

$$\mu^{-1} = \frac{\omega_k}{2\pi i} \int_c \frac{ds}{\sqrt{s}} \frac{1}{(s - \omega_k^2) \mathcal{D}(s)} \quad (6.1)$$

где согласно (2.14) $\mathcal{D}(s)$ имеет вид

$$\mathcal{D}(s) = 1 - \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k \kappa^4 f_k^2 d\kappa}{s - \omega_k^2} \quad (6.2)$$

Преобразуем выражение (6.2) к виду:

$$\mathcal{D}(s) = \mathcal{D}(1) + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k \kappa^4 f_k^2 d\kappa}{(\omega_k^2 - 1)(\omega_k^2 - s)} \quad (6.3)$$

где $\mathcal{D}(1) = \mathcal{D}(s)|_{s=1} = 1 + Q$, причём согласно (6.2) величина Q равняется

$$Q = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k \kappa^4 f_k^2 d\kappa}{(\omega_k^2 - 1)} \quad (6.4)$$

Для выяснения характера решения в области сильной связи рассмотрим прежде всего аналитические свойства функции $\mathcal{D}(s)$.

Функция $\mathcal{D}(s)$ как функция комплексного переменного s обладает следующими свойствами:

1. $\mathcal{D}(s)$ имеет разрез вдоль вещественной оси от $s = 1$

(от $s = \omega(\cdot)$) до ∞ и не имеет ни нулей ни полюсов.

$$2. \mathcal{D}^*(s) = \mathcal{D}(s^*)$$

3. При стремлении s к бесконечности $s \mathcal{D}(s)$ возрастает не медленнее s .

Перечисленные выше свойства непосредственно вытекают из выражения (6.2) для $\mathcal{D}(s)$.

Действительно полюс $\mathcal{D}(s)$ может быть расположен лишь на вещественной оси, т.к. в силу положительной определенности функции $\omega_k k^4 f_k^2$ в (6.2) уравнение

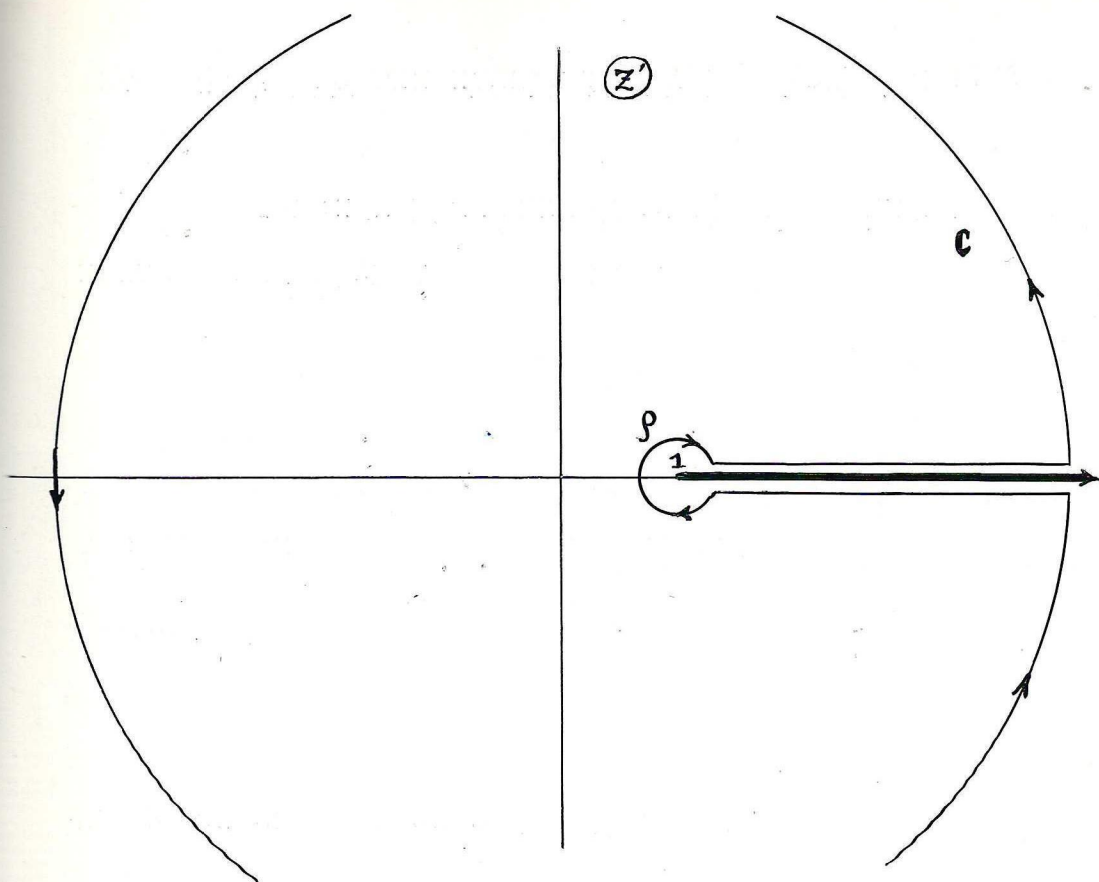
$$1 + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \frac{\omega_k k^4 f_k^2 (\omega_k^2 - s_0 + i\varepsilon)}{(\omega_k^2 - s_0)^2 + \varepsilon^2} dk = 0$$

может выполняться лишь при $\varepsilon = 0$. Кроме того, $\mathcal{D}(s)$ является монотонно возрастающей функцией от s ($\mathcal{D}'(s) > 0$ при $s < 1$) и при $s_0 \rightarrow -\infty$ $\mathcal{D}(s)$ обращается в единицу. Поэтому $\mathcal{D}(s)$ не может иметь нулей при $-\infty < s_0 < 1$.

Учитывая сказанное функция $(s-1) \mathcal{D}(s)$ оказывается представимой в виде

$$\frac{1}{(s-1)\mathcal{D}(s)} = \frac{1}{2\pi i} \int_{C+p} \frac{ds'}{(s'-s)(s'-1)\mathcal{D}(s')} \quad (6.5)$$

где в интеграле Коши в (6.5) контур интегрирования $C+p$ указан на рис.3.



Подинтегральная функция в (6.5) имеет полюс при $s' = 1$ и разрез от $s' = 1$ до $s' \Rightarrow \infty$. Выполняя в (6.5) интегрирование вдоль верхней и нижней стороны разреза получим следующее интегральное уравнение для

$$\frac{1}{\mathfrak{D}(s)} = \frac{1}{1+Q} + \frac{s-1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{\omega_k k^4 f_k^2 dk}{(\omega_k^2 - 1)(s - \omega_k^2) |\mathfrak{D}(\omega_k^2)|^2} \quad (6.6)$$

Подставляя (6.6) в (6.1) придем к следующему интегральному уравнению для μ^{-1}

$$\mu^{-1} = \frac{1}{1+Q} + \frac{1}{3\pi^2} \int_0^{\infty} \frac{(\omega_k \omega_{k'} + 1) k'^4 f_{k'}^2 dk'}{(\omega_{k'}^2 - 1)(\omega_k + \omega_{k'}) |\mathfrak{D}(\omega_{k'}^2)|^2} \quad (6.7)$$

Преобразуем теперь выражение (2.15) для ΔE с помощью интегрирования по частям к виду

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty d\kappa \omega_\kappa \kappa^4 f_\kappa^2 \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{\sqrt{s}}{(s - \omega_\kappa^2)^2} \frac{1}{\mathfrak{D}(s)} ds \quad (6.8)$$

Подставляя в (6.8) выражение для функции $\mathfrak{D}(s)$ из (6.6) представим ΔE в виде

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\kappa^4 f_\kappa^2 d\kappa}{2(1+Q)} + \frac{1}{12\pi^4} \iint_0^\infty \frac{\kappa^4 f_\kappa^2 \kappa'^4 f_{\kappa'}^2 \omega_{\kappa'} [\omega_\kappa \omega_{\kappa'} + \omega_\kappa (\omega_\kappa + \omega_{\kappa'}) + 1]}{(\omega_\kappa + \omega_{\kappa'})^2 |\mathfrak{D}(\omega_{\kappa'}^2)|^2 (\omega_{\kappa'}^2 - 1)} \underbrace{(d\kappa d\kappa')}_{(6.9)}$$

Прежде чем перейти к дальнейшему вычислению энергии поясним смысл введенной выше константы Q . Если бы мы с самого начала записали оператор $\mathcal{H}_0$ в виде

$$\mathcal{H}_0 = \sum_\kappa \omega_\kappa a_\kappa^+ a_\kappa + \lambda \left(\sum_\kappa \bar{\kappa} f_\kappa (a_\kappa + a_\kappa^+) \right)^2 \quad (6.10)$$

то, как это следует из парной мезонной теории, перенормированная константа связи $\bar{\lambda}$ будет иметь вид [30]

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{1 + \lambda Q} \quad (6.11)$$

который весьма характерен для квантовой теории поля.

Таким образом введенная выше величина Q определяет перенормированную константу связи.

Уравнение (6.7) для функции μ^{-1} имеет в общем случае очень сложную структуру и его точное решение вряд ли представляется возможным. Поэтому для вычисления энергии в общем случае мы воспользуемся прямым вариационным принципом, полагая

$$f_{\kappa} = -V_{\kappa} \varphi(\kappa^2/a^2) \quad (6.12)$$

где φ некоторая функция от κ^2/a^2 . В качестве φ ниже взято следующее выражение

$$\varphi = \exp\left(-\frac{\kappa^2}{2a^2}\right) \quad (6.13)$$

Оценим теперь порядок величины Q в области сильной связи. Подставляя (6.12) в (6.4) получим

$$Q = \frac{4}{3\pi\sqrt{2}} g^2 a \int_0^{\infty} e^{-y^2} \frac{1 + \frac{a^2 y^2}{2}}{1 + \frac{a^2 y^2}{4}} dy \quad (6.14)$$

Интеграл в правой части (6.14) является медленно меняющейся функцией от a^2 , поэтому можно приближенно считать, что величина Q пропорциональна $g^2 a$, т.е. $Q \gg 1$. Для оценки характера решения в области сильной связи возьмем предварительно лишь первый член в (6.9), который с учётом (6.13) и (6.14) будет пропорционален a^2 ; с учётом только этого члена выражение для энергии примет вид

$$\tilde{E} = A a^2 - B g^2 a$$

где A, B — постоянные. Варьируя $\tilde{E}$ по a получим, что $a \sim g^2$, а энергия в области сильной связи будет пропорциональна g^4 .

Рассмотрим теперь общий случай.

Имеем

$$\operatorname{Re} \Phi(\omega_k^2) = 1 + \frac{1}{3\pi^2} \text{v.p.} \int_0^\infty \frac{\omega_{k'} k'^4 f_{k'}^2 d k'}{\omega_{k'}^2 - \omega_k^2} \quad (6.15)$$

$$\operatorname{Im} \Phi(\omega_k^2) = \frac{k^3 f_k^2}{6\pi} \quad (6.16)$$

При вычислении $\operatorname{Re} \Phi(\omega_k^2)$ возникает согласно (6.13) следующий интеграл

$$\text{v.p.} \int_0^\infty k^2 \frac{\exp(-\frac{x^2}{a^2})}{x^2 - k^2} dx, \quad (6.17)$$

который может быть легко вычислен с помощью интегрального преобразования

$$\exp(-\frac{x^2}{a^2}) = \frac{a}{\sqrt{4\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\frac{a^2 y^2}{4} \pm ixy) dy \quad (6.18)$$

и известного выражения для знаковой функции

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{i\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix\tau} \frac{d\tau}{\tau} \quad (6.19)$$

В результате подстановки (6.18) в (6.17) получим

$$\text{V.p. } \kappa^2 \int_0^\infty \frac{e^{-\frac{x^2}{a^2}}}{x^2 - \kappa^2} dx = -\sqrt{\pi} \kappa \int_0^\infty e^{-x^2} \sin(2 \frac{\kappa x}{a}) dx \quad (6.20)$$

и для

$$\text{Re } \mathcal{D}(\omega^2) = 1 + \lambda \mathcal{V}(y) \quad (6.21)$$

$$\mathcal{V}(y) = 1 - y e^{-y^2} \int_0^y e^{t^2} dt - \frac{1}{3} e^{-\frac{1}{3} y^2} \int_{\frac{1}{3}}^y e^{-t^2} dt, \quad (6.22)$$

где введены обозначения

$$\zeta = \sqrt{y^2 + \frac{4}{a^2}}; \quad y = \frac{\kappa}{a}; \quad \lambda = \frac{4}{3} \frac{g^2 a}{\sqrt{2\pi}} \quad (6.23)$$

Таким образом $\text{Re } \mathcal{D}(\omega^2)$ сводится к известным функциям.^{х)} В области сильной связи $a^2 \gg 1$ и $\zeta \rightarrow y$. Переходя в (3.14) под знаком интеграла к пределу больших и вычисляя согласно (6.13) члены $2g \sum_{\kappa} v_{\kappa} f_{\kappa} + \sum f_{\kappa}^2$ в (2.15) представим выражение для энергии E в виде:

х) Функция $e^{-x^2} \int_0^x e^{y^2} dy$ табулирована

$$E = \frac{3}{16} \alpha^2 \left(1 + q\left(\frac{1}{\lambda}\right)\right) - g^2 \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \left(2 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right) \quad (6.24)$$

где функция $q\left(\frac{1}{\lambda}\right)$ представляет двойной интеграл в (6.9) и может быть записана после некоторых алгебраических преобразований в виде

$$q\left(\frac{1}{\lambda}\right) = \frac{2}{\sqrt{\lambda}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2} (1 - \Omega(y)) dy}{\left[\frac{1}{\lambda} + v(y)\right]^2 + \frac{\lambda}{4} y^2 e^{-2y^2}} \quad (6.25)$$

где $\Omega(y)$ следующая функция

$$\Omega(y) = 2y^2 \left\{ (1 + 2y^2) y e^{y^2} \int_y^{\infty} e^{-t^2} dt - y^2 \right\} \quad (6.26)$$

В области сильной связи $1/\lambda \rightarrow 0$ и асимптотическое поведение энергии определяется значением $q(0)$ x). Эта величина была вычислена на основании выражения (6.25) численным интегрированием, в результате которого для было получено значение

$$q(0) = 5,75 \quad (6.27)$$

x) Для получения разложения по обратным степеням константы связи необходимо в общем случае предварительно написать разложение величины α по степеням g^2 . ~~=====~~

Подставляя это значение $q(0)$ в (6.24) и варьируя энергию E по a получим для a значение

$$a = 0,288 g^2 \quad (6.28)$$

Откуда для энергии следует

$$E = -0,105 g^4 \quad (6.29)$$

Это значение весьма близко к известному результату Пекара-Фейнмана

$$E = -0,106 g^4 \quad (6.30)$$

Таким образом развиваемый в настоящей работе метод построения решения в области сильной связи приводит к тем же результатам, что и теория Пекара-Фейнмана ^{х)} и тем самым выделенный выше в (2.1) эффективный гамильтониан включает в себя как приближение слабой, так и приближение сильной связи всех работ по теории полярона.

К рассмотренному выше приближению сильной связи следует сделать два дополнительных замечания. Безразмерным параметром, по которому выполняется интегрирование является величиной $\kappa (h/m\omega)^{1/2}$.

х) Отличие (6.29) и (6.30) составляет 0,001 и разумеется не является принципиальным, так как (6.13) не является точным решением уравнения (6.7) и следовательно, введением еще одного варьируемого параметра можно улучшить результат.

Поскольку далее константа связи для эффективной массы связана с константой связи g_0^2 при $m = m_0$ соотношением

$$g^2 = g_0^2 \left(\frac{m}{m_0} \right)^{1/2}$$

то тем самым фактически область интегрирования при $g^2 \rightarrow \infty$ считается до нуля и в этом смысле (6.29) и (6.30) не являются правильными асимптотическими формулами при $g^2 \rightarrow \infty$. Однако в интересующей нас области $g^2 \approx 8-9$ верхний предел интегрирования составляет (для типичного случая $g_0^2 = 5$) 3,66, а численное интегрирование в (6.25) фактически приходится выполнять до $y = 3,5$, ~~так как~~ во всяком случае порядок выражения для E имеет действительно вид (6.29).

Если даже рассматривать формальную задачу о собственной энергии с бесконечным верхним пределом, то возникает вопрос, в какой мере оператор H_I является возмущением.

Матричные элементы оператора H_I с собственными функциями H_0 вычисляются в приложении Б к первой главе.

При $g^2 \rightarrow \infty$ оператор H_I как в этом нетрудно убедиться уже не является возмущением, однако в области представляющей физический интерес ($g^2 \approx 8-9$) вклад от H_I все еще является малым и достаточно быстро убываю-

щая функция f_k составляет примерно 15%. Заметим кстати, что из метода континуального интегрирования по Фейнману [3] трудно понять в какой мере полученная для энергии асимптотика является верной (В самой работе [3] об этом вообще не говорится ни слова).

В основу метода Фейнмана положено вычисление функции преобразования для перехода вакуум вакуум, которую можно представить в виде континуального интеграла

$$\langle \bar{\pi}'' t'' | \bar{\pi}' t' \rangle = \int \mathcal{D}(\bar{\pi}(t)) e^{i \int \mathcal{L}_p(\bar{\pi}(t)) dt} G_{\infty}(\bar{\pi}(t)) \quad (6.32)$$

где $\mathcal{L}_p$ — функция Лагранжа:

$$\mathcal{L}_p = \frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{\pi}}{dt} \right)^2$$

а G_{∞} имеет вид:

$$G_{\infty} \sim \exp \left\{ \frac{i}{4m\omega} \int_{t'}^{t''} \sum_k \gamma_k(t) \gamma_k(s) e^{-i\omega|t-s|} dt ds \right\}$$

$$\gamma_k = - \frac{4\pi e}{k} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{z}} \quad (6.33)$$

Суммирование по "k" Фейнман заменяет в (6.32) интегрированием в бесконечных пределах, тем самым разумеется и в методе Фейнмана, если говорить о реальной задаче, асимптотика (6.30) остается справедливой лишь в узкой области кон-

стант связи.

Перейдем к вопросу о распределении заряда в поляроне.

Если электрон находится в точке $\vec{r}_e$, то потенциал созданный этим электроном в точке $\vec{r}$ будет равен

$$\varphi(\vec{r} - \vec{r}_e) = \langle \Psi_0(\vec{r}_e), H_{int}(\vec{r}) \Psi_0(\vec{r}_e) \rangle \quad (6.34)$$

где $\Psi_0(\vec{r}_e)$ — собственные функции основного состояния (4.13).

Подставляя в (6.34) H_{int} получим для плотности непрерывно распределенного заряда ρ выражение

$$\rho(\vec{r} - \vec{r}_e) = \frac{1}{4\pi} \langle \Psi_0(\vec{r}_e), \sum_{\vec{k}} k^2 V_{\vec{k}} (e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}}^+) \Psi_0(\vec{r}_e) \rangle \quad (6.35)$$

Подставляя далее в (6.35) функционалы (4.13) получим для ρ с учётом

$$\langle \Omega, a_{\vec{k}} \Omega \rangle = \langle \Omega, a_{\vec{k}}^+ \Omega \rangle = 0$$

где

$$\Omega \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \iint a_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}'}^+ d\vec{k} d\vec{k}' \right\} \Psi_0$$

следующее выражение

$$\rho = \frac{1}{2\pi} \sum_{\kappa} \kappa^2 V_{\kappa} f_{\kappa} e^{i\vec{\kappa}(\vec{r} - \vec{r}_e)}$$

Возьмем функцию f_{κ} в виде (6.16), тогда в области сильной связи получим

$$\rho = -e \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{a^3}{(2\pi)^{3/2}} e^{-\frac{a^2}{2} (\vec{r} - \vec{r}_e)^2} \quad (6.36)$$

где

$$a = 0,288 g^2. \quad (6.37)$$

Полный наведенный заряд будет в соответствии с классическими представлениями равен

$$e' = \int \rho(\vec{r} - \vec{r}_e) d\vec{r}_e = -e \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right)$$

Если определить радиус полярона r_p как радиус сферы, внутри которой находится половина индуцированного заряда (e'), то для r_p получится следующее выражение

$$r_p = \frac{2,18}{a} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2} \quad (6.38)$$

По мере увеличения q^2 радиус полярона согласно (6.37) уменьшается и при достаточно больших q^2 будет меньше постоянной решетки. Последнее обстоятельство указывает на неприменимость макроскопического описания полярона при больших значениях q^2 .

Получающиеся из этих соображений максимальные значения q^2 найдены из (6.38) и приведены в таблице .x)

Эти предельные значения константы связи можно оценить, положив в (6.38) радиус полярона равным постоянной решетки.

x) В первом столбце таблицы приведены постоянные решетки a в Å.

Кристалл	α°	$\left(\frac{\hbar}{2m_0\omega}\right)^{1/2}(\text{\AA})$	$\frac{2\pi}{\alpha} \left(\frac{\hbar}{2m_0\omega}\right)^{1/2}$	$g^2_{\max}$
LiF	4,02	6,84	10,6	8,1
NaCl	5,63	10,88	12,1	9,0
NaF	4,62	8,68	11,8	9,2
NaBr	5,96	12,15	12,8	8,8
NaJ	6,46	13,18	12,3	8,6
KCl	6,28	12,09	12,1	9,2
KBr	6,58	13,76	13,1	10,1
KJ	7,05	18,99	16,9	8,9
RbCl	6,54	13,02	12,5	9,8
RbBr	6,85	15,47	14,2	10,3
RbJ	7,33	16,9	14,5	9,3
AgCl	5,54	12,5	14,2	8,2

Из приведенной таблицы следует, что для большинства полярных кристаллов предельные допустимые значения $g^2_{\max}$ составляют 8-10.

Полученные выше в (6.38) зависимость радиуса полярона от константы связи имеет тот же вид, что и в Фейнмановской теории полярона, согласно которой

$$r_p = \frac{3\sqrt{3\pi}}{2g^2} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{1/2}$$

х) См. [3] формула (2.4) ; в области сильной связи следует положить $v/\omega = \frac{4}{9\pi} g^4$.

Фейнмановская теория приводит к еще более жесткому ограничению констант связи чем настоящая теория.

Таким образом изложенный выше метод учёта отдачи приводит:

- а) к наиболее точным значениям энергии в области слабой и промежуточной связи ;
- б) к правильному значению энергии в области сильной связи ;
- в) к выводу, что радиус полярона убывает (при фиксированном m) в области сильной связи как g^{-2} .

Построенные выше (формула (4.13)) собственные функционалы оператора энергии весьма удобны для решения рассеяния.

§ 7. Теория подвижности поляронов.

Подвижность носителей тока в кристаллах обусловлена рядом факторов. Она зависит от наличия дефектов, дислокаций, от поверхностных эффектов и, наконец, от тепловых колебаний решетки (фононов).

Удельный вклад каждого из этих механизмов рассеяния в общую подвижность зависит от числа объектов, на которых может происходить рассеяние, и от температуры. Исследуя температурную зависимость подвижности можно судить о природе рассеивающего механизма; при этом оказывается, что во многих случаях подвижность обусловлена в значительной степени рассеянием на колебаниях решетки; во всяком случае этот тип рассеяния играет всегда существенную роль и требует тщательного исследования.

Как известно, теория электронно-фононного взаимодействия в полярных кристаллах отличается той особенностью, что обычное подразделение всей системы на две слабо взаимодействующие подсистемы (решетка + электроны) лишено вообще говоря смысла, т.к. взаимодействие между этими подсистемами не является слабым. "Голый" электрон в случае полярных кристаллов является лишь абстракцией, носителями тока являются поляроны, и теорию необходимо с самого начала строить с учётом поляронного эффекта.

При построении обычной теории подвижности исходят из уравнения Больцмана ^{x)}, критерий применимости которого, как из-

x) Более последовательный метод описания заключается в исследовании уравнения для матрицы плотности.

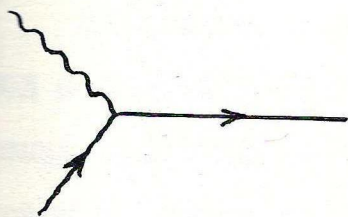
вестно, ограничивается соотношением типа

$$\frac{\hbar}{\tau} < kT \quad (7.1)$$

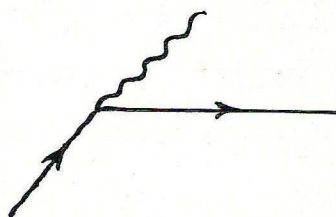
где τ — время релаксации, T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана.

Одна из возможных интерпретаций соотношения (7.1) заключается в следующем. Необходимо, чтобы неопределенность в энергии ($\Delta E \Delta t \sim \hbar$) за время между двумя столкновениями была бы меньше характеристической энергии для данной задачи kT . В области низких температур, даже в случае сильной связи, соотношение (7.1) всегда выполняется, т.к. вероятность столкновения $w = \frac{1}{\tau}$ будет пропорциональна числу фононов $n = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ поэтому при достаточно малых T величина $\frac{1}{\tau}$ будет также малой.

Простейшим типом взаимодействия электрона с фононами являются процессы поглощения и излучения фононов. (фиг.1 и 2).



Фиг.1



Фиг.2.

В релятивистской квантовой теории поля эти процессы не могут быть реальными, т.к. они противоречат закону сохранения энергии-импульса, но в теории твёрдого тела они возможны и на их рассмотрении построена вся обычная теория электропроводности. Однако в случае полярных кристаллов есть основания считать, что процессы 1 и 2 не являются основными (Лоу и Пайнс [21], Шульц [22]).

Действительно:

а) процесс поглощения оптического фонона всегда сопровождается значительным изменением энергии E на величину $\hbar\omega$. Если рассматривать область низких температур, то единственно возможным процессом будет процесс поглощения фонона, после чего электрон сразу же превращается из медленного в быстрый с энергией примерно равной $\hbar\omega$. Быстрый же электрон обладает, вообще говоря, большей вероятностью столкновения чем медленный x), что приведет к нарушению соотношения (7.1).

б) Для вычисления вероятности элементарного процесса I необходимо знать волновую функцию конечного состояния быстрого полярона, способного спонтанно излучить фонон. Эта функция фактически неизвестна.

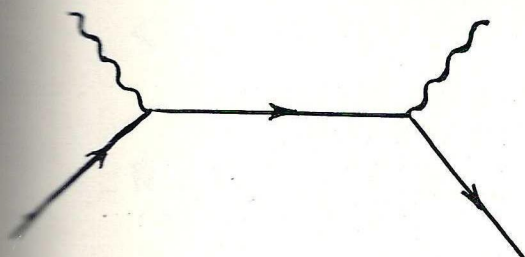
в) Необходимо знать плотность конечных состояний быстрого полярона. Последняя может, вообще говоря, сильно отличаться от обычного дебаевского распределения.

⁰³Выражение а) носит принципиальный характер, б) и в) ставят под сомнение численные характеристики, полученные путём рассмотрения процесса I . Возражение а) можно преодолеть, считая, что сразу же вслед за поглощением фонона) вероятность пропорциональна $\bar{n}$) следует излучение (вероятность $\bar{n}+1$). Иными словами более последовательный метод состоит в рассмотрении рассеяния не как акта поглощения отдельного фонона, а как процесса двойного рассеяния (Комpton-эффекта), в котором фонон виртуально поглощается, а затем снова излучается.

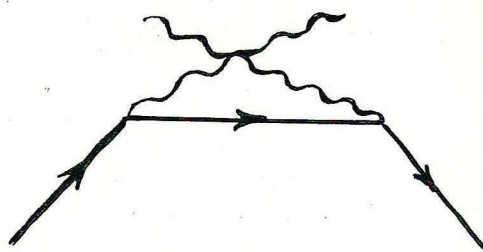
Время жизни возбужденного состояния мала и неопределенности в энергии велика. Итак, с этой точки зрения элементарными про-

х) Вероятность упругого рассеяния пропорциональна при $E = \frac{p^2}{2m^*}$ конечному импульсу P .

цессами будут процессы, приведенные в фиг. 3 и 4.



фиг.3.



фиг.4.

Дополнительным преимуществом этого рассмотрения является то, что волновые функции начального и конечного состояний принадлежат медленному полюрону, т.к. процесс рассеяния является упругим. Функцию распределения по импульсам можно поэтому взять дебаевской $\frac{d\bar{p}}{(2\pi)^3}$. В области слабой связи теория приводит к тем же результатам, что и в процессах I и 2.

Впервые расчёты указанного выше типа были осуществлены Лоу и Пайнсом с помощью волновых функций полярона в первом приближении теории возмущений [21] и затем Шульцем [22] с помощью метода континуального интегрирования Фейнмана [3].

Нашей задачей является вычисление сечения рассеяния в области промежуточной и сильной связи на основе найденных выше функций поляронного состояния.

Основные уравнения теории рассеяния.

Для вычисления сечения рассеяния следует исходить из такого математического аппарата, который учитывает, что начальными и конечными состояниями являются состояния облаченных частиц. Этим математическим аппаратом является развитый в теории поля метод Лоу [23]. Согласно Лоу матричный элемент матрицы рассеяния S может быть записан в виде :

$$\langle \bar{P}, \bar{K} | S | \bar{P}_0, \bar{K}_0 \rangle = \delta(P - P_0) \delta(\bar{K} - \bar{K}_0) - 2\pi i \delta(E_i - E_f) R \quad (7.2)$$

$$R = V_{K_0} V_K \int d\bar{z} \left\{ \Psi_f(\bar{P}, \bar{z}), e^{-i\bar{K}\bar{z}} (H - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} e^{i\bar{K}_0\bar{z}} \Psi_i(\bar{P}_0, \bar{z}) \right. \\ \left. + \Psi_f(\bar{P}, \bar{z}), e^{i\bar{K}_0\bar{z}} (H - E + \omega - i\varepsilon)^{-1} e^{-i\bar{K}\bar{z}} \Psi_i(\bar{P}_0, \bar{z}) \right\} \quad (7.3)$$

где P_0 и K_0 — соответственно начальные импульсы полярона и фотона, P и K — конечные импульсы, E_i и E_f — начальная и конечная энергии $E_i = E_f = \frac{P^2}{2m^*}$, m^* — эффективная масса полярона, Ψ_i и Ψ_f — собственные функции оператора полной энергии, — — — — — волновые функции полярона, приближенный вид которых был найден выше (4.13). Слагаемое $-i\varepsilon$ в (7.3) в выражении $(H - E - \omega - i\varepsilon)^{-1}$ вводится для того, чтобы получить расходящуюся волну в координатном представлении. Выражение (7.3) отличается от обычной теории в следующих двух отношениях:

- 1) Ψ_i и Ψ_f являются собственными функциями облаченной частоты, т.е. собственной функции оператора полной энергии.
- 2) в выражении $(H - E - \omega - i\varepsilon)^{-1}$ стоит не оператор H_0 , как в обычной теории возмущений, а оператор полной энергии.

Как далее будет видно вклад в амплитуду рассеяния в области низких температур вносит лишь первый матричный элемент в (7.3) вычисление которого и рассматривается ниже.

Используя соотношение

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

можно прежде всего перенести в (7.3) множитель

$$T = \exp \left\{ i (P_0 + \kappa_0 - \sum_{\kappa} \bar{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}) \bar{\tau} \right\}$$

справа налево и проинтегрировать по объёму $d\bar{\tau}$. В результате получаем

$$\langle \bar{P}, \bar{\kappa} | S^{-1} | P_0, \kappa_0 \rangle = -i (2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\bar{P}_0 + \bar{\kappa}_0 - \bar{P} - \bar{\kappa}) M \quad (7.6)$$

где $M = V_{\kappa} V_{\kappa_0} (\Omega, U^{-1}(P) (H' - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} U(P_0) \Omega)$

$$H' = T^{-1} H T$$

$$U = \exp \left\{ \sum_{\kappa} f_{\kappa} (a_{\kappa} - a_{\kappa}^{\dagger}) \right\} \quad (7.7)$$

Перенесем далее множитель $U(P_0)$ через обратный оператор в (7.8). Имея в виду, кроме того в дальнейшем перейти к пределу

$$P_0 \rightarrow 0, \text{ положим } U^{-1}(E) U(P_0) \approx 1$$

функция M принимает вид

$$M = V_{\kappa_0}^2 (\Omega, (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} \Omega) \quad (7.8)$$

$\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{H}_I$ — суть следующие операторы ^{x)}:

$$\mathcal{H}_0 = H_0 + \frac{\bar{P}_0 \bar{\kappa}_0}{m^*} + \frac{\kappa_0^2}{2m} \quad (7.9)$$

$$\mathcal{H}_I = H_I - \frac{1}{m} \sum_{\kappa} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} \quad (7.10)$$

а H_0 и H_I операторы энергии полярона (1.5) и (1.6).

^{x)} В § 7 константа связи g исключена в функции V_{κ} . Суммирование по κ подразумевает кроме того дальнейший переход к интегрированию.

Обозначения следующие:

$$\sum_{\kappa} \bar{\kappa} f_{\kappa}^2 = \eta \bar{P}$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} (1 - \eta) \quad (7.11)$$

$$\varphi_{\kappa} = - \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0)}{m} f_{\kappa} + V_{\kappa} + f_{\kappa} \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2m} - \frac{P_0 \kappa_0}{m^*} \right) \equiv$$

$$\equiv - \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0)}{m} f_{\kappa} + \Phi_{\kappa} \quad (7.12)$$

Оператор H_0 выбрать в форме (7.9) с тем расчётом, чтобы функционал Ω был собственным функционалом оператора H_0 .

Перейдем к вычислению матричного элемента (7.8). Введём с этой целью, следуя Лоу и Хайнсу [21] функционал

$$\alpha \tilde{\Omega} = (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_I - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} \Omega \quad (7.13)$$

который удовлетворяет интегральному уравнению

$$\tilde{\Omega} = \Omega - (\mathcal{H}_0 - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} \mathcal{H}_I \tilde{\Omega} \quad (7.14)$$

где

$$\alpha^{-1} = \frac{\kappa_0^2}{2m} + \frac{\bar{P}_0 \bar{\kappa}_0}{m^*} - \omega - i\varepsilon \quad (7.15)$$

Полный ортонормированной системой собственных функций является следующая система ^{x)}

$$\Omega_{\kappa_1 \dots \kappa_n} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \alpha_{\kappa_1}^+ \alpha_{\kappa_2}^+ \dots \alpha_{\kappa_n}^+ \Omega$$

x) См. приложение Б.

где α_k^+ введенные выше операторы физических частиц. Действительно, в силу определения вакуумного состояния

$$\alpha_k \Omega = 0$$

и в силу перестановочных соотношений $[\alpha_k, \alpha_{k'}^+] = \delta_{kk'}$ функционалы Ω_n являются ортогональными

$$(\Omega_n, \Omega_{n'}) = \delta_{nn'}$$

и кроме того на основании соотношения

$$[H_0, \alpha_k^+] = \omega_k \alpha_k^+$$

функционалы Ω являются собственными функционалами H_0 .

Итак, функционал $\tilde{\Omega}$ можно представить в виде

$$\tilde{\Omega} = u \Omega + \sum_k \tilde{v}_k \alpha_k^+ \Omega + \sum_{kk'} w_{kk'} \alpha_k^+ \alpha_{k'}^+ \Omega + \dots \quad (7.16)$$

Подставляя разложение (7.16) в (7.14) можно получить систему уравнений для коэффициентов u , $\tilde{v}_k$, $w_{kk'}$, из которых эти коэффициенты могут быть в принципе найдены.

Рассмотрим сначала решение задачи в однофоновом приближении

$$\tilde{\Omega} = u \Omega + \sum_k \tilde{v}_k \alpha_k^+ \Omega \quad (7.17)$$

При вычислении следует иметь в виду, что оператор поглощения α_k при действии на функционал физического вакуума дает не нуль, а следующую величину

$$\alpha_k \Omega = \left(\int A_{kk'} \alpha_{k'}^+ d\vec{k}' \right) \Omega \quad (7.18)$$

где согласно (4.12) матрица $A_{kk'}$ равняется

$$A_{kk'} = M_z^* (M_z^*)^{-1}$$

поэтому функция $\alpha_k^+ \Phi_0$ является линейной комбинацией функ-

и $a_k^+ \Omega$ и разложение (7.17) можно переписать в виде:

$$\tilde{\Omega} = u \Omega + \sum_k v_k a_k^+ \Omega \quad (7.19)$$

Функционалы Ω и $a_k^+ \Omega$, разумеется, являются ортогональными. Подставляя (7.19) в (7.14) получаем с учетом (7.18) следующую систему уравнений

$$u = 1 - a \sum_k v_k \varphi_k \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_k v_k = & -u \varphi_k - u \sum_{k'} A_{kk'} \varphi_{k'} - \frac{u}{m} \sum_{k'} (\bar{k} \bar{k}') f_{k'} A_{kk'} \\ & - \frac{1}{m} \sum_{k'} (\bar{k} \bar{k}') f_k f_{k'} v_{k'} - \frac{1}{m} \sum_{k', k''} A_{kk'} f_{k'} (\bar{k}' \bar{k}'') f_{k''} v_{k''} \end{aligned} \quad (7.21)$$

где через ΔE обозначена величина

$$\Delta E = \frac{1}{2m} (\bar{k} - \bar{k}_0)^2 + \frac{1}{m^*} \bar{P}_0 (\bar{k}_0 - \bar{k}) - i\varepsilon \quad (7.22)$$

Будем решать систему уравнений (7.21) и (7.20) в предельном случае малых импульсов (низкие температуры). Как будет видно в дальнейшем зависимость от P_0 существенна главным образом в выражении (7.22), т.к. эта зависимость придает амплитуде рассеяния вид

$$\mathcal{M}(k_0) \sim \frac{B}{(k_0^2 - k_c^2) + i\Delta E}$$

что в свою очередь приводит к тому, что сечение рассеяния при $P_0 \rightarrow 0$ стремится не к нулю, а к постоянному пределу [21].

Поэтому в правых частях (7.22) можно положить P_0 . Можно далее показать, что матрица $A_{kk'}$ имеет следующую структуру

$$A_{kk'} = (\bar{k} \bar{k}') Q(k, k') \quad (7.23)$$

где $Q(k, k')$ зависит только от модулей $|\bar{k}|$ и $|\bar{k}'|$. Обозначая через

$$\bar{k}_0 = \sum_k \bar{k}' f_{k'} v_{k'}$$

запишем (7.21) в виде:

$$\Delta E_{\kappa} v_{\kappa} = u \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0)}{m} (f_{\kappa} + T_{\kappa})(1 - \zeta) - u (\Phi_{\kappa} + \Pi_{\kappa}) \quad (7.24)$$

где

$$T_{\kappa} = \sum_{\kappa'} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}')^2}{\kappa'^2} Q(\kappa, \kappa') \quad ; \quad \Pi_{\kappa} = \frac{\kappa^2}{m} T_{\kappa} \quad (7.25)$$

Подставляя (7.24) в (7.20) получим

$$au = \left\{ \frac{\kappa_0^2}{2m} \frac{1 - I - K + 2U}{1 + I + K} - \omega(N + T + 1) \right\}^{-1} \quad (7.26)$$

где

$$U = 2L + M + (L + Q)(L + M)$$

I, K, L, M, N, S, T следующие функции от κ_0 .

$$I = \sum_{\kappa} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0)^2 f_{\kappa}^2}{m \kappa_0^2 \Delta E_{\kappa}} \quad ; \quad M = \sum_{\kappa} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) \Phi_{\kappa} T_{\kappa}}{\kappa_0^2 \Delta E_{\kappa}}$$

$$K = \sum_{\kappa} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0)^2 f_{\kappa} T_{\kappa}}{m \kappa_0^2 \Delta E_{\kappa}} \quad ; \quad S = \sum_{\kappa} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) \kappa^2 f_{\kappa} T_{\kappa}}{m \kappa_0^2 \Delta E_{\kappa}} \quad (7.27)$$

$$L = \sum_{\kappa} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) f_{\kappa} \Phi_{\kappa}}{\kappa_0^2 \Delta E_{\kappa}} \quad ; \quad N = \frac{1}{\omega} \sum_{\kappa} \frac{\Phi_{\kappa}^2}{\Delta E_{\kappa}}$$

$$T = \frac{1}{\omega} \sum_{\kappa} \frac{\kappa^2 f_{\kappa} \Phi_{\kappa}}{m \Delta E_{\kappa}}$$

Таким образом исконый матричный элемент матрицы рассеяния оказывается равным:

$$\langle \bar{P}, \bar{k} | S-1 | \bar{P}_0, \bar{k}_0 \rangle = -i(2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\bar{P}_0 + \bar{k}_0 - \bar{P} - \bar{k}) V_{k_0}^2 \text{ см} \quad (7.28)$$

Интегрируя это выражение по конечным импульсам P и k и по начальным импульсам K_0 получим следующее выражение для вероятности рассеяния $w = 1/\tau$ в единицу времени

$$w = \frac{1}{\tau} = \frac{m^* p_0}{8\pi^4} \int \frac{V_{k_0}^4 e^{-\frac{\omega}{kT}} d\kappa_0}{\left| \frac{\kappa_0^2}{2m} \frac{1 - \bar{I} - \kappa + 2U}{1 + \bar{I} + \kappa} - \omega(N + T + 1) \right|^2} \quad (7.29)$$

множитель $e^{-\frac{\omega}{kT}}$ учитывает температурную зависимость числа фононов при малых T .

Используя формулу

$$\frac{1}{a - i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{a}\right) + i\pi\delta(a)$$

можно показать, что мнимая часть $\bar{I} = \bar{I}_1 + i\bar{I}_2$ равняется

$$\bar{I}_2 = p_0 \frac{2\omega^2}{\sqrt{2m\omega} \left(\omega + \frac{\kappa_0^2}{2m\mu(\kappa_0)}\right)^2} \left(\frac{m}{m^*}\right) \equiv p_0 A \quad (7.30)$$

где в качестве f_k взято полученное выше (4.16) выражение.

Мнимые же части остальных интегралов будут порядка p_0^2, p_0^3 и ими можно пренебречь.

Отделяя в (7.29) в знаменателе действительную и мнимую часть получим

$$w = \frac{m^* p_0}{8\pi^4} \int \frac{V_{k_0}^4 e^{-\frac{\omega}{kT}} d\bar{k}_0}{\left[\frac{\kappa_0^2}{2m} \frac{1 - \bar{I}_1 - \kappa + 2U}{1 + \bar{I}_1 + \kappa} \right]^2 + p_0^2 \frac{\kappa_0^4 A^2 (1+U)^2}{m^2 (1 + \bar{I}_1 + \kappa)^4}} \quad (7.31)$$

Если теперь в (7.31) перейти к пределу $P_0 \rightarrow 0$, то согласно

$$\lim_{P_0 \rightarrow 0} \frac{P_0}{B^2 + C^2 P_0^2} = \frac{\pi}{C} \delta(B)$$

получим

$$W = \frac{1}{\tau} = \frac{m^*}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{dk_0 |V_{k_0}|^4 e^{-\frac{\omega}{k_0}}}{\frac{A}{m} \frac{1+U}{(1+I,+k)^2}} \delta \left[\frac{k_0^2}{2m} \frac{1-I,-k+2U}{1+I,+k} - \omega(N+T+1) \right] \quad (7.32)$$

Используя далее формулу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 f(k_0) \delta(g(k_0)) = \frac{f(k_2)}{\left| \frac{\partial}{\partial k_0} g(k_0) \right|_{k_0=k_2}} \quad (7.33)$$

где k_2 корень уравнения $g(k_0)=0$ получим для вероятности столкновения выражение

$$W = \frac{1}{\tau} = \left(\frac{m^*}{m} \right)^2 \frac{2g^2 \omega e^{-\frac{\omega}{k_2}}}{\tilde{f}(g^2)} \quad (7.34)$$

$$\tilde{f}(g^2) = \frac{2(1+U)}{(1+I,+k)^2} \left(\frac{y^2}{1+\frac{y^2}{\mu}} \right)^2 \frac{\partial}{\partial y} \left\{ y^2 \frac{1-I,-k+2U}{1+I,+k} - (N+T+1) \right\} \quad (7.35)$$

где через y обозначена величина $y = \frac{k_0}{\sqrt{2m\omega}}$

Таким образом задача сводится к исследованию нулей δ -функции, что необходимо для вычисления функции $\tilde{f}(g^2)$ в явном виде.

Рассмотрим область сильной связи.

В приближении сильной связи функция f_k может быть согласно (7.35) записана приближенно в виде

$$f_k = -V_k \exp\left(-\frac{k^2}{2a^2}\right) \quad (7.36)$$

где константа a пропорциональная g^2 , функция φ_k будет тогда иметь вид

$$\varphi_k = -\frac{(k k_0)}{m} f_k + V_k \left[1 - e^{-\frac{k^2}{2a^2}} \left(\omega + \frac{k^2}{2m} \right) \right] \quad (7.37)$$

Если известна матрица $A_{kk'}$, то она в принципе известна, однако вид $A_{kk'}$ сложен. Для вычисления (7.34) необходимо знать поведение функций (7.27) вблизи нуля δ -функции (7.32). Для определения интересующей нас области значений k преобразуем для целей ориентировки в уравнениях (7.29), (7.31) члены, содержащие $A_{kk'}$.

Уравнение для резонансного импульса при этом принимает вид

$$\frac{k_z^2}{2m\omega} \frac{1 - I_1 + 4L + 2L^2}{1 + I_1} = (N + 1) \quad (7.38)$$

Нашей задачей является рассмотрение корней уравнения (7.37) при $g^2 \rightarrow \infty$. Можно убедиться, оценивая с помощью (7.35) порядок интегралов I, L, N по отношению к g^2 , что при $g^2 \gg 1$ корень уравнения (7.38) будет зависеть от g^2 и притом так, что с ростом g^2 и значения k_z будет возрастать. Поэтому мы не будем приводить довольно громоздкие выражения I, L, N для произвольных $x = k/a$, а ограничимся лишь асимптотическим выражением при $x \gg 1$.

Имеем ($x = \kappa/a$)

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

$$\operatorname{Re} I = I_1(x) = \frac{g^2 a}{3\sqrt{2\pi} x^2} \quad (7.39)$$

а для $\operatorname{Re} L$ получим

$$\operatorname{Re} L = \frac{1}{3\sqrt{2\pi}} \frac{g^2}{a x^4}$$

откуда видно, что в рассматриваемой области больших g^2 и больших x величиной L можно пренебречь, и уравнение (7.38) для резонансного импульса принимает вид

$$\frac{\kappa_r^2}{2m\omega} (1 - I_1(\kappa_r)) = \mathcal{N}(1 + I_1(\kappa_r)) \quad (7.40)$$

Из (7.30) получаем

$$x^2 - \frac{g^2 a}{3\sqrt{2\pi}} - \frac{3}{8\sqrt{2\pi}} \frac{g^2 a}{x^2} \left(1 + \frac{g^2 a}{3\sqrt{2\pi} x^2} \right) = 0 \quad (7.41)$$

т.е. в области сильной связи x оказывается пропорциональной g^2 , а величина κ_r пропорциональной g^4 (+)

$$y_r = \frac{\kappa_r}{\sqrt{2m\omega}} = a \left(\frac{g^2 a}{6\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{27}{8} \frac{\sqrt{2\pi}}{g^2 a} + O(g^{-8}) \right] \quad (7.42)$$

Если в области слабой связи ответственными за рассеяние являются фононы с импульсами порядка $y \approx 1$, то в области сильной

+) При фиксированном m .

связи ответственны за рассеяние должны быть фононы с импульсами в q^4 раз большими. Втекающие отсюда физические следствия будут обсуждены в дальнейшем.

Оценка двухфононного приближения и
интегралов K, M, S, T .

Рассмотрим порядок величины интегралов K, M, N, T , при больших значениях K_0 . Обратимся с этой целью к виду матрицы $A_{kk'}$

$$A_{kk'} = M_2^* (M_1^*)^{-1}$$

где согласно (4.8) M_1 и M_2 равняются

$$(M_1)_{kk'} = \delta(\vec{k} - \vec{k}') + \frac{(\vec{k} \vec{k}') f_k f_{k'}}{(\omega_{k_1} - \omega_k + i\varepsilon) \mathcal{D}_+(\omega_{k_1}^2)} \quad (7.43)$$

$$(M_2)_{kk'} = - \frac{(\vec{k} \vec{k}') f_k f_{k'}}{(\omega_k + \omega_{k_1}) \mathcal{D}_+(\omega_{k_1}^2)} \quad (7.44)$$

Как это было показано ранее (§ 6) приближение сильной связи сводится в основном к замене при интегрировании по импульсам функции $\mathcal{D}(\omega_k^2)$ на величину $Q+1 \approx Q$ (см. 6.13). Поэтому, если приближенно аппроксимировать матрицу M_2 величиной

$$M_2 = - \frac{1}{Q} \frac{(\vec{k} \vec{k}') f_k f_{k'}}{(\omega_k + \omega_{k_1})} = M_2^* = M_2^T \quad (7.45)$$

то из соотношения

$$M_1 M_1^+ = 1 + M_2^* M_2^T$$

получим

$$A = M_2 (1 + M_2^2)^{-1} M_1^T \quad (7.46)$$

Можно убедиться, что матрицы M_2, M_2^2, M_2^3 имеют структуру

$$M_2^3 = (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') R^{(3)}(\kappa, \kappa') ; M_2^{(2n+1)} = (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') R^{(2n+1)}(\kappa, \kappa')$$

и что R^{2n+1} имеют тот же знак, что R_1 . Кроме того $\text{Sp} M_2^2$ является членом, не зависящим от g^2 . Поэтому во всяком случае

$$A_{\kappa\kappa'} < (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') R^{(1)} M_1^T \quad (7.47)$$

Интегралы K, S, M, T , были вычислены с функцией

$$A_{\kappa\kappa'} \approx -\frac{1}{Q} \frac{(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'}}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'})} \quad (7.48)$$

которая получается при подстановке в (7.46) первого члена матрицы M_1^T .

В результате вычислений оказалось, что $\text{Re} T$ имеет по отношению к $\text{Re} N$ порядок g^{-4} , а $\text{Re} S$ и $\text{Re} M$ имеют порядок g^{-3} по отношению к основному интегралу I_1 . Кроме того, численное значение интеграла K на порядок величин меньше численного значения I_1 , этим интегралом, поэтому, можно так же как и интегралами T, S и M пренебречь. Таким образом в области сильной связи резонансный импульс может быть определен из уравнения (7.42). Если взять в качестве a выражение (6.28) то выражение (7.42) для резонансного импульса можно переписать в виде

$$\frac{K_{\kappa}}{\sqrt{2m\omega}} = g^4 \cdot 0,0397 \left(1 + \frac{29,37}{g^4} \right) \quad (7.50)$$

Подставляя (7.50) в (7.34) получим следующее выражение для функции $\tilde{f}(g^2)$ в области сильной связи

$$\tilde{f}(g^2) = y^4 e^{-2y^2/a^2} \left[\frac{N}{y} - \frac{(N+y^2)^2}{4y^2} \frac{\partial I_1}{\partial y} - \frac{\partial N}{\partial y} \right]_{y=y_2} \quad (7.51)$$

Заметим сразу же, что хотя $\tilde{f}(g^2)$ согласно (7.21) быстро возрастает с ростом g^2 , тем не менее вероятность столкновения $1/\tau$ будет возрастать с ростом g^2 , т.к. перенормированная масса m^* будет в области сильной связи в свою очередь пропорциональна g^8 . В области же слабой и промежуточной связи функция $\tilde{f}(g^2)$ переходит в полученную Лоу и Пайнсом [21]

$$\tilde{f}(g^2) = \left[\frac{1}{x_2} - \frac{(1+x_2^2)}{4x_2^2} \left(\frac{\partial I_1}{\partial x} \right)_{x=x_2} \right] \quad (7.52)$$

где

$$x_2^2 = \frac{1+I_1(x_2)}{1-I_1(x_2)}$$

Вид функции $\tilde{f}(g^2)$ приведен на рис. 5

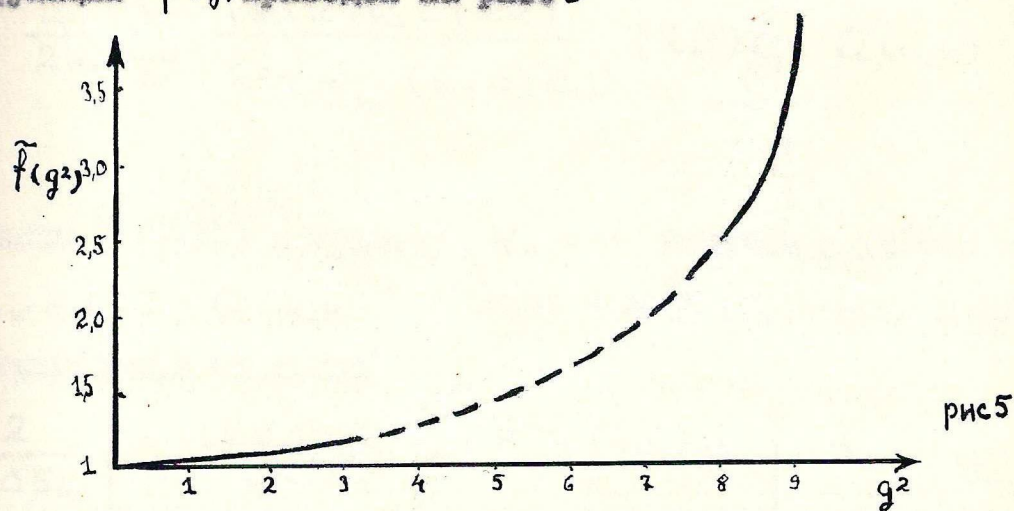


рис 5

Перейдем к рассмотрению двухфонового приближения. Добавление члена $\sum_{\kappa\kappa'} W_{\kappa\kappa'} a_{\kappa'}^+ a_{\kappa} \Omega$ в правую часть уравнения (7.19) приводит к следующему уравнению для

$$v_{\kappa} = v_{\kappa}^0 - \frac{2}{\Delta E_{\kappa}} \sum_{\kappa'} W_{\kappa\kappa'} \varphi_{\kappa'} - \frac{1}{m \Delta E_{\kappa}} \sum_{\kappa'} (\bar{\kappa}\bar{\kappa}') W_{\kappa\kappa'} (f_{\kappa} + f_{\kappa'}) \quad (7.58)$$

где через v_{κ}^0 обозначено решение при $W_{\kappa\kappa'} = 0$.

Уравнение же для $W_{kk'}$ имеет вид:

$$\left[\omega + \frac{1}{2m} (\bar{k} + \bar{k}' - \bar{k}_0)^2 \right] W_{kk'} = - \frac{u}{2m} \left[(\bar{k} + \bar{k}') \bar{k}_0 - (\bar{k} \bar{k}') \right] A_{kk'} - \frac{(\bar{k} \bar{k}')}{2m} (v_k f_{k'} + \text{интегральные члены})$$

Нас интересует роль двухфононных членов в области сильной связи. Левая часть уравнения (7.54) содержит параметр K_0 в квадрате, а правая часть (7.54) содержит K_0 в первой степени, поэтому можно полагать, что поправка к однофононным членам будет порядка $K_0^{-1} \sim g^{-4}$. Проверим это на примере первого члена в правой части (7.54), подстановка которого в выражение (7.53) дает

$$\frac{2}{\Delta E_k} \frac{u}{2m} \sum_{k'} \frac{(\bar{k} + \bar{k}') \bar{k}_0 - (\bar{k} \bar{k}')}{\omega + \frac{1}{2m} (\bar{k} + \bar{k}' - \bar{k}_0)^2} (\bar{k} \bar{k}') \varphi_{k'} Q(k, k') \quad (7.55)$$

Переходя в (7.55) к пределу $K_0 \rightarrow \infty$ получим с учётом

$A_{kk'} = (\bar{k} \bar{k}') Q(k, k')$ (часть членов обращается в нуль из-за интегрирования по углам)

$$\frac{2}{\Delta E_k} \left\{ 2 \frac{(\bar{k} \bar{k}_0)^2}{K_0^2} T_k + \frac{K^2 - (\bar{k} \bar{k}_0)}{K_0^2} R_k \right\} \frac{u}{2m} \quad (7.56)$$

где

$$T_k = \frac{1}{3} \sum_{k'} k'^2 Q(k, k') f_{k'}$$

$$R_k = \frac{1}{3} \sum_{k'} k'^4 Q(k, k') f_{k'}$$

$$\sum_k k^4 T_k f_k = \sum_k k^2 f_k R_k$$

Подставляя (7.56) в (7.53) получим

$$u = 1 - a \sum_k v_k \varphi_k + a \frac{u}{m} \left[\frac{4}{15 K_0} \sum_k k^4 T_k f_k + \frac{1}{K_0} \sum_k k^4 f_k R_k \right]$$

Нетрудно видеть, что поправочные члены имеют тот же порядок, что и интеграл S , т.к. последний согласно (7.27) равен при больших k_0

$$S(k_0) = \frac{4}{3k_0^4} \sum_k k^4 T_k f_k$$

Поскольку интеграл S имеет по отношению к основному интегралу I порядок g^{-4} , то того же порядка будет и вклад от двухфононного приближения. Такой же порядок величины оказывается оценка последующих членов в (7.54).

Обсуждение теории подвижности

Ответственными за рассеяние поляронов являются те фононы, импульсы которых находятся вблизи резонансного импульса (7.24)

По мере увеличения константы связи величина резонансного импульса возрастает, в связи с этим интересно рассмотреть вопрос, как скажется учет дисперсии оптических фононов на величину резонансного импульса. Численная величина интегралов, определяющих согласно (7.38) резонансный импульс, изменится очень незначительно, т.к. в силу (7.36) подинтегральные функции быстро убывают с ростом $|k|$. Поэтому фактически учет дисперсии сведется к замене в (7.38) ω на $\omega(k)$, т.к. множитель при δ функции в (7.32) мало чувствителен к учету дисперсии, поскольку и числитель и знаменатель в (7.32) изменяются при этом одинаковым образом (напомним, что является мнимой частью I).

Перейдем теперь к рассмотрению условия резонанса (7.42). При увеличении g^2 величина резонансного импульса возрастает и при достаточно больших g^2 может оказаться, что ре-

резонансный импульс окажется больше предельного импульса, т.е. при больших, взятых *ad hoc* константах связи рассеяние вообще не может иметь места. Поскольку однако, подвижность является конечной величиной, то, следовательно, условие резонанса накладывает ограничения на допустимые значения константы связи. Если взять в качестве $g^2 = g_0^2 \left(\frac{m}{m_0}\right)^{1/2}$, то резонансный импульс будет согласно (7.50) равняться

$$\frac{\kappa_z}{\sqrt{2m_0\omega}} = \frac{g^6}{g_0^2} 0,0397 \left(1 + \frac{29,37}{g^4}\right) \quad (7.59)$$

Максимальное значение $\kappa = \frac{2\pi}{\lambda}$ составляет как известно $2\pi/a^0$, где a^0 — постоянная решетки. Однако при $\lambda = a^0$ ионы будут находиться в узлах волны (см. рис. 6), т.е. волне $\lambda = a^0$ фактически не соответствует движение ионов решетки.



рис. 6.

Для наглядности на рис. 6 изображена не продольная, а поперечная волна.

Перемещение ионов соответствует, по крайней мере, волне $\lambda = 2a^0$. Если даже предположить, что рассеяние поляронов происходит только на волне $\lambda = 2a^0$ (при больших длинах волны условий резонанса не выполняется), то уже это предположение

накладывает довольно жесткие ограничения на допустимые значения g^2 . Действительно, если в (7.59) положить $\kappa_2 = \frac{\pi}{a^2}$, то соответствующие предельные значения g^2 будут, как это следует из приводимой ниже таблицы порядка $g_{\max}^2 = 8-9$.

Таблица IV.

кристалл	LiF	NaF	NaCl	NaBr	NaI	KCl
$g_{\max}^2$	7,7	8,6	8,4	8,3	8,1	8,6
кристалл	KBr	KI	RbCl	RbBr	RbI	AgCl
$g_{\max}^2$	8,8	8,4	9,14	9,7	9,2	7,8

Если сравнить приведённые в таблицах II и IV предельные значения констант связи, то видно, что согласно получается очень хорошее. Природа полученных ограничений на значения констант связи одна и та же: конечность постоянной решетки. Конечность постоянной решетки делает бессмысленной макроскопическую трактовку полирона при размерах полирона меньших постоянной решетки и одновременно ограничивает сверху значения импульсов.

Учёт поляронного эффекта является центральной задачей в теории рассеяния, т.к. само экспериментальное доказательство существования полиронов можно получить из опытов по определению подвижности.

Действительно, если применять обычную теорию возмущений,

то подвижность μ будет равняться

$$\mu = \frac{e}{2m g^2 \omega} \left(e^{\frac{\omega}{kT}} - 1 \right) \quad (7.60)$$

За счёт рассеяния на оптических колебаниях решетки получается следующая экспериментальная зависимость

$$\mu = \text{const} \left(e^{\frac{\omega}{kT}} - 1 \right) \quad (7.61)$$

из которой можно было бы в принципе определить m и m^* , если иметь в распоряжении достаточно надёжные формулы для μ при произвольных значениях констант связи. Поскольку, однако, как это ниже обсуждается, теория приводит пока к весьма противоречивым результатам, то наряду с экспериментальным определением желательно было бы знать, скажем из опытов по циклотронному резонансу, эффективную массу. Тогда отклонение численного значения константы в (7.61) от вычисленного по (7.60) являлось бы следствием поляронного эффекта и, следовательно, являлось бы доказательством существования поляронов.

В настоящее время при расчёте подвижности большинство авторов, так же как это делается и в настоящей работе кладет в основу процесс типа комптоновского рассеяния, изображённые на рис. 3 и 4 в § 7. хх)

х) формула (7.60) была впервые независимо получена Фрёлихом и Воттом [19], [20] и Давидович и Шмукивичем [19].

хх) Эта точка зрения уже нашла отражение и в последних работах по теории твёрдого тела [10] [24].

Известны две различных формулы для подвижности

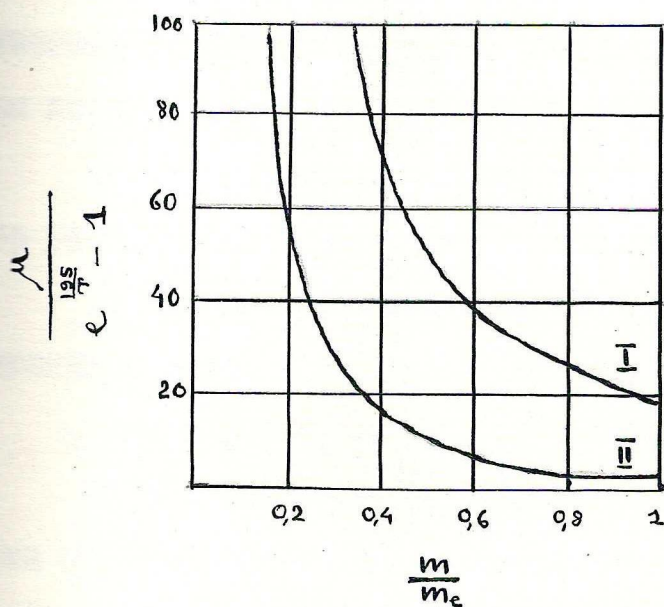
$$\frac{\mu}{e^{\frac{\omega}{kT}} - 1} = \frac{e}{2 m g^2 \omega} \left(\frac{m}{m^*} \right)^3 \tilde{f}_{LP}(g^2)$$

Лоу - Пайнс

$$\frac{\mu}{e^{\frac{\omega}{kT}} - 1} = \frac{e}{2 m g^2 \omega Z(g^2)} \left(\frac{m}{m^*} \right) \tilde{f}_s(g^2)$$

Шульц

где $\tilde{f}_{LP}$ и $\tilde{f}_s, Z$ - известные функции от g^2 . Эти формулы для подвижности, как это видно из приводимого ниже Рис. 7, дают совершенно различное численное значение.



$$g^2 = 4 \cdot \left(\frac{m}{m_e} \right)^{1/2}$$

I Шульц

II Лоу - Пайнс

AgBr

Рис. 7.

В настоящей работе был использован формализм метода Лоу, который, по мнению автора, дает в принципе более точный ответ, чем использованный Шульцем метод континуального интегрирования.

Дело в том, что единственно практически выполнимой задачей в методе континуального интегрирования является вычисление амплитуд перехода с помощью эффективного гамильтониана типа гамильтониана для гармонического осциллятора. При вычислении энергии это дает хороший по сравнению с прямым вариационным методом результат, но тем не менее за хороший результат в теории рассеяния ручаться нельзя, т.к. важные для задачи рассеяния недиагональные матричные элементы точного и эффективного операторов энергии взаимодействия могут быть весьма различными.

Метод Лоу является в этом смысле точным методом, однако имеется основание считать, что в работе Лоу - Пайнса [21] члены порядка g^4 учитываются не весьма точно.

Что же касается полученных в § 7 результатов, то их можно резюмировать следующим образом:

1. При низких температурах ответственными за рассеяние являются фононы, импульсы которых расположены вблизи импульса, при котором выполняется условие резонанса.

Резонансный импульс зависит от константы связи и в области сильной связи пропорционален g^4 . Поскольку однако резонансный импульс не может быть больше предельного, то тем самым имеются ограничения на максимальные значения g^2 , которые и приведены в таблице стр 75.

2. Двухфононные члены в области сильной связи дают малый вклад, пропорциональный g^{-4} .

3. Получено выражение для подвижности в области сильной связи.

Что же касается области промежуточной связи, то здесь для

решения задачи требуются дополнительные численные расчёты, которые являются предметом отдельной работы.

Г Л А В А II.

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНА С КОЛЕБАНИЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА ЧАСТОТУ ЦИКЛОТРОННОГО РЕЗОНАНСА

Явление циклотронного резонанса имеет место в однородном магнитном поле, если частота дополнительного переменного поля равна удвоенной частоте Лармора $2\omega_0 = \frac{e\hbar}{m^*}$. Из опытов по циклотронному резонансу можно найти величину эффективной перенормированной массы m^* , или в общем случае тензор массы.

Однако, в сильных магнитных полях величина m^* будет зависеть, в свою очередь, от H по следующим двум причинам.

Во-первых, сильное магнитное поле может вызвать изменение формы зоны, а так как эффективная масса определяется соотношением $\frac{1}{m} = \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2}$, то это изменение означает зависимость от H . В полярных кристаллах, кроме того, имеет место следующий эффект. Электронно-фоонное взаимодействие, как уже говорилось выше, приводит к изменению (перенормировке) исходной эффективной массы, причем вычисление перенормированной массы при наличии внешнего магнитного поля приводит к тому, что m^* будет функцией от H , если даже m не зависит от H .^{х)}

Отсюда следует, что частота циклотронного резонанса будет, вообще говоря, нелинейной функцией от H , и задача заключается в вычислении нелинейных членов, возникающих за счет электронно-фоонного взаимодействия.

х) Перенормировка массы во внешнем магнитном поле рассматривалась в квантовой электродинамике Р. Ньютоном [43].

В дальнейшем рассматривается случай полярных кристаллов, эффективная масса для простоты считается изотропной.

В случае полярных кристаллов взаимодействие электронов с решеткой нельзя рассматривать как возмущение. При больших значениях постоянной связи α справедливо адиабатическое приближение [1], при $\alpha = 1 - 4$ — приближение промежуточной связи. Ниже будет рассматриваться последний случай.

Развиваемый в настоящей работе метод перенормировки массы при наличии магнитного поля основан на приближенном исключении переменных фононного поля из оператора энергии. Вычисляя коммутатор оператора поглощения фонана a_k с гамильтонианом $\mathcal{H}$, можно найти действие a_k на собственный функционал оператора энергии Ω . Этот метод был предложен в мезонной теории ЧУ, Лоу и Виком [39]. В результате действия a_k на Ω функционал Ω умножается на некоторую функцию, которая будет зависеть от импульса электрона как от параметра. Поэтому при вычислении среднего значения энергии операторы фононного поля дадут дополнительные слагаемые, зависящие от импульса электрона. Члены, квадратичные по импульсам, будут определять величину перенормированной массы.

При вычислении $a_k \Omega$ возникает трудность, связанная с тем, что действие a_k на Ω выражается через оператор импульса фононного поля, который возникает при учёте отдачи. Этот оператор в выражении для $a_k \Omega$ заменяется его средним значением, которое в дальнейшем вычисляется.

Этот способ учёта импульса эквивалентен в случае свободного полярона следующей модели. Предполагается, что все фононы,

образующие облако вокруг электрона, обладают одной и той же "радиальной функцией", которая может быть найдена из вариационного принципа [2].

§ I. Исключение переменных фононного поля из оператора энергии

Рассмотрим оператор энергии электрона в магнитном поле при учёте известного из теории полярона взаимодействия электрона с полем продольных оптических фононов [1]:

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{k}} \omega a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} (V_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}} + V_{\mathbf{k}}^* a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i\vec{k}\vec{x}}) \quad (1.1)$$

$a_{\mathbf{k}}$ — операторы вторичного квантования,

$$V_{\mathbf{k}} = - \frac{i\omega}{\kappa} \left(\frac{4\pi\alpha}{\sqrt{2m\omega} L^3} \right)^{1/2} ; \quad \alpha = e^2 \left(\frac{m}{2\omega} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\epsilon} \right) \quad (1.2)$$

$$\vec{\pi} = -i\nabla - e\vec{A}$$

ω — предельная частота продольных оптических колебаний, статическая диэлектрическая постоянная, n — показатель преломления света. x)

Будем считать, что магнитное поле направлено по оси Z. Перестановочные соотношения для операторов π_i примут вид

$$[\pi_1, \pi_2] = i\epsilon H \quad (1.3)$$

остальные коммутаторы равны нулю.

Представим собственный функционал Ψ оператора энергии

x) Используется система единиц, в которой $\hbar = 1$, $c = 1$, кроме того константа g^2 в главе II обозначена через $\alpha = g^2$.

(I.1) в виде

$$\Psi = \exp \left\{ i (\pi_3 x_3 - \sum_{\kappa} (\bar{\kappa} \bar{x}) a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}) \right\} \Omega(a) \quad (I.4)$$

Подставляя (I.4) в (I.1), получим следующее уравнение для функционала Ω :

$$\left\{ \frac{\pi^2}{2m} + \sum_{\kappa} \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2m} - \frac{\bar{\kappa} \bar{\pi}}{m} \right) a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} + \right. \\ \left. + \sum_{\kappa} (V_{\kappa} a_{\kappa} + V_{\kappa}^* a_{\kappa}^{\dagger}) + \frac{1}{2m} \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa'}^{\dagger} a_{\kappa} a_{\kappa'} \right\} \Omega = E \Omega \quad (I.5)$$

В выражении (I.5) π_3 является числом, а не оператором, так как величина

$$\pi_3 = -iV_3 + \sum_{\kappa} \kappa_3 a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}$$

является интегралом движения.

Для исключения переменных фононного поля из оператора энергии вычислим коммутатор оператора энергии с оператором :

$$[\mathcal{H}, a_{\kappa}] = -V_{\kappa}^* - (\kappa^2 + c^2 - 2\kappa \bar{\pi})/2m - (\bar{\kappa} \bar{q}) a_{\kappa} \frac{1}{m} \quad (I.6)$$

$$\bar{q} = \sum_{\kappa} \bar{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}, \quad c^2 = 2m\omega$$

Действуя операторами в левой и правой части (I.6) на функционал Ω , получим

$$a_{\kappa} \Omega = -2m V_{\kappa}^* \left\{ 2m(\mathcal{H} - E) + \kappa^2 + c^2 - 2\kappa \bar{\pi} + 2\bar{\kappa} \bar{q} \right\}^{-1} \Omega \quad (I.7)$$

Поскольку V_{κ}^* является функцией, то порядок записи V_{κ}^* несущественен, что учтено в (I.7). Воспользуемся преобразованием

$$L^{-1} = i \int_0^{\infty} e^{-isL} ds \quad (I.8)$$

Преобразование (1.8) аналогично методу собственного времени В.А.Фока в релятивистской квантовой механике. Интеграл в правой части (1.8) следует рассматривать как предельное значение выражения

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} i \int_0^{\infty} e^{-isL - \delta s} ds$$

Перенесем (1.7) с учётом (1.8) в виде

$$a_{\kappa} \Omega = -2m i V_{\kappa}^* \int_0^{\infty} ds \exp \left\{ -is(\kappa^2 + c^2) - is(2m(\mathcal{H} - E) - 2\bar{\kappa}\bar{\pi} + 2\bar{\kappa}\bar{q}) \right\} \Omega \quad (1.7a)$$

Дальнейшие преобразования ставят своей задачей "выпутывание" оператора $\exp \{ -is 2m(\mathcal{H} - E) \}$ из экспоненты (1.7a) в виде сомножителя.

Для того чтобы пояснить характер дальнейшего приближения, рассмотрим вначале тот случай, когда магнитное поле отсутствует и, следовательно, с операторами π_i можно обращаться как с числами. Используемый Ли, Лоу и Пайнсом [9] метод промежуточной связи эквивалентен следующему упрощению выражения (1.7a). Если пренебречь коммутатором $[q, \mathcal{H}]$, то действие оператора поглощения на функционал состояния представится выражением

$$a_{\kappa} \Omega = -2m i V_{\kappa}^* \int_0^{\infty} ds \exp \left\{ -is(\kappa^2 + c^2 - 2\bar{\kappa}\bar{\pi} + 2\bar{\kappa}\bar{q}) \right\} \Omega \quad (1.9)$$

Заменяя в (1.9) оператор q на его среднее значение, вычисляемое с функционалами Ω , и учитывая, что в силу симметрии среднее значение импульса фононного поля может быть направлено лишь вдоль единственного сохраняющегося в данной задаче вектора π :

$\langle q \rangle = \eta \pi$, получим согласно (1.9) приближенное выражение для $a_{\kappa} \Omega$, причём параметр η вычисляется из указанного соот-

вошения $\langle q \rangle = \eta \pi$. Если воспользоваться вариационным принципом для функционала фононного поля, то согласно [9], это приближение соответствует предположению, что все фононы находятся в одном и том же состоянии.

Перенормировка массы в случае магнитного поля производится в этом же приближении: предполагается, что при распутывании экспоненты в (1.9) можно положить $[q, \mathcal{K}] = 0$ и затем заменить q на среднее значение.

Вернемся к выражению (1.7a). Выпишем прежде всего оператор $\exp \{2is \bar{\kappa} \bar{\pi}\}$ с учётом того, что операторы π_1 и π_2 не коммутируют друг с другом. Воспользуемся формулой (см. Приложение А)

$$\left. \begin{aligned} \exp \{ -is (\kappa^2 + \pi^2 - 2\bar{\kappa} \bar{\pi} - 2\bar{q} \bar{\pi}) \} = \\ = \exp \{ -is [\kappa_3^2 + \frac{1}{2}(\kappa_1^2 + \kappa_2^2)] \} \exp \{ 2is (\kappa_1 \Pi - Q + q) \} \cdot \\ \cdot \exp \{ -is (\pi^2 - 2\bar{\pi} \bar{q}) \} \end{aligned} \right\} \quad (1.10)$$

$$\text{где} \quad \xi(x) = \frac{\sin 2x}{2x} \quad (1.11)$$

$$\left. \begin{aligned} \Pi_1(x) &= \frac{\sin x}{x} (\pi_1 \cos x - \pi_2 \sin x) \\ \Pi_2(x) &= \frac{\sin x}{x} (\pi_2 \cos x + \pi_1 \sin x) \end{aligned} \right\} \quad (1.12)$$

$$[\Pi_1, \Pi_2] = ieH \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2, \quad \Pi_3 = \pi_3 \quad (1.13)$$

Величины Q_i выражаются через q_i так же, как Π_i выражается через π_i в (1.12) и (1.13). В выражении (1.10) и в последующих выражениях Π_1 и Π_2 имеют в качестве аргумента $x = eHs$, который для краткости будем опускать.

Пренебрегая коммутатором оператора q с $\mathcal{H}$, получим из (1.7a) следующее выражение для $a_k \Omega$:

$$a_k \Omega = -2m_i V_k^* \int_0^\infty ds \cdot \exp \left\{ -is (c^2 + \kappa_3^2 + \xi (\kappa_1^2 + \kappa_2^2) - 2\kappa (\Pi - Q)) \right\} \Omega \quad (1.14)$$

Как указывалось выше, величина Q будет в дальнейшем заменена её средним значением, причём под средним значением будет подразумеваться усреднение по переменным фоновому полю. Если представить функционал Ω в виде $\Omega = \Phi(a) \psi(x)$, то после этого усреднения величина $\langle q_i \rangle = \langle \Phi, q_i \Phi \rangle$ продолжает оставаться оператором, действующим на функцию $\psi(x)$.

Таким образом, появляется связь между средними значениями оператора фоновому поля и операторами Π_i , происходящая за счёт свойств функционала состояния Ω . Сами по себе операторы a_k и Π , разумеется, динамически независимы.

Перейдем к вычислению среднего значения оператора импульса фоновому поля.

§ 2. Вычисление констант, определяющих перенормировку

массы

Предположим, что, как и для случая свободного полярона, соблюдается пропорциональность между $\langle q_i \rangle$ и Π_i :

$$\langle q_1 \rangle = \gamma \Pi_1, \quad \langle q_2 \rangle = \gamma \Pi_2, \quad \langle q_3 \rangle = \gamma_3 \Pi_3 \quad (2.1)$$

Справедливость этого предположения подтверждает последующий расчёт: если в (1.14) сделать подстановку (2.1) и вычислить с определенными таким образом $a_k \Omega$ среднее значение q_i , то действительно окажется, что среднее значение q_i пропорционально Π_i .

Имеем, согласно (1.7a),

$$\langle \Omega, q_i \Omega \rangle = -4m^2 \sum_{\kappa} \kappa_i |V_{\kappa}|^2 \int_0^{\infty} s ds.$$

$$\langle \Omega, \exp \{ -is [c^2 + \kappa^2 - 2\bar{\kappa} \bar{\pi} + 2\bar{\kappa} \bar{q} + 2m(\mathcal{H} - E)] \} \Omega \rangle \quad (2.2)$$

В (2.2) оператор $\exp \{ -2is(\mathcal{H} - E) \}$ одинаково удобно вынести в качестве сомножителя как справа, так и слева от остальных операторов. Беря полусумму этих выражений, получим с учётом (1.2) и соотношения

$$\kappa^{-2} = i \int_0^{\infty} e^{-i\tau \kappa^2} d\tau \quad (2.3)$$

следующее выражение:

$$\langle \Omega, q_i \Omega \rangle = -i \frac{4\pi^2}{(2\pi)^3} c^3 \int \kappa_i d^3\kappa \int_0^{\infty} d\tau \int_0^{\infty} s ds \langle \Omega, \exp \{ -isc^2 - i(\tau+s)\kappa_3^2 - i(\tau+\frac{1}{2}s)(\kappa_1^2 + \kappa_2^2) \} \frac{1}{2} [\exp \{ 2isk \tilde{\Pi}(e\mathcal{H}s) \} + \exp \{ 2isk \tilde{\Pi}(-e\mathcal{H}s) \}] \Omega \rangle \quad (2.4)$$

где

$$\tilde{\Pi}_i = (1 - \eta_i) \Pi_i \quad \forall i = 1, 2 \quad \tilde{\Pi}_3 = (1 - \eta_3) \Pi_3$$

Из (2.4) видно, что $\langle q_i \rangle$ является четной функцией от $\mathcal{H}$. При вычислении интеграла по $d^3\kappa$ (см. Приложение Б) используется формула

$$e^A \cdot e^B = e^{A+B} \cdot e^{[A,B]\frac{1}{2}} \quad (2.5)$$

$[A, B]$ — число.

При интегрировании по $ds ds$ подынтегральная функция раскладывается в ряд по $\mathcal{H}$, после чего интегралы вычисляются согласно

$$\int_0^\infty d\tau \int_0^\infty ds \cdot s^n \frac{e^{-isc^2}}{(\tau+s)^{\frac{m}{2}}} = \frac{\sqrt{\pi} (2\kappa-1)!!}{2^\kappa c^{2\kappa+1} (\frac{m}{2}-1)} e^{-i\frac{\pi}{4}(2\kappa+1)} \quad (2.6)$$

n и m — целые числа, $2\kappa = 2n-m+3$.

В полученном асимптотическом разложении удерживаются члены квадратичные относительно $(\frac{\omega_0}{\omega})^2$. В результате получается следующее уравнение для определения η :

$$\eta = (1-\eta) \frac{\omega_0}{\omega} \left\{ 1 - \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{45}{56} (1-\eta)^4 \right] \right\} \quad (2.7)$$

Полагая далее

$$\eta = \eta^{(0)} + \eta^{(1)} \quad ; \quad \eta^{(0)} = \frac{\omega_0}{\omega} \left(1 + \frac{\omega_0}{\omega} \right)^{-1}$$

найдем

$$\eta = \eta^{(0)} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{\omega_0}{\omega} \right)^{-1} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{45}{56} \left(1 + \frac{\omega_0}{\omega} \right)^{-4} \right] \right\} \quad (2.8)$$

функция η_3 оказывается равной

$$\eta_3 = \eta^{(0)} \left\{ 1 - 3 \left(1 + \frac{\omega_0}{\omega} \right)^{-1} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2 \left[\frac{1}{2} - \frac{15}{56} \left(1 + \frac{\omega_0}{\omega} \right)^{-4} \right] \right\} \quad (2.9)$$

Таким образом, в рассматриваемом приближении действие a_k на Ω определено полностью.

Задача теперь заключается в вычислении средних значений операторов фононного поля в гамильтониане (1.5).

Рассмотрим выражение $\langle \sum_k a_k^+ (\bar{k} \pi) a_k \rangle$

Согласно (I.7) и (I.8),

$$\left\langle \sum_{\kappa} a_{\kappa}^+ (\bar{\kappa} \bar{\pi}) a_{\kappa} \right\rangle = -4m^2 \sum_{\kappa} |V_{\kappa}|^2 \int_0^{\infty} ds \int_0^{\infty} ds' \left\langle e^{-isL} (\bar{\kappa} \bar{\pi}) e^{-is'L} \right\rangle \quad (2.10)$$

Выражение (2.10) удобно вычислить следующим образом. Перенесем сначала оператор $(\bar{\kappa} \bar{\pi})$ направо от $\exp\{-is'L\}$, затем налево от $\exp\{-isL\}$ и возьмем полусумму полученных выражений, которая, как в этом нетрудно убедиться, будет четной функцией от H .

Используя формулу

$$(\bar{\kappa} \bar{\pi}) e^{-is(\pi^2 - 2\bar{p}\bar{\pi})} = e^{-is(\bar{\pi}^2 - 2\bar{p}\bar{\pi})} \left\{ \bar{\kappa} \bar{\pi}'(eHs) + eHs [\bar{p} \bar{\kappa}]_3 \right\} \quad (2.11)$$

$$\bar{\pi}_1'(x) = \bar{\pi}_1 \cos x + \bar{\pi}_2 \sin x, \quad \bar{\pi}_2'(x) = \bar{\pi}_2 \cos x - \bar{\pi}_1 \sin x, \quad \bar{\pi}_3'(x) = \bar{\pi}_3$$

получим после некоторых преобразований следующее выражение для члена квадратичного по импульсам $\bar{\pi}_1^2$ и $\bar{\pi}_2^2$

$$-i \frac{4\pi^2}{(2\pi)^3} c^3 \pi^{3/2} e^{-3i\frac{\pi}{4}} \int_0^1 dv \int_0^{\infty} d\tau \int_0^{\infty} ds \cdot s e^{-isc^2} \frac{s}{(\tau+s)^{1/2} (\tau+\xi s)^2} \cdot \quad (2.12)$$

$$\left(1 + \frac{s^2}{(\tau+\xi s)^2} \frac{\sin^4 eHs}{(eHs)^2} (1-\eta)^4 \right)^{-1/2}$$

$$\frac{1}{2} \left\{ \bar{\pi}_1(-\gamma s H) \tilde{\pi}_1(esH) + \tilde{\pi}_1(-esH) \bar{\pi}_1(\gamma s H) + (1 \rightleftharpoons 2) \right\}$$

Интегрирование по dv дает

$$\int_0^1 dv \frac{1}{2} \{ \dots \} = (1-\eta) \left(\frac{\sin eHs}{eHs} \right)^2 (\bar{\pi}_1^2 + \bar{\pi}_2^2) \quad (2.13)$$

Дальнейшее интегрирование осуществляется с помощью (2.6).

После вычисления средних значений операторов поля получим следующее значение для перенормированной массы:

$$m_{11}^* = m_{22}^* = m_{\perp} = m_0 \left\{ 1 + \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^2 \left[\frac{29}{24} \alpha \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)^{-1} - \frac{5}{12} \alpha - \frac{15}{14} \alpha \frac{1}{\left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)^5} \right] \right\} \quad (2.14)$$

$$m_{33}^* = m_{\parallel} = m_0 \left\{ 1 + \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^2 \left[\frac{\alpha}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)^{-1} - \frac{45}{112} \alpha \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)^{-5} \right] \right\} \quad (2.15)$$

$$m_0 = m \left(1 + \frac{\alpha}{6} \right)$$

При $H = 0$ получается значение перенормированной массы, полученное в [9].

Отношение неперенормированной частоты циклотронного резонанса к перенормированной составляет, согласно (2.14),

$$\left(\frac{\omega_0}{\omega_0^*} \right) = \left[1 + d_{\perp}(\alpha) \left(\frac{\omega_0}{\omega} \right)^2 \right] \quad (2.16)$$

В области промежуточной связи функция $d_{\perp}(\alpha)$ равна по порядку величины единице:

$$d(1) = 0,12 ; \quad d(2) = 0,46 ; \quad d(3) = 0,74 ; \quad d(4) = 0,90.$$

Поскольку энергия продольных оптических фононов $\sim 0,01$ e.v., то для практически используемых полей поправочный член в (2.16)

исчезающе мал, т.е. опыты по циклотронному резонансу дают $m|_{H=0}$.

§ 3. Поправка к диамагнитной восприимчивости

В результате исключения переменных фононного поля оператор энергии принимает следующий вид:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_{\perp}} (\pi_1^2 + \pi_2^2) + \frac{1}{2m_{\parallel}} \pi_3^2 \quad (3.1)$$

Рассмотрим задачу о вычислении статистической матрицы $\rho(x, x', \beta)$ для идеального газа, если гамильтониан системы задан выражением (3.1). Запишем матрицу $\rho(x, x', \beta)$ в виде

$$\rho(x, x', \beta) = \langle x | \exp(-\beta \mathcal{H}) | x' \rangle \quad (3.2)$$

где x обозначает три координаты x_1, x_2, x_3 . Если вместо β ввести переменную s , равную $-i\beta$, то выражение (3.2) можно формально рассматриваться как функцию преобразования $\langle x(s) | x'(0) \rangle$. Последняя может быть найдена из следующих уравнений [41] [42]

$$i \frac{\partial}{\partial s} \langle x(s) | x'(0) \rangle = \langle x(s) | \mathcal{H} | x'(0) \rangle \quad (3.3)$$

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial x} - e A(x) \right) \langle x(s) | x'(0) \rangle = \langle x(s) | \pi(s) | x'(0) \rangle \quad (3.4)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x_1} - e A(x_1) \right) \langle x(s) | x'(0) \rangle = \langle x(s) | \pi(0) | x'(0) \rangle$$

и из граничного условия

$$\lim_{s \rightarrow 0} \langle x(s) | x'(0) \rangle = \delta(x - x') \quad (3.5)$$

Для вычисления функции преобразования необходимо решить гейзенберговские уравнения движения для операторов π и x .

Рассмотрим на некоторых примерах, как осуществляются эти вычисления [41] [45]:

а) Для свободной частицы

$$H = \frac{p^2}{2m}$$

■ уравнения движения

$$\frac{dx_j(s)}{ds} = i [H, x_j(s)] \quad (3.6)$$

$$\frac{dp_j(s)}{ds} = i [H, p_j(s)]$$

имеет следующее решение:

$$p(s) = p(0)$$

$$x(s) - x(0) = \frac{p(0)}{m} s \quad (3.7)$$

Подставляя $p(s)$ из (3.7) в H , получаем

$$H = \frac{m}{2s^2} \left\{ x^2(s) - 2x(s)x(0) + x^2(0) \right\} - \frac{3i}{2s} \quad (3.8)$$

из (3.3), (3.4), (3.5) следует

$$\langle x(s) | x'(0) \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i s} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2s} (x - x')^2 \right\} \quad (3.9)$$

$$\langle x | e^{-\beta H} | x' \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\beta} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2\beta} (x - x')^2 \right\}$$

б) Для одномерного гармонического осциллятора

$$H = \frac{p_q^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} = \frac{\omega}{2} (p_\lambda^2 + x^2) \quad (3.10)$$

где

$$q = \frac{x}{(m\omega)^{1/2}}$$

Если в качестве базисной системы функций взять плоские волны, то статистическая матрица может быть записана в виде интеграла

$$\frac{(m\omega)^{1/2}}{2\pi} \int e^{-ikx'} e^{-\beta \frac{\omega}{2} [(-i\frac{\partial}{\partial x})^2 + x^2]} e^{ikx} dx$$

Однако, прямое вычисление последнего выражения оказывается более кропотливым, чем решения уравнений (3.3) и (3.6).

Из (3.6) следует

$$\frac{dx}{ds} = \omega p \quad ; \quad \frac{dp}{ds} = -\omega x \quad (3.11)$$

Интегрируя уравнение (3.11), получаем

$$p(s) = p(0) \cos \omega s - x(0) \sin \omega s \quad (3.12)$$

$$x(s) = p(0) \sin \omega s + x(0) \cos \omega s$$

Оператор энергии примет следующий вид:

$$H = \frac{\omega}{2 \sin^2 \omega s} \left(x^2(s) - 2x(s)x(0) \cos \omega(s) + x^2(0) \right) - \frac{i\omega}{2} \operatorname{ctg} \omega s \quad (3.13)$$

Интегрирование уравнения (3.3) дает с учетом (3.13)

$$\langle x(s) | x'(0) \rangle = \frac{C(x, x')}{(\sin \omega s)^{1/2}} \quad (3.14)$$

$$\cdot \exp -\frac{i}{4} \left\{ (x+x')^2 \operatorname{tg} \frac{\omega s}{2} - (x-x')^2 \operatorname{ctg} \frac{\omega s}{2} \right\}$$

а из (3.4) следует, что $C(x, x) = \text{const}$.

Для определения постоянной следует использовать условие (3.5) и следующий предел

$$\lim_{s \rightarrow 0} \left(\frac{\alpha}{2\pi s} \right)^{1/2} e^{-\frac{(x-x')^2 \alpha}{2s}} = \delta(x-x') \quad (3.15)$$

Возвращаясь к переменным q и β , получим из (3.14) и (3.15)

$$\langle q | p | q' \rangle = \left(\frac{m\omega}{2\pi \hbar \omega_\beta} \right)^{1/2} \cdot \quad (3.16)$$

$$\cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega}{4} \left[(q+q')^2 \tanh \frac{\omega_\beta}{2} + (q-q')^2 \coth \frac{\omega_\beta}{2} \right] \right\}$$

Выражение (3.16) представляет известную формулу, полученную Слейтером и Мёллером.

в) Рассмотрим задачу о вычислении статистической суммы, если гамильтониан системы имеет вид (3.1).

Уравнения (3.6) примут вид

$$\frac{dx}{ds} = P \cdot \pi \quad ; \quad \frac{d\pi}{ds} = 2\omega_0 Q \pi \quad (3.17)$$

$$P = \begin{pmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{11}^{-1} \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Решение уравнений (3.17) может быть представлено в виде

$$\pi(s) = e^{2\omega_0 Q s} \pi(0) \quad (3.19)$$

$$X(s) = X(0) + (2\omega_0 Q)^{-1} (e^{2\omega_0 Q s} - 1) P \pi(0)$$

Воспользовавшись выражением (3.19), можно представить оператор энергии как функцию от операторов $X(s)$ и $X(0)$. Перенос

валено и $\chi(\omega)$ направо, получим после некоторых преобразований (см. [4,15]) следующее уравнение:

$$i \frac{\partial}{\partial s} \langle x(s) | x'(0) \rangle = \left\{ \frac{1}{2} \omega_0^2 (x-x') P^{-1} \frac{Q^2}{\sinh^2 \omega_0 Q s} (x-x') - \right. \\ \left. - i \omega_0 \operatorname{Sp} Q (1 - e^{-2\omega_0 Q s})^{-1} \right\} \langle x(s) | x'(0) \rangle \quad (3.20)$$

Принимая во внимание свойства матрицы Q , найдем

$$2 \operatorname{Sp} Q (1 - e^{-2\omega_0 Q s})^{-1} = \operatorname{Sp} Q \operatorname{ctg} \omega_0 Q s \\ = 2 \operatorname{ctg} \omega_0 s + \frac{1}{\omega_0 s} \quad (3.21)$$

Интегрирование уравнений (3.9) дает следующее значение статистической суммы

$$Z = \operatorname{Sp} \rho(x, x', \beta) = \frac{2V}{h^3} (2\pi kT)^{3/2} m_{\perp} m_{\parallel}^{1/2} \frac{\beta \hbar \omega_0}{\sinh \beta \hbar \omega_0} \quad (3.22)$$

V - объём системы.

Диамагнитная восприимчивость с учётом (2.14) и (2.15) оказывается равной

$$\chi = - N \mu^2 / 3 kT + N kT (2d_{\perp} + d_{\parallel}) \frac{\mu^2}{\hbar^2 \omega^2} = \chi_1 + \chi_2 \quad (3.23)$$

где $\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$.

По порядку величины

$$\left| \frac{\chi_2}{\chi_1} \right| \sim \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^2$$

Таким образом поляронный эффект приводит к уменьшению диамагнитной восприимчивости. Поправочный член оказывается существенным при температурах порядка $kT \sim \hbar \omega$.

Использованный выше способ вычисления статистической матрицы близок к методу собственного времени Фока и может быть использован также в задачах с более сложным оператором энергии. однако эти вопросы здесь рассматриваться не будут.

ГЛАВА III.

ТЕОРИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭКСИТОНА С КОЛЕБАНИЯМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ I. Потенциал фотонного взаимодействия электрона и дырки в экситоне

Существование экситонных состояний в кристаллах было впервые показано Я.И.Френкелем [46] при исследовании поглощения света твердыми телами. На примере модели Гайтлера-Лондона Я.И.Френкель пришел к выводу, что возникшее при поглощении фотона возбужденное атомное состояние может перемещаться от атома к атому в виде волны, несущей энергию, но не несущей электрического тока. Эти перемещающиеся по кристаллу возбужденные атомные состояния были названы Я.И.Френкелем экситонами. В дальнейшей Ванье [47] было показано, что экситонные состояния можно в рамках обычной зонной теории рассматривать при достаточно больших размерах экситона как задачу о движении двух квазичастиц — электрона и дырки с эффективными массами m_1 и m_2 . В общем случае, разумеется, эффективные массы будут не скалярными, а тензорными величинами.

В качестве оператора энергии взаимодействия между электроном и дыркой Мотт [48] предложил потенциал

$$W(r) = - \frac{e^2}{n^2 r} \quad (I.1)$$

где показатель преломления света n учитывает поляризацию электронных оболочек атомов, входящих в состав диэлектрического континуума, окружающего электрон и дырку.

Таким образом, возникла водородоподобная модель экситона Ванье-Мотта.

Экспериментальное доказательство существования экситонов

было получено в работах Е.Ф.Гросса [42] и Никитина [50]. Было обнаружено, что в записи меди имеются в спектре поглощения четко выраженные водородноподобные серии, которые можно было приписать экситонам. Удалось проследить возникновение экситонов вплоть до состояний с главным квантовым числом $n = 10$; в этом случае размеры экситона достигают огромной величины порядка нескольких сотен ангстрем. Расположение энергетических уровней, кроме уровней с $n = 1$, прекрасно описывается законом $E_n = -\frac{C}{n^2}$, где C — некоторая константа. Энергия основного состояния оказывается меньше чем $-\frac{C}{1^2}$. Сдвиг уровня энергии $n = 1$ был объяснен в работах [51] [56], в которых кристаллы рассматривались в приближении сплошной среды, и в работе А.Г.Жилича [57], в которой учитывалось влияние кристаллической структуры записи меди на движение электрона в основном состоянии экситона.

В опытах Е.Ф.Гросса и сотрудников было в дальнейшем показано, что в записи меди существует не одна, а две и даже три водородноподобные серии. Происхождение этих серий было объяснено П.П.Павинским и А.Г.Жиличем [58] и А.Г.Жиличем [59].

Последующее исследование эффектов Зеемана и Штарка на экситоне (эксперимент — Е.Ф.Гросс и сотрудники [60], теория А.Г.Самойлович, Л.А.Коренблит [61], П.П.Павинский [58] полностью подтвердили первоначальное предположение о том, что водородоподобный спектр в записи меди обязан своим происхождением экситонным состояниям. Кроме того, опыты по диамагнитному эффекту Зеемана [62] привели к важному выводу о примерном равенстве эффективных масс электрона и дырки.

Экситоны могут быть двух типов в зависимости от величины полного спина системы: ортоэкситоны имеют $S = 1$, параксцитоны $S = 0$. Схема энергетических уровней экситонов обоих типов

вычислена С.А. Москаленко и К.Б. Толыго [63] с помощью сведения многоэлектронной задачи к задаче движения двух квазичастиц.

Теория экситонов малых радиусов, где приближение Ванье-Мотта становится непригодным, была развита Геллером и Марку-
зом [64]. В обзоре Хакена [65] содержится подробный анализ теоретических работ, выполненных до 1958 года.^{х)}

Перейдем к рассмотрению взаимодействия экситонов Ванье-Мотта с колебаниями кристаллической решетки. Кристаллы закиси меди, так же как и ряд других кристаллов, для которых исследовался вопрос о существовании экситонов (NaCl , CdS , CsCl) принадлежит к числу полярных кристаллов. В последних основную роль играет взаимодействие электрона и дырки с оптическими колебаниями решетки. Оператор энергии взаимодействия имеет тот же вид, что и в теории полярона:

$$g \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^{\circ} e^{i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}_1} a_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}}^{\circ*} e^{-i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}_1} a_{\mathbf{k}}^+ \quad \text{для электрона} \quad (1.2)$$

$$-g \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^{\circ} e^{i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}_2} a_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}}^{\circ*} e^{-i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}_2} a_{\mathbf{k}}^+ \quad \text{для дырки}$$

где $V_{\mathbf{k}}^{\circ}$ имеет вид $V_{\mathbf{k}}^{\circ} = -i \frac{\omega}{k} \left(\frac{4\pi}{\sqrt{2}} \right)^{1/2}$

Переходя к системе центра инерции

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{r}}_1 &= \bar{\mathbf{R}} + \frac{m_2}{M} \bar{\mathbf{r}} \\ \bar{\mathbf{r}}_2 &= \bar{\mathbf{R}} - \frac{m_1}{M} \bar{\mathbf{r}} \end{aligned} \quad \bar{\mathbf{r}} = \bar{\mathbf{r}}_1 - \bar{\mathbf{r}}_2 \quad (1.3)$$

получим следующее уравнение для экситона Ванье-Мотта

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \nabla_{\bar{\mathbf{r}}}^2 - \frac{1}{2\mu} \nabla_{\bar{\mathbf{r}}}^2 + W(\bar{\mathbf{r}}) + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \right. \\ \left. + g \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}(\bar{\mathbf{r}}) e^{i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}} a_{\mathbf{k}} + V_{\mathbf{k}}^*(\bar{\mathbf{r}}) e^{-i\mathbf{k}\bar{\mathbf{r}}} a_{\mathbf{k}}^+ \right\} \Psi = E \Psi \quad (1.4)$$

х) Приведенный в настоящей работе перечень теоретических работ не претендует на полноту.

где через $V_k(r)$ обозначено

$$V_k(r) = V_k^* \left(e^{i \frac{m^2}{M} \vec{k} \vec{r}} - e^{-i \frac{m^2}{M} \vec{k} \vec{r}} \right) \quad (1.5)$$

Таким образом все взаимодействие в гамильтониане (1.4) разбивается на две части. Первая, описываемая потенциалом $W(r)$ представляет "непосредственно" кулоновское взаимодействие с учётом поляризации электронных оболочек атомов, образующих диэлектрический фон вокруг электрона и дырки. Вторая часть взаимодействия связана со смещением ионов и описывается в представлении вторичного квантования операторами поля a_k и, выражаясь языком теории поля, связана с обменом фононами между электроном и дыркой.

Задача заключается в вычисления собственных значений операторов (1.4) при произвольной величине константы связи g . В первых работах по теории экситонно-фотонного взаимодействия было использовано приближение сильной связи (И.М.Дикман, С.И.Пенар [66]), приближение промежуточной связи (Мейер [53], И.П.Ипатова, А.В.Тулуб [55]) и теория возмущений в сочетании с методом канонического преобразования (В.А.Москаленко [70]). Г.Хакен [68] и затем А.В.Тулуб [56] получили явное выражение для потенциала взаимодействия между электроном и дыркой в области слабой и промежуточной связи. Этот потенциал автоматически приводит к сдвигу уровня $n = 1$ за счёт отдачи (см. ниже). В дальнейшем И.М.Дикман и И.Г.Заславская [66] вычислили энергию основного состояния экситона при константах связи меняющихся в широком диапазоне.

Г.Хакен [65] применил метод континуального интегрирования Фейнмана для вычисления энергии экситона.

Критический анализ указанных выше работ содержится в обзоре [65].

Обсудим, следуя [53], [54], [55], некоторые вопросы теории взаимодействия экситона Ванье-Мотта с кристаллической решеткой. Рассматривая это взаимодействие следует иметь в виду различие между основным и возбужденными состояниями экситона.

В основном состоянии экситона "период обращения" τ

$$\tau = \frac{2\pi a}{v} = \frac{2\pi \mu a^2}{\hbar} \quad \text{где} \quad a \approx \frac{\hbar^2 n^2}{m e^2}$$

меньше примерно на один порядок периода продольных оптических колебаний. Поэтому воздействие экситона на кристаллическую решетку можно учесть в среднем путём вычисления математического ожидания энергии с атомными волновыми функциями $\Psi(r, \delta)$, где δ — варьируемый параметр.

Обратимся к уравнению (1). Нетрудно видеть, что оператор энергии коммутирует с оператором

$$\bar{P} = -i\nabla_r + \sum_k \bar{\kappa} a_k^+ a_k \quad (1.6)$$

поэтому координаты центра инерции системы могут быть исключены из (1.1) с помощью канонического преобразования

$$S = \exp \left\{ i \left(\bar{P} - \sum_k \bar{\kappa} a_k^+ a_k \right) \bar{R} \right\} \quad (1.7)$$

в результате которого гамильтониан системы примет вид

$$\frac{(\bar{P} - \sum_k \bar{\kappa} a_k^+ a_k)^2}{2M} - \frac{1}{2\mu} \nabla_r^2 + W(r) + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + g \sum_k V_k(r) a_k + V_k^*(r) a_k^+ \quad (1.8)$$

Если теперь вычислить

$$\langle \Psi(r, \delta), H \Psi(r, \delta) \rangle = \tilde{H} \quad (1.9)$$

δ - варьируемый параметр, то полученное уравнение совпадает по своей форме с уравнением для полярона с той лишь разницей, что функция V_k в задаче о поляроне заменяется на следующую

$$V_k \rightarrow V_k^0 \left\langle \Psi(r, \delta), \left(e^{i \frac{m_2 \vec{k} \vec{r}}{M}} - e^{-i \frac{m_1}{M} (\vec{k} \vec{r})} \right) \Psi(r, \delta) \right\rangle \quad (1.10)$$

Собственные значения гамильтониана (1.9) могут быть найдены описанным в главе I § 1-5 способом. В первом приближении, например, получим [55]

$$E(\delta) = \frac{P^2}{2M} + \left\langle \Psi(r, \delta), \left(-\frac{1}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{n^2 r} \right) \Psi(r, \delta) \right\rangle - \sum_k \frac{|\langle \Psi(r, \delta) V_k(r) \Psi(r, \delta) \rangle|^2}{\omega + \frac{k^2}{2M} - \frac{P \cdot k}{M} (1-\eta)} \quad (1.11)$$

Величина перенормированной массы будет зависеть от атомного состояния. Значения энергии $1s$ и $2p$ состояний вычислены [54] при $P = 0$, где также сопоставлены теоретические и экспериментальные данные. Выражение (1.10) обладает тем свойством, что при $m_1 = m_2$ взаимодействие экситона с фононным полем исчезает. Этот результат является следствием указанного выше приближенного способа решения задачи. ^{x)} Ниже в § 2 будет показано, что даже в случае равенства масс электрона и дырки фононное взаимодействие существует, но оно даёт лишь небольшую поправку к энергии основного состояния экситона.

Перейдем теперь к рассмотрению возбужденных состояний экситона, в которых размеры экситона значительно превышают размеры элементарной ячейки.

С ростом главного квантового числа n движение частицы

x) Хакен в обзоре [65] называет это приближение *Ansatz'* em Нейера, Тулуба и Ипатовой.

по "орбите" становится все более медленным и соотношение между периодом обращения и периодом собственных колебаний решетки меняется на обратное по сравнению с основным состоянием: период обращения становится больше чем период кристаллических колебаний.

Поэтому решетка будет уже "откликаться" не на средние, а на мгновенные положения электрона. Иными словами, если для основного состояния минимум энергии можно было искать в классе функций

$$\Psi(r, a) = \psi(r, s) \Omega(a) \quad (1.12)$$

то для возбужденных состояний приближение (1.12) становится непригодным.

Для экситонов больших радиусов можно воспользоваться другим приближением, полагая, что фоновое взаимодействие между электроном и дыркой будет таким же как и в случае неподвижных частиц. Вычислив потенциал этого статического взаимодействия, можно затем решить задачу об относительном движении частиц.

Следует лишь оговориться относительно термина "неподвижной" частицы. Полярон представляет систему из "голого" электрона и фононного поля, или, иными словами, систему из электрона движущегося внутри потенциальной ямы, созданной самим электроном. Интегралом движения для изолированного поларона является полный импульс; движение же электрона внутри потенциальной ямы, разумеется, не прекращается. Неподвижный полярон означает, что полный импульс системы равен нулю, отдачей же при взаимодействии электрона с фононами, разумеется, пренебрегать нельзя.

В низшем приближении теории возмущений учёт отдачи сводится к замене

$$\omega \rightarrow \omega + \frac{k^2}{2m}$$

Этот результат может быть, например, получен с помощью двух канонических преобразований [56] (см. также книгу Бёте и Гоф-
[69].

Потенциал взаимодействия между двумя закрепленными источ-
никами скалярного поля хорошо известен, и имеет в применении к
настоящей задаче следующий вид

$$\varphi(r) = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}(r)|^2}{\omega + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}}$$

Переходя в (1.13) от суммирования к интегрированию получим с
учётом (1.10)

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= - \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\omega + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}} (1 - \cos \bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{r}}) d^3\mathbf{k} \\ &= - 2g^2\omega + e^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{e}{r} + \frac{e^2}{2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \end{aligned} \quad (1.13)$$

В этом же приближении собственные функции оператора энергии при-
мут вид ($P = 0$)

$$\begin{aligned} \Psi_{(r,a)} &= \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \left(e^{i\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{r}}} V_{\mathbf{k}}(r) a_{\mathbf{k}} - e^{-i\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{r}}} V_{\mathbf{k}}^*(r) a_{\mathbf{k}}^+ \right) \right\} \Phi_0 = \\ &= e^{-i \sum_{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{r}}} \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} (V_{\mathbf{k}}(r) a_{\mathbf{k}} - V_{\mathbf{k}}^*(r) a_{\mathbf{k}}^+) \right\} \Phi_0 \end{aligned} \quad (1.14)$$

где Φ_0 — функционал вакуумного состояния.

Первый член в (1.13) представляет изменение энергии за счёт по-
лиронного эффекта электрона и дырки, второй же член в (1.13) и
является искомым потенциалом фононного взаимодействия.

Задача теперь сводится к решению уравнения Шредингера

$$\left\{ - \frac{1}{2\mu} \nabla^2 + U(r) \right\} \psi = E \psi \quad (1.15)$$

с потенциалом

$$U(r) = \varphi(r) + w(r) = - \frac{e^2}{\varepsilon r} - e^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{e^{-nr}}{r} \quad (1.16)$$

функция $U(r)$ имеет следующее поведение на больших и малых расстояниях

$$U(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} = - \frac{e^2}{\varepsilon r} \quad (1.17a)$$

$$U(r) \Big|_{r \rightarrow 0} = - \frac{e^2}{n^2 r} \quad (1.17b)$$

Из (1.17) следует, что в основном состоянии фононное взаимодействие незначительно. На больших же расстояниях $U(r)$ имеет тот вид, который и следовало ожидать — вид кулоновского потенциала двух частиц погруженных в среду с диэлектрической постоянной ε . Необходимо также отметить, что выражения (1.13), (1.14) фактически справедливы и при константах связи порядка нескольких единиц. Это обстоятельство связано с тем, что в теории полярона ряды по теории возмущений могут применяться и при $1 < g^2 < 5$ (см. введение ф-ла (10)).

Отличие потенциала $U(r)$ от кулоновского приводит к смещению энергетических уровней, которые особенно существенно для $1s$, а также и для $2s$ и $2p$ состояний.

Рассматривая потенциал

$$- e^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{e^{-nr}}{r}$$

х) Предельный переход $r \rightarrow 0$ имеет разумеется несколько символический смысл, т.к. само уравнение (1.4) получается в предположении, что расстояния достаточно велики.

так возмущение получаем следующую поправку к энергии

$$\Delta E_{Ne} = -e^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) J_{Ne}^u \quad (1.18)$$

$$J_{Ne}^u = \langle Ne | \frac{e^{-ur}}{r} | Ne \rangle$$

Интеграл J_{Ne} относится к числу вычисленных Альдером и Винте-ром [71]

$$\int_0^\infty R_{ne}^2 \left(\frac{r}{Na} \right) r^p e^{-ur} r^2 dr = \quad (1.19)$$

$$= \frac{4 (N+e)! (2e+p+2)! 2^{2e}}{[(2e+1)!]^2 N^{4+2e} (N-e-1)! u^p (ua)^{2e+3}}$$

$$F_2 (2e+p+3, e+1+N, e+1-N, 2e+2, 2e+2, -\frac{2}{Nau}, \frac{2}{Nau})$$

a — радиус первой борзовской орбиты, равный в рассматриваемой задаче

$$a = \frac{\varepsilon}{\mu e^2} = 2\varepsilon \frac{1}{me^2} \quad \left(= 2\varepsilon \frac{\hbar^2}{me^2} \right) \quad (1.20)$$

$$F(\alpha, \beta, \beta'; \gamma, \gamma'; x, y)$$

— функция Аппеля

$$F_2(\alpha, \beta, \beta'; \gamma, \gamma'; x, y) = \sum_{m,n} \frac{\alpha_{m+n} \beta_m \beta_n}{\gamma_m \gamma_n m! n!} x^m y^n \quad (1.21)$$

$$\alpha_m = \frac{\Gamma(\alpha+m)}{\Gamma(\alpha)} \quad ; \quad \beta_m = \frac{\Gamma(\beta+m)}{\Gamma(\beta)}$$

При специальном соотношении между параметрами функция Аппеля может быть сведена к гипергеометрической функции. Так, например,

Полагая в (1.19) $p = -1$, получим с учётом (1.21) следующее выражение для J_{Ne}

$$a J_{Ne} = \frac{(N+e)!}{N^2 (N-e-1)! (2e+1)!} \frac{(z_{N-1})^{N-e-1}}{(z_{N+1})^{N+e+1}} F\left(N+e+1, e+1-N, 2e+2, \frac{1}{1-z_N^2}\right) \quad (1.22)$$

где a радиус первой боровской орбиты для данной задачи

$$a = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{\mu e^2}$$

а величина z_N равняется

$$z_N = \frac{N}{2} a u \quad (1.23)$$

Из (1.22) получаем для интересующих нас p уровней

$$\begin{aligned} a J_{21} &= \frac{1}{4} \frac{1}{(1+z_2)^4} ; \\ a J_{31} &= \frac{4}{9} \frac{z_3-1}{(z_3+1)^5} \left(1 - \frac{5}{4} x_3\right) \\ a J_{41} &= \frac{5}{8} \frac{(z_4-1)^2}{(z_4+1)^6} \left(1 - 3x_4 + \frac{21}{5} x_4^2\right) \end{aligned} \quad (1.24)$$

$$\text{где } x_N = \frac{1}{1-z_N^2}$$

Выражение для энергии примет с учётом (1.18) следующий вид

$$E_{Ne} = -\frac{1}{2N^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2 \varepsilon^2} - \frac{\mu e^4}{\hbar^2 \varepsilon} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon}\right) (a J_{Ne}) \quad (1.25)$$

Отношение второго члена в (I.25) к первому составляет

$$\frac{\Delta E_{Ne}}{E_N^0} = 2\varepsilon \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) (N^2 a J_{Ne}) \quad (I.26)$$

Для больших N отношение (I.26) мало и уровни энергии имеют такой же вид, что и в задаче об атоме водорода

$$E_N^0 = - \frac{1}{2N^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2 \varepsilon^2} \quad (I.27)$$

Обратимся к экспериментальным данным. В приводимой ниже таблице помещены полученные Е.Ф. Гроссом [49] спектральные линии для экситона при температуре $T = 1,3^\circ \text{K}$.

Желтая серия Cu_2O при $T = 1,3^\circ \text{K}$.

n	$\nu_N \text{ см}^{-1}$	$\Delta \nu_N \text{ см}^{-1}$	$\Delta \nu_N \cdot N^2 \text{ см}^{-1}$
1	16406,8	1117,7	1117,7
2	17331,3	193,2	772,8
3	17438,3	86,2	775,8
4	17477,3	47,2	755,2
5	17494,4	30,1	752,5
6	17504,4	20,1	729,6
7	17510,0	14,5	710,5
8	17513,4	11,1	710,4
9	17515,8	8,7	704,7
	17524,5		

По последним шести линиям среднее значение $\Delta \nu_N \cdot N^2$

равняется

$$\langle \Delta \nu \cdot N^2 \rangle = 729,3 \text{ см}^{-1} \approx 730 \text{ см}^{-1} \quad (1.28)$$

Перепишем теперь (1.27) в виде

$$\Delta \nu \cdot N^2 = R_{\infty} \frac{\mu}{m_e \cdot \varepsilon^2} \quad (1.29)$$

где R_{∞} постоянная Ридберга для приведенной массы, равной массе электрона в вакууме

$$R_{\infty} = 109737 \text{ см}^{-1}$$

Выражения (1.29) и (1.28) определяют эффективную массу т.к. при $m_1 = m_2 = m$ величина μ равняется ^{x)}

$$\mu = \frac{m}{2}$$

и из (1.29) получаем

$$\frac{m}{m_e} = \frac{2 \varepsilon^2 \cdot 730}{109737} \quad (1.30)$$

К сожалению, значение n , ε , ω известны для закиси меди сравнительно неточно и в литературе имеются большие расхождения в этом вопросе. Беря в качестве ε значение $\varepsilon = 7,6^{xx)}$ получим из (1.30)

$$\frac{m}{m_e} = 0,77 \quad (1.31)$$

Интересно отметить, что из диамагнитного эффекта Зеемана следует весьма близкое к (1.31) соотношение ^{xxx)}

$$\frac{m}{m_e} = 0,8$$

x) Как уже выше указывалось соотношение $m_1 = m_2$ следует из теории эффекта Зеемана на экзистоне.

xx) Frank, Polovica v. toezii i praxi
SNTL, Praha, 1955.

xxx) Интегралы между уровнями Ландау в магнитном поле определяют эффективную массу Е.Ф. Гросс, В.П. Захарченя, И.П. Павинский X T Ф, XXII, 1940, 1957.

Значение параметра am равняется

$$am = 2\sqrt{2} \varepsilon \left(\frac{m_e}{m} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0} \right)^{1/2} \quad (1.32)$$

где $\varepsilon_0 = 27,2$ e.v.

Подставляя в (1.32) значение $\varepsilon \left(\frac{m_e}{m} \right)^{1/2}$ из (1.30)

получим

$$am = 24,5 \left(\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_0} \right)^{1/2} \quad (1.33)$$

Если в качестве $\hbar\omega$ воспользоваться значением x)

$$\hbar\omega = 0,027 \text{ e.v.},$$

то значение am окажется равным

$$am = 0,7748 \quad (1.34)$$

При этом значении am сдвиг уровня $3p$ согласно (1.26) окажется равным

$$\frac{\Delta E_{31}}{E_3^0} = 0,949 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{2} \right) \quad (1.35)$$

Если далее взять в качестве n приведенное в [1] значение $n=2$, то отношение (1.35) составит

$$\frac{\Delta E_{31}}{E_3^0} = 0,11,$$

в то время из таблицы на стр. 108 получается

$$\frac{\Delta E_{31}}{E_3^0} = 0,063$$

Из последних данных еще, однако, нельзя делать заключение о соответствии или несоответствии теории и эксперимента, т.к.

х) См. напр. Е.Ф. Гросс, Физика твердого тела, т. I, вып. 3, 518, (1959).

в литературе можно встретить значения показателя преломления n от $n = 1,8$ до $n = 2,5$, а ΔE_{nc} довольно чувствительно к изменению n .

Экспериментальному отношению $\frac{\Delta E_{31}}{E_3} = 0,063$ соответствует n равно

$$n = 2,25 \quad (I.36)$$

Сдвиг уровня $4p$ при указанных выше значениях

$$\varepsilon = 7,6; \quad n = 2,25; \quad \omega = 0,7748,$$

составляет $\frac{\Delta E_{41}}{E_4} \approx 0,01$

что соответствует сдвигу на $\Delta \nu = 7,3 \text{ см}^{-1}$

Соответствующий сдвиг уровня $2p$ будет равен 23 см^{-1} .

Резюмируя можно сказать, что теория дает возможность определить эффективную массу электрона и дырки, и теория дает правильное по величине смещение энергетических уровней экситона. Что же касается численных значений сдвига, то здесь необходимо уточнение значений n^2 , ε , ω . Следует также учесть, что нижние уровни довольно сильно размыты и уровни энергии для орто- и паракситонов согласно [63] не совпадают, поэтому точное определение положения нижних p уровней экситона затруднено в экспериментальном отношении, что возможно сказывается на приведенных выше значениях ν . Кроме того многоэлектронная теория экситона [63] приводит к возможности дополнительных и потенциалу (I.16) членов. Следует отметить, что порядок сдвига энергетических уровней свидетельствует в пользу того, что Cu_2O является слабополярным кристаллом (близость n^2 и ε) и тем самым

оправдывается теория возмущений. х)

Основное состояние экситона занимает несколько особое положение, т.к. в основном состоянии размеры экситона сравнимы с размерами кристаллической ячейки и макроскопическая трактовка кристалла является лишь грубым приближением. Смещение основного состояния было объяснено в [52], исходя из кристаллической структуры ячейки Cu_2O и в [53], [54], [55] в приближении сплошной среды на основе приближения слабой и промежуточной связи. хх) В § 2 будет показано, что для основного состояния экситона фоновое взаимодействие является малым не только при малых g^2 , но даже и при $g^2 \approx 10$, что оправдывает, использованное в [53] - [55] приближение. Частота перехода $1s - 2p$ была вычислена в [54] и находится в довольно неплохом согласии с экспериментом.

х) Отметим впрочем, что и при приведенных в [1] значениях n^2, ε, ω константа связи g^2 при $m_1 = m_2$ будет сравнительно невелика: $g_0^2 = 2,9$

хх) См.сноску на стр. 102

§ 2. Энергия основного состояния экситона Ванье-Мотта

В § 1 было получено выражение для собственных функций (функционалов) экситона в состояниях $n = 2, 3, 4, \dots$. По аналогии с формулой (1.14) будем искать волновую функцию основного состояния в виде

$$S \Phi_0 \Psi = \exp \left\{ \sum_{\kappa} a_{\kappa} f_{\kappa}^*(z, R) - a_{\kappa}^+ f_{\kappa}(z, R) \right\} \Phi_0 \Psi(z, R) \quad (2.1)$$

где Φ_0 вакуумный функционал, $f_{\kappa}(z, R)$ некоторые пока произвольные функции от координат R и z и от импульса κ , функция $\Psi(z, R)$ зависит только от пространственных координат.

Применим к оператору энергии (1.4) каноническое преобразование S' . При дифференцировании S следует учесть, что ∇S не коммутирует с S благодаря чему появляются дополнительные слагаемые согласно формуле

$$\frac{d}{dx} e^{\varphi(x)} = e^{\varphi(x)} \left\{ \varphi'(x) + \frac{1}{2!} [\varphi'(x), \varphi(x)] + \frac{1}{3!} [[\varphi', \varphi], \varphi] + \dots \right\} \quad (2.2)$$

Из (2.2) следует, что

$$\nabla S = S \left\{ \sum_{\kappa} a_{\kappa} \nabla f_{\kappa}^* - a_{\kappa}^+ \nabla f_{\kappa} + \frac{1}{2} \sum_{\kappa} (f_{\kappa}^* \nabla f_{\kappa} - f_{\kappa} \nabla f_{\kappa}^*) \right\}$$

Предположим кроме того, что функция $f_{\kappa}(z, R)$ удовлетворяет дополнительному условию

$$\sum_{\kappa} (f_{\kappa}^* \nabla f_{\kappa} - f_{\kappa} \nabla f_{\kappa}^*) = 0 \quad (2.3)$$

которое справедливо по отношению к координатам z и R .

В результате преобразований оператор энергии примет сле-

дующий вид

$$\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \sum_{\kappa} \omega_{\kappa} |f_{\kappa}|^2 + \frac{1}{2M} \sum_{\kappa} |\nabla_{\mathbf{R}} f_{\kappa}|^2 + \frac{1}{2\mu} \sum_{\kappa} |\nabla_{\mathbf{r}} f_{\kappa}|^2 \quad (2.4)$$

$$+ \sum_{\kappa} (V_{\kappa} f_{\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} + V_{\kappa}^* f_{\kappa}^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}})$$

где

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{n^2 r} \quad (2.5)$$

Будем вычислять математическое ожидание энергии E

$$E = \int \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \mathcal{H} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d^3\mathbf{R} d^3\mathbf{r}$$

в классе функций

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Omega(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

Приравнявая нулю функциональную производную от E по функциям $\mathbf{x}$

$f_{\kappa}^*(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ получим следующее уравнение для $f_{\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$

$$-\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 f_{\kappa} - \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 f_{\kappa} + \omega_{\kappa} f_{\kappa} - \frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}} f_{\kappa} \frac{\nabla |\Omega|^2}{|\Omega|^2} - \quad (2.7)$$

$$- \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}} f_{\kappa} \frac{\nabla |\psi|^2}{|\psi|^2} = -g V_{\kappa}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}}$$

Если положить

$$\varphi_{\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{f_{\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\psi(\mathbf{r}) \Omega(\mathbf{R})}, \quad (2.8)$$

то для $\varphi_{\kappa}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ получится более простое уравнение

$$-\frac{1}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \varphi_{\kappa} - \frac{1}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \varphi_{\kappa} + \omega_{\kappa} \varphi_{\kappa} + \frac{1}{2M} \varphi_{\kappa} \frac{\nabla^2 \Omega}{\Omega} + \frac{1}{2\mu} \varphi_{\kappa} \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} =$$

$$= -g V_{\kappa}^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}} \Omega(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.9)$$

Пусть, далее u_n и v_n суть собственные функции следующих

х) Если функцию Ω взять в виде $\Omega = e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}}$ то (2.11) перейдет в уравнение, рассмотренное Хакеном [65].

операторов

$$-\frac{1}{2M} \nabla_K^2 u_n + \frac{1}{2M} \frac{\nabla^2 \Omega}{\Omega} u_n = E_n u_n \quad (2.11)$$

$$-\frac{1}{2\mu} \nabla_z^2 v_n + \frac{1}{2\mu} \frac{\nabla^2 \psi}{\psi} v_n = \varepsilon_n v_n$$

где индекс n заменяет три индекса: $n = (n_1, n_2, n_3)$, тогда решение уравнения (2.13) примет вид

$$\varphi(z, K) = - \sum_{n, n'} \frac{u_n(K) v_{n'}(z) a_n b_{n'}}{E_n + \varepsilon_{n'} + \omega_K} \quad (2.12)$$

$$a_n = \int u_n^*(K) e^{-iK\bar{K}} \Omega(K) d^3K$$

$$b_n = \int v_n^*(z) V_K^*(z) \psi(z) d^3z$$

Дальнейшие вычисления требуют конкретизации вида функций $\psi(z)$ и $\Omega(K)$. Выберем эти функции, следуя И.М. Дитману и С.И. Пекару [51] следующим образом

$$\psi = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\beta z^2}{2}\right); \quad \Omega(K) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\alpha K^2}{2}\right) \quad (2.13)$$

Если подставить (2.13) в (2.11), то u_n и v_n будут соответствующими функциями гармонического осциллятора с собственными значениями

$$E_n = \frac{\alpha}{M} (n_1 + n_2 + n_3); \quad \varepsilon_{n'} = \frac{\beta}{\mu} (n'_1 + n'_2 + n'_3) \quad (2.14)$$

Выбранная выше аппроксимация (2.13) позволяет точно вычислить, как это было указано Е.П. Гроссом [29], бесконечные суммы в правой части (2.13). Для выполнения суммирования удобно воспользоваться, следуя [29], следующим интегральным преобра-

зованием

$$(E_n + \varepsilon_n + \omega_k)^{-1} = \int_0^\infty ds \exp\{-s(E_n + \varepsilon_n + \omega_k)\} \quad (2.15)$$

Подставляя (2.15) в (2.12) получим с учётом (2.8) следующее выражение для $f_k(z, R)$

$$f_k(z, R) = -g V_k^* \int_0^\infty ds e^{-s\omega_k} e^{\frac{3}{2}s(\frac{\alpha}{M} + \frac{\beta}{\mu})} \Omega(R) \psi(z) \quad (2.16)$$

$$\iint d^3R' d^3z' \rho_d(R, R') e^{-i\vec{k}\vec{R}'} \Omega(R') \rho_p(z, z') \left(e^{i\frac{m_2}{M}(\vec{R}\vec{z})} - e^{-i\frac{m_1}{M}(\vec{R}\vec{z})} \right)$$

где $\rho(R, R')$ статистическая матрица гармонического осциллятора

$$\rho_{sd}(R, R') = \sum_{n_1, n_2, n_3} e^{-s E_{n_1, n_2, n_3}(\alpha)} U_{n_1, n_2, n_3}(R) U_{n_1, n_2, n_3}(R') \quad (2.17)$$

$$\rho_{sp}(z, z') = \sum_n e^{-s \varepsilon_n} \psi_n(z) \psi_n(z')$$

В одномерном случае $\rho(x, x')$ имеет согласно гл. II (3.16) следующий вид

$$\rho_{ds}(x, x') = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2\pi \sinh \frac{\alpha s}{M}}} \cdot \quad (2.18)$$

$$\exp\left\{-\frac{\alpha}{4} \left[(x+x')^2 \tanh \frac{\alpha s}{2M} + (x-x')^2 \coth \frac{\alpha s}{2M} \right]\right\}$$

Интегралы в (2.16) вычисляются по формуле

$$\begin{aligned} e^{\frac{\alpha s}{2M}} \Omega(x) \int \rho_{ds}(x, x') \Omega(x') e^{-i\kappa x'} dx' = \\ = \exp(-i\kappa x e^{-\frac{\alpha s}{M}}) \exp\left(-\frac{\kappa^2}{4\alpha} (1 - e^{-2\frac{\alpha s}{M}})\right) \end{aligned} \quad (2.19)$$

и функция $f_k(z, R)$ оказывается равной

$$f_k(z, R) = -g V_k^* \int_0^\infty ds \exp(-s\omega_k) e^{-i\vec{k}\vec{R}} e^{-\frac{\alpha s}{M}} \quad (2.20)$$

$$e^{-\frac{\kappa^2}{4\alpha}(1-e^{-2\frac{\alpha s}{\mu}})} - \frac{\kappa^2}{16\beta}(1-e^{-2\frac{\beta s}{\mu}}) \left[e^{-\frac{i\kappa\bar{z}}{2}} e^{-\frac{\beta s}{\mu}} - e^{i\frac{\kappa\bar{z}}{2}} e^{-\frac{\beta s}{\mu}} \right]$$

Можно убедиться, что выражение (2.20) удовлетворяет дополнительному условию (2.3).

Если в уравнении (2.7) пренебречь членами

$$\frac{1}{2\mu} \nabla f_{\kappa} \frac{\nabla |\psi|^2}{|\psi|^2} \quad \text{и} \quad \frac{1}{2M} \nabla f_{\kappa} \frac{\nabla |\Omega|^2}{|\Omega|^2}$$

которые учитывают, что функционалы фононного поля различны в общем случае для различных состояний экситона, то функции примут вид

$$f_{\kappa}(z, R) = -V_{\kappa}^{0*} \left\{ \frac{e^{-i\frac{m_2}{M}(\bar{\kappa}\bar{z})}}{\omega + \kappa^2 \left[\frac{1}{2M} + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{m_2}{M} \right)^2 \right]} - \frac{e^{i\frac{m_1}{M}(\bar{\kappa}\bar{z})}}{\omega + \kappa^2 \left[\frac{1}{2M} + \frac{1}{2\mu} \left(\frac{m_1}{M} \right)^2 \right]} \right\} \quad (2.21)$$

Выражение (2.21) при $m_1 = m_2 = \frac{M}{2}$ переходит в (1.14).

Этот же результат можно получить из выражения (2.20), если выражения в экспоненте разложить в ряд по α и β .

Перейдем к вычислению энергии. Если воспользоваться уравнением (2.7), то можно показать, что математическое ожидание энергии будет равно

$$E = \langle \mathcal{H}_0 \rangle + \sum_{\kappa} \langle V_{\kappa}(z) e^{i\kappa\bar{R}} f_{\kappa}(z, R) \rangle \quad (2.22)$$

где $\langle \dots \rangle$ означают среднее значение.

Подставляя (2.20) в (2.22) получим при $m_1 = m_2$ для E следующее выражение

$$E = \langle \mathcal{H}_0 \rangle - 2 \sum_{\kappa} |V_{\kappa}^0|^2 \int_0^{\infty} ds \cdot e^{-\frac{\kappa^2}{2\alpha}(1-e^{-2\frac{\alpha s}{\mu}})} e^{-s\omega} \cdot \left\{ e^{-\frac{\kappa^2}{8\beta}(1-e^{-\frac{\beta s}{\mu}})} - e^{-\frac{\kappa^2}{8\beta}(1+e^{-\frac{\beta s}{\mu}})} \right\}$$

В случае основного состояния можно считать (как это подтверждает нижеследующая оценка), что

$$\frac{m\omega}{\beta} \ll 1, \quad \alpha \ll 1 \quad (2.23)$$

При соблюдении неравенств (2.23) выражение для E примет вид

$$E = \langle \mathcal{H}_0 \rangle - 2g^2 \frac{u\omega}{\pi\beta} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2g} - \frac{p\pi}{2} (1 - \Phi(pq)) e^{\frac{p^2 q^2}{2}} + \dots \right\}$$

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz$$

или с учётом

$$(pq) \sim 1, \text{ т.е. } p^2 = 2M\omega + 8\beta, \quad q^2 = \frac{1}{8\beta}$$

получим

$$E = \frac{3}{4\mu} \beta - \frac{2e^2}{n^2} \left(\frac{\beta}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} - 2\alpha g^2 \omega \left(\frac{m\omega}{\pi\beta} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \alpha = 0,76 \quad (2.24)$$

Выражение (2.24) близко к полученному И.М.Дикманом и И.Г.Заславской [66].

В реальных кристаллах последний член в (2.24) значительно меньше первых двух, поэтому можно воспользоваться следующим приближенным значением

$$\beta = \frac{16}{9} \frac{\hbar^2 e^4}{\pi n^4} = \frac{4}{9} \frac{m^2 e^4}{\pi \hbar^4}$$

которое гарантирует справедливость неравенства

$$\frac{m\omega}{\beta} \ll 1$$

Таким образом, последний член в (2.24), который характеризует величину фононного взаимодействия в основном состоянии, действительно мал, как это и утверждалось в § I. Что касается численных значений энергии, как функции g^2 , то эти расчёты приведены в цитированной выше работе И.М.Дикмана и И.Г.Заславской [66].

§ 3. Длина свободного пробега экситона в полярных кристаллах

Для экситонов больших радиусов справедливо приближение Ванье-Мотта, согласно которому экситон представляет систему электрона и положительно заряженной дырки с кулоновским взаимодействием между ними. Периодическое поле решетки учитывается, как обычно, введением эффективных масс, которые, имея в виду кристаллы закиси меди, можно считать изотропными.

Обе частицы — электрон и дырка — взаимодействуют с кристаллической решеткой, причём в полярных кристаллах основную роль играет известное из теории полярона взаимодействие частиц с продольными оптическими фононами [1]. Существование фононного взаимодействия приводит, согласно Хакену [65], к тому, что на больших расстояниях потенциал имеет вид $-\frac{e^2}{\varepsilon r}$, а на малых $-\frac{e^2}{n^2 r}$. Описывая взаимное движение электрона и дырки явком классической физики, можно сказать, что на малых расстояниях движение быстрое и ионы не успевают смещаться относительно своих положений равновесия. Поэтому потенциал равен $-\frac{e^2}{n^2 r}$, где показатель преломления света n учитывает поляризацию электронных оболочек атомов. На больших же расстояниях движение медленное и взаимодействие характеризуется статической диэлектрической постоянной ε .

Такая разница в характере взаимодействия автоматически получается при учёте отдачи, связанной с излучением фононов [56].

Существенно отметить, что при равенстве эффективных масс электрона и дырки, как это имеет место в закиси меди [62], фононное взаимодействие не исчезает, экситон вызывает поляризацию решетки. Имеющееся в литературе утверждение противоположного характера [72] основано на приближенном представлении волновой функ-

ции системы в виде

$$\Psi(r, \alpha) = \psi_n(r) \Omega(\alpha) \quad (3.1)$$

где $\psi_n(r)$ — функция от пространственных координат r , Ω — функционал, зависящий только от переменных фононного поля α .

Приближение (3.1) приводит к тому, что при равенстве эффективных масс вероятность столкновения фонона с экситоном оказывается равной нулю и длина свободного пробега обращается в бесконечность [72]. Учёт взаимодействия экситона с акустическими колебаниями решетки не может изменить этого результата, так как в приближении сплошной среды константы взаимодействия электрона и дырки с фононами оказываются равными, а при этих условиях длина свободного пробега также равна бесконечности [65].

Для получения конечной вероятности столкновения следует использовать более точные функционалы экситонного состояния, которые учитывают не поляризацию в среднем, а поляризацию, производимую каждой из частиц в отдельности.

Удобным математическим аппаратом для рассматриваемой задачи является метод Лоу [23], который позволяет вычислить сечение рассеяния фонона без использования обычной схемы теории возмущения. Для полупроводников это обстоятельство является весьма существенным, так как в этом случае связь будет сильной или промежуточной. Вычисление матричных элементов производится по отношению к фононному полю в том же приближении, что и в работе Лоу и Пайнса [24], в которой рассматривалось рассеяние фононов на поляроне. Полученные результаты справедливы в области промежуточной связи.

Оператор энергии экситона в модели Ванье — Мотта имеет

вид

$$H = -\frac{1}{2M} \nabla_R^2 - \frac{1}{2M'} \nabla_z^2 - \frac{e^2}{n^2 z} + \sum_k \omega a_k^\dagger a_k + \sum_k (V_k(z) e^{i\vec{k}\vec{R}} a_k + V_k^*(z) e^{-i\vec{k}\vec{R}} a_k^\dagger) \quad (3.2)$$

Обозначения следующие ($k=1$): $M=m_1+m_2$ — полная масса, M' — приведенная масса, ω — предельная частота продольных оптических колебаний, $a_k^\dagger$ и a_k — операторы рождения и поглощения фотона, $\vec{R} = \mu_1 \vec{r}_1 + \mu_2 \vec{r}_2$ — координата центра тяжести,

$\mu_i = \frac{m_i}{M}$, $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ коэффициент V_k равен

$$V_k = \gamma_k \left(e^{i\vec{k}\vec{r}\mu_2} - e^{-i\vec{k}\vec{r}\mu_1} \right) \quad (3.3)$$

$$\gamma_k = V_k^0 = -i \frac{\omega}{k} (2m\omega)^{-1/4} \left(\frac{4\pi q^2}{V} \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

играет роль константы связи:

$$q^2 = \alpha = \frac{1}{2} e^2 \left(\frac{2m}{\omega} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\epsilon} \right) \quad (3.5)$$

Нетрудно показать, что матричный элемент матрицы рассеяния S , соответствующий переходу из состояния с импульсом фотона k_0 и полным импульсом экситона P_0 в состояние k, P , равен (см. [23], и глава I

$$\langle \vec{P}, \vec{k} | S_{nn} | \vec{P}_0, \vec{k}_0 \rangle = \delta(\vec{P} - \vec{P}_0) \delta(\vec{k} - \vec{k}_0) - 2\pi i \delta(E_i^{(n)} - E_f^{(n)}) T \quad (3.6)$$

где T — следующая матрица:

$$T = \int d^3R \int d^3r \left(\Psi_f, e^{-i\vec{k}\vec{R}} V_k^* \frac{1}{H - E - \omega - i\varepsilon} e^{i\vec{k}_0\vec{r}} V_{k_0} \Psi_i \right) + \int d^3R \int d^3r \left(\Psi_f, e^{i\vec{k}_0\vec{r}} V_{k_0} \frac{1}{H - E + \omega - i\varepsilon} e^{-i\vec{k}\vec{R}} V_k \Psi_i \right) \quad (3.7)$$

В выражении (3.5) Ψ_i и Ψ_f являются точными собственными функциями начального и конечного состояний, ε — бесконечно малая величина, дающая расходящуюся волну в координатном представлении, $E_i^{(n)}$ и $E_f^{(n)}$ — энергия начального и конечного состояний¹⁾

$$E_i^{(n)} = \frac{P_0^2}{2M^*} + E_n = E \quad (3.8)$$

E_n — энергия экситона в n -состоянии. В качестве функционалов Ψ_i и Ψ_f , возьмем функционалы, полученные Хакеном [68] 2)

$$\Psi_i = \exp \left\{ i \left(\bar{P}_0 - \sum_{\kappa} \bar{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} \right) \bar{R} \right\} U \psi_n(\mathbf{r}) \Phi_0 \quad (3.9)$$

где

$$U = \exp \left(\sum_{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} f_{\kappa} - a_{\kappa} f_{\kappa}^* \right) ; \quad a_{\kappa} \Phi_0 = 0$$

$$f_{\kappa}(\mathbf{r}) = -f_{\kappa}^* \left\{ v_2^{-1} e^{-i\bar{\kappa}\bar{r}_2} - v_1^{-1} e^{-i\bar{\kappa}\bar{r}_1} \right\} \quad (3.10)$$

$$v_i = \left\{ \omega + \kappa^2 \left(\frac{1}{2M} + \frac{\mu_i^2}{2M_i} \right) - \frac{\bar{P}\bar{\kappa}}{M} (1-\eta) \right\}$$

функции f_{κ} и $\psi_n(\mathbf{r})$ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2M_i} \nabla_i^2 f_{\kappa} + \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2M} - \frac{\bar{P}\bar{\kappa}}{M} (1-\eta) \right) f_{\kappa} + V_{\kappa}^* = 0, \\ & \left\{ -\frac{1}{2M_i} \nabla_i^2 - \frac{e^2}{n^2 r} + \sum_{\kappa} |f_{\kappa}(\mathbf{r})|^2 \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2M} \right) + \sum_{\kappa} (f_{\kappa}(\mathbf{r}) V_{\kappa} + \right. \\ & \left. + f_{\kappa}^*(\mathbf{r}) V_{\kappa}^*) + \frac{1}{2M_i} \sum_{\kappa} |\nabla f_{\kappa}(\mathbf{r})|^2 \right\} \psi_n = E_n \psi_n \end{aligned} \quad (3.11)$$

1) В выражении для энергии опущена несущественная для данной задачи аддитивная константа.

2) В цитированной работе Хакена рассмотрен случай $P=0$.

функционал (3.9) получен в предположении, что $\psi_n(r)$ — сферически-симметричная функция. Если вычислить математическое ожидание энергии с функционалом (3.9) и затем с функционалом (3.1), то окажется, что в последнем случае энергия будет меньшей. Поэтому выбор решения в форме (3.9) более правилен. Значение перенормировочной константы η будет найдено в дальнейшем.

При малых импульсах P_0 отличным от нуля будет только первое слагаемое в (3.7). Для вычисления этого выражения перенесем члены, зависящие от P_0 , через оператор $(H - E - \omega - i\varepsilon)^{-1}$ и проинтегрируем по d^3k . В результате получим

$$\langle \bar{P}, \bar{k} | S - 1 | \bar{P}_0, \bar{k}_0 \rangle = -i(2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\bar{P}_0 + \bar{k}_0 - \bar{P} - \bar{k}) Q \quad (3.12)$$

где
$$Q = \int d^3r \langle \Phi_0 \psi_n, V_k^* U^{-1}(P) \frac{1}{H - E - \omega - i\varepsilon} U(P_0) V_{k_0} \psi_n \Phi_0 \rangle$$

$$\bar{H}(P_0) = H(\bar{P}_0 + \bar{k}_0 - \sum_k \bar{k} a_k^\dagger a_k) \quad (3.13)$$

Величину Q удобно представить в виде суммы двух членов $Q = Q_1 + Q_2$, которые соответствуют двум слагаемым в (3.3):

$$Q_2 = \gamma_{k_0} \int d^3r \langle \Phi_0 \psi_n, V_k^* U^{-1}(P) \frac{1}{H - E - \omega - i\varepsilon} U(P_0) e^{i\bar{k}_0 \cdot \bar{r} \mu_2} \psi_n \Phi_0 \rangle \quad (3.14)$$

Q_1 получается из Q_2 заменой $\exp\{i\bar{k}_0 \cdot \bar{r} \mu_2\} \rightarrow \exp\{-i\bar{k}_0 \cdot \bar{r} \mu_1\}$.

Рассмотрим вычисление Q_2 .

Перенесем оператор U справа налево. При дифференцировании

U следует соблюдать известную осторожность, поскольку ∇U не коммутирует с U . Воспользуемся общей формулой

$$\frac{d}{dx} e^{\varphi(x)} = e^{\varphi(x)} \left\{ \varphi' + \frac{1}{2!} [\varphi', \varphi] + \frac{1}{3!} [[\varphi', \varphi] \varphi] + \dots \right\} \quad (3.15)$$

Из (3.15) следует

$$\nabla U = U \left\{ \sum_{\kappa} \nabla f_{\kappa} a_{\kappa}^+ - \nabla f_{\kappa}^* a_{\kappa} + \frac{1}{2} \bar{j}_{\kappa} \right\}$$

$$\bar{j}_{\kappa} = f_{\kappa}^* \nabla f_{\kappa} - f_{\kappa} \nabla f_{\kappa}^*$$

Выражение $\text{div } j_{\kappa}$ можно на основании (3.11) переписать в виде

$$-\frac{1}{2M} \text{div } \bar{j}_{\kappa} = \frac{1}{2} (f_{\kappa} \Psi_{\kappa} - f_{\kappa}^* V_{\kappa}^*)$$

Среднее значение $\text{div } j_{\kappa}$, вычисленное со сферически симметричными функциями, обращается в нуль. Перенесем теперь множитель

$\exp \{ i \bar{k}_0 \cdot \bar{r} \mu_2 \}$ в (3.14) справа налево. В результате Q_2 может быть записана в виде

$$Q_2 = \gamma_{k_0} \int d^3 r \langle \Phi_0 \psi_n, V_{\kappa}^* e^{i \bar{k}_0 \cdot \bar{r} \mu_2} \frac{1}{H_0 + H_1 - E - \omega - i\varepsilon} \psi_n \Phi_0 \rangle \quad (3.16)$$

Имея в виду в дальнейшем случай малых импульсов, $U^{-1}(\bar{P}_F) U(\bar{P}_0)$ заменено на единицу. Это допустимо, так как единственное выражение, где существенно конечное значение $\bar{P}$, есть знаменатель под интегралом (3.34), который будет исследован особо. $H_0 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)}$ — следующий оператор:

$$H_0 = -\frac{1}{2M} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{n^2 r} + \sum_{\kappa} (V_{\kappa} f_{\kappa} + V_{\kappa}^* f_{\kappa}^*) + \sum_{\kappa} |f_{\kappa}|^2 \left(\omega - \frac{\bar{k} \bar{P}_0 + \kappa^2}{M + 2M} \right) +$$

$$+ \frac{1}{2M} \sum_{\kappa} |V f_{\kappa}|^2 + \sum_{\kappa} \omega a_{\kappa}^+ a_{\kappa} + \frac{1}{2M} (\bar{P}_0 - \sum_{\kappa} \bar{k} a_{\kappa}^+ a_{\kappa})^2 +$$

$$+ \frac{\kappa_0^2}{2M} + \frac{\kappa_0^2}{2M} \mu_z^2 + \frac{1}{M} (\bar{P}_0 \bar{\kappa}_0 - \sum_{\kappa} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa}) +$$

$$+ \frac{1}{M} \sum_{\kappa} \bar{\kappa} a_{\kappa}^{\dagger} a_{\kappa} \sum_{\kappa} \bar{\kappa} |f_{\kappa}|^2 - \frac{1}{M} \sum_{\kappa} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) f_{\kappa}^2 + \frac{1}{2M} \left(\sum_{\kappa} \bar{\kappa} f_{\kappa}^2 \right)^2 \quad (3.17)$$

Разбиение оператора H_0 на $H_0^{(1)}$ и $H_0^{(2)}$ производится следующим образом. Каждый из последних трех членов в (3.17) можно представить в виде суммы двух слагаемых, первое, не зависящее от $\bar{\tau}$, следует отнести к $H_0^{(1)}$, второе — к $H_0^{(2)}$. В остальных членах $f_{\kappa} = f_{\kappa}(P)$ и $|f_{\kappa}(P)|^2$ следует разложить в ряд по P и отнести $f_{\kappa(0)}$ и $|f_{\kappa(0)}|^2$ к $H_0^{(1)}$. Члены, квадратичные по P , могут быть в свою очередь разбиты на два слагаемых; члены, не содержащие зависимости от τ , относятся к $H_0^{(1)}$, остальные — к $H_0^{(2)}$; последние окажутся в дальнейшем несущественными. Рассмотрим, например, выражение

$$\sum_{\kappa} \bar{\kappa} f_{\kappa}^2 = \sum_{\kappa} \bar{\kappa} |\gamma_{\kappa}|^2 \left\{ \gamma_1^{-2} + \gamma_2^{-2} - \gamma_1^{-1} \gamma_2^{-1} (e^{i\bar{\kappa}\bar{\tau}} + e^{-i\bar{\kappa}\bar{\tau}}) \right\} \quad (3.18)$$

Если перейти от суммирования к интегрированию в бесконечных пределах, то первые два члена в (3.18) дадут

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \bar{\kappa} |\gamma_{\kappa}|^2 (\gamma_1^{-2} + \gamma_2^{-2}) d^3\kappa = \frac{d(m)}{6} (1-\eta) \left\{ \left(\frac{m_1}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{m_1}{M} + \left(\frac{m_2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{m_2}{M} \right\} \quad (3.19)$$

Аналогичным образом с точностью до p^2

$$\sum_{\kappa} |f_{\kappa}(P)|^2 \left(\omega - \frac{\bar{\kappa}\bar{P}}{M} + \frac{\kappa^2}{2M} \right) = \sum_{\kappa} |f_{\kappa(0)}|^2 \left\{ \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2M} \right) \right\} +$$

$$+ 3(1-\eta)^2 M^{-2} \sum_{\kappa} |\gamma_{\kappa}|^2 (\bar{\kappa}\bar{P})^2 \left(\omega + \frac{\kappa^2}{2M} \right) (\gamma_{1(0)}^{-4} + \gamma_{2(0)}^{-4}) -$$

$$- 2(1-\eta) M^{-2} \sum_{\kappa} |\gamma_{\kappa}|^2 (\bar{\kappa}\bar{P})^2 (\gamma_{1(0)}^{-3} + \gamma_{2(0)}^{-3}) + \text{члены, зависящие от пространственных координат.}$$

Выделяя члены, квадратичные по импульсам, получим с точностью до аддитивной постоянной:

$$H_0^{(1)} = -\frac{1}{2M_1} \nabla_z^2 + W(z) + \frac{P_0^2}{2M_1^*} + \sum_{\kappa} a_{\kappa}^+ a_{\kappa} (\omega - \frac{\bar{\kappa} \bar{P}_0}{M^*} - \frac{\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0}{M}) +$$

$$+ \frac{\kappa_0^2}{2M} + \frac{\kappa_0^2}{2M_1} \mu_z^2 + \frac{\bar{\kappa}_0 \bar{P}_0}{M^*} + \frac{1}{2M} \left(\sum_{\kappa} \bar{\kappa} a_{\kappa}^+ a_{\kappa} \right)^2, \quad (3.20)$$

где

$$W(z) = -\frac{e^2}{n^2 z} + \frac{1}{2M_1} \sum_{\kappa} |\nabla f_{\kappa}|^2 + \sum_{\kappa} |f_{\kappa}|^2 (\omega + \frac{\kappa^2}{2M}) + \sum_{\kappa} f_{\kappa} V_{\kappa} + f_{\kappa}^* V_{\kappa}^*$$

При $m_1 = m_2$ потенциал $W(z)$ имеет вид (1.16)

$$W(z) = -\frac{e^2}{\varepsilon z} - e^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{\varepsilon} \right) \frac{e^{-\tau \sqrt{2mz}}}{z}$$

Согласно (3.19), имеем

$$M^{*-1} = M^{-1} \left\{ 1 - \frac{1}{6} (1-\eta) \left[\left(\frac{m_1}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{m_1}{M} + \left(\frac{m_2}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{m_2}{M} \right] \right\} \quad (3.21)$$

Масса M_1^* несколько отлична от M^* .

Рассмотрим оператор $H_1 = H_1^{(1)} + H_1^{(2)}$.

$$H_1^{(1)} = -\frac{1}{2M_1} \sum_{\kappa \kappa'} \left\{ \nabla f_{\kappa} \nabla f_{\kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'}^+ - 2 \nabla f_{\kappa} \nabla f_{\kappa'}^* a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} + \right.$$

$$+ \left. \nabla f_{\kappa}^* \nabla f_{\kappa'}^* a_{\kappa} a_{\kappa'} \right\} + \frac{1}{2M} \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') \left\{ f_{\kappa} f_{\kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'}^+ + 2 f_{\kappa} f_{\kappa'}^* a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} + \right.$$

$$+ \left. f_{\kappa}^* f_{\kappa'} a_{\kappa} a_{\kappa'} + f_{\kappa'}^* a_{\kappa}^+ a_{\kappa} a_{\kappa'} + f_{\kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa}^+ a_{\kappa} \right\} -$$

$$- \frac{1}{M} \sum_{\kappa} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}_0) (a_{\kappa} f_{\kappa}^* + a_{\kappa}^+ f_{\kappa}) - \frac{1}{M_1} \sum_{\kappa} (\nabla f_{\kappa} a_{\kappa}^+ - \nabla f_{\kappa}^* a_{\kappa}) \nabla -$$

$$- i \frac{\mu_z}{M_1} \bar{\kappa}_0 \sum_{\kappa} (\nabla f_{\kappa} a_{\kappa}^+ - \nabla f_{\kappa}^* a_{\kappa}) - \frac{1}{M} \sum_{\kappa} (\nabla f_{\kappa} a_{\kappa}^+ - \nabla f_{\kappa}^* a_{\kappa}) \sum_{\kappa'} \bar{j}_{\kappa'} -$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2M'} \sum_{\kappa} (\nabla^2 f_{\kappa} a_{\kappa}^+ - \nabla^2 f_{\kappa}^* a_{\kappa}) + \sum_{\kappa} a_{\kappa}^+ \left\{ V_{\kappa}^* + f_{\kappa} \left(\omega - \frac{\bar{P}_0 \bar{\kappa}}{M} + \frac{\kappa^2}{2M} \right) \right. \\
 & \left. + \frac{\bar{\kappa}}{M} \sum_{\kappa'} \bar{\kappa}' |f_{\kappa'}|^2 \right\} + \sum_{\kappa} a_{\kappa} \left\{ V_{\kappa} + f_{\kappa}^* \left(\omega - \frac{\bar{P}_0 \bar{\kappa}}{M} + \frac{\kappa^2}{2M} \right) + \frac{\bar{\kappa}}{M} \sum_{\kappa'} \bar{\kappa}' |f_{\kappa'}|^2 \right\} \\
 H_1^{(2)} = & -\frac{1}{2M'} \sum_{\kappa} \operatorname{div} \bar{j}_{\kappa} - \frac{1}{2M'} \left(\sum_{\kappa} j_{\kappa} \right)^2 - \frac{1}{M'} \sum_{\kappa} j_{\kappa} \nabla - \frac{i\mu_2 \bar{\kappa}_0}{M} \sum_{\kappa} \bar{j}_{\kappa} \\
 & - \frac{i\mu_2}{M'} (\bar{\kappa}_0 \nabla) \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

Воспользовавшись уравнением для функции f_{κ} можно записать последние три суммы в выражении для $H_1^{(0)}$ в следующем виде:

$$\frac{1}{M} \sum_{\kappa} f_{\kappa} \kappa^2 a_{\kappa} \left\{ e^{i\bar{\kappa}\bar{\mu}_2} \gamma_2^{-1} \mu_2^2 + e^{-i\bar{\kappa}\bar{\mu}_1} \gamma_1^{-1} \mu_1^2 \right\} \equiv \sum_{\kappa} \delta_{\kappa} a_{\kappa} \quad (3.23)$$

Членом $\sum_{\kappa} \bar{\kappa} |f_{\kappa}|^2 \gamma_1^{-1} \gamma_2^{-1} e^{\pm i\bar{\kappa}\bar{\mu}_2} a_{\kappa}$, как это будет показано ниже, можно в (3.22) пренебречь. Обратимся к выражению (3.16). Для вычисления матричного элемента введем, следуя Лоу и Райнсу [21], функционал Ψ согласно

$$c\Psi = (H_0^{(0)} + H_0^{(2)} + H_I - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} \psi_n \Phi_0, \quad (3.24)$$

который удовлетворяет следующему интегральному уравнению:

$$\Psi = \psi_n \Phi_0 - (H_0^{(0)} - E - \omega - i\varepsilon)^{-1} (H_0^{(2)} + H_I) \Psi$$

$$c^{-1} = \frac{\kappa_0^2}{2M} + \frac{\kappa_0^2 \mu_2^2}{2M'} + \frac{\bar{\kappa}_0 \bar{P}_0}{M^*} - \omega \quad (3.25)$$

Пологая $\Psi = u(\omega) \Phi_0 + \sum_{\kappa} v_{\kappa}(\omega) a_{\kappa}^+ \Phi_0$, можно получить следующую

систему интегродифференциальных уравнений для функций $u(\mathbf{r})$ и $v(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 u + \frac{1}{c} u = \frac{1}{c} \psi_n + \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}}_0) f_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} - \frac{i\mu_2}{M'} \sum_{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}}_0 \nabla f_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} - \\ - \frac{1}{M'} \sum_{\mathbf{k}} \nabla f_{\mathbf{k}}^* \nabla v_{\mathbf{k}} - \frac{1}{M'} \sum_{\mathbf{k}} j_{\mathbf{k}} \nabla f_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} - H_1^{(2)} u - \\ - \langle \Phi_0, H_0^{(2)} \Phi_0 \rangle - \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 v_{\mathbf{k}} + \Delta E_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{M} u(\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}}_0) f_{\mathbf{k}} + \frac{1}{M'} \nabla f_{\mathbf{k}} \nabla u + \frac{1}{M'} u \nabla f_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \bar{j}_{\mathbf{k}'} \\ + i \frac{\mu_2}{M'} u \bar{\mathbf{k}}_0 \nabla f_{\mathbf{k}} - H_1^{(2)} v_{\mathbf{k}} - \langle a_{\mathbf{k}}^+ \Phi_0, H_0^{(2)} a_{\mathbf{k}}^+ \Phi_0 \rangle v_{\mathbf{k}} - \\ - \frac{1}{M} f_{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \bar{\mathbf{k}}' f_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{M'} \nabla f_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \nabla f_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (3.27)$$

где

$$\mathcal{H}_0 = - \frac{\nabla^2}{2M'} + W(\mathbf{r}) - E_n \quad (3.28)$$

$$\Delta E = \frac{\kappa_0^2}{2M} + \kappa_0^2 \mu_2^2 \frac{1}{2M'} + \frac{\kappa^2}{2M} - \frac{(\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}}_0)}{M} + \frac{\bar{\mathbf{p}}_0 (\bar{\mathbf{k}}_0 - \bar{\mathbf{k}})}{M^*} - i\varepsilon$$

Рассмотрим наиболее интересный случай, когда эффективные массы электрона и дырки совпадают. Согласно (3.18) и (3.17),

$$\langle a_{\mathbf{k}}^+ \Phi_0, H_0^{(2)} a_{\mathbf{k}}^+ \Phi_0 \rangle = - \frac{1}{M} (\bar{\mathbf{k}} - \bar{\mathbf{k}}_0) \sum_{\mathbf{k}'} \bar{\mathbf{k}}' \gamma_{\mathbf{k}'}^{-2} (p_0) 2 \cos \bar{\mathbf{k}}' \bar{\mathbf{z}}$$

Представим функцию $v_{\mathbf{k}}$ в виде $v_{\mathbf{k}} = \exp(-i \frac{\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{z}}}{2}) v_{\mathbf{k}}^{(u)}$, тогда для u и $v_{\mathbf{k}}^{(u)}$ получатся следующие уравнения:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 u + \frac{1}{c} u = \frac{1}{c} \psi_n - \frac{1}{m} \sum_{\mathbf{k}} (\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{k}}_0) \varphi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{(u)} - \\ - \frac{1}{M'} \sum_{\mathbf{k}} (\nabla f_{\mathbf{k}}^*) (\nabla e^{-i \frac{\bar{\mathbf{k}} \bar{\mathbf{z}}}{2}} v_{\mathbf{k}}^{(u)}) + \frac{i}{2M'} (\bar{\mathbf{x}}_0 \bar{\nabla}) u - \sum_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{(u)} \end{aligned} \quad (3.26a)$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{H}_0 v_k^{(u)} + \frac{i}{m} (\bar{k} - \bar{k}_0) \nabla v_k^{(u)} + \Delta E^{(u)}(P_0) v_k^{(u)} - \\ & - \frac{1}{M} (\bar{k} - \bar{k}_0) \sum_{k'} \bar{k}' \gamma_{k'}^{-2}(P_0) (2 \cos \bar{k}' \bar{z}) v_k^{(u)} = - \frac{u}{m} (\bar{k} \bar{k}_0) \varphi_k^* - \\ & - \frac{1}{M} (1 - e^{-i \bar{k} \bar{z}}) \varphi_k^* \cdot (i \bar{k} \nabla u) - \frac{1}{m} \varphi_k^* \bar{k} \sum_{k'} \bar{k}' \varphi_{k'} (1 + e^{i(\bar{k} - \bar{k}') \bar{z}}) \end{aligned} \quad (3.27a)$$

где

$$\varphi_k = \gamma_k \frac{1}{\omega + \frac{k^2}{2m}}$$

$$\Delta E^{(u)}(P_0) = \frac{(\bar{k}_0 - \bar{k})^2}{2m} + \frac{P_0}{M^*} (\bar{k}_0 - \bar{k}) - i\varepsilon \quad (3.28a)$$

Зависимостью от $\bar{P}_0$ в функциях φ_k можно пренебречь при малых P_0 .

Разложим функции u и $v_k^{(u)}$ по полной системе функций оператора $\mathcal{H}_0$

$$\begin{aligned} u &= \sum_n a_n \psi_n \\ v_k^{(u)} &= \sum_n b_{nk} \psi_n \end{aligned} \quad (3.29)$$

Поскольку на больших расстояниях потенциал $W(z)$ ведет себя как $-\frac{e^2}{\varepsilon z}$, то для состояний с $n = 2, 3, 4 \dots$ можно в качестве волновых функций экситона ψ_n взять водородные функции, считая радиус боровской орбиты равным $\frac{\varepsilon}{me^2}$. Если в качестве нулевого приближения для u подставить в правую часть (3.27a) $u = a_n \psi_n$, то видно, что коэффициент b_n будет главным. Умножая левую и правую части (3.27a) на ψ_n и интегрируя по координатам, получим уравнение для коэффициента b_{nk} . Величина перенормированной массы экситона будет при этом определяться выражением

$$\frac{\bar{P}_e}{M_n^*} = \frac{\bar{P}_0}{M} - \frac{1}{M} \sum_k \bar{k} |\gamma_k|^2 2 \gamma_k^{-2}(P_0) (1 - \langle n | \cos \bar{k} \bar{z} | n \rangle) \quad (3.30)$$

Можно показать (см. Приложение), что $\langle n | \exp(\pm i \bar{k} \bar{z}) | n \rangle$ стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$. Предельное значение M_n^* поэтому будет равно M^* . С другой стороны, ясно, что при больших квантовых числах электрон и дырка движутся настолько медленно, что они успевают не только поляризовать атомные оболочки, но также смещать ионы. Поэтому при больших n масса экситона должна равняться удвоенной массе полярона. Последняя, например, в приближении Ли, Лоу, Пайнса [9] связана с константой связи $\alpha = g^2$ соотношением $m^* = m(1 + \frac{\alpha}{6})$, поэтому параметр η в (3.9) и (3.19) будет равен $\eta = \frac{\alpha}{6} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{6}}$. Рассмотрим решение уравнений (3.26a) и (3.27a) в предельных случаях больших и малых квантовых чисел n .

В случае больших n величину $\langle n | \exp(\pm i \bar{k} \bar{z}) | n \rangle$ можно считать малой по сравнению с единицей. Уравнения для коэффициентов a_n и b_{nk} примут вид

$$a_n = 1 - \frac{e}{m} \sum_k (\bar{k} \bar{k}_0) \varphi_k b_{kn} \quad (3.266)$$

$$\Delta E_n^{(n)} b_{nk} = - \frac{a_n}{m} (\bar{k} \bar{k}_0) \varphi_k^* - \frac{1}{m} \varphi_k^* \bar{k} \sum_{k'} \bar{k}' \varphi_{k'} b_{nk'} \quad (3.270)$$

Решение этой системы уравнений имеет вид 3)

$$c u_n = \left(\frac{\kappa_0^2}{2m} \frac{1-I}{1+I} - \omega \right)^{-1} \psi_n$$

$$I = \sum_k (\bar{k} \bar{k}_0)^2 \frac{\varphi_k^2}{m \Delta E^{(n)}(\bar{k}_0)} = I_1 + i I_2$$

причём I_2 пропорционален $\bar{P}_0$.

3) Зависимость от P_0 сохраняется только в $\Delta E^{(n)}(\bar{k}_0)$, см. гл. I § 7.

где I , имеет вид (глава I, § 7)

Таким образом, искомый матричный элемент Q будет равен

$$Q = Q_1 + Q_2 = |\gamma_{k_0}|^2 \left(\frac{k_0^2}{2m} \frac{1-I}{1+I} - \omega \right)^{-1} p_n(k_0) \quad (3.32)$$

где

$$p_n(k_0) = |\gamma_{k_0}|^{-2} \int |\psi_n(r)|^2 |V_{k_0}(r)|^2 dr \quad (3.33)$$

Первый множитель в (3.32) имеет такой же вид, как амплитуда рассеяния фонона на полароне [21], а множитель p_n играет роль фактора.

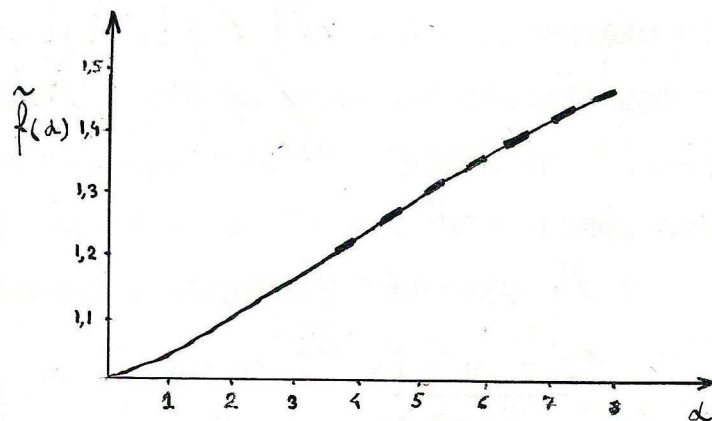
Интегрируя (3.13) по конечным состояниям и по начальным импульсам фонона k_0 , получим следующую формулу для вероятности рассеяния $1/\tau$ единицу времени

$$\frac{1}{\tau} = \frac{M_n^*}{8\pi^4} P_0 \int |\gamma_{k_0}|^4 p_n^2(k_0) \left| \frac{k_0^2}{2m} \frac{1-I}{1+I} - \omega \right|^{-2} d^3k_0 e^{-\frac{\omega}{kT}} \quad (3.34)$$

Множитель $\exp(-\frac{\omega}{kT})$ дает объемную зависимость числа фононов от температуры T . При малых P_0 , используя известный предел $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \pi \delta(x)$, получим

$$\frac{1}{\tau} = \left(\frac{M_n^*}{M}\right)^2 \frac{2\alpha\omega}{\tilde{f}(\alpha)} e^{-\frac{\omega}{\kappa T}} (2\rho_n(\kappa_0))^2 \quad (3.35)$$

где $\tilde{f}(\alpha)$ — медленно меняющаяся функция α , приведенная на рис. [21]. Длина свободного пробега ℓ связана с $1/\tau$ соотношением $\ell = v\tau$, где v — скорость экситона.



Рассмотрим основное состояние экситона. Размеры экситона в основном состоянии в несколько раз меньше характеристической длины $\kappa^{-1} = (2m\omega)^{-1/2}$; поэтому если взять волновую функцию в виде $\psi_0 = (\pi\tau_0^2)^{-1/2} \exp(-\frac{r^2}{\tau_0^2})$, то константа τ_0 будет удовлетворять неравенству $\kappa\tau_0 < 1$. Учитывая это неравенство, можно считать

$$\langle \psi_0 | \exp(\pm i\tau(\bar{\kappa} - \bar{\kappa}')) | \psi_0 \rangle \approx 1$$

и уравнения для коэффициентов a_0 и $b_{0\kappa}$ примут вид

$$a_0 = 1 - \frac{c}{m} \sum_{\kappa} (\bar{\kappa}\bar{\kappa}_0) \varphi_{\kappa} b_{0\kappa}$$

$$\Delta E_0 b_{0\kappa} = -\frac{a_0}{m} (\bar{\kappa}\bar{\kappa}_0) \varphi_{\kappa}^* - \frac{2}{m} \varphi_{\kappa}^* \bar{\kappa} \sum_{\kappa'} \bar{\kappa}' \varphi_{\kappa'} b_{0\kappa'} \quad (3.36)$$

Из (3.36) получим

$$\epsilon u_0 = \left(\frac{\kappa_0^2}{2m(1+2I)} - \omega \right)^{-1} \psi_0 \quad (3.37)$$

Перенормированная масса экситона в случае основного состояния совпадает с точностью до $O(\tau_0^2 \kappa_0^2)$, согласно (3.30), с перенормированной. Этот результат соответствует интуитивному представлению о том, что в основном состоянии обе частицы двигаются "быстро", и они не успевают смещать среднее положение окружающих ионов. Функцию $\rho(\kappa_0)$ можно для основного состояния приблизительно заменить на $\tau_0^2 \kappa_0^2$. Вычисления, аналогичные предыдущим, приводят к следующему значению $1/\tau$:

$$1/\tau = 2\alpha\omega e^{-\frac{\omega}{\kappa_0^2}} \frac{4(\kappa_2 \tau_0)^4}{\varphi(\alpha)} \quad (3.38)$$

где

$$\varphi(\alpha) = (1 + x_2^2) \left\{ \frac{1}{x_2} - \frac{1}{x_2^2} \frac{\partial I}{\partial x_2} \right\} \quad (3.39)$$

x_2 — корень уравнения

$$x_2^2 = 1 + 2I(x_2) \quad x_0 = \frac{\kappa_0}{\sqrt{2m\omega}} \quad (3.40)$$

Корень уравнения (3.40) находится вблизи единицы, поэтому при оценке порядка малости различных членов можно, как это делалось выше, подставить вместо κ_2 величину κ_0 . Функция $\varphi(\alpha)$ близка к единице и медленно меняется с изменением α .

Представление о кристалле как о сплошной среде и предположение об изотропности массы являются, разумеется, грубыми при рассмотрении основного состояния экситона [см. §1].

Тем не менее на качественное описание характера взаимодей-

ствии электрона в основном состоянии с кристаллической решеткой модель Ванье-Мотта может претендовать. Согласно расчётам Хилича [57], волновая функция электрона при образовании экситонного состояния имеет главный максимум в кристалле Cu_2O примерно на расстоянии 4,3 атомных единиц от центрального иона кислорода O^{--} . Это означает, что электрон в основном движется за пределами четырех ионов меди, которые являются ближайшими соседями O^{--} . Если приближенно ввести представление об электроне и дырке, то главная часть взаимодействия между ними будет описываться потенциалом $-\frac{e^2}{n^2r}$, где показатель преломления n учитывает поляризацию атомов Cu . Рассмотренный выше потенциал $W(r)$ при малых r ведет себя как раз как $-\frac{e^2}{n^2r}$. По мере уменьшения r , экситон представляет в целом все более и более нейтральную систему, и согласно (3.38), вероятность столкновения с фононом будет быстро уменьшаться.

Для экситонов больших радиусов длина свободного пробега того же порядка, что и длина свободного пробега полярона.

Этот результат объясняется тем, что электрон и дырка индивидуально поляризуют кристалл (функция U в (3.9) зависит от пространственных координат). Хотя экситон и является электрически нейтральной системой, но тем не менее он деформирует решетку даже при $m_1 = m_2$ и фононы испытывают рассеяние на деформированной решетке. Обычная теория возмущений не дает возможности правильно учесть этот эффект, что и приводило при $m_1 = m_2$ к бесконечно большой длине свободного пробега.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрим в порядке изложения материала полученные в работе результаты.

В первой главе развивается на основе канонического преобразования Ли, Тоу и Пайнса новый вариационный принцип в теории полярона, в основу которого положено решение ^{линейной} линейной системы уравнений для операторов поля. Получено общее выражение для энергии движущегося полярона; вычислено значение собственной энергии с использованием разложения в ряд по константе связи g электронно-фононного взаимодействия. Полученное в этой области значение энергии оказалось лучшим чем в методе континуального интегрирования.

Введение перенормировочной константы (выражение (6.4)), связанной с перенормировкой заряда, позволяет с учётом аналитических свойств функции Грина, объяснить характер решения в области сильной связи. Оценка значения собственной энергии в этой области совпадает с результатом теории С.И.Пекара. В области сильной связи размеры полярона убывают как g^{-2} , последнее обстоятельство накладывает ограничение не допустимое в теории значения g .

Далее в § 7 исследуется задача рассеяния как явления резонансного рассеяния. Показано, что вклад двухфононного приближения является малым, а из однофононного приближения следует, что резонансный импульс в области сильной связи зависит от константы связи в четвертой степени, откуда можно также получить максимальные значения g . Последние совпадают с полученными из величины поляронного радиуса и составляют

$g^2=8-9$. Значение подвижности в области промежуточной связи требует дополнительных расчётов.

Во второй главе рассматривается задача о влиянии электронно-фоонного взаимодействия на частоту циклотронного резонанса.

При перенормировке массы в внешнем магнитном поле перенормированная масса становится зависящей от H , т.е. электронно-фоонное взаимодействие, наряду с другими причинами, приводит к нелинейной зависимости частоты циклотронного резонанса от H . Вычисленные во второй главе нелинейные члены имеют порядок $\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2$ где ω_0 частота Лармора, а ω — предельная частота продольных оптических фоонов. Для используемых в настоящее время магнитных полей поправка мала и поэтому частота циклотронного резонанса будет линейной функцией от H . Во второй главе рассматривается также применение метода собственного времени Фока-Швингера для вычисления статистической матрицы.

В третьей главе разбираются ряд вопросов теории полярона. Сюда относятся: § 1 — вычисление вероятности перехода $1s-2p$ по методу Мейера, Ипатовой и Тулуба и вычисление потенциала электронно-фоонного взаимодействия для возбужденных состояний экситона. Получено значение эффективной массы электрона и дырки равное $m_1 = m_2 = 0,8 m_c$ и объясняется смещение энергетических уровней экситона на основе теории фоонного взаимодействия электрона и дырки в экситоне.

В § 2 решается задача о фоонном взаимодействии при произвольных значениях констант связи. Показано, что в основном

состоянии фононное взаимодействие вплоть до $g^2 \approx 10$ является слабым.

В § 3 решается задача о длине свободного пробега экситона в полярных кристаллах. При равенстве эффективных масс электрона и дырки поляризующее воздействие экситона на среду не прекращается, и для экситонных больших радиусов можно считать, что электрон и дырка порознь поляризуют кристалл. Поэтому, несмотря на электрическую нейтральность экситона в целом, фононы испытывают рассеяние на деформированной решетке, что и приводит к конечной длине свободного пробега. Вероятность столкновения экситона с фононом имеет тот же порядок величины, что и вероятность поляронно-фононного столкновения.

Приложение A_I

Рассмотрим решение уравнения (3.2) для случая $\bar{P} \neq 0$.
Подставляя выражение (3.3a) в (3.4) получим

$$\bar{X}_{\pm}(\kappa_0) = \int \bar{Z}(\kappa') q_{\pm}^0(\kappa', \kappa_0) d\bar{\kappa}' + L_{\pm}(\kappa_0) \quad (A_1 I)$$

где $L_{\pm}$ — вектор с компонентами

$$L_{\pm}^{(i)} = \int \frac{Z^{(i)}(\bar{\kappa}') (\bar{Z}(\kappa') \bar{X}(\kappa_0))}{\kappa_0^2 - \omega_{\kappa'}^2 \pm i\varepsilon} d\bar{\kappa}' \quad (A_1 2)$$

Поскольку оператор энергии функции $\bar{P}$ входит, если не считать аддитивного слагаемого $\bar{P}^2/2$, только в виде скалярного произведения $(\bar{\kappa}\bar{P})$, то и функции f_{κ} , ω_{κ} и Z_{κ} следует считать зависящими как от $|\kappa|$ так и от $(\bar{\kappa}\bar{P})$.

Учитывая, далее, что

$$\int \kappa_i \kappa_j \Phi(|\kappa|; \bar{\kappa}\bar{P}) d\bar{\kappa} = \delta_{ij} C(P) \quad (A_1 3)$$

получим из (A₁2)

$$X_{\pm}^{(i)} = \frac{1}{\mathcal{D}_{\pm}^{(i)}(\kappa_0^2)} \int Z^{(i)}(\kappa) q_{\pm}^0(\kappa, \kappa_0) d\bar{\kappa} \quad (A_1 4)$$

где

$$\mathcal{D}_{\pm}^{(i)}(\kappa_0^2) = 1 - \int \frac{Z^{(i)2}(\kappa) d\bar{\kappa}}{\kappa_0^2 - \omega_{\kappa}^2 \pm i\varepsilon}$$

функция $(\bar{k} | \Omega_{\pm} | \bar{k}')$ примет вид ^{x)}

$$(\bar{k} | \Omega_{\pm} | \bar{k}') = \delta(\bar{k} - \bar{k}') + \frac{Z^{(i)}(\kappa) \delta_{ij} Z^{(j)}(\bar{k}')}{(\kappa_0^2 - \omega_{\kappa}^2 \pm i\varepsilon) \mathcal{D}_{\pm}^{(i)}(\kappa_0^2)} \quad (A.5)$$

функция Грина $(\bar{k} | G_{(\kappa_0)}^{ij} | \bar{k}')$, определяемая уравнением

$$q(\kappa) = q^{\circ}(\kappa) - \iint (\bar{k} | G_{(\kappa_0)}^{ij} | \bar{k}') Z^{(i)}(\bar{k}') Z^{(j)}(\bar{k}'') q^{\circ}(\bar{k}'') d\bar{k}''$$

будет равняться

$$(\bar{k} | G_{(\kappa_0)}^{ij} | \bar{k}') = \delta_{ij} \delta(\bar{k} - \bar{k}') \frac{G_{\pm}^{\circ}(\kappa, \kappa_0^2)}{\mathcal{D}_{\pm}^{(i)}(\kappa_0^2)} \quad (A.6)$$

Из динамического принципа Эвингера можно получить, так же как и выше, следующее выражение для энергии

$$\Delta E = - \frac{i}{8\pi} \int_c \frac{ds}{\sqrt{s}} \ln \prod_{i=1}^3 \mathcal{D}_{+}^{(i)}(s) \quad (A.7)$$

Выражение (A.7) следует, разумеется, также непосредственно из (2.12) если учесть (A.3).

x) Производится суммирование по повторяющимся индексам.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б.

Полная ортонормированная система собственных функций оператора H_0 .

Для построения полной системы функций оператора H_0 рассмотрим предварительно коммутатор $[H_0, a_k^+]$

Имеем

$$[H_0, a_k] = -\omega_k a_k - \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\bar{k} \bar{q}) f_k f_q (a_q + a_q^+) d\bar{q}$$

(B.I)

$$[H_0, a_k^+] = \omega_k a_k^+ + \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\bar{k} \bar{q}) f_k f_q (a_q + a_q^+) d\bar{q}$$

Из (4.7) и (4.8) следует

$$[H, a_k^+] = \omega_k a_k^+ + \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\bar{k} \bar{k}') f_k f_{k'} (a_{k'} + a_{k'}^+) d\bar{k}' +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{k} \bar{k}') f_k f_{k'} [H, a_{k'}^+] d\bar{k}'}{(\omega_k - \omega_{k'} + i\varepsilon) \mathcal{D}_+(\omega_k^2)} +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{(\bar{k} \bar{k}') f_k f_{k'} [H, a_{k'}] d\bar{k}'}{(\omega_k + \omega_{k'}) \mathcal{D}_-(\omega_k^2)}$$

(B.II)

При подстановке (Б.1) в (Б.2) в последних двух членах удобно воспользоваться преобразованием

$$\frac{\omega_{k'}}{\omega_k - \omega_{k'} + i\varepsilon} = \frac{\omega_k}{\omega_k - \omega_{k'} + i\varepsilon} - 1 \quad (\text{Б.III})$$

$$= \frac{\omega_{k'}}{\omega_k + \omega_{k'}} = \frac{\omega_k}{\omega_k + \omega_{k'}} - 1$$

после которого $[H_0, a_k^+]$ примет вид:

$$\begin{aligned} [H_0, a_k^+] &= \omega_k a_k^+ + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\bar{k} \bar{k}') f_k f_{k'} \left(1 - \frac{1}{D_+(\omega_k^2)}\right) (a_{k'} + a_{k'}^+) d\bar{k}' \\ &- \frac{2}{3} \frac{1}{D_+(\omega_k^2)} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{f_{k'}^2 k'^2 \omega_{k'} d\bar{k}'}{\omega_{k'}^2 - \omega_k^2 - i\varepsilon} \frac{1}{(2\pi)^3} \int (\bar{k} \bar{q}) f_k f_q (a_q + a_q^+) d\bar{q} \end{aligned} \quad (\text{Б.IV})$$

Откуда следует

$$[H_0, a_k^+] = \omega_k a_k^+ \quad (\text{Б.V})$$

Из (Б.5) из определения функционала основного состояния как функционала

$$\Omega \Omega = 0$$

следует, что полной ортонормированной системой собственных функций H_0 будет следующая система функций

$$\Omega_{k_1 k_2 \dots k_n} = \frac{1}{\sqrt{n!}} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \dots a_{k_n}^+ \Omega \quad (\text{Б.6})$$

причём

$$H_0 \Omega_{k_1, k_2, \dots, k_n} = (\omega_{k_1} + \omega_{k_2} + \dots + \omega_{k_n}) \Omega_{k_1, k_2, \dots, k_n}$$

Рассмотрим матричные элементы оператора H_I . Во втором приближении теории возмущений получаем для $H_I^{(2)} = \sum_k \varphi_k (a_k + a_k^+)$

$$\delta E^{(2)} = \sum_n \frac{| \langle n | H_I^{(2)} | 0 \rangle |^2}{E_0 - E_n} \quad (Б.7.)$$

Нетрудно убедиться, что отличными от нуля будут лишь матричные элементы вида $(\alpha_q^+ \Omega, H_I^{(2)} \Omega)$, равные

$$\begin{aligned} (\alpha_q^+ \Omega, H_I^{(2)} \Omega) &= \sum_k \varphi_k [\alpha_q, (a_k + a_k^+)] = \\ &= \sum_k \varphi_k \{ (M_1^*)_{kq} + (M_2^*)_{kq} \} \end{aligned} \quad (Б.8)$$

т.к. согласно (4.7)

$$[\alpha_k, a_{k'}] = (M_2^*)_{k'k}$$

$$[\alpha_k, a_{k'}^+] = (M_1^*)_{k'k}$$

Учитывая явный вид матриц M_1 и M_2 и то обстоятельство, что φ_k является (при $\vec{P} = 0$) функцией модуля $|\vec{k}|$, получим

$$\langle \alpha_q^+ \Omega, H_I^{(2)} \Omega \rangle = \varphi_q \quad (Б.9)$$

откуда

$$\delta E^{(2)} = - \sum_q \frac{\varphi_q^2}{\omega_q} \quad (Б.10)$$

Рассмотрим далее оператор

$$H_I^{(2)} = \sum_{k, k'} (\bar{k} \bar{k}') f_{k'} (a_k^+ a_k a_{k'} + a_{k'}^+ a_k^+ a_k) \quad (Б.11)$$

Рассмотрим

$$\begin{aligned}
 & (\alpha_q^+ \Omega, \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} a_{\kappa} \Omega) = \\
 & = \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} \left\{ (M_1^*)_{\kappa q} \langle a_{\kappa} a_{\kappa'} \rangle + (M_2^*)_{\kappa q} \langle a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} \rangle + (M_2^*)_{\kappa' q} \langle a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} \rangle \right\}
 \end{aligned}
 \tag{B.11}$$

где $\langle \rangle$ означают математическое ожидание в вакуумном состоянии:

$$\begin{aligned}
 \langle a_{\kappa} a_{\kappa'} \rangle &= (M_1 M_2^+)_{\kappa \kappa'} \\
 \langle a_{\kappa}^+ a_{\kappa'}^+ \rangle &= (M_2 M_1^+)_{\kappa \kappa'} \\
 \langle a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} \rangle &= (M_2 M_2^+)_{\kappa \kappa'} \\
 \langle a_{\kappa} a_{\kappa'}^+ \rangle &= (M_1 M_1^+)_{\kappa \kappa'}
 \end{aligned}
 \tag{B.12}$$

Если записать

$$(M_1 M_2^+)_{\kappa \kappa'} = -(\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa} f_{\kappa'} R(\kappa, \kappa')$$

то

$$(\alpha_q^+ \Omega, \sum_{\kappa, \kappa'} (\bar{\kappa} \bar{\kappa}') f_{\kappa'} a_{\kappa}^+ a_{\kappa'} a_{\kappa} \Omega) =
 \tag{B.13}$$

$$= -\frac{1}{3} f_q q^2 \sum_{\kappa'} \kappa'^2 f_{\kappa'}^2 R(\kappa, \kappa') \quad , \quad \text{где}$$

$$R(\kappa, \kappa') = \frac{1}{(\omega_{\kappa} + \omega_{\kappa'}) \mathcal{D}_+(\omega_{\kappa'}^2)} + \frac{1}{3} \sum_p \frac{p^2 f_p^2}{(\omega_p + \omega_{\kappa})(\omega_p - \omega_{\kappa'} - i\varepsilon) |\mathcal{D}_+(\omega_p^2)|^2}
 \tag{B.14}$$

Из (B.14) получается в нижнем приближении теория возмущений выражения (5.11).

Заметим также, что все матричные элементы типа

$$(\alpha_q^+ \alpha_{q'}^+ \Omega, H_{II}^{(2)} \Omega) \quad) \text{ равны нулю.}$$

Вводя операторы

$$c = \frac{1}{\sqrt{2eH}} (\pi_1 + i\pi_2) ; \quad c^+ = \frac{1}{\sqrt{2eH}} (\pi_1 - i\pi_2) \quad (A_2.1)$$

и используя обозначения

$$q' = \frac{1}{\sqrt{2eH}} (q_1 + iq_2) ; \quad \kappa' = \frac{1}{\sqrt{2eH}} (\kappa_1 + i\kappa_2) \quad (A_2.2)$$

перепишем выражение $\exp\{-is(\pi^2 - 2\bar{\kappa}\pi - 2\bar{q}\pi)\}$ в виде

$$\exp\{-is(\pi^2 - 2\bar{\kappa}\pi - 2\bar{q}\pi)\} = \exp\{-is(\pi_3^2 - 2\kappa_3\pi_3 - 2q_3\pi_3 + eH)\} \\ \cdot \exp\{-2ieHs(c^+c - q'c^+ - q'^+c - \kappa'c^+ - \kappa'^+c)\}$$

Рассмотрим далее функцию

$$\Phi(\varepsilon) = \exp \varphi(\varepsilon) = \exp\{-2ieHs[c^+c - q'c^+ - q'^+c - \varepsilon(\kappa'c^+ + \kappa'^+c)]\} \quad (A_2.3)$$

Для выпутывания оператора $\exp\{2ieHs(\kappa'c^+ + \kappa'^+c)\}$ составим производную [43]

$$\frac{d\Phi}{d\varepsilon} = \Phi(\varepsilon) \left\{ \varphi' + \frac{1}{2!} [\varphi', \varphi] + \frac{1}{3!} [[\varphi', \varphi], \varphi] + \dots \right\} \quad (A_2.4)$$

После вычисления коммутаторов ряд можно просуммировать. Интегрируя полученное уравнение по ε от нуля до единицы, получим приведенный в тексте результат.

Рассмотрим вычисление интеграла

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} k_1 dk_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \exp \left\{ -is \xi (k_1^2 + k_2^2) + 2is(k_1 \Pi_1 + k_2 \Pi_2) \right\} \quad (Б.1)$$

где $[\Pi_1, \Pi_2] = ieH\lambda^2$

Интеграл по dk_2 с учётом (2.5) равен

$$\begin{aligned} & \exp(2is k_1 \Pi_1) \int_{-\infty}^{+\infty} dk_2 \exp \left\{ -is \xi k_2^2 + 2is k_2 (\Pi_2 + k_1 eHs\lambda^2) \right\} \\ &= \exp(2is k_1 \Pi_1) e^{-\frac{i\pi}{4}} \\ & \sqrt{\frac{\pi}{s\xi}} \exp \left\{ is\xi^{-1} (\Pi_2 + k_1 eHs\lambda^2)^2 \right\} \end{aligned}$$

При интегрировании по dk_1 следует снова воспользоваться (2.5)

После усреднения операторов по переменным фоновому полю следует выделить члены, квадратичные по импульсам. Предварительно целесообразно симметризовать точные значения интегралов. Например, в (Б.1) можно при интегрировании по dk_2 поместить оператор $\exp\{2is k_1 \Pi_1\}$ как слева, так и справа от членов с оператором Π_2 .

Можно, наконец, вычислить сначала интеграл по dk_1 , затем по dk_2 . Полученные таким путем выражения отличаются взаимным расположением операторов Π_1 и Π_2 . В итоге значение интеграла (Б.1) с точностью до членов порядка $(eH)^3$ оказывается

равным

$$I = -i\pi(\xi')^{-1}(\xi\xi')^{-1}(\Pi, T + T\Pi,)/2 \quad (B_2, 2)$$

$$T = \exp(i s \Pi_1^2 / 2 \xi) \exp(i s \xi \Pi_2^2 / \xi'^2) \exp(i s \Pi_1^2 / 2 \xi) + (1 \rightarrow 2)$$

$$\xi'^2 = \xi^2 + (e H s)^2 \lambda^4 \quad (B_2, 3)$$

При упрощении полученных выражений использовалась формула [43]

$$\begin{aligned} & \exp(-a p^2) \exp(b q^2) \exp(a p^2) = \\ & = \exp \{ b (q + 2 i a p)^2 \} \end{aligned} \quad (B_2, 4)$$

Рассмотрим вычисление интеграла $J_n(\kappa) = \langle n | \exp i \vec{\kappa} \vec{r} | n \rangle$
где $|n\rangle$ — сферически-симметричная функция дискретного спектра атома водорода

$$|n\rangle = N L_n^{(0)}(\rho) e^{-\frac{\rho}{2}} \quad \rho = \frac{2r}{na} ; \quad a = \frac{\epsilon}{me^2}$$

Воспользовавшись интегральным представлением для полиномов Лагерра

$$L_n(\rho) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C u^{-n-1} (1+u)^n e^{-\rho u} du$$

где контур C охватывает начало координат, можно выполнить сначала интегрирование по пространственным координатам

$$J_n(\kappa) = N^2 \pi a^3 \frac{1}{2\pi i} \oint_C u^{-n} (1+u)^n du \oint \frac{1}{2\pi i} v^{-n} (1+v)^n \frac{u+v+1}{[(u+v+1)^2 + \kappa_n^2]^2} dv$$

Интегрирование по v легко осуществить, если контур интегрирования стянуть к полюсам функции $[(u+v+1)^2 + \kappa_n^2]^{-2}$. Замена переменных $u = i\kappa_n t / (t - 1 - i\kappa_n)$ приводит интеграл по du к гипергеометрической функции

$$J_n(\kappa) = \frac{(-1)^{n+1}}{4i\kappa_n} (1+\kappa_n^2)^{-n-1} \left\{ (1+i\kappa_n)^{2n} - (1-i\kappa_n)^{2n} \right\} \cdot F(1-n, 1+n, 2; \frac{1}{1+\kappa_n^2})$$

При $n \rightarrow \infty$ функция $J_n(\kappa)$ стремится к нулю. Если $J_n(\kappa)$ разложить в ряд по κ , то из приведенного выражения можно получить известные формулы для $\overline{r^2}$, $\overline{r^4}$ и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. С.И. Пекар. Исследования по электронной теории кристаллов.
Гостехиздат 1951.
2. Л.Д. Ландау. *Sov. Phys.* 3, 664, (1933).
3. R.P. Feynman *Phys. Rev.* 97, 660 (1955).
4. J. Osada, H. Fujino, *Progr. Theoret. Phys.*
20, 487, (1958).
5. E. Gieb, K. Yamazaki, *Phys. Rev.*
III, 728, (1958).
6. D.S. Falk, *Phys. Rev.* III, 1074 (1959).
7. М. Борн, Х. Кунь. Динамическая теория кристаллических
решеток. ИЛ. 1958.
8. Н.Ф. Дайген, В.Л. Виноцкий. *ИЗТО* 32, 1382 1957.
9. T.D. Lee, F. Low, D. Pines, *Phys. Rev.*
90, 297 (1953)
10. W.W. Scanlon, *Solid State Phys.* v. IX,
R.S. Allgaier, W.W. Scanlon *Phys. Rev.* III, 1029 (1958)
11. D.C. Burnhan, F.C. Brown, R. Knox, *Phys. Rev.* III, 1560, (1960).
12. K. Kobayashi, F.C. Brown, *Phys. Rev.* III, 507, (1959)
13. K. Huang, *Proc. Phys. Soc* A 204, 406 (1950)
14. И.В. Абаренков *Вестник ЛГУ* № 22, 14 (1958).
15. J.H. Simpson, *Proc. Roy. Soc.* 231, 308 (1955)
16. В. Бурстейн, П. Брэн. Проблемы современной физики 1957.
вып. 8, 5.
17. F.C. Brown, K. Kobayashi, *J. Phys. Chem Solids*
8, 300 (1959)
- E. Conwell, *J. Phys. Chem Solids* 8, 234, 1959

18. Т.А.Конторова ЖТФ 24, 2217, 1955 ;
 К.Б.Толшного, А.М.Седоренко ЖЭТФ, 31, 845 (1956)
 Н.Н.Порфирьева, Физика твердого тела том I, 873 (1959)
19. H. Fröhlich, N.F. Mott, Proc. Roy. Soc.
 A. 171, 496 (1939)
 Б.Н.Давыдов, И.М.Шмукиевич. УФН т.XXIV. 21 (1940)
20. H. Fröhlich, H. Pelzer, S. Zienau, Phil. Mag.
41, 221 (1950).
21. F.E. Low, D. Pines, Phys. Rev.
98, 414 (1955)
22. T.D. Schulz, Phys. Rev. 116, 526 (1959)
23. F.E. Low Phys. Rev. 97, 1392, (1955)
24. H. Ziman, "Electrons and Phonons", Oxford Press, 1960.
25. И.Н.Боголюбов, Укр. мат. журнал 2, 3, 1950
26. С.В.Тябликов. ЖЭТФ, 21, 377, 1951; 21, 16, 1951
 " " 22, 325, (1952); 23, 381, (1952)
 УФН, 48, 447, (1952).
27. G. Wentzel Helv. Phys. Acta 15, III, 1942.
28. C.N. Yang, D. Feldman, Phys. Rev.
79, 972, 1950.
29. E.P. Gross, Phys. Rev. 100, 1571, (1955)
30. A. Klein, Mc - Cormick Phys. Rev. 98, 1428, (1955)
31. J. Schwinger Phys. Rev. 82, 664, (1951)
32. B. Brout, Phys. Rev. 108, 515 (1957)
33. V.A. Fock, Sov. Phys. 6, 425, (1934)
 В.А.Фок. Некоторые вопросы квантовой теории поля.
 Издательство ЛГУ, 1958.

34. В.В.Новосильков, А.В.Тулуб. У Ф Н. 61, В I, (1957)
35. E. Hage Progr. Theoret. Phys. 11, 449, (1954)
36. E.P. Gross, Annals of Physics
8, 78, (1959).
37. G. Källen, W. Pauli, Kgl. Danske
Videnskabel, Selskab, Mat.-Phys. Medd. 30, 7, (1955).
H. Lehman, K. Symanzik, Zimmermann
Nuovo Cimento 2, 425, 1955.
38. D.C. Burnhan, F.C. Brown, Phys. Rev. 112, 1560, (1960)
39. G.F. Chew, F.E. Low, Phys. Rev. 101, 1570, (1955)
40. G.R. Allcock, Advances in Physics 5, 412, (1956)
41. J. Schwinger Phys. Rev. 82, 664, 1951.
42. В.А.Фок. Вестник ЛГУ, 22, 1959.
Добавление к книге П.А.М. Дирака "Основы квантовой
механики".
43. R. Newton, Phys. Rev. 96, 523, (1959)
44. A. Erdelyi, Mathemat. Zs. 44, 201 (1938)
45. А.В.Тулуб, Вестник ЛГУ 4, 23, (1958)
46. И.И.Френкель. Phys. Rev. 37, 17, 1276 (1931);
Z S T F 6, 647, (1936)
47. G.H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191, (1937)
48. Н.Мотт и Р.Горни. Электронные процессы в ионных кристаллах
N.F. Mott, Proc. Roy. Soc. A 167, 384, (1938)
49. В.Ф.Гросс, И.А.Карпов. ДАН СССР 84, 261, 871, (1952);
В.Ф.Гросс, Б.И.Захарченя ДАН СССР, 90, 745, (1953)
В.Ф.Гросс, Б.И.Захарченя, И.И.Райнов.
ДАН СССР 92, 265 (1953); 99, 231 (1954).
В.Ф.Гросс, УФН 63, 575, 1957.
Вестник АН СССР 10, 11, 1958.

50. S. Nikitine, G. Permy, M. Sieskind
J. Phys. et Radium 15, 18, (1954), 238, 67, 1987 (1959)
51. И.М.Димман, С.И.Лекар. ДАН СССР, 83, 825, (1952)
52. H. Haken, Zeits. f. Phys. 146, 527, (1957)
53. H.J.G. Mayer, Physica 22, 109, (1956)
54. И.И.Ипатова ЖТФ 26, 2787, (1956)
55. А.В.Тулуб. Вестник ЛГУ, 4, 53, (1957).
56. А.В.Тулуб. ЖЭТФ 34, 1641, (1958)
57. А.Г.Жилич, Вестник ЛГУ № 4, (1957)
58. А.Г.Жилич, И.Навинский. Вестник ЛГУ, 4, (1957).
59. А.Г.Жилич, Вестник ЛГУ, 22, 4 (1959)
60. Е.Ф.Гросс, Б.П.Захарченя ДАН СССР, III, 564, 1956.
ЖТФ. XXVII, 1940, (1957)
61. А.Г.Самойлович, Л.А.Коренблит, ДАН СССР, 100, 43, (1955)
62. Е.Ф.Гросс, Б.П.Захарченя ЖТФ, XXVII, 1940, (1957)
63. С.А.Москаленко, К.Б.Толыго. ЖЭТФ, 36, 149, (1959)
64. W.K. Helle, A. Markus Phys. Rev. 84, 809 (1951)
65. H. Haken, Fortschritte der Physik 6, 271, (1958) YPH
66. И.М.Димман, И.Г.Заславская. ЖТФ, 29, 1959, (1959)
67. В.М.Буйминистров, С.И.Лекар. ЖЭТФ, 32, 1193, (1957)
68. H. Haken, Zeitschrift für Physik
147, 323, (1957).
69. Г.Бете, Швобер, Гюфман. Поля и мезоны т. II, ИЛ, (1957).
70. В.А.Москаленко. ЖЭТФ 30, 959 (1956)
71. K. Adler, A. Winther, Kgl. Danske Mat.-Phys.
Medd. 29, 18, (1955).
72. А.И.Ансельм, Ю.Фирсов. ЖЭТФ, 28, 151, (1955); 30, 719, (1956)

Изложение материала основано на работах:

по первой главе

73. А.В.Тулуб. Вестник ЛГУ, № 22, (1960).

по второй главе

74. А.В.Тулуб. ЖЭТФ, 36, 565 (1959).

75. А.В.Тулуб. Вестник ЛГУ, 4, 23, (1958)

по третьей главе

76. А.В.Тулуб. Вестник ЛГУ, 4, 53 (1957)

77. А.В.Тулуб. ЖЭТФ, 34, 1641, (1958).

78. А.В.Тулуб. ЖЭТФ, 40, № 2, (1961)

79. А.В.Тулуб. ЖЭТФ, 36, 6, 1959.