«ФИЗИКА ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ И АТОМНОГО ЯДРА», 1984, ТОМ 15, ВЫП. 4

УДК 539.19

МЕТОД КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ В ПРОБЛЕМЕ ПОЛЯРОНА

К. Родригес, В. К. Федянин

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В обзоре содержится последовательное изложение функционального вариационного подхода к теории полярона. Рассматриваются вычисления энергии, эффективной массы, радиуса, подвижности, электропроводности, магнитной восприимчивости и других характеристик полярона, а также описание его поведения в статических магнитных и электрических полях при произвольных значениях параметра электрон-фононного взаимодействия и температуры. Все расчеты сделаны в рамках вариационного принципа для свободной энергии полярона.

This review article contains a systematic exposition of the path—integral variational approach to polaron theory. The calculation of the polaron energy, effective mass, radius, mobility, conductivity, magnetic susceptibility and other polaron quantities and also the description of it's behaviour in static electric and magnetic fields at arbitrary temperature and coupling strength are considered. All the quantities are calculated in the framework of the variational principle for the polaron free energy.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время под проблемой полярона понимается широкий круг задач, касающихся поведения электронов проводимости в полярных кристаллах. После ряда известных упрощений [1, 2] система из электрона и взаимодействующих с ним продольных оптических фононов описывается гамильтонианом Пекара — Фрелиха:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum Q(k) (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}; \tag{1}$$

$$Q(k) = \left(\frac{2\pi c_0}{\Omega}\right)^{1/2} \frac{e}{k},$$

где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор электрона; e — его заряд; $\hat{\mathbf{p}} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$ — оператор квазиимпульса электрона; $\hat{a}^+_{\mathbf{k}}$, $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения продольных оптических фононов с квазиимпульсом $\mathbf{k}$, который принимает значения в первой зоне Бриллюэна; Ω — объем системы; $c_0 = (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1})$ (ε_∞ и ε_0— высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости кристалла).*

* Здесь все измеряется в следующих единицах: массы $m = 1$ — эффективная масса электрона в зоне проводимости, энергии $\hbar\omega_0 = 1$, где ω_0 — частота продольных оптических фононов и длина $(\hbar/m\omega_0)^{1/2} = 1$.

Интенсивность взаимодействия описывается в терминах безразмерного параметра $\alpha = e^2 c_0/\sqrt{2}$. Специфика проблемы полярона состоит в том, что в общем случае нельзя считать α малым параметром. В полупроводниках группы III—V взаимодействие может быть слабым ($\alpha \ll 1$), во многих полярных диэлектриках и полупроводниках группы II—VI промежуточным ($\alpha \sim 1$) и сильным ($\alpha \gg 1$) в ионных кристаллах. Поэтому в общем случае приходится отказаться от предположения, что энергетический спектр носителей заряда определяется их слабым взаимодействием с полем идеальной решетки и роль колебаний решетки состоит лишь в том, что они приводят к сравнительно редким переходам между состояниями электронов в идеальном кристалле. В полярных кристаллах электрон-фононное взаимодействие приводит к существенной перенормировке электронного спектра (поляронный эффект), а также к сравнительно сильному рассеянию носителей тока на оптических фононах и к изменению закона дисперсии последних. Все это усложняет описание электрических и оптических свойств полярных кристаллов.

Качественно полярон представляют как электрон, движущийся совместно с созданной им поляризацией решетки. Такая поляризация описывается в терминах дополнительного возбуждения продольных оптических фононов. Основными квазичастичными характеристиками полярона являются его собственная энергия, эффективная масса, время жизни (связанное с рассеянием полярона на оптических фононах) и его радиус. Все эти характеристики зависят от константы связи α и от температуры. Задача теории состоит в вычислении этих характеристик, в описании термодинамики электрон-фононной системы, его кинетических свойств и отклика на внешние электрические и магнитные поля, в изучении поведения полярона в кулоновском потенциале примесей и т. п. Тесно связаны с проблемой полярона также такие задачи, как экситон-фононное взаимодействие в полярных кристаллах (электронный полярон связан кулоновским потенциалом с поляронной дыркой) и задача биполярона (два полярона, взаимодействующие между собой через поляризацию решетки). Исторически сложилось так, что вначале в работах Л. Д. Ландау [3], С. И. Пекара [1, 4], Н. Н. Боголюбова [5, 6] и С. В. Тябликова [5, 7] была развита теория полярона сильной связи, затем в работах Фрелиха [8], Ли, Лоу и Пайнса [9], Гросса [10] и других изучались поляроны слабой и промежуточной связи. Первая попытка создания теории, справедливой при всех значениях α, была предпринята в работе Фейнмана в 1955 г. [11]. Основной целью этих работ было вычисление энергии и эффективной массы полярона при нулевой температуре. Дальнейшее развитие теории полярона шло по линии рассмотрения термодинамики и динамики поляронов, их поведения во внешних полях, а также создания новых методов описания электрон-фононной системы. Обсуждению главных достижений теории полярона посвящен ряд статей обзорного характера и трудов конференций [12—19].

Теория полярона уже традиционная, но тем не менее очень актуальная область физики конденсированных сред. Растущий интерес к ней в последние годы связан с тем, что только в конце 60-х и в течение 70-х годов стали появляться надежные экспериментальные данные по электрическим и оптическим свойствам полярных кристаллов. Наиболее информативными являются эксперименты по циклотронному резонансу, оптические и магнетооптические измерения и изучение электропереноса в сильных полях и поведения горячих поляронов [14—17]. Обсуждаются вопросы зависимости эффективной массы от температуры и интенсивности внешнего магнитного поля, возможное существование фазового перехода от свободного к автолокализованному состоянию полярона *, наблюдение в оптическом спектре свободных поляронов так называемых франк-кондоновских и релаксированных возбужденных состояний и динамика поляронов в сильных электрических полях.

Успех метода континуального интегрирования в теории полярона связан со следующими техническими моментами. Во-первых, удается точно исключить фононные переменные из проблемы, которая таким образом сводится к одночастичной задаче, описываемой нелокальным функционалом, зависящим только от электронных траекторий. Во-вторых, после такого существенного упрощения задачи легко сформулировать с помощью неравенства Иенсена вариационный метод решения, который является функциональным аналогом вариационного принципа Боголюбова для свободной энергии квантовостатистических систем. В-третьих, на языке функционалов нетрудно построить класс точно решаемых моделей, соответствующих квадратичным функционалам, которые используются в качестве аппроксимирующих моделей для вариационных расчетов. В результате удается в рамках единого подхода описывать поляроны произвольной связи, причем в широком интервале значений α получается оценка энергии основного состояния точнее, нежели полученные в рамках других существующих приближений. При помощи этого метода можно вычислить почти все термодинамические и динамические величины, представляющие интерес в теории полярона. Конечно, нет a priori никакой гарантии того, что хорошее приближение для свободной энергии так же хорошо аппроксимирует другие поляронные величины (в некоторых случаях это заведомо не так), но, в общем, функциональный вариационный подход позволяет создать единую картину поведения поляронной системы в широком интервале значений параметра связи α, температуры, частоты и напряженности внешних полей. Отметим, однако, что эти положительные черты не являются исключительным достоинством метода континуального интегрирования. Такие же результаты можно получить (и в некоторых случаях были впервые получены) техникой исключения фононных операторов с помощью T-произведений [20—24]. Более того, подход [21—23] имеет

* В этой связи см. также работу [132].

и ряд преимуществ, в особенности при получении строго обоснованных результатов и доказательства некоторых теорем. Поскольку эти вопросы полно освещены в [21—23], то здесь мы их касаться не будем.

Целью настоящего обзора является последовательное изложение теории полярона на языке континуальных интегралов. Хотя отдельные результаты обсуждаются и сравниваются с результатами других методов и с экспериментальными данными, основное внимание уделяется вопросам методического характера: как получить для каждой величины континуальное представление, как вычислить ее в рамках вариационного метода, а также существующим трудностям этого подхода. В этом отношении подробно обсуждаются некоторые неоднозначности, фигурирующие в литературе, относительно вычисления эффективной массы и электропроводности полярона. Изложение ограничивается изучением свободных поляронов и их поведением во внешних однородных полях, т. е. задачи биполярона, полярон-примеси и экситон-фононного взаимодействия не рассматриваются. Применение метода континуального интегрирования к этим задачам можно найти в работах [25—32], а также в обзоре [133].

1. ЭНЕРГИЯ ПОЛЯРОНА

Определения. Описание электрон-фононной системы в рамках модели Пекара — Фрелиха формально сводится к изучению поведения нерелятивистской частицы импульса $\mathbf{p}$, которая взаимодействует с квантовым бозонным полем, характеризуемым импульсом $\Sigma_{\mathbf{k}}\mathbf{k}\hat{a}^+_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и энергией $\sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}$. Оператор полного импульса системы

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}\hat{a}^+_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}$$

коммутирует с гамильтонианом (1) [6] и, следовательно, является интегралом движения, образующим вместе с остальными квантовыми числами, совокупность которых обозначим η, полный набор для определения собственных энергий $E(\eta, \mathbf{P})$ и векторов $|\eta, \mathbf{P}\rangle$ гамильтониана $\hat{H}$. Как было доказано Н. Н. Боголюбовым [6], средняя скорость частицы в состоянии $|\eta, \mathbf{P}\rangle$ определяется выражением:

$$\mathbf{v}(\eta, \mathbf{P}) = \langle \eta, \mathbf{P} | \hat{\mathbf{p}} | \eta, \mathbf{P} \rangle = \frac{\partial E(\eta, \mathbf{P})}{\partial \mathbf{P}}. \tag{2}$$

Электронные координаты могут быть исключены из гамильтониана при помощи канонического преобразования Боголюбова [6]

$$\hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}; \quad \hat{b}^+_{\mathbf{k}} = \hat{a}^+_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}; \quad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}\hat{b}^+_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}},$$

после проведения которого гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\Big[\hat{\mathbf{P}} - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}\hat{b}^+_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}}\Big]^2 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}^+_{\mathbf{k}}\hat{b}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} Q(k)(\hat{b}^+_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}). \tag{3}$$

Рассмотрим ситуацию при нулевой температуре ($T = 0$).

Пусть $|\eta_0, \mathbf{P}\rangle$ — состояние наименьшей энергии $E(\eta_0, \mathbf{P})$ при малом фиксированном $\mathbf{P}$. Энергия $E(\alpha)$ и эффективная масса $m^*(\alpha)$ основного состояния полярона определяются формулой:

$$E(\eta_0, \mathbf{P}) = E(\alpha) + \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*(\alpha)} + \ldots \tag{4}$$

или [6], с учетом (2):

$$E(\eta_0, \mathbf{P}) = E(\alpha) + \frac{1}{2} m^*(\alpha)\, \mathbf{v}^2 + \ldots \tag{5}$$

Рассмотрим теперь систему в состоянии термодинамического равновесия при температуре T. Свободная энергия системы $\Phi(\alpha, \beta)$ определяется выражением

$$\Phi(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \operatorname{Sp} e^{-\beta \hat{H}},$$

где $\beta = 1/kT$ и k — постоянная Больцмана. Свободную энергию полярона $F(\alpha, \beta)$ обычно определяют вычитанием из $\Phi(\alpha, \beta)$ свободной энергии фононного поля в отсутствие частицы [20, 35]:

$$F(\alpha, \beta) = \Phi(\alpha, \beta) - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln(1 - e^{-\beta})$$

. или

$$F(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln \frac{\operatorname{Sp} e^{-\beta \hat{H}}}{Z_{\text{ph}}}, \tag{6}$$

где

$$Z_{\text{ph}} = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{(1 - e^{-\beta})}.$$

Средняя энергия $U(\alpha, \beta)$ и собственная энергия $E(\alpha, \beta)$ полярона определяются из $F(\alpha, \beta)$ следующим образом [20, 33]:

$$\left.\begin{aligned} U(\alpha, \beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta} \beta F(\alpha, \beta); \\ E(\alpha, \beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta} \beta F(\alpha, \beta) - \frac{3}{2\beta}. \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

В пределе нулевой температуры имеем:

$$\lim_{\beta \to \infty} F(\alpha, \beta) = \lim_{\beta \to \infty} U(\alpha, \beta) = \lim_{\beta \to \infty} E(\alpha, \beta) = E(\alpha). \tag{8}$$

Континуальные представления и вариационный метод расчета. Представления для энергий основного состояния $E(\alpha)$ и свободной энергии $F(\alpha, \beta)$ полярона в виде континуальных интегралов были получены впервые Фейнманом [11] и в [33] соответственно. Существуют разные способы вывода таких представлений. Один из них основан на формуле Фейнмана — Каца [34, 35], которая позволяет записать матричные элементы статистического оператора системы

$\langle \mathbf{r}', Q' \mid \exp(-\beta \hat{H}) \mid \mathbf{r}, Q\rangle$ в виде интеграла по мере Винера [36]:

$$\langle \mathbf{r}', Q' \mid e^{-\beta\hat{H}} \mid \mathbf{r}, Q\rangle = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{r}'} D\mathbf{x} \int\limits_{Q(0)=Q}^{Q(\beta)=Q'} DQ \times$$

$$\times \exp\left\{-\int\limits_0^\beta d\tau H[\mathbf{x}(\tau), Q(\tau)]\right\},$$

где $H[\mathbf{x}(\tau), Q(\tau)]$ — гамильтониан системы:

$$\left.\begin{aligned} H[\mathbf{x}, Q] &= \frac{1}{2}\dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(\dot{q}_{\mathbf{k}}^2 + q_{\mathbf{k}}^2) + \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{2}\, Q(k)\, q_{\mathbf{k}}\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}; \\ Q &= \{q_{\mathbf{k}}\}; \quad \int\limits_{Q(0)=Q}^{Q(\beta)=Q'} DQ \ldots = \left\{\prod_{\mathbf{k}} \int\limits_{q_{\mathbf{k}}(0)=q_{\mathbf{k}}}^{q_{\mathbf{k}}(\beta)=q'_{\mathbf{k}}} D_{q_{\mathbf{k}}}\right\} \ldots \end{aligned}\right\} \quad (9)$$

Из (9) имеем для статистической суммы системы

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}} = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x} \int\limits_{Q(0)=Q(\beta)} DQ \times$$

$$\times \exp\left\{-\int\limits_0^\beta d\tau H[\mathbf{x}(\tau), Q(\tau)]\right\}.$$

Интегралы берутся по всем замкнутым траекториям электрона $\mathbf{x}(\tau)$ и осцилляторов $q_{\mathbf{k}}(\tau)$ $(0 \leqslant \tau \leqslant \beta)$, а также по всем начальным точкам $\mathbf{x}(0)$ и $q_{\mathbf{k}}(0)$. Интегрирование по траекториям осцилляторов можно привести с помощью общих формул [35]

$$\int\limits_{q(0)=q(\beta)} Dq \exp\left\{-\frac{1}{2}\int\limits_0^\beta du\,[\dot{q}^2 + W^2q^2 + \gamma q]\right\} =$$

$$= \frac{\exp\left\{\frac{1}{16W}\int\limits_0^\beta\int\limits_0^\beta du\, dv\, \gamma(u)\,\gamma(v)\, C_W(u-v)\right\}}{2\operatorname{sh}\frac{\beta W}{2}},$$

где

$$C_W(x) = \frac{e^{Wx}}{e^{\beta W}-1} + \frac{e^{-Wx}}{1-e^{-\beta W}}.$$

Результат имеет вид:

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}} = Z_{\mathrm{ph}} \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S[\mathbf{x}]},$$

где

$$\left.\begin{aligned} S[\mathbf{x}] &= \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V[\mathbf{x}];\\ V[\mathbf{x}] &= -\sum_{\mathbf{k}} Q^2(k)\int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\sigma\, C(\tau-\sigma)\, e^{i\mathbf{k}[\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)]};\ C(\tau) = C_1(\tau) \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

и согласно (6) для свободной энергии полярона имеем

$$F(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\beta}\int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S[\mathbf{x}]}. \tag{11}$$

Эквивалентное выражение было впервые получено в [33]. Обобщение на случай, когда частота фононов зависит от волнового вектора $\mathbf{k}$, получается заменой $C(\tau-\sigma)$ на $C_{\omega_{\mathbf{k}}}(\tau-\sigma)$, где $\omega_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсии фононов.

Чтобы получить представление для энергии основного состояния, следует согласно (8) рассмотреть предел $\beta \to \infty$. При этом слагаемые, пропорциональные $e^{-\beta}$, в (10) не дают вклада. Сумма по $\mathbf{k}$ в первой зоне Бриллюэна заменяется интегралом по всему $\mathbf{k}$-пространству (континуальный предел). В итоге имеем:

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= -\lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\beta}\ln \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S_\Phi(\mathbf{x})};\\ S_\Phi(x) &= \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) - \frac{\alpha}{2^{3/2}}\int_0^\beta\int_0^\beta d\tau\, d\sigma \frac{e^{-|\tau-\sigma|}}{|\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)|}. \end{aligned} \tag{12}$$

Функциональные квадратуры, фигурирующие в (11) и (12), не удается вычислить точно и приходится разрабатывать приближенные процедуры их расчета. Здесь очень полезным оказался функциональный аналог вариационного метода Боголюбова для свободной энергии квантовостатистических систем [37]: для вычисления $E(\alpha)$ он был сформулирован в [11] и обобщен затем на случай конечных температур в [33].

Пусть $S_0(\mathbf{x})$ — действительный функционал, аппроксимирующий $S(\mathbf{x})$. С помощью неравенства Иенсена нетрудно доказать, что

$$F(\alpha, \beta) \leqslant F_0 + \frac{1}{\beta}\langle S(\mathbf{x}) - S_0(\mathbf{x})\rangle_{S_0}, \tag{13}$$

где F_0 — свободная энергия системы, описываемой функционалом действия $S_0(\mathbf{x})$:

$$\left.\begin{aligned} F_0 &= -\frac{1}{\beta}\ln\int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S_0(\mathbf{x})};\\ \langle A[\mathbf{x}]\rangle_{S_0} &= \frac{\int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D(\mathbf{x})\, e^{-S_0(\mathbf{x})} A[\mathbf{x}]}{\int_{x(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S_0(\mathbf{x})}}. \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

В частности, при нулевой температуре имеем

$$E(\alpha) \leqslant E_0 + \lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} \langle S - S_0 \rangle_{S_0}, \tag{15}$$

где $E_0 = \lim\limits_{\beta\to\infty} F_0$ — энергия основного состояния системы, описываемой функционалом действия $S_0(\mathbf{x})$.

Если выбрать для S_0 функционал действия свободной частицы

$$S_0 = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau),$$

то получим результат второго порядка теории возмущений:

$$E(\alpha) \leqslant -\alpha,$$

который, таким образом, оказывается верхней границей для энергии основного состояния. Если S_0 выбрать в виде

$$S(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) - \lambda \int_0^\beta d\tau \frac{1}{|\mathbf{x}(\tau)|},$$

где λ — вариационный параметр, который определяется из условия минимума правой части неравенства (15), то наилучшая оценка дается формулой $F(\alpha) \leqslant -0{,}098\alpha^2$ $(\alpha \gg 1)$ — это близко к значению, полученному Пекаром вариационным методом Ритца [1]: $E(\alpha) = -0{,}1088\alpha^2$.

Трудности при аппроксимации функционала действия $S[\mathbf{x}]$ функционалом $S_0[\mathbf{x}]$, соответствующим движению частицы в поле классического потенциала $V_{\text{кл}}(\mathbf{x})$, подробно обсуждаются в [35]. Оказывается, что при $\alpha \leqslant 6$ ни при каком выборе $V_{\text{кл}}(\mathbf{x})$ нельзя улучшить результат, полученный при $V_{\text{кл}} = 0$. Это показывает, что классические потенциалы, за исключением случая очень сильной связи, плохо аппроксимируют реальную физическую ситуацию. С одной стороны, из выражения (10) видно, что действие $S[\mathbf{x}]$ трансляционно-инвариантно, а потенциальное поле, которое действует на электрон во «время» τ, зависит не только от его положения $\mathbf{x}(\tau)$, но и от его предыдущего движения, т. е. определяется распространением с конечной скоростью возмущения, созданного им в прошлом. С другой, любой классический потенциал, потенциал внешнего источника $V_{\text{кл}}(x)$, будет удерживать электрон вблизи точки минимума потенциала и зависеть только от положения электрона в данный момент времени. По этой причине следует ожидать, что при очень больших α, когда возмущение, созданное электроном, распространяется с очень большой скоростью, приближение классического потенциала окажется более реалистическим.

Вариационный функционал и линейная модель полярона. Если в выражении (10) для $S[\mathbf{x}]$ разложить $\exp\{i\mathbf{k}[\mathbf{x}(\tau) - \mathbf{x}(\sigma)]\}$ до степеней $\mathbf{k}$ второго порядка, опустить постоянный член и сделать замены $\sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2Q^2(k)}{3} \to C$, $C(\tau-\sigma) \to C_W(\tau-\sigma)$, то получим функционал

$$S_0[\mathbf{x}] = \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + C\int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\sigma\, C_W(\tau-\sigma)\,|\,\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)\,|^2. \quad (16)$$

Функционал $S_0(\mathbf{x})$ является действием [аналогом $S(\mathbf{x})$ в модели Пекара — Фрелиха] для системы, где электрон связан не с решеткой, а с некоторой другой частицей массы M посредством «пружины», т. е. для модели, описываемой гамильтонианом:

$$\hat{H}_\Phi = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{2M} + \frac{1}{2}k\,|\,\mathbf{r}-\mathbf{r}'\,|^2, \quad (17)$$

где $W = \sqrt{k/M}$ и $C = MW^3/4$. Из выражения (16) видно, что $S_0[\mathbf{x}]$ трансляционно-инвариантен, а потенциал, действующий на электрон, тоже определяется предысторией его движения, как и для функционала $S[\mathbf{x}]$. Кроме того, все континуальные интегралы, фигурирующие в (13) и (15), для S_0 вычисляются в явном виде [11, 33]. Оптимальные значения вариационных параметров C и W в зависимости от α и β определяются условием минимума правой части (13).

К функционалу действия вида $S_0[\mathbf{x}]$ для электрона приводит также и линейная модель электрон-фононного взаимодействия Боголюбова [21—23, 38], которая определяется гамильтонианом:

$$\left.\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{2}W^2(\nu^2-1)\,r^2 + \sum_{\mathbf{k}} W\hat{a}^+_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}} + \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} iQ_0(k)\,(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,(\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^+_{\mathbf{k}}); \\ \nu^2 &= 1 + \frac{2}{3}\sum_k \frac{k^2Q_0^2(k)}{W^3}. \end{aligned}\right\} \quad (18)$$

Гамильтониан $\hat{H}_0$, как и гамильтониан модели Пекара — Фрелиха, обладает свойствами трансляционной инвариантности. Здесь роль полного импульса, коммутирующего с гамильтонианом, играет оператор

$$\hat{\mathbf{P}}_0 = \mathbf{p} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{W} Q_0(k)\,(\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^+_{\mathbf{k}}).$$

Если обозначить $E_0(\eta, \mathbf{P}_0)$ и $|\,\eta, \mathbf{P}_0\rangle$ собственные значения энергии и собственные функции $\hat{H}_0$, то для средней скорости частицы в состоянии $|\,\eta, \mathbf{P}_0\rangle$ имеем [38]:

$$V(\eta, \mathbf{P}_0) = \langle \eta, \mathbf{P}_0\,|\,\mathbf{p}\,|\,\eta, \mathbf{P}_0\rangle = \frac{\partial E_0(\eta, P_0)}{\partial \mathbf{P}_0}. \quad (19)$$

Электронные координаты могут быть исключены из гамильтониана при помощи канонического преобразования [21]:

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \hat{b}_{\mathbf{k}} - \frac{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,Q_0(k)}{W}; \quad \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} = \hat{b}^{+}_{\mathbf{k}} + \frac{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,Q_0(k)}{W};$$

$$\hat{\mathbf{P}}_0 = \hat{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{W} Q_0(k)\,(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}^{+}_{\mathbf{k}}).$$

Тогда гамильтониан принимает вид:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{P}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{k}}{W} Q_0(k)\,(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}^{+}_{\mathbf{k}})\right]^2 + \sum_{\mathbf{k}} W \hat{b}^{+}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}. \tag{20}$$

Нетрудно диагонализовать $\hat{H}_0$ каноническими преобразованиями фононных операторов. Результат имеет вид [38]:

$$\hat{H}_0 = \frac{3}{2} W(\nu - 1) + \frac{\hat{\mathbf{P}}_0^2}{2\nu^2} + \sum_{\mathbf{k}} W \hat{C}^{+}_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}} + \sum_{i=1}^{3} W(\nu - 1)\,\hat{C}^{+}_{\mathbf{k}_i} \hat{C}_{\mathbf{k}_i}, \tag{21}$$

где $\hat{C}^{+}_{\mathbf{k}}$, $\hat{C}_{\mathbf{k}}$ — новые операторы рождения и уничтожения фононов. Оператор импульса электрона выражается через $\mathbf{P}_0$, $\hat{c}^{+}_{\mathbf{k}}$, $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ формулой:

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{P}}_0 - \sqrt{2W(\nu^2 - 1)} \sum_{i=1}^{3} \frac{\mathbf{k}_i}{k_i} (\hat{c}_{\mathbf{k}_i} + \hat{c}^{+}_{\mathbf{k}_i}). \tag{22}$$

Из (19) и (21) следует, что для линейной модели энергия основного состояния E_0 и эффективная масса m_0^* полярона даются выражениями:

$$E_0 = \frac{3}{2} W(\nu - 1); \quad m_0^* = \nu^2. \tag{23}$$

Отметим, что $m_0^* = 1 + M$ — суммарная масса двухчастичной модели Фейнмана (17). Свободная энергия полярона в линейной модели имеет вид:

$$F_0(\beta) = \frac{3}{2} W(\nu - 1) + \frac{3}{2\beta} \ln \frac{2\pi\beta}{\nu^2 \Omega^{2/3}} + \frac{3}{\beta} \ln \frac{1 - e^{-\beta W \nu}}{1 - e^{-\beta W}}. \tag{24}$$

Таким образом, линейная модель полярона есть точно решаемая модель электрон-фононного взаимодействия, в которой проявляются эффекты перенормировки энергии основного состояния, эффективной массы и фононных частот. Поэтому, если значения параметров ν и W выбираются подходящим образом, линейная модель может служить хорошим нулевым приближением для вычисления равновесных характеристик полярона.

Выражение (16) позволяет обобщить линейную модель на случай, когда электрон взаимодействует с распределением осцилляторов всех возможных частот. В этом случае функционал действия имеет вид

[39—42]:

$$\left.\begin{aligned} S_0[G,\ \mathbf{x}] &= \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V_0[G,\ \mathbf{x}];\\ V_0[G,\ \mathbf{x}] &= \int_{-\infty}^{\infty} dW\, G(W) \int_0^\beta d\tau \times\\ &\times \int_0^\tau d\sigma\, e^{-W(\tau-\sigma)}\, |\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)|^2, \end{aligned}\right\} \tag{25}$$

где функция $G(W)$ удовлетворяет условию

$$G(-W) = e^{-\beta W} G(W).$$

В частном случае функционала (16) имеем

$$G(W') = \frac{C}{1-e^{-\beta W'}}\,[\delta(W'-W) - \delta(W'+W)].$$

Эффективная масса полярона для модели (25) имеет вид [38]:

$$m_0^*(G) = 1 + 4\int_{-\infty}^{\infty} dW\, \frac{G(W)}{W^3}.$$

Применение вариационного принципа. Все континуальные интегралы, фигурирующие в (13) и (15), выражаются через корреляционную функцию

$$J_{\mathbf{k}}(\tau-\sigma) = \langle e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)]}\rangle_{S_0}. \tag{26}$$

Явный вид континуального интеграла (26) для функционалов (16) и (25) можно найти в [33, 41].

В частности, можно вычислить $E(\alpha)$ и $F(\alpha,\ \beta)$ для различных значений α и β. Для этого требуется найти оптимальные значения параметров ν и W в зависимости от α и β. В общем случае задачу надо решать численными методами, но некоторые предельные случаи можно рассматривать аналитически:

а) при нулевой температуре и слабой связи [11]

$$\nu = 1 + 2\alpha/27;\ W = 3;\ E(\alpha) \leqslant -\alpha - \alpha^2/81; \tag{27}$$

б) при нулевой температуре и сильной связи [11]

$$\left.\begin{aligned} &\nu = \frac{4\alpha^2}{9\pi} - 2(2\ln 2 + \tilde{C}) + 1;\quad \tilde{C} = 0{,}5772;\quad W = 1;\\ &E(\alpha) \leqslant -\frac{\alpha^2}{3\pi} - \frac{3}{2}\left(2\ln 2 + \tilde{C} + \frac{1}{2}\right); \end{aligned}\right. \tag{28}$$

в) при низкой температуре ($\beta \gg 1$) и слабой связи [43]

$$\left.\begin{aligned} &\nu = 1 + \frac{2\alpha}{27} + \frac{7}{9}\frac{\alpha}{\beta}; \quad W = 3\left(1 - \frac{15}{4\beta}\right); \\ &F(\alpha, \beta) \leqslant \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{\Omega^{2/3}} - \alpha\left(1 + \frac{1}{4\beta}\right) - \frac{\alpha^2}{81}\left(1 + \frac{2}{\beta}\right); \end{aligned}\right\} \tag{29}$$

г) при низкой температуре и сильной связи [43]

$$\left.\begin{aligned} &\nu = \frac{4\alpha^2}{9\pi} - 2(2\ln 2 + \widetilde{C}) + 1 + \frac{6}{\beta}; \quad W = 1; \\ &F(\alpha, \beta) \leqslant \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{\Omega^{2/3}} - \frac{\alpha^2}{3\pi} - \\ &- \frac{3}{2}\left(2\ln 2 + \widetilde{C} + \frac{1}{2}\right) + \frac{3}{\beta}\left(1 - \ln\frac{4\alpha^2}{9\pi}\right); \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

д) при $\beta \ll 1$ и $\alpha\sqrt{\beta} \ll 1$, $\nu = 1 + 0(\alpha\sqrt{\beta})$; $W = \dfrac{6{,}50}{\beta}$ [20]

$$\left.\begin{aligned} &F(\alpha, \beta) \leqslant \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{\Omega^{2/3}} - \alpha\left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{1/2}\left(1 + \frac{\beta^2}{48}\right) - \\ &- \frac{\pi\alpha^2}{12}(0{,}0804 - 0{,}00132\beta^2); \\ &E(\alpha, \beta) = -\frac{\alpha}{2}\left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{1/2}(1 + 0{,}024\alpha\beta^{1/2}). \end{aligned}\right\} \tag{31}$$

Шульц, использовав ЭВМ [44], показал, что значения $E(\alpha)$ при $3 \leqslant \alpha \leqslant 11$ ниже (и поэтому лучше) всех полученных ранее оценок. Сравнение всех численных результатов и асимптотических формул (при $\alpha \to 0$ и $\alpha \to \infty$) для $E(\alpha)$ приводится в работе [45].

Поправки к результатам [11] с учетом членов второго порядка по $S - S_0$ в разложении

$$\begin{aligned} F(\alpha, \beta) &= F_0 + \frac{1}{\beta}\langle S - S_0\rangle_{S_0} - \\ &- \frac{1}{2\beta}[\langle (S - S_0)^2\rangle_{S_0} - \langle S - S_0\rangle_{S_0}^2] + \ldots \end{aligned} \tag{32}$$

были получены в работах [45, 46]. Результат [46] совпадает с точным результатом четвертого порядка теорий возмущений [47, 48]. Для сильной связи результаты [45, 46] ближе к наилучшей оценке адиабатической теории возмущений Пекара, Боголюбова и Тябликова [1, 5—7]

$$E(\alpha) = -0{,}1085\alpha^2 - 3/2.$$

Асимптотика для $E(\alpha, \beta)$ при $\beta \gg 1$ и $\alpha \ll 1$ имеет вид [43]:

$$E(\alpha, \beta) = -\alpha + \frac{9}{32}\frac{\alpha}{\beta^2}. \tag{33}$$

В работах [49, 50] модель Фейнмана обобщена на случай, когда функционал действия имеет вид:

$$S_0[\mathbf{x}] = \frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\, \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{2} C_n \int_0^\beta\int_0^\beta d\tau\, d\sigma\, e^{-W_n|\tau-\sigma|}\, |\mathbf{x}(\tau)-\mathbf{x}(\sigma)|^2,$$

где C_1, C_2, W_1, W_2 — вариационные параметры. Вычисление вариационным методом энергии основного состояния приводит к небольшому улучшению оценки Фейнмана, на 0,08% при $\alpha = 3$ и на 0,15% при $\alpha = 5$. В пределе слабой связи их результат имеет вид: $E(\alpha) \leqslant -\alpha - 0{,}012583\alpha^2$. Другое обобщение модели Фейнмана предложено в [45]. Оно подробно разобрано в [132]. Скачки в производной $E'(\alpha)$ при $\alpha \simeq 5{,}8$ и больших значениях α (см. [132]) интерпретируются как фазовый переход полярона от нелокализованного состояния ($\alpha < 5{,}8$) к автолокализованному состоянию ($\alpha > 5{,}8$), а критическое значение $\alpha_c = 5{,}8$ связывается с радиусом сходимости ряда теорий возмущения, который согласно аргументам работ [51, 52] должен быть конечным. Скачки эти были получены также в работах [51—60, 132], а значения $\alpha_c \sim 6 \div 50$. По нашему мнению, вопрос о фазовых переходах по α, поставленный в [61], пока является нерешенным.

Эффект конечности зоны Бриллюэна был рассмотрен в [44]. В этой работе первая зона Бриллюэна была заменена сферой радиуса $k_0 = 2\pi/a$, где a — постоянная решетки. Континуальный предел соответствует $k_0 \to \infty$. Шульц оценил относительный сдвиг $E(\alpha)$ при $\alpha = 5$ и $0 \leqslant a \leqslant R_0/0{,}9$, где величина $R_0 = (2W\nu)^{-1/2}$ имеет смысл радиуса полярона в модели Фейнмана. Показано, что относительный сдвиг меньше или порядка 11%. Считают, что при очень высоких температурах собственная энергия полярона должна обращаться в нуль и его эффективная масса — в массу электрона проводимости. Это обусловлено тем, что тепловое движение разрушает ионную поляризацию, созданную электроном вокруг себя. Однако такая картина не реализуется в приведенных выше расчетах. Согласно формуле (31) $E(\alpha, \beta) \to -\infty$ при $\beta \to 0$. В [62, 63] эта ситуация объяснялась тем, что определения (6) и (7) не учитывают изменения энергии фононной подсистемы из-за перенормировки фононных частот, обусловленной электрон-фононным взаимодействием. Согласно такой точке зрения, часть свободной энергии $F(\alpha, \beta)$ и собственной энергии $E(\alpha, \beta)$ следует приписывать не полярону, а фононам, частоты которых меняются на величину $\delta\omega(\mathbf{k})$ пропорционально Ω^{-1}. Конечно, процедура «деления» энергии взаимодействия между поляроном и фононами в большой мере произвольна, но как бы мы ее не определяли, она не обращается в нуль при $\beta \to 0$ в рамках существующих приближенных методов расчета энергии для модели Пекара — Фрелиха. Когда рассматривается один электрон, взаимодействующий с макроскопической подсистемой, более естественной представляется картина, согласно которой свойства макроскопической подсистемы не модифицируются из-за ее взаимодействия с электроном, и эффект взаимодействия приводит только к изменению энергии электронных состояний и к переходам между ними.

Отметим, что c_0 должна обращаться в нуль при очень высоких температурах. Это должно приводить к эффекту «раздевания» полярона, который, если считать α постоянным, видимо, не содержится в модели Пекара — Фрелиха.

Учет конечности зоны Бриллюэна при высоких температурах приводит к тому, что результаты (31) справедливы при условиях: $\beta \ll 1$; $\alpha \sqrt{\beta} \ll 1$; $\beta k_0^2/2 \gg 1$.

Если устремить β к нулю при фиксированном k_0, получим

$$E(\alpha, \beta) = \frac{2\alpha}{\pi} \left(\frac{k_0^2}{2}\right)^{1/2} \quad (\beta k_0^2/2 \to 0).$$

Это соответствует классическому значению энергии полярона, определяемому минимумом функционала $S[\mathbf{x}]$:

$$\delta S[\mathbf{x}] = 0; \ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(\beta),$$

решением которого является $\mathbf{x}(\tau) = 0$.

2. РАДИУС ПОЛЯРОНА И ЧИСЛО ВОЗБУЖДЕННЫХ ФОНОНОВ

Определение радиуса полярона. Континуальное представление. В рамках модели Пекара — Фрелиха электрон-фононное взаимодействие рассматривается как взаимодействие между электроном и поляризуемым континуумом. Пусть $\hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ — оператор поляризации продольных оптических фононов. Тогда

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = e \int\limits_{\Omega} d^3\mathbf{r}' \, \frac{\nabla' \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \tag{34}$$

где оператор плотности поляризационного заряда $\hat{\rho}(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ дается выражением

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{c_0}{\pi\Omega}\right)^{1/2} k\hat{q}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}; \quad \hat{q}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}} (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^{+}_{-\mathbf{k}}). \tag{35}$$

Как известно, это будет хорошее приближение, если основной вклад в энергию взаимодействия дают области кристалла, которые находятся на больших расстояниях от электрона. Радиус полярона — это параметр, который позволяет установить количественный критерий применимости такого описания (радиус полярона должен быть намного больше постоянной решетки).

Пусть $\rho(\mathbf{r})$ — среднее значение плотности поляризационного заряда. Потенциальная энергия взаимодействия электрона с этим распределением заряда

$$V = e \int\limits_{\Omega} d^3\mathbf{r} \, \frac{\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}|}, \tag{36}$$

а суммарный заряд распределения $q^* = \int\limits_\Omega d^3\mathbf{r}\rho(\mathbf{r})$. Радиус полярона можно условно определить как то расстояние R, на котором должен находиться от электрона точечный заряд q^*, чтобы их потенциальная энергия взаимодействия равнялась V. Отсюда следует, что

$$\frac{1}{R(\alpha,\ \beta)} = \frac{\int\limits_\Omega d^3\mathbf{r}\,\frac{\rho(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}|}}{\int\limits_\Omega d^3\mathbf{r}\rho(\mathbf{r})}. \tag{37}$$

Для системы, описываемой статистическим оператором $\exp(-\beta\hat{H})$, плотность $\rho(\mathbf{r})$ по определению равна:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\int dQ\,\langle Q\,|\rho(\mathbf{r})|\,Q\rangle\langle 0,\ Q\,|e^{-\beta\hat{H}}|\,0,\ Q\rangle}{\int dQ\,\langle 0,\ Q\,|e^{-\beta\hat{H}}|\,0,\ Q\rangle},$$

где статистический оператор дается формулой (9). После интегрирования по фононным траекториям приходим к результату [64]

$$\left.\begin{aligned}
&\rho(\mathbf{r}) = \frac{ec_0}{\Omega}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\int\limits_0^{\beta/2} d\tau C(\tau)\,\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}(\tau)}\rangle_S;\\
&q^* = ec_0;\\
&\frac{1}{R(\alpha,\ \beta)} = \frac{4\pi}{\Omega}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{k^2}\int\limits_0^{\beta/2} d\tau C(\tau)\,\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}(\tau)}\rangle_S,
\end{aligned}\right\} \tag{38}$$

где $C(\tau)$ и $\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}(\tau)}\rangle_S$ определены в разд. 1. Отметим, что, если не учитывать температурную зависимость параметра c_0, суммарный заряд q^*, окружающий электрон, постоянен.

Радиус полярона в линейной модели. В рамках линейной модели (18) взаимодействие электрона с фононами эквивалентно взаимодействию с фиктивной частицей массы $M = \nu^2 - 1$, связанной с ним посредством пружины. Поэтому в качестве радиуса полярона R_0 здесь следует брать то расстояние от электрона, на котором должна фиксироваться эта фиктивная частица, чтобы ее потенциальная энергия с электроном равнялась среднему значению этой величины, т. е.

$$R_0^2 = \frac{\mathrm{Sp}\,(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2\,e^{-\beta\hat{H}_\Phi}}{\mathrm{Sp}\,e^{-\beta\hat{H}_\Phi}}, \tag{39}$$

откуда [38]

$$R_0^2 = \frac{3}{2W\nu}\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta W\nu}{2}. \tag{40}$$

При $\beta \to \infty$, $R_0^2 \to \dfrac{3}{2W\nu}$ этот результат впервые получен в [44]. При нулевой температуре и слабой связи с учетом (27) имеем

$$R_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{\alpha}{27}\right), \quad \alpha \ll 1,$$

а при $\alpha \gg 1$ из (29) следует, что

$$R_0 = \frac{3}{2\alpha}\sqrt{\frac{3\pi}{2}}, \quad \alpha \gg 1.$$

Сравнение величины $R_0 = \sqrt{3/2W\nu}$ с постоянной решетки разных ионных кристаллов проведено также в [44].

Вычисление радиуса полярона. Чтобы вычислить $R(\alpha, \beta)$ и $\rho(r)$ в рамках вариационного метода, следует заменить $\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}(\tau)}\rangle_S$ на $\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}(\tau)}\rangle_{S_0}$ в выражении (38). В континуальном приближении получается [43]:

$$\left.\begin{aligned} \frac{1}{R(\alpha, \beta)} &= \nu\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^{\beta/2} d\tau C(\tau) f^{-1/2}(\tau); \\ \rho(r) &= \frac{ec_0\nu^3}{(2\pi)^{3/2}}\int_0^{\beta/2} d\tau C(\tau) f^{-3/2}(\tau)\exp\left[-\frac{r^2\nu^2}{2f(\tau)}\right]. \end{aligned}\right\} \qquad (41)$$

Значения ν и W в формулах (41) определяются из условия минимума свободной энергии. Таким образом, можно изучить зависимость радиуса полярона и плотности заряда от температуры и константы связи. Рассмотрим некоторые предельные случаи [43]:

$$\text{а)}\ \beta = \infty; \quad \alpha \ll 1; \quad R(\alpha) = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(1 - \frac{2\alpha}{81}\right);$$

$$\text{при}\ \alpha \to 0 \quad R(\alpha) \to R(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{и} \quad \rho(r) \to \frac{ec_0}{2\pi r}\exp\left\{-\frac{r}{R(0)}\right\};$$

$$\text{б)}\ \beta = \infty; \quad \alpha \gg 1; \quad R(\alpha) = \frac{3\pi}{2\alpha}\sqrt{\frac{1}{2}};$$

$$\text{в)}\ \alpha \ll 1; \quad \beta \gg 1; \quad R(\alpha, \beta) = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(1 - \frac{2\alpha}{81} - \frac{1}{4\beta} - \frac{2\alpha}{9\beta}\right);$$

$$\text{г)}\ \beta \ll 1; \quad \alpha\sqrt{\beta} \ll 1;$$

$$R(\alpha, \beta) = \sqrt{\beta/2\pi}, \quad \text{если} \quad \frac{\beta k_0^2}{2} \gg 1, \ k_0 \to \infty;$$

$$R(\alpha, \beta) = \frac{\pi}{2k_0} = \frac{a}{4}, \quad \text{если} \quad \beta \to 0, \ \frac{\beta k_0^2}{2} \to 0.$$

Из этих формул видно, что радиус полярона уменьшается с ростом параметра связи α и температуры и что при очень высоких температурах условие $R > a$ не выполняется. Поведение $R(\alpha, \beta)$ при $\beta \ll 1$

указывает на то, что при высоких температурах фононные методы с большим волновым вектором играют важную роль в электрон-фононном взаимодействии.

Рассмотрим теперь вычисление числа фононов, возбужденных взаимодействием, и их распределение по импульсу. В отсутствие электрон-фононного взаимодействия число фононов с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ определяется распределением Бозе — Эйнштейна:

$$N_{\mathbf{k}}^0 = \frac{1}{e^{\beta}-1}.$$

Взаимодействие электрона с поляризацией решетки приводит к дополнительному возбуждению оптических фононов. Имеем:

$$N_{\mathbf{k}} \equiv \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = N_{\mathbf{k}}^0 + \delta N_{\mathbf{k}}; \quad \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\mathrm{Sp}\, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta \hat{H}}}. \tag{42}$$

Чтобы найти $N_{\mathbf{k}}$, рассмотрим несколько более общий гамильтониан

$$\hat{H}_1 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})\, \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} Q(k)\, (\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}}^+)\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{43}$$

С помощью теоремы Фейнмана—Хеллмана можно записать

$$N_{\mathbf{k}} = \left\langle \frac{\delta \hat{H}_1}{\delta\omega(\mathbf{k})} \right\rangle_{\omega(\mathbf{k})=1} = \frac{\delta\Phi_1}{\delta\omega(\mathbf{k})}\bigg|_{\omega(\mathbf{k})=1}, \tag{44}$$

где $\Phi_1 = -\frac{1}{\beta} \ln \mathrm{Sp}\, e^{-\beta \hat{H}_1}$ согласно (6), (10) и (11) дается выражением

$$\Phi_1 = \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{1}{1-e^{-\beta\omega(\mathbf{k})}} - \frac{1}{\beta} \ln \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S_1[\mathbf{x}]}, \tag{45}$$

где $S_1[\mathbf{x}]$ получается от $S[\mathbf{x}]$ заменой $C(\tau)$ на $C_{\omega(\mathbf{k})}(\tau)$. Дифференцируя Φ_1 по $\omega(\mathbf{k})$, получаем

$$\delta N_{\mathbf{k}} = Q^2(k) \int\limits_0^{\beta/2} d\tau \left[\tau C(\tau) - \frac{1}{2} \frac{\beta\, \mathrm{sh}\,\tau}{\mathrm{sh}^2 \beta/2} \right] \langle e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)]} \rangle_S, \tag{46}$$

где $\tau = |\tau_1 - \tau_2|$. Поскольку $\langle e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)]} \rangle_S$ зависит только от $|\mathbf{k}|$, то для плотности распределения по импульсу возбужденных фононов имеем:

$$n_k = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi^2 k^2 \delta N_{\mathbf{k}};$$

$$n_k = \frac{\sqrt{2}\alpha}{\pi} \int\limits_0^{\beta/2} d\tau \left[\tau C(\tau) - \frac{1}{2} \frac{\beta\, \mathrm{sh}\,\tau}{\mathrm{sh}^2 \beta/2} \right] \langle e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)]} \rangle_S. \tag{47}$$

Суммарное число возбужденных фононов ΔN определяется интегрированием n_k по всем значениям k.

Выражения (46) и (47) точные и позволяют определить n_k в зависимости от α и β. Отметим, что $n_0 = \sqrt{2}\alpha/\pi$ для всех α и β. Чтобы вычислить n_k в приближении Фейнмана, следует заменить $\langle e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)]}\rangle_S$ на функцию $J_{\mathbf{k}}(\tau)$ (26). Проводя выкладки, получаем

$$\left.\begin{aligned} n_k &= \frac{\sqrt{2}\,\alpha}{\pi}\int_0^{\beta/2} d\tau\left[\tau C(\tau)-\frac{1}{2}\,\frac{\beta\,\mathrm{sh}\,\tau}{\mathrm{sh}^2\beta/2}\right]e^{-\frac{k^2}{2\nu^2}f(\tau)};\\ N &= \frac{\alpha\nu}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\beta/2} d\tau\left[\tau C(\tau)-\frac{1}{2}\,\frac{\beta\,\mathrm{sh}\,\tau}{\mathrm{sh}^2\beta/2}\right]f^{-1/2}(\tau). \end{aligned}\right\} \qquad (48)$$

Рассмотрим некоторые предельные случаи. При нулевой температуре:

$$\left.\begin{aligned} n_k &= \frac{\alpha\sqrt{2}}{\pi}\,e^{-\frac{k^2}{2}\frac{\nu^2-1}{W\nu^3}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(1-\frac{1}{\nu^2}\right)^n k^{2n}}{(2W\nu)^n\,n!}\,\frac{1}{\left(1+\frac{k^2}{2\nu^2}+nW\nu\right)^2};\\ n_k &\simeq \frac{\alpha\sqrt{2}}{\pi}\,\frac{e^{-\mu^2\frac{k^2}{2\nu^2}}}{\left(1+\frac{k^2}{2\nu^2}\right)^2};\\ \Delta N &\simeq \alpha\nu\left\{\left(\frac{1}{2}-\mu^2\right)[1-erf(\mu)]\,e^{\mu^2}+\frac{\mu}{\sqrt{\pi}}\right\};\\ \mu &= \frac{\nu^2-1}{W\nu}. \end{aligned}\right\} \qquad (49)$$

С ростом α растет число коротковолновых фононов, возбужденных взаимодействием. При $\alpha\to 0$ ΔN стремится к известному значению $\alpha/2$, а при $\alpha\to\infty$ $\Delta N\to 4\alpha^2/3\pi$. С увеличением температуры функция распределения n_k становится более пологой — возбуждается все большее число коротковолновых фононов. В пределе $\beta\to 0$, $\alpha\sqrt{\beta}\to 0$ имеем: $n_k\Rightarrow\alpha\sqrt{2}/\pi$; $\Delta N\to\alpha\sqrt{2}k_0/\pi$.

3. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ПОЛЯРОНА

Эффективная масса полярона при нулевой температуре. При нулевой температуре, когда электрон-фононная система находится в состоянии с наинизшей энергией и число реальных фононов равно нулю, вся энергия и весь импульс системы переносятся поляроном. В этом случае эффективная масса полярона определяется формулой (4) или (5). Возможны и другие определения эффективной массы: через сдвиг энергии основного состояния полярона в слабом магнитном поле [65—69]. Такие «магнитные» массы рассматриваются в разд. 4.

Для вычисления эффективной массы основного состояния полярона в рамках функционального вариационного подхода Фейнман [11] предположил, что энергию полярона, движущегося со скоростью $\mathbf{u}$, можно найти обобщением формулы (12) на случай, когда интеграл берется по всем траекториям $\mathbf{x}(\tau)$ с граничными условиями $\mathbf{x}(0)=0$, $\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{u}\beta$. Таким образом:

$$E(\mathbf{u}) = E(\alpha) + \frac{1}{2} m_\Phi^* \mathbf{u}^2 + \ldots = -\lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} \int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{u}\beta} D\mathbf{x}\, e^{-S_\Phi(\mathbf{x})}. \tag{50}$$

Приближенное вычисление интеграла по траекториям в (50) приводит к выражению:

$$m_\Phi^* = 1 + \frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \int\limits_0^\infty d\tau\, e^{-\tau}\tau^2 \left[\tau + \frac{v^2-1}{Wv}\left(1 - e^{-Wv\tau}\right)\right]^{-3/2}. \tag{51}$$

При подстановке в (51) оптимальных значений параметров v и W можно оценить эффективную массу m_Φ^* во всем интервале значений параметра связи α. В предельных случаях слабой и сильной связи получаем:

$$m_\Phi^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{2\alpha^2}{81}, \quad \alpha \ll 1;$$

$$m_\Phi^* = \left(\frac{4\alpha^2}{9\pi}\right)^2 - \frac{4\alpha^2}{\pi}\left(1 + 2\ln 2 + \tilde{C}\right), \quad \alpha \gg 1.$$

В главном порядке по α эти формулы совпадают с результатами теории возмущений ($\alpha \ll 1$) и адиабатического приближения ($\alpha \gg 1$). Коэффициент при α^2 в формуле для m_Φ^* при $\alpha \ll 1$ равен 0,024691. Это близко к точному значению четвертого порядка теорий возмущений [47, 48]: $m^*(\alpha) = 1 + \frac{\alpha}{6} + 0{,}023676\alpha^2$.

Численные расчеты по формуле (50) при $\alpha = 3, 5, 7, 9, 11$ проведены в [44]. Показано, что m_Φ^* немного больше оптимального значения эффективной массы линейной модели $m_0^* = v^2$, но разница между этими величинами меньше 10% и уменьшается с ростом α.

Определение эффективной массы m_Φ^* по (50) интуитивно разумно и приводит к общепринятым результатам в хорошо известных предельных случаях. Однако априори не ясно, совпадают ли масса m_Φ^*, даваемая (50), и эффективная масса m^*, определенная формулой (4) (см. также [70]). Это усугубляется еще и тем, что непосредственное обобщение определения (50) на случай конечных температур заменой функционала $S_\Phi[\mathbf{x}]$ на $S[\mathbf{x}]$ (10) приводит к нефизическому результату для эффективной массы.

В работе [20] вычислена эффективная масса m^* с помощью асимптотики свободной энергии при $\beta \to \infty$. Отметим здесь, что способ определения $m^*(\alpha)$, использующий асимптотику, не позволяет найти зависимость эффективной массы полярона от температуры.

Эффективную массу основного состояния полярона ($T = 0$) можно также вычислить на основе точного континуального представления для наинизшей энергии системы при фиксированном значении полного импульса $E(\eta_0, \mathbf{P})$ [71, 72]:

$$E(\eta_0, \mathbf{P}) = E(\alpha) + \frac{P^2}{2m^*(\alpha)} + \ldots = -\lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} \ln \operatorname*{Sp}_{\mathbf{P}} e^{-\beta\hat{H}}, \qquad (52)$$

где символом $\operatorname*{Sp}_{\mathbf{P}}$ означают усреднение по полному набору состояний гамильтониана (3) при фиксированном $\mathbf{P}$. Выражение (52) может быть тоже записано в виде

$$E(\eta_0, \mathbf{P}) = -\lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} \ln \int \frac{d^3\mathbf{R}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}} \operatorname{Sp}\{e^{-\beta\hat{H} - i\mathbf{R}\cdot\hat{\mathbf{P}}}\} \qquad (53)$$

и приводит к следующему континуальному представлению для $E(\eta_0, \mathbf{P})$:

$$E(\eta_0, \mathbf{P}) = E(\alpha) + \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*(\alpha)} + \ldots =$$
$$= -\lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} \ln \int \frac{d^3\mathbf{R}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{P}} \int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{R}} D\mathbf{x}\, e^{-S_\Phi[\mathbf{x}]}. \qquad (54)$$

Эквивалентное выражение для $E(\eta_0, \mathbf{P})$ было получено впервые в [71]. Вычисление по формуле (54) в рамках вариационного метода Фейнмана приводит к формуле (51) для эффективной массы $m^*(\alpha)$ [71]. Отметим, однако, что определение эффективной массы полярона через разложение его энергии по степеням полного импульса $\mathbf{P}$ не допускает, по нашему мнению, непосредственного обобщения на случай конечных температур. При $T \neq 0$ это разложение, строго говоря, и не имеет смысла. При $T \neq 0$ определенная доля полного импульса системы переносится реальными фононами и нельзя отождествить $\mathbf{P}$ с импульсом полярона.

В [49, 50] вычислили фейнмановскую эффективную массу (50) с помощью предложенного или обобщенного вариационного функционала. Их результат отличается от (51) примерно на 0,4% при $\alpha = 3$ и на 1 % при $\alpha = 5$. Как показано в [44], учет конечности зоны Бриллюэна при $\alpha = 5$ и $0 \leqslant a \leqslant R_0/0{,}9$ приводит к изменению эффективной массы $m_\Phi^* \sim 4\%$ и увеличивает разницу между m_Φ^* и m_0^*.

Определение эффективной массы полярона при конечных температурах. Температурная зависимость эффективной массы полярона изучалась в работах [33, 43, 62, 64, 73—80]. Как уже было сказано, определения (50), (51) и (54) не допускают непосредственно обобщения на случай конечных температур, и сам вопрос определения эффективной массы полярона при температуре, отличной от нуля, представляется довольно спорным. Это обусловлено, конечно, тем, что при $T = 0$ электрон взаимодействует с «вакуумом» решетки (нулевыми колебаниями). При $T \neq 0$ налицо реальные фононы и необходимо проявлять аккуратность, определяя характеристики полярона в этой ситуации [64]. Стандартный подход для вычисления энергии, эффективной массы и времени жизни квазичастиц при конечных температурах через одноэлектронную функцию Грина встречает серьезные трудности, когда применяется к задаче о поляроне. Трудности связаны с учетом трансляционной инвариантности системы при формулировке разных аппроксимаций [81], с одной стороны, методом функции Грина более или менее удалось продвинуться в вычислении в первом порядке теории возмущений по α. Параметром разложения оказывается не α, а $\alpha/(1 - e^{-\beta})$, так что область применимости полученных выражений сжимается с ростом температуры.

С другой — температурная зависимость эффективной массы полярона представляет несомненный физический интерес, в частности, в связи с интерпретацией экспериментов по циклотронному резонансу в полярных кристаллах [82—91]. Измерения, проведенные в кристаллах CdTe [84] и Ag Br [85, 86] в слабых магнитных полях ($\omega_c \ll 1$, где ω_c — частота циклотронного резонанса), ясно показывают, что циклотронная масса растет с температурой при низких температурах ($e^{\beta} \gg 1$). Наблюдается ли чисто поляронный эффект или это является следствием наличия примесей, не вполне ясно [85, 86, 91]. Так или иначе, имеет смысл детальнее обсудить различные подходы к определению и вычислению эффективной массы.

Большинство теоретических работ, посвященных вычислению эффективной массы полярона при конечных температурах, можно отнести к одной из следующих групп.

а. Эффективная масса полярона оценивается через эффективную массу аппроксимирующей модели [например, $m_0^* = \nu^2$ в случае модели (21)], использованной для вычисления тех или иных физических величин (свободная энергия в [33] или коэффициент электропроводности в [75]) при оптимальных значениях параметров модели. Недостаток такого подхода состоит в том, что не ясно, как вычислить следующие поправки, чтобы выяснить, является ли масса модели хорошим приближением к значению эффективной массы полярона.

б. Эффективная масса полярона определяется через изменение свободной энергии или собственной энергии полярона в слабом внешнем поле. При этом в [77, 78] предполагалось, что в присутствии электрического поля напряженностью $\mathbf{E}$ система находится в гиббсовском состоянии термодинамического равновесия, описываемом статистическим оператором $\exp\{-\beta(\hat{H} + e\mathbf{E}\cdot\mathbf{r})\}$. Это довольно сильное упрощение задачи полярона в электрическом поле. Отметим в этой связи, что исследования точного стационарного решения уравнения Больцмана [92] показывают, что при слабых полях функция распределения импульса резко отличается от максвелловского вида. Такое обстоятельство затрудняет физическую интерпретацию «инертной массы» полярона, вычисленной в [77, 78]. «Магнитные массы», определяемые в связи с рассмотрением поведения полярона в магнитном поле, обсуждаются в разд. 4 [67, 68].

в. Эффективная масса полярона определяется через свободную энергию или среднюю энергию системы в смешанном состоянии при фиксированном среднем значении полного импульса [43, 62, 64, 73—80]. При таком подходе возникает следующий вопрос: какая часть энергии взаимодействия или полного импульса системы при конечных температурах относится к полярону и какая часть принадлежит фононной подсистеме? Как уже обсуждалось выше, в связи с определением энергии полярона ответ на этот вопрос в некоторой мере произволен, что приводит к определенному произволу и в результатах. Конкретные формулы для эффективной массы при конечных температурах получены в работах [43, 62, 73—80]. Большинство из них предсказывает, что $M(\alpha, \beta) \to 1$ в высокотемпературном пределе $\beta \to 0$ [62, 73—80]. В случае низких температур из результатов работ [33, 43, 76] следует, что $M(\alpha, \beta)$ растет с температурой при низких температурах, а согласно работам [62, 73, 77—80] эффективная масса полярона монотонно убывает при $0 \leqslant T < \infty$.

Чтобы определить эффективную массу полярона, необходимо знать дополнительную энергию, которую приобретает система, когда частица движется с малой, но отличной от нуля средней скоростью $\mathbf{v}$. Такова картина, которая наблюдается в системе отсчета S', движущейся относительно S со скоростью $-\mathbf{v}$. В S' гамильтониан $\hat{H}'$, статистический оператор $\hat{\rho}'$, свободная энергия Φ' и среднее значение $\mathbf{P}'$ полного импульса системы даются выражениями [64]:

$$\left.\begin{aligned} &\hat{H}' = \hat{H} - \mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{P}}; \quad \hat{\rho}' = \exp(-\beta\hat{H}'); \quad \Phi' = -\frac{1}{\beta}\ln \operatorname{Sp}\hat{\rho}'; \\ &\mathbf{P} = \frac{\operatorname{Sp}\hat{\mathbf{P}}\hat{\rho}'}{\operatorname{Sp}\hat{\rho}'}. \end{aligned}\right\} \qquad (55)$$

Теперь, чтобы найти свободную энергию полярона F' и среднее значение импульса полярона $\mathbf{\Pi}'$, мы должны, как и в (6), вычесть из Φ и $\mathbf{P}'$ вклад фононного поля в отсутствие взаимодействия в системе S'. Имеем:

$$\left.\begin{aligned} &F'(\alpha, \beta, \mathbf{v}) = \Phi'(\alpha, \beta, \mathbf{v}) - \\ &-\frac{1}{\beta}\sum_{\mathbf{k}} \ln\frac{1}{1-e^{-\beta\omega'_{\mathbf{k}}}} = -\frac{1}{\beta}\ln\frac{\operatorname{Sp} e^{-\beta(\hat{H}-\mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{P}})}}{Z_{\mathrm{ph}}(\mathbf{v})}; \\ &\mathbf{\Pi}(\alpha, \beta, \mathbf{v}) = \mathbf{P}' - \sum_{\mathbf{k}}\frac{\mathbf{k}}{e^{\beta\omega'_{\mathbf{k}}}-1} = -\frac{\partial}{\partial\mathbf{v}}F'(\alpha, \beta, \mathbf{v}), \end{aligned}\right\} \qquad (56)$$

где $\omega_k' = 1 - \mathbf{k}\cdot\mathbf{v}$ — сдвинутые за счет доплеровского эффекта частоты фононов в системе S'. Предполагается, что $\mathbf{v}$ достаточно мала, чтобы в первой зоне Бриллюэна $\omega_{\mathbf{k}}' > 0$. Статистическая сумма фононного поля в системе S' имеет вид:

$$Z_{\mathrm{ph}}(\mathbf{v}) = \prod_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 - e^{\beta\omega_{\mathbf{k}}'}}.$$

Если теперь определить эффективную массу полярона $M(\alpha, \beta)$ через разложение $F'(\alpha, \beta, \mathbf{v})$ по степеням $\mathbf{v}$:

$$F'(\alpha, \beta, \mathbf{v}) = F(\alpha, \beta) - \frac{1}{2} M(\alpha, \beta)\,\mathbf{v}^2 - \ldots, \tag{57}$$

где $F(\alpha, \beta)$ — свободная энергия определена формулой (6), то из (56) следует, что

$$\mathbf{\Pi}'(\alpha, \beta, \mathbf{v}) = M(\alpha, \beta)\,\mathbf{v} + \ldots \tag{58}$$

Таким образом, изменение скорости частицы на малую величину приводит к изменению импульса полярона на величину $M(\alpha, \beta)\,\mathbf{v}$. Это позволяет придавать определенный физический смысл «термодинамической» массе $M(\alpha, \beta)$. Следует ожидать, что при воздействии слабой внешней силы, медленно меняющейся во времени по сравнению с характерным периодом установления термодинамического равновесия в системе, полярон ведет себя как квазичастица массы $M(\alpha, \beta)$ с некоторым временем жизни τ (при низких температурах τ очень велико). Такая картина реализуется, например, при воздействии слабого внешнего электромагнитного поля, при условии $\omega \ll 1$ (см. разд. 6). С помощью формул (2), (4), (5), (56) и (57) нетрудно доказать, что [64]

$$\lim_{\beta\to\infty} M(\alpha, \beta) = m^*(\alpha). \tag{59}$$

Уместно отметить, что уже в работе [6] Боголюбовым было подчеркнуто, что эффективную массу надо определять как коэффициент при v^2 в выражении для энергии. Для линейной модели (18) использованная выше процедура приводит к правильному значению эффективной массы $m_0^* = \nu^2$. Действительно, из (21), (23) и (24) следует, что:

$$F_0' = -\frac{1}{\beta} \ln \frac{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mathbf{v}\cdot\hat{\mathbf{P}})}}{\prod_{\mathbf{k}} (1 - e^{-\beta W})^{-1}} = F_0(\beta) - \frac{1}{2} m_0^* \mathbf{v}^2. \tag{60}$$

Представление в виде континуального интеграла. Вариационный метод. Согласно определению (57) вычисление эффективной массы $M(\alpha, \beta)$ сводится к вычислению величины $F'(\alpha, \beta, \mathbf{v})$, имеющей смысл свободной энергии полярона, движущегося со скоростью $\mathbf{v}$. Формально можно ввести мнимую скорость $\mathbf{v} = i\mathbf{u}$ и рассмотреть величину:

$$F(\alpha, \beta, \mathbf{u}) = F(\alpha, \beta) + \frac{1}{2} M(\alpha, \beta)\,\mathbf{u}^2 + \ldots =$$

$$= -\frac{1}{\beta} \ln \frac{\operatorname{Sp} e^{-\beta[\hat{H} - i\mathbf{u}\cdot\mathbf{P}]}}{Z_{\text{кр}}(i\mathbf{u})}. \qquad (61)$$

Проиллюстрируем теперь на примере величины $F(\alpha, \beta, \mathbf{u})$ другой метод получения континуальных представлений для величин электрон-фононной системы. С этой целью напишем гамильтониан (3) в виде

$$H = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{v}}^2 + \hat{H}_0 + \hat{H}_i, \qquad (62)$$

где $\hat{\mathbf{v}} = \mathbf{P} - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}\hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}\hat{b}_{\mathbf{k}}$; $\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}\hat{b}_{\mathbf{k}}$; $\hat{H}_i = \sum_{\mathbf{k}} Q(k)(\hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^{+})$. Тогда:

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta(\hat{H} - i\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{P}})} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{P} e^{i\beta\mathbf{u}\cdot\mathbf{P}} \operatorname{Sp}_{\mathbf{P}} e^{-\beta\hat{H}_0}\hat{\sigma}(\beta), \qquad (63)$$

где $\hat{O}(\tau) = e^{\hat{H}_0\tau} O e^{-\hat{H}_0\tau}$; $\hat{b}_{\mathbf{k}}(\tau) = \hat{b}_{\mathbf{k}} e^{-\tau}$; $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}(\tau) = \hat{b}_{\mathbf{k}}^{+} e^{\tau}$. Теперь с помощью тождества

$$\hat{\sigma}(\beta) = T \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \left[\hat{H}_i(\tau) + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{v}}^2(\tau)\right]\right\} =$$

$$= \frac{\int D\eta\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \eta^2(\tau)}\, T \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau\, [\hat{H}_i(\tau) + i\eta(\tau)\cdot\hat{\mathbf{v}}(\tau)]\right\}}{\int D\eta\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \eta^2(\tau)}}, \qquad (64)$$

учитывая то, что $\mathbf{P}$ коммутирует с $\hat{H}_0$, получаем

$$\operatorname{Sp} e^{-\beta(\hat{H} - i\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{P}})} = \int D\eta\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau \eta^2(\tau)}\, \delta\left[\int_0^\beta d\tau \eta(\tau) - \mathbf{u}\beta\right] \prod_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}}(\eta),$$

где

$$W_{\mathbf{k}}(\eta) = \operatorname{Sp}\left[e^{-\beta\hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}\hat{b}_{\mathbf{k}}} T \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau\, [Q(k)\hat{b}_{\mathbf{k}}(\tau) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + Q(k)\hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}(\tau) - i\mathbf{k}\cdot\eta \hat{b}_{\mathbf{k}}^{+}(\tau)\hat{b}_{\mathbf{k}}(\tau)]\right\}\right]. \qquad (64a)$$

С учетом результатов [93] $W_{\mathbf{k}}(\eta)$ может быть записан в виде

$$\left.\begin{aligned} W_{\mathbf{k}}(\eta) &= \frac{1}{1-e^{-\beta\lambda_{\mathbf{k}}}} \exp R_{\mathbf{k}}(\eta); \\ \lambda_{\mathbf{k}}(\eta) &= 1 - i\frac{k}{\beta}\int\limits_0^\beta d\tau\eta(\tau), \end{aligned}\right\} \tag{64б}$$

где

$$R_{\mathbf{k}}(\eta) = Q^2(k)\left\{\int\limits_0^\beta d\tau_1 \int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{\tau_2-\tau_1+i\mathbf{k}\cdot\int_{\tau_2}^{\tau_1} d\tau\eta(\tau)} + \right.$$

$$\left. + \int\limits_0^\beta d\tau_1 \int\limits_0^\beta d\tau_2 \frac{e^{\tau_1-\tau_2+i\mathbf{k}\cdot\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\sigma\eta(\sigma)}}{e^{\beta\lambda_{\mathbf{k}}}-1}\right\}.$$

Теперь делая замену функциональных переменных $\eta(\tau) = \dot{\mathbf{x}}(\tau)$, с учетом определения (63) приходим к результату, полученному в [64]:

$$F(\alpha, \beta, \mathbf{u}) = -\frac{1}{2}\ln \int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{u}(\beta)} D\mathbf{x} \exp\{-S[\mathbf{x}, \mathbf{u}]\}, \tag{65}$$

где $S[\mathbf{x}, \mathbf{u}] = \frac{1}{2}\int\limits_0^\beta d\tau\dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V[\mathbf{x}, \mathbf{u}];$

$$V[\mathbf{x}, \mathbf{u}] = -\sum_{\mathbf{k}} Q^2(k)\int\limits_0^\beta d\tau_1 \int\limits_0^\beta d\tau_2 \times$$

$$\times\left[\frac{e^{\tau_2-\tau_1}}{1-e^{-\beta(1-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u})}} + \frac{e^{\tau_1-\tau_2}}{e^{\beta(1+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u})}-1}\right] e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)]}. \tag{66}$$

При $\beta\to\infty$ формулы (65), (66) приводят к выражению Фейнмана (50), т. е.:

$$\lim_{\beta\to\infty} F(\alpha, \beta, \mathbf{u}) = E(\mathbf{u}).$$

Тогда $\lim\limits_{\beta\to\infty} M(\alpha, \beta) = m^*_\Phi$, откуда с учетом (59) следует, что $m^*_\Phi = m^*$. Для линейной модели (18) величина, аналогичная $F(\alpha, \beta, \mathbf{u})$, определяется выражением

$$F_0(\beta, \mathbf{u}) = -\frac{1}{\beta}\ln\frac{\operatorname{Sp} e^{-\beta(\hat{H}_0 - i\mathbf{u}\cdot\hat{\mathbf{P}}_0)}}{\prod\limits_{\mathbf{k}}\left(\frac{1}{1-e^{-\beta W}}\right)} = F_0(\beta) + \frac{1}{2}m_0^*\mathbf{u}^2 \tag{67}$$

и для нее нетрудно получить следующее континуальное представление [38]:

$$F_0(\beta, \mathbf{u}) = -\frac{1}{\beta}\ln \int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{u}\beta} D\mathbf{x}e^{-S_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}]}, \tag{68}$$

где

$$\left.\begin{aligned} S_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}] &= \frac{1}{2}\int\limits_0^\beta d\tau\dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}];\\ V_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}] &= \frac{2C}{W^2}\int\limits_0^\beta d\tau_1\int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2 C_W(\tau_1-\tau_2)\,\dot{\mathbf{x}}(\tau_1)\,\dot{\mathbf{x}}(\tau_2). \end{aligned}\right\} \tag{69}$$

Интегрируя в (69) по частям, можно записать $V_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}]$ в виде [38]

$$V_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}] = C\sum_{n=0}^{\infty}\int\limits_0^\beta d\tau_1\int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2\{e^{-\beta Wn-W(\tau_1-\tau_2)}\,|\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)-\mathbf{u}\beta n|^2 +$$

$$+ e^{-\beta W(n+1)+W(\tau_1-\tau_2)}|\mathbf{x}(\tau_1)-\mathbf{x}(\tau_2)-\mathbf{u}\beta(n+1)|^2\}.$$

Последнее выражение можно получить из (66) таким же образом, как функционал $S_0[\mathbf{x}]$ получался из $S[\mathbf{x}]$ в разд. 1.

Отметим, что функционалы $S[\mathbf{x}, \mathbf{u}]$ и $S_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}]$ действительны при действительном $\mathbf{u}$. Отсюда следует

$$F(\alpha, \beta, \mathbf{u}) \leqslant F_0(\beta, \mathbf{u}) + \frac{1}{\beta}\langle S[\mathbf{x}, \mathbf{u}] - S_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}]\rangle_{S_0}^{\mathbf{u}}, \tag{70}$$

где

$$\langle A[\mathbf{x}, \mathbf{u}]\rangle_{S_0}^{\mathbf{u}} \equiv \frac{\int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{u}\beta} D\mathbf{x}e^{-S[\mathbf{x}, \mathbf{u}]}A[\mathbf{x}, \mathbf{u}]}{\int\limits_{\mathbf{x}(\beta)=\mathbf{x}(0)+\mathbf{u}\beta} D\mathbf{x}e^{-S[\mathbf{x}, \mathbf{u}]}}.$$

Мы видим, что эффективная масса полярона равна массе линейной модели m_0^* плюс некоторая поправка, даваемая слагаемым $\langle S[\mathbf{x}, \mathbf{u}] - S_0[\mathbf{x}, \mathbf{u}]\rangle_{S_0}^{\mathbf{u}}$. Таким образом, результат [33] здесь соответствует нулевому приближению.

В случае модели (25), когда электрон взаимодействует с распределением осцилляторов всех возможных частот, функционал $S_0[G, \mathbf{x}, \mathbf{u}]$ имеет вид:

$$S_0[G, \mathbf{x}, \mathbf{u}] = \frac{1}{2}\int\limits_0^\beta d\tau\dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + V_0[G, \mathbf{x}, \mathbf{u}];$$

$$V_0[G, \mathbf{x}, \mathbf{u}] = 2\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dW}{W^2}G(W)\int\limits_0^\beta d\tau_1\int\limits_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{-W(\tau_1-\tau_2)}\dot{\mathbf{x}}(\tau_1)\,\dot{\mathbf{x}}(\tau_2)$$

и эффективная масса модели дается выражением [38]

$$m_0^*(G) = 1 + 4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dW}{W^3} G(W).$$

Зависимость эффективной массы полярона от температуры. Вычисление континуальных интегралов, фигурирующих в (70), приводит к выражению:

$$F(\alpha, \beta, \mathbf{u}) \leqslant \frac{3}{2\beta} \ln \frac{2\pi\beta}{\Omega^{2/3}} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 - \frac{3}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \left[1 - \frac{(i\omega_n)^2}{Z_0(i\omega_n)} + \ln \frac{(i\omega_n)^2}{Z_0(i\omega_n)} \right] - \\ - \sum_{\mathbf{k}} Q^2(k) \int_0^{\beta/2} d\tau C_{1-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}}(\tau) e^{-\beta \frac{k^2}{2} \Phi(\tau)}; \tag{70a}$$

$$\Phi(\tau) = -\frac{4}{\beta^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1-\cos\omega_n\tau}{Z_0(i\omega_n)},$$

$$Z_0(\omega) = (\omega + i\varepsilon)^2 \left\{ 1 + 4 \int_{-\infty}^{\infty} dW \frac{P}{W} \frac{G(W)}{W^2 - (\omega + i\varepsilon)^2} \right\}.$$

Отсюда для эффективной массы $M(\alpha, \beta)$ следует:

$$M(\alpha, \beta) = 1 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2 Q^2(k)}{3} \int_0^{\beta/2} d\tau e^{-\beta \frac{k^2}{2} \Phi(\tau)} \times \\ \times \left\{ \tau^2 C(\tau) - \frac{2\beta\tau}{(e^\beta - 1)(1 - e^{-\beta})} (e^\tau - e^{-\tau}) + \beta^2 \frac{(e^\beta + 1)(e^\tau + e^{-\tau})}{(1 - e^{-\beta})(e^\beta - 1)^2} \right\}. \tag{71}$$

Рассмотрим на основе (71) некоторые предельные случаи.

а. Случай низких температур. При $e^{-\beta} \ll 1$ в континуальном приближении получаем [43]:

$$M(\alpha, \beta) = 1 + \frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\beta/2} d\tau e^{-\tau} \tau^2 \times \\ \times \left[\tau \left(1 - \frac{\tau}{\beta} \right) + \frac{v^2 - 1}{Wv} (1 - e^{-Wv\tau}) \right]^{-3/2}. \tag{72}$$

Формула (72) является обобщением результата Фейнмана (51) на случай низких температур. С учетом (29) и (30) для очень низких температур имеем [43]:

$$\left. \begin{aligned} M(\alpha, \beta) &= 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{3}{8} \frac{\alpha}{\beta} + \frac{2}{81} \alpha^2 + 0{,}235 \frac{\alpha^2}{\beta}, \quad \alpha < 1, \quad \beta \gg 1; \\ M(\alpha, \beta) &= \left(\frac{4\alpha^2}{9\pi} \right)^2 - \frac{4\alpha^2}{3\pi} \left(1 + 2\ln 2 + \widetilde{C} - \frac{9}{\beta} \right), \quad \alpha \gg 1, \quad \beta \gg 1. \end{aligned} \right\} \tag{73}$$

Формулы (73) показывают, что эффективная масса полярона $M(\alpha, \beta)$ растет с температурой при низких температурах. Такая зависимость определяется непараболичностью закона дисперсии полярона $E(\eta_0, \mathbf{P})$.

В работах [43, 82, 94] проведено сравнение относительного сдвига эффективной массы полярона, предсказанного формулой (73), с экспериментальной температурной зависимостью циклотронных масс, которая наблюдается в полярных кристаллах при $e^{-\beta} \ll 1$ и $\omega_c \ll 1$. В CdTe ($\alpha = 0{,}4$ [88]; $\hbar\omega_0/k = 245$ К [83]), когда температура менялась от 4,2 до 60 К, сдвиг массы согласно формуле (73) равен 4%, а в эксперименте 5% [84]. В AgBr ($\alpha = 1{,}6$ [83]; $\hbar\omega_0/k = 190$ К [83]) наблюдался относительный сдвиг массы 5% в интервале от 4,2 до 19,1 К [85] и 2% от 17 до 23 К [86]. Формула (73) предсказывает соответственно 7 и 2%. Отметим, что при низких температурах эффективная масса намного более чувствительная к температуре, чем собственная энергия полярона, для которой первая температурная поправка порядка $\alpha\beta^{-2}$ [см. формулу (33)]. Поэтому никакого сдвига собственной энергии не наблюдалось в экспериментах по оптическому поглощению в AgBr от 4,2 до 40 К [95] (ожидаемый сдвиг около 3 мэВ [82], порядка экспериментальной погрешности). Если учитывать экспериментальную погрешность, влияние примесей, конечность магнитного поля и возможность учета членов более высокого порядка по α и β^{-1}, можно заключить, что формула (73) объясняет, в принципе, температурную зависимость циклотронной массы полярона. Аналитические выражения для эффективной массы полярона при $\beta \gg 1$ получены также в работах [67, 73, 74, 77, 79, 80].

б. Случай очень высоких температур. При $\beta \ll 1$, $\nu \to 1$ и формула (71) приводит к следующему результату:

$$M(\alpha, \beta) = 1 + \frac{16\alpha}{3\pi\beta}\left(\frac{k_0^2}{2}\right)^{1/2}\left[1 - {}_1F_1\left(1, \frac{3}{2}, -\frac{\beta k_0^2}{8}\right)\right]; \quad \alpha\sqrt{\beta} \ll 1, \tag{73a}$$

где ${}_1F_1(a, b, z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Как обычно, можно рассматривать два предельных случая:

$$\text{i)}\ \beta \ll 1;\ \beta\frac{k_0^2}{2} \gg 1;\ M(\alpha, \beta) = 1 + \frac{16\mu}{3\pi\beta}\left(\frac{k_0^2}{2}\right)^{1/2};$$

$$\text{ii)}\ \beta \gg 1;\ \frac{\beta k_0^2}{2} \ll 1;\ M(\alpha, \beta) = 1 + \frac{8\alpha}{9\pi}\left(\frac{k_0^2}{2}\right)^{3/2}.$$

Последнее выражение соответствует классическому пределу. Такое выражение для эффективной массы получается также вычислением $E(\mathbf{u})$ в классическом приближении, т. е. когда минимум функционала S_Φ ищется на траекториях, для которых выполняются условия

$$E_{\text{кл}}(\mathbf{u}) = \lim_{\beta\to\infty} \frac{1}{\beta} S[\mathbf{x}_{\text{кл}}, \mathbf{u}];$$
$$\delta S[x_{\text{кл}}, \mathbf{u}] = 0;\ \mathbf{x}_{\text{кл}}(0) = 0,\ \mathbf{x}_{\text{кл}}(\beta) = \mathbf{u}\beta. \tag{74}$$

Решение последнего уравнения имеет вид: $\mathbf{x}_{\text{кл}}(\tau) = \mathbf{u}\,\tau$. Отметим, что при $\beta \to 0$ эффективная масса $M(\alpha, \beta)$ стремится не к единице, а к ее классическому значению. Здесь справедливы те же соображения по поводу «раздевания» полярона, приведенные в разд. 1 в связи с высокотемпературным поведением энергии полярона. Отметим еще, что зависимость $M(\alpha, \beta)$ от k_0 при $\beta \ll 1$ согласуется с растущей ролью коротковолновых фононов в этом пределе, на которую указывает поведение радиуса полярона и распределения возбужденных фононов при высоких температурах. Формулы для эффективной массы полярона при $\beta \ll 1$ получены также в работах [67, 73, 77, 79, 80].

4. РАВНОВЕСНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛЯРОНА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Электрон-фононная система (1) в присутствии статического однородного магнитного поля напряженности $\mathbf{h}$ описывается гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\,\mathbf{A}\right)^2 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} Q(k)\,(\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^{+}_{-\mathbf{k}})\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \tag{75}$$

где $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{h} \times \mathbf{r})$ — векторный потенциал.

Метод континуального интегрирования применялся для изучения поведения полярона в магнитном поле в [65—69, 96]. Основной интерес представляет вычисление поляронной восприимчивости [65, 67, 69], энергии основного состояния и свободной энергии полярона в магнитном поле [66, 68, 96] и в определенных на их основе магнитных масс [65—67, 69]. В [96] предсказано существование фазового перехода первого рода от автолокализованного к свободному состоянию полярона под действием достаточно сильного магнитного поля.

Исходным пунктом для этих расчетов является континуальное представление для свободной энергии полярона в магнитном поле [65]:

$$\left.\begin{aligned} F(\alpha, \beta, \omega_c) &= -\frac{1}{\beta}\ln\frac{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}}}{Z_{\mathrm{ph}}} = -\frac{1}{\beta}\ln \int\limits_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}(\beta)} D\mathbf{x}\, e^{-S[\mathbf{x},\,\omega_c]};\\ S[\mathbf{x}, \omega_c] &= S[\mathbf{x}] + \frac{i\omega_c}{2}\int_0^\beta d\tau\,[x_1(\tau)\,\dot{x}_2(\tau) - \dot{x}_1(\tau)\,x_2(\tau)]. \end{aligned}\right\} \tag{76}$$

Здесь $S(\mathbf{x})$ определяется формулой (10), $\omega_c = eh/c$ и предполагается, что магнитное поле h направлено вдоль оси z. Отметим сразу, что хотя свободная энергия $F(\alpha, \beta, \omega_c)$ — действительная величина, функционал $S[\mathbf{x}, \omega_c]$ — комплексный. Поэтому доказательство вариационного принципа для свободной энергии с помощью неравенства Иенсена неприменимо к $F(\alpha, \beta, \omega_c)$. Ясно, что полная свободная энергия системы $-\frac{1}{\beta}\ln \operatorname{Sp} e^{-\beta\hat{H}}$ удовлетворяет неравенству Боголюбова [37], но неравенство типа (13) для $F(\alpha,\ \beta,\ \omega_c)$ до сих пор не удалось доказать.

Статическая восприимчивость $\chi(\alpha,\ \beta)$ определяется выражением:

$$\chi(\alpha,\ \beta)=-\left.\frac{\partial^2 F(\alpha,\ \beta,\ \omega_c)}{\partial\omega_c^2}\right|_{\omega_c=0}$$

при использовании (76)

$$\chi(\alpha,\ \beta)=-\frac{1}{\beta}\int\limits_0^\beta\int d\tau\, d\sigma\,[\langle x_1(\tau)\,\dot{x}_2(\tau)\,x_1(\sigma)\,\dot{x}_2(\sigma)\rangle_S-$$

$$-\langle x_1(\tau)\,\dot{x}_2(\tau)\rangle_S\,\langle x_1(\sigma)\,\dot{x}_2(\sigma)\rangle]. \tag{77}$$

Для вычисления $\chi(\alpha,\ \beta)$ в квадратичном приближении следует заменить в (77) функционал $S[\mathbf{x}]$ на $S_0[\mathbf{x}]$. Для квадратичного функционала $\langle x_1(\tau)\,\dot{x}_2(\tau)\rangle_{S_0}=0$ и приближенное выражение для $\chi(\alpha,\ \beta)$ имеет вид:

$$\chi(\alpha,\ \beta)=\frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\omega_n^2}{Z_0^2(i\omega_n)}. \tag{78}$$

Для свободной частицы $Z_0(i\omega_n)=(i\omega_n)^2$ и формула (78) приводит к известному результату $\chi_{00}(\beta)=\frac{1}{24}\beta$. Для линейной модели восприимчивость имеет вид:

$$\chi_0(\beta)=\frac{\beta}{24\nu^4}+\frac{1}{8W\nu^5}(\nu^2-1)(\nu^2+3)\operatorname{cth}\frac{\beta W\nu}{2}+\frac{\beta(\nu^2-1)}{16\nu^2}\operatorname{csch}^2\frac{\beta W\nu}{2}. \tag{79}$$

Низкотемпературный предел этой формулы был получен впервые в [65]. По аналогии с выражениями для восприимчивости свободной частицы и линейной модели в [65] магнитная масса полярона определялась выражением:

$$\frac{1}{m_H^2}=\lim_{\beta\to\infty}\left[\frac{\chi(\alpha,\ \beta)}{\chi_{00}(\beta)}\right]=\lim_{\beta\to\infty}\frac{24\chi(\alpha,\ \beta)}{\beta}. \tag{80}$$

Для полярона $Z_0(i\omega_n)$ определяется из вариационного принципа для свободной энергии уравнением (71). Если для решения этого уравнения методом последовательных приближений используем нулевое приближение, то для $Z_0(i\omega_n)$ в первом приближении получим

$$Z_0(i\omega_n)=(i\omega_n)^2-\frac{2}{3}\frac{\alpha\nu^3}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\beta/2}d\tau C(\tau)\,(1-\cos\omega_n\tau)\,f^{-3/2}(\tau).$$

Если теперь подставить это выражение в (78), а затем в (80) и учесть, что ряд в (78) равномерно сходится, получим:

$$m_h = m_\Phi^* = m^* = 1 + \frac{\alpha v^3}{\sqrt{\pi}} \int\limits_0^\infty \frac{d\tau\tau^2 e^{-\tau}}{\left[\tau + \frac{v^2-1}{Wv}\left(1 - e^{-Wv\tau}\right)\right]^{3/2}}. \tag{81}$$

Рассмотрим приближенное выражение для свободной энергии полярона в магнитном поле:

$$F(\alpha,\ \beta,\ \omega_c) = F_0(\alpha,\ \beta,\ \omega_c) + \frac{1}{\beta}\langle S - S_0\rangle_{S_0}. \tag{82}$$

В качестве аппроксимирующего функционала $S_0[\mathbf{x},\ \omega_c]$ с учетом симметрии задачи берем

$$S_0[\mathbf{x},\ \omega_c] = \frac{1}{2}\int\limits_0^\beta d\tau \dot{\mathbf{x}}^2(\tau) + \frac{i\omega_c}{2}\int\limits_0^\beta d\tau\,[x_1(\tau)\dot{x}_2(\tau) - \dot{x}_1(\tau)x_2(\tau)] +$$

$$+ \sum_{i=1}^{3}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dW G_i(W)\int\limits_0^\beta d\tau\int\limits_0^\tau d\sigma e^{-W(\tau-\sigma)}\,|x_i(\tau) - x_i(\sigma)|^2, \tag{83}$$

где $G_1(W) = G_2(W) = G_\perp(W)$; $G_3(W) = G_\parallel(W)$; $G_i(-W) = G_i(W)\,e^{-\beta W}$.

Однако следует отметить, является ли (82) верхней границей для истинной свободной энергии полярона при $\omega_c \neq 0$ — не ясно. Выражение для свободной энергии, вытекающее из (82) и (83), имеет вид:

$$F(\alpha,\ \beta,\ \omega_c) = \frac{3}{2\beta}\ln\frac{2\pi\beta}{\Omega^{2/3}} - \frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty}\ln\frac{\omega_n^4(i\omega_n)^2}{Z_\parallel(i\omega_n)\,[Z_\perp^2(i\omega_n) + \omega_n^2\omega_c^2]} -$$

$$-\frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\frac{\omega_n^2 + Z_\parallel(i\omega_n)}{Z_\parallel(i\omega_n)} + \frac{2Z_\perp(i\omega_n)\,[Z_\perp(i\omega_n) + \omega_n^2]}{Z_\perp^2(i\omega_n) + \omega_n^2\omega_c^2}\right\} -$$

$$-\sum_{\mathbf{k}} Q^2(k)\int\limits_0^{\beta/2} d\tau C(\tau)\exp\left\{-\frac{\beta}{2}\left[(k_1^2 + k_2^2)\Phi_\perp(\tau) + k_3^2\Phi_\parallel(\tau)\right]\right\}, \tag{84}$$

где

$$Z_{ii}(i\omega_n) = (i\omega_n)^2\left\{1 + 4\mathcal{F}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dW}{W}\,\frac{G_i(W)}{W^2 + \omega_n^2}\right\};$$

$$Z_{11} = Z_{22} = Z_\perp;\ Z_{33} = Z_\parallel;\ \Phi_\perp(\tau) = -\frac{2}{\beta^2}\sum_{n=1}^{\infty}(1 - \cos\omega_n\tau)\times$$

$$\times\left[\frac{1}{Z_\perp(i\omega_n) + i\omega_n\omega_c} + \frac{1}{Z_\perp(i\omega_n) - i\omega_n\omega_c}\right];$$

$$\Phi_\parallel(\tau) = -\frac{4}{\beta^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1 - \cos\omega_n\tau}{Z_\parallel(i\omega_n)}.$$

Выражение (84) совпадает с полученным в [68], а при

$$G_{\perp}(W') = G_{\parallel}(W') = \frac{C}{1-e^{-\beta W}}\left[\delta(W'-W) - \delta(W'+W)\right]$$

приводит к результату работы [65].

В случае слабого магнитного поля ($\omega_c \ll 1$) можно ожидать, что модель, приводящая к наилучшей оценке свободной энергии при $\omega_c = 0$, дает также хорошее приближение для $F(\alpha, \beta, \omega_c)$. В таком случае разложение (84) до второго порядка по ω_c приводит к выражению [67]

$$F(\alpha, \beta, \omega_c) = F(\alpha, \beta) + \frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty} \ln\left\{1 + \frac{\omega_n^2\omega_c^2}{Z_0^2(i\omega_n)}\right\}.$$

Отсюда при конечном β легко получить выражение (78) для восприимчивости [67].

Энергия основного состояния полярона в слабом магнитном поле имеет вид:

$$E(\alpha, \omega_c) = \lim_{\beta\to\infty} F(\alpha, \beta, \omega_c) = E(\alpha) + \Delta E(\alpha, \omega_c),$$

где $\Delta E(\alpha, \omega_c)$ в данном приближении дается формулой

$$\Delta E = \lim_{\beta\to\infty}\frac{1}{\beta}\sum_{n=1}^{\infty} \ln\left\{1 + \frac{\omega_n^2\omega_c^2}{Z_0(i\omega_n)}\right\}.$$

Для свободной частицы $\Delta E = \omega_c/2$ и для линейной модели $\Delta E = \omega_c/2\nu^2$. По аналогии можно определить еще одну магнитную массу m_Λ, определяющую перенормировку энергии первого уровня Ландау из-за электрон-фононного взаимодействия [66]

$$\Delta E = \omega_c/2m_\Lambda.$$

Насколько нам известно, доказательство того, что m_Λ равна по определению эффективной массе основного состояния полярона, не опубликовано, хотя из физических соображений следует ожидать их совпадение. В работе [67] доказано, что в квадратичном приближении

$$m_\Lambda = m_H = \lim_{\beta\to\infty}\frac{Z_0(i\omega_n)}{(i\omega_n)^2}.$$

Тогда, с учетом (81),

$$m_\Lambda = m_H = m_\Phi^* = m^*. \tag{85}$$

Формула (85) показывает, что последовательное вычисление в рамках квадратичного приближения, с учетом первой поправки к одноосцилляторной модели Фейнмана, приводит к совпадению всех этих масс.

В работе [96] для вычисления энергии основного состояния полярона в произвольном магнитном поле был использован функционал типа (83) при частном выборе

$$G_{\perp}(W)=\frac{C_{\perp}}{1-e^{-\beta W_{\perp}}}[\delta(W-W_{\perp})-\delta(W+W_{\perp})];$$

$$G_{\parallel}(W)=\frac{C_{\parallel}}{1-e^{-\beta W_{\parallel}}}[\delta(W+W_{\parallel})-\delta(W+W_{\parallel})];$$

$$C_{\parallel}=\frac{W^3_{\parallel}(\nu^2_{\parallel}-1)}{4};\quad C_{\perp}=\frac{W^3_{\perp}(\nu^2_{\perp}-1)}{4}. \qquad (86)$$

Авторы работы [96] предполагали, что полученные ими выражения для $E(\alpha, \omega_c)$ являются верхней границей для истинной энергии основного состояния полярона в магнитном поле и минимизировали его численным методом по отношению к параметрам $W_{\parallel}$, $\nu_{\parallel}$, $W_{\perp}$, $\nu_{\perp}$ в районе $\alpha > 4$ и $\omega_c > 2$. Они нашли, что при $\omega_c > 2{,}24$ производная $\frac{\partial E(\alpha, \omega_c)}{\partial \alpha}$ имеет скачок в точке $\alpha_c(\omega_c) > >4{,}21$, а при $\omega_c = 2{,}24$ и $\alpha_c = 4{,}21$ $\frac{\partial E(\alpha\omega_c)}{\partial \alpha}$ — непрерывная функция, но $\frac{\partial^2 E(\alpha, \omega_c)}{\partial \alpha^2}$ расходится. Отсюда делается вывод, что при $\omega_c > 2{,}24$; $\alpha > 4{,}21$ система претерпевает фазовый переход первого рода, а точка $\alpha_c = 4{,}21$ $\omega_c = 2{,}24$ соответствует фазовому переходу второго рода. В точках $(\omega_c, \alpha_c(\omega_c))$ поперечная масса модели $\nu^2_{\perp}$ обнаруживает скачок, что позволяет интерпретировать фазовый переход как переход полярона от связанного состояния, где электрон вместе с фононным облаком вращается в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, к свободному состоянию меньшей массы, в котором фононное облако не успевает следовать за движением полярона. Экспериментально такой фазовый переход должен заметно отражаться в магнитооптическом спектре кристаллов с достаточно сильным электрон-фононным взаимодействием, например, для поляронных дырок в CuCl ($\alpha = 4{,}36$) и TeCl ($\alpha = 4{,}2$). Линейная модель Боголюбова для полярона в магнитном поле подробно исследована в [135]. Показано, что при изотропной зависимости параметра взаимодействия электрона с фононными модами одинаковой частоты гамильтониан может быть диагонализован.

5. ПОДВИЖНОСТЬ ПОЛЯРОНА

Метод кинетического уравнения. Проблема электропереноса в полярных кристаллах с учетом поляронного эффекта широко исследовалась разными авторами в рамках подхода, основанного на кинетическом уравнении Больцмана. Подробный обзор всех работ до 1967 г. имеется в [13], так что мы здесь обсудим только основные моменты и трудности применения метода кинетического уравнения для вычисления подвижности полярона. Последовательное изложение методов получения кинематических уравнений для динамических систем, взаимодействующих с бозонным полем, и их применение к задаче полярона приводится в работах [21, 22]. Обобщение уравнения Больцмана для полярона на случае произвольного электрического поля получено в [97]. Исследование точных стационарных решений уравнения Больцмана, трудности максвелловского приближения и линеаризации по электрическому полю обсуждаются в работах [92, 98, 99].

Как известно, при достаточно низких температурах ($\beta \gg 1$) и низких частотах внешнего поля ($\omega \ll 1$) электропроводность в полярном кристалле определяется «редким» рассеянием носителей заряда на акустических фононах и примеси. Тогда можно исходить из концепции существования квазичастицы (полярона) с законом дисперсии $\varepsilon(\mathbf{p})$, длина свободного пробега которой велика по сравнению с длиной ее дебройлевской волны. Как следствие, поведение носителей заряда описывается функцией распределения импульса $W(\mathbf{p}, t)$, которая определяется как решение хорошо известного кинетического уравнения Больцмана с учетом квантовомеханической природы закона дисперсии поляронов и вероятности их рассеяния на акустических фононах и примеси. Поскольку рассеяние на акустических фононах — квазиупругое, а рассеяние на примеси упругое, не требуется знания волновой функции или закона дисперсии полярона при большой скорости. Подвижность имеет такой же вид, как и для электронов в гомеополярных кристаллах, и отличается только заменой эффективной массы электрона эффективной массой полярона $m^*(\alpha)$.

С ростом температуры растет вклад рассеяния на оптических фононах, который становится доминирующим при $\beta \sim 1$. Больцмановское описание удовлетворительно, если выполняются следующие условия: а) взаимодействие достаточно слабо и сечение в одиночном акте рассеяния можно вычислить по теории возмущения в наинизшем борновском приближении; б) последовательные акты рассеяния (поглощения и испускания оптических фононов) достаточно разнесены по времени, так что можно пренебречь квантовомеханической интерференцией между ними. Соответствующее уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial W(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E}(t)\frac{\partial W(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -\sum_{\mathbf{p}'}[\gamma(p, p')W(\mathbf{p}, t) - \gamma(\mathbf{p}', \mathbf{p})W(\mathbf{p}', t)], \qquad (87)$$

где $\mathbf{E}(t)$ — вектор напряженности внешнего электрического поля и

$$\gamma(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = 2\pi Q^2(|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|)\left[\frac{\delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2}{2} - \frac{\mathbf{p}^2}{2} + 1\right)}{1-e^{-\beta}} + \frac{\delta\left(\frac{\mathbf{p}'^2}{2} - \frac{\mathbf{p}^2}{2} - 1\right)}{e^{\beta}-1}\right].$$

Такое уравнение описывает рассеяние электрона на оптических фононах, т. е. не учитывает поляронный эффект. Оно было строго получено в работах [21, 22] для модели Фрелиха в электрическом поле во втором порядке теорий возмущений [пренебрегается членами порядка α^2 и $\alpha \mathrm{E}(t)$]. Приближенное решение уравнения Больцмана [13] приводит к следующему выражению для дрейфовой подвижности электрона:

$$\mu = \frac{4e}{3\pi^{1/2}\alpha} G(\beta)(e^{\beta}-1)\beta^{-1/2}$$

при $\beta \to \infty$, $G(\beta) \to \frac{(3\pi\beta)^{1/2}}{8}$ и $\mu \to \frac{e}{2\alpha} e^{\beta}$; при $\beta \to 0$, $G(\beta) \to 1$ и $\mu \to \to \frac{4}{3} e\, \beta^{1/2} \alpha^{-1} \pi^{-1/2}$. Существует ряд работ [4, 44, 100, 101], где больцмановское описание обобщается на случай произвольной величины константы связи α.

Результаты [4, 100, 101], предсказывают, что подвижность полярона растет с ростом константы связи при достаточно больших α. Качественно такое поведение объясняется [102] сильным экранированием полярон-фононного взаимодействия, которое при $\alpha \gg 1$ компенсирует эффект уменьшения подвижности из-за роста эффективной массы полярона.

Очень трудно четко установить пределы применимости больцмановского подхода в случае промежуточной или сильной связи. Следует ожидать, что он будет справедливым при низких температурах, когда времена длительности столкновений (которые порядка β) намного меньше времени релаксации τ. При таких температурах τ очень велико и определяется другими механизмами рассеяния. Однако при тех температурах, для которых рассеяние на оптических фононах является основным механизмом релаксации, метод уравнения Больцмана неприменим.

Метод Кубо. Подвижность полярона, в случае когда не только теория возмущения, но и сам метод кинетического уравнения Больцмана не применимы, можно вычислить с помощью общей формулы Кубо:

$$\mu = \frac{1}{2} e^2\beta \int_0^{\infty} dt\, \langle \hat{v}_i(0)\hat{v}_i(t) + \hat{v}_i(t)\hat{v}_i(0)\rangle, \tag{88}$$

где $\hat{v}_i(t)$ — i-я компонента оператора скорости электрона в представлении Гейзенберга. На основе (88) вычисление подвижности сводится к определению временной корреляционной функции скоростей для системы в состоянии термодинамического равновесия

$$\langle \hat{v}_i(0)\hat{v}_i(t)\rangle = \frac{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}}\hat{v}_i(0)\hat{v}_i(t)}{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}}}.$$

Осака [103] применил формулу (88) и метод континуального интегрирования для вычисления подвижности полярона при низких температурах и произвольной константе связи. При этом он предположил, что: а) подвижность определяется только асимптотикой временной корреляционной функции $\langle\hat{v}_i(0)\,\hat{v}_i(t)\rangle$; б) такая асимптотика имеет вид экспоненциальной функции от времени. Его результат совпадает с результатом [100], полученным на основе кинетического уравнения. Трудность подхода Осаки состоит в том, что для выполнения конкретных расчетов требуются дополнительные, сильные предположения о временной зависимости корреляционных функций, которые, видимо, эквивалентны предположению о справедливости кинетического уравнения типа Больцмана.

Формула Кубо (88) применялась также в работе [104] для вычисления низкотемпературной подвижности полярона в четвертом порядке теории возмущений. Авторы [104] выразили корреляционную функцию скоростей через двухчастичную функцию Грина. Затем двухчастичная гриновская функция была разложена в ряд по одночастичным гриновским функциям и электрон-фононному взаимодействию. Их результат имеет вид:

$$\mu=\frac{e}{2\alpha}\left(1-\frac{\alpha}{6}\right)(e^{\beta}-1).$$

Отметим, что при $\alpha\ll 1$ формула Осаки для подвижности дает очень хорошее приближение к этой формуле.

Метод неравновесной матрицы плотности. Наиболее общее выражение для подвижности полярона при произвольных значениях константы связи и температуры получено в работах [39, 105] на основе приближенного вычисления неравновесной матрицы плотности электрон-фононной системы методом интегралов по траекториям. В [105] подвижность получается из общего выражения для электропроводности $\sigma(\omega)$ полярона в пределе $\omega\to 0$ (ω — частота внешнего поля), а в [39] из формулы для стационарной скорости $\mathbf{v}(\mathbf{E})$ электрона во внешнем, постоянном электрическом поле в пределе слабых полей. Результат [105] гласит:

$$\mu^{-1}=\frac{\alpha e^{-1}}{3\sqrt{\pi}}\,\frac{\beta^{5/2}v^3}{\operatorname{sh}\beta/2}\times$$

$$\times\int\limits_0^\infty\frac{\cos u\,du}{\left[u^2+\frac{\beta}{4}+\beta\frac{v^2-1}{Wv}\operatorname{cth}\frac{\beta Wv}{2}-\frac{\beta(v^2-1)}{4}\,\frac{\cos Wvu}{\operatorname{sh}\frac{\beta Wv}{2}}\right]^{3/2}}. \qquad (89)$$

В пределе очень низких температур (89) приводит к выражению

$$\mu=\frac{3}{2\beta}\,\frac{e}{2\alpha v^3}\exp\left\{\frac{v^2-1}{Wv}+\beta\right\},$$

которое отличается фактором $3/2\,\beta$ от выражений [100, 103]. Поскольку результат [100, 103] должен быть правильным по крайней мере в пределе слабой связи, можно сделать вывод, что (89) приводит к неправильной температурной зависимости подвижности полярона при $\beta \to \infty$. Причины такого различия до сих пор не совсем ясны. В [105] это связывалось с несправедливостью сделанных приближений при $\omega = 0$. С другой стороны, приближенный метод, использованный в [39], как было отмечено в [21], эквивалентен предположению (при $\alpha \ll 1$) о том, что стационарное решение уравнения Больцмана имеет вид максвелловского распределения с некоторой средней скоростью, а это предположение приводит к неправильному выражению для дрейфовой подвижности при низких температурах. Однако неясность остается из-за того, что (89) получено двумя совершенно независимыми способами.

6. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПОЛЯРОНА МЕТОДОМ КОНТИНУАЛЬНОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Для того чтобы преодолеть недостатки теории явлений электропереноса в полярных кристаллах, основанной на уравнении Больцмана и с целью создания единой теории импеданса полярона для произвольных частот, температур и констант взаимодействия, Фейнман, Хеллварс, Иддингс и Платцман (ФХИП) [105] вычислили функцию линейного отклика полярона методом неравновесной матрицы плотности. ФХИП получили для функции линейного отклика точное представление в виде двойного интеграла по траекториям, который был затем аппроксимирован в рамках одноосцилляторной модели Фейнмана. Подход ФХИП получил дальнейшее развитие в работах [41, 75, 102, 106, 107]. Полученные таким образом выражения для электропроводности позволяют описывать единым образом поляронные эффекты в оптике, в гальваномагнитных явлениях, в циклотронном резонансе и т. д. Трудности метода неравновесной матрицы плотности связаны с наличием определенного произвола в определении приближенного выражения для импеданса [106, 107], который приходится решать на основе физически разумных, но математически нестрогих соображений, а также с тем, что приводит к неправильной низкотемпературной зависимости дрейфовой подвижности полярона. Альтернативный подход, который позволяет преодолеть первую из этих трудностей, обсуждается ниже.

Выражение для электропроводности через функцию отклика. Электрон-фононная система в присутствии внешнего, однородного электрического поля напряженности $\mathbf{E}(t)$, действующего вдоль оси x, описывается гамильтонианом:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + eE(t)\,x + \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^+_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + e^{\varepsilon t} \sum_{\mathbf{k}} Q(k)\,[\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}^+_{-\mathbf{k}}]\,e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \tag{90}$$

Фактор $e^{\varepsilon t}$ вводится для адиабатического включения взаимодействия, что соответствует пределу $t_0 \to -\infty$, а затем $\varepsilon \to 0^+$.

Неравновесный статистический оператор системы $\hat{\rho}(t)$ имеет вид:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(E;\ t,\ t_0)\,\hat{\rho}(t_0)\,\hat{U}^{+}(E,\ t,\ t_0), \tag{91}$$

где $\hat{U}(E;\ t,\ t_0)$ — унитарный оператор временной эволюции, удовлетворяющий уравнению

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(E;\ t,\ t_0) = \hat{H}(t)\,\hat{U}(E;\ t,\ t_0);\quad t > t_0;\quad \hat{U}(E;\ t_0,\ t_0) = 1.$$

Пусть $\langle x(t)\rangle_E$ — среднее значение координаты x электрона в момент времени t:

$$\langle x(t)\rangle_E = \mathrm{Sp}\,\{\hat{x}\,\hat{\rho}(t)\}.$$

Функция линейного отклика системы определяется выражением

$$Y(\tau - \sigma) = \frac{1}{e}\,\frac{\delta}{\delta E(\sigma)}\langle x(\tau)\rangle_{E=0},\quad t_0 < \sigma < \tau,$$

а электропроводность $\sigma(\omega)$ выражается через нее формулой

$$\sigma(\omega) = \mathrm{i}e^2\omega Y(\omega); \tag{92}$$

$$Y(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\mathrm{i}\omega\tau}\,Y(\tau);\ Y(\tau) = 0 \text{ при } \tau < 0,$$

где $Y(\omega)$ — адмитанс системы, аналитическая функция от ω при $\mathrm{Im}\,\omega > 0$.

Для определения функции $Y(\tau - \sigma)$ достаточно рассмотреть отклик системы на внешнее поле $eE(s) = \xi\,\delta(s - \sigma)$. Тогда

$$Y(\tau - \sigma) = \frac{\partial}{\partial\xi}\langle x(\tau)\rangle_{\xi=0}.$$

Рассмотрим теперь производящую функцию

$$g(\xi,\ \eta) = \mathrm{Sp}\,\{\hat{U}(E;\ t,\ t_0)\,\hat{\rho}(t_0)\,\hat{U}^{+}(E';\ t,\ t_0)\}, \tag{93}$$

где $E(s) = \xi\delta(s - \sigma) + \eta\delta(s - \tau)$;

$$E'(s) = \xi\delta(s - \sigma) - \eta\delta(s - \tau),\quad t_0 < \sigma < \tau < t.$$

Нетрудно убедиться в том, что

$$\langle x(t)\rangle_\xi = \frac{\mathrm{i}}{2}\,\frac{\partial}{\partial\eta}\,g(\xi,\ \eta)\Big|_{\eta=0},$$

тогда для $Y(\tau - \sigma)$ имеем

$$Y(\tau - \sigma) = \frac{\mathrm{i}}{2}\,\frac{\partial^2}{\partial\xi\,\partial\eta}\,g(\xi,\ \eta)\Big|_{\xi=\eta=0}. \tag{94}$$

Таким образом, вычисление электропроводности сводится к нахождению функции $g(\xi,\ \eta)$, через которую выражается $Y(\tau - \sigma)$.

Континуальное представление для производящей функции. Чтобы получить выражение для $g(\xi, \eta)$ в виде континуального интеграла, перепишем (93) в виде

$$g(\xi, \eta) = \int\int\int\int\int\int d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{r}'\, d^3\mathbf{r}''\, dQ\, dQ'\, dQ'' \times$$
$$\times \langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E;\ t,\ t_0) \mid \mathbf{r}', Q' \rangle \langle \mathbf{r}', Q' \mid \hat{\rho}(t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle \times$$
$$\times \langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E';\ t,\ t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle^*. \qquad (95)$$

Теперь с учетом формулы Фейнмана — Каца для матричных элементов $\langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E;\ t,\ t_0) \mid \mathbf{r}', Q' \rangle$ имеем:

$$\langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E;\ t,\ t_0) \mid \mathbf{r}', Q' \rangle =$$
$$= \int\limits_{\mathbf{x}(t_0)=\mathbf{r}'}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{r}} D\mathbf{x} \int\limits_{Q(t_0)=Q'}^{Q(t)=Q} DQ \exp\left\{ -\mathrm{i} \int\limits_{t_0}^{t} d\tau H[\tau,\ \mathbf{x}(\tau),\ Q(\tau)] \right\}.$$

Для $t = t_0$, когда электрическое поле еще не действовало [мы рассмотрим отклик системы на поле $eE(s) = \xi\delta(s - \sigma)$] и электрон не взаимодействовал с фононами $e^{\varepsilon t_0} \to 0$ при $t_0 \to -\infty$, естественно предполагать, что фононная подсистема находилась в гиббсовском состоянии термодинамического равновесия при температуре T. Выбор начальных условий для электрона в некоторой степени произволен, но удобнее всего предполагать, что он находился в состоянии с полностью неопределенным значением импульса. Тогда имеем:

$$\langle \mathbf{r}', Q' \mid \hat{\rho}(t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \frac{\langle Q' \mid e^{-\beta \hat{H}_\Phi} \mid Q'' \rangle}{\int dQ \langle Q \mid e^{-\beta \hat{H}_\Phi} \mid Q \rangle},$$

откуда

$$\langle \mathbf{r}', Q' \mid \hat{\rho}(t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle =$$
$$= \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \frac{\int\limits_{Q(0)=Q''}^{Q(\beta)=Q'} DQ \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum\limits_{\mathbf{k}} \int\limits_0^\beta d\tau\, [\dot{q}_{\mathbf{k}}^2(\tau) + q_{\mathbf{k}}^2(\tau)] \right\}}{\int\limits_{Q(0)=Q(\beta)} DQ \exp\left\{ -\frac{1}{2} \sum\limits_{\mathbf{k}} \int\limits_0^\beta d\tau\, [\dot{q}_{\mathbf{k}}^2(\tau) + q_{\mathbf{k}}^2(\tau)] \right\}}.$$

Фигурирующие здесь гауссовы континуальные интегралы элементарно вычисляются (см. [102, 105]) и результат имеет вид:

$$\langle \mathbf{r}', Q' \mid \hat{\rho}(t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \prod_{\mathbf{k}} \left(\frac{\operatorname{th} \beta/2}{\pi} \right)^{1/2} \times$$
$$\times \exp\left\{ -\frac{1}{2 \operatorname{sh} \beta} \left[(q'_{\mathbf{k}} + q''_{\mathbf{k}})^2 \operatorname{ch} \beta - 2 q'_{\mathbf{k}} q''_{\mathbf{k}} \right] \right\}.$$

Теперь для получения окончательного выражения для $g(\xi, \eta)$ следует:

а) проинтегрировать по траекториям осцилляторов в выражениях для $\langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E; t, t_0) \mid \mathbf{r}', Q' \rangle$ и $\langle \mathbf{r}, Q \mid \hat{U}(E'; t, t_0) \mid \mathbf{r}'', Q'' \rangle$ с помощью формул типа (9) (см. [102, 105]);

б) проинтегрировать по Q, Q' и Q'' в (95);

в) сделать замену переменных $\mathbf{x}(s) = \mathbf{r}(t-s)$.

Тогда в пределе $t_0 \to -\infty$ получим

$$g(\xi, \eta) = \iint\limits_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'(0)}^{\mathbf{r}(\infty)=\mathbf{r}'(\infty)} D\mathbf{r} D\mathbf{r}' e^{i\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}, \tag{96}$$

где

$$\left.\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int_0^\infty dt \left\{\frac{1}{2}[\dot{\mathbf{r}}^2(t) - \dot{\mathbf{r}}'^2(t)] + E(t)\,x(t) - E'(t)\,x'(t)\right\} + \\ &\qquad + V(\mathbf{r}) - V^*(\mathbf{r}') + U(\mathbf{r}, \mathbf{r}'); \\ V(\mathbf{r}) &= i \sum_{\mathbf{k}} Q^2(k) \int_0^\infty dt \int_0^t ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} C[i(t-s)]\, e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)]}; \\ U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -i \sum_{\mathbf{k}} Q^2(k) \int_0^\infty \int_0^\infty dt\, ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} C[i(t-s)]\, e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}'(s)]}. \end{aligned}\right\} \tag{97}$$

Интеграл в (96) нормирован таким образом, что $g(\xi, 0) = 1$. Выражение (96) представляет собой существенное упрощение задачи по сравнению с (93), поскольку фононные переменные точно исключены. В результате исключения возникает эффективное электрон-электронное взаимодействие, описываемое функционалами $V(\mathbf{r})$, $V^*(\mathbf{r}')$ и $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Физический смысл этих членов подробно обсуждается в [70]. В частности, показано, что $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ответствен за диссипацию.

Формулы (92), (94), (96), (97) без труда обобщаются на случай, когда электрон проводимости характеризуется тензорной эффективной массой $\overleftrightarrow{m}$, на систему действует магнитное поле $\mathbf{h}$ и электрон взаимодействует с несколькими ветвями фононного спектра, каждая из которых характеризуется законом дисперсии $\omega_n(\mathbf{k})$ [40, 41, 75, 106]. Гамильтониан системы в таком случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \frac{1}{\overleftrightarrow{m}} \left(\hat{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + e\mathbf{E}(t)\cdot\mathbf{r} + \\ &+ \sum_{n, k} \{\omega_n(\mathbf{k})\, \hat{a}^+_{\mathbf{k}, n} \hat{a}_{\mathbf{k}, n} + Q_n(\mathbf{k})\, [\hat{a}_{\mathbf{k}, n} + \hat{a}^+_{-\mathbf{k}, n}]\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\}, \end{aligned} \tag{98}$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{h} \times \mathbf{r}).$$

Тогда

$$\sigma_{ik} = \mathrm{i}e^2\omega Y_{ik}(\omega);$$

$$Y_{ik}(\tau - \sigma) = \frac{\mathrm{i}}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi_k\,\partial\eta_i}\,g(\xi,\ \eta)\Big|_{\xi=\eta=0}$$

и $g(\xi,\ \eta)$ определяется выражением (96), где теперь:

$$\left.\begin{aligned}
\Phi(\mathbf{r},\ \mathbf{r}') = \int_0^\infty dt \Big\{ \frac{1}{2}[\dot{\mathbf{r}}(t)\cdot \overleftrightarrow{m}\cdot \dot{\mathbf{r}}(t) - \dot{\mathbf{r}}'(t)\cdot \overleftrightarrow{m}\cdot \dot{\mathbf{r}}'(t)] + \\
+ \mathbf{E}(t)\,\mathbf{r}(t) - \mathbf{E}'(t)\cdot\mathbf{r}'(t) + \frac{e}{2c}[\dot{\mathbf{r}}(t)\cdot(\mathbf{r}(t)\times\mathbf{h}) - \\
- \dot{\mathbf{r}}'(t)\cdot(\mathbf{r}'(t)\times\mathbf{h})]\Big\} + V(\mathbf{r}) - V^*(\mathbf{r}') + U(\mathbf{r},\ \mathbf{r}');\\
V(\mathbf{r}) = \mathrm{i}\sum_{n,\ \mathbf{k}} Q_n^2(\mathbf{k}) \int_0^\infty dt \int_0^t ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} \times \\
\times C_{\omega n(\mathbf{k})}[\mathrm{i}(t-s)]\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(s)]};\\
U(\mathbf{r},\ \mathbf{r}') = -\mathrm{i}\sum_{n,\ \mathbf{k}^-} Q_n^2(\mathbf{k}) \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} \times \\
\times C_{\omega n(\mathbf{k})}[\mathrm{i}(t-s)]\, e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}'(s)]}.
\end{aligned}\right\} \qquad (99)$$

Точное континуальное представление для полного неравновесного статистического оператора системы (98) $\langle \mathbf{r}Q \mid \hat{\rho}(t) \mid \mathbf{r}',\ Q' \rangle$ получено в работе [108] для произвольного выбора начального распределения $\hat{\rho}(t_0)$.

Приближенное выражение для электропроводности. Для приближенного вычисления $g(\xi,\ \eta)$ на основе (96) необходимо аппроксимировать $\Phi(\mathbf{r},\ \mathbf{r}')$ некоторым функционалом $\Phi_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}')$, для которого континуальные интегралы типа (96) вычисляются точно. С учетом первой поправки (обусловленной разницей между Φ и Φ_0) имеем:

$$\left.\begin{aligned}
e^{\mathrm{i}\Phi} = e^{\mathrm{i}\Phi_0 + \mathrm{i}(\Phi-\Phi_0)} \simeq e^{\mathrm{i}\Phi_0}[1 + \mathrm{i}(\Phi - \Phi_0)];\\
g(\xi,\ n) \simeq g_0(\xi,\ \eta)[1 + \mathrm{i}\langle\Phi - \Phi_0\rangle_{\Phi_0}],
\end{aligned}\right\} \qquad (100)$$

где

$$g_0(\xi,\ \eta) = \int\!\!\int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}'(0)}^{\mathbf{r}(\infty)=\mathbf{r}'(\infty)} D\mathbf{r}D\mathbf{r}'\, e^{\mathrm{i}\Phi_0(\mathbf{r},\ \mathbf{r}')}.$$

Наиболее общий выбор Φ_0 соответствует замене функционалов $V(\mathbf{r})$, $V^*(\mathbf{r})$ и $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в (97) квадратичными функционалами. Имеем:

$$\left.\begin{aligned}
\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \int_0^\infty dt \left\{\frac{1}{2}[\dot{\mathbf{r}}^2(t) - \dot{\mathbf{r}}'^2(t)] + E(t)\,x(t) - E'(t)\,x'(t)\right\} + \\
&\qquad + V_0(\mathbf{r}) - V_0^*(\mathbf{r}') + U_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'); \\
V_0(\mathbf{r}) &= -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} dW G(W) \int_0^\infty dt \int_0^t ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} e^{\mathrm{i}W(t-s)}\,|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(s)|^2; \\
U_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} dW G(W) \int_0^\infty dt \int_0^\infty ds\, e^{-\varepsilon(t+s)} e^{\mathrm{i}W(t-s)}\,|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}'(s)|^2.
\end{aligned}\right\} \quad (101)$$

Функционал $\Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ соответствует системе, где электрон взаимодействует с распределением осцилляторов всех возможных частот.

При таком выборе Φ_0 континуальные интегралы, фигурирующие в (100), без труда вычисляются (см. [102, 105]) и для адмитанса $Y(\omega)$ получается

$$Y(\omega) = Y_0(\omega)\left[1 + \frac{Z_1(\omega)}{Z_0(\omega)}\right], \quad (102)$$

где $Z_0(W) = Y_0^{-1}(\omega)$ — импеданс модели (101):

$$\left.\begin{aligned}
Z_0(\omega) &= \omega^2\left[1 + 4\int_{-\infty}^{\infty} dW \frac{P}{W}\frac{G(W)}{W^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\varepsilon}\right], \\
Z_1(\omega) &= -\omega^2 + Z_0(\omega) + \chi(\omega); \\
\chi(\omega) &= \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}}\int_0^\infty du\,(1 - e^{\mathrm{i}\omega u})\,\mathrm{Im}\,[C(-\mathrm{i}u)\,D^{-3/2}(u)]; \\
D(u) &= 4\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{G(\omega)}{Z_0(\omega)\,Z_0^*(\omega)}(1 - e^{\mathrm{i}\omega u}).
\end{aligned}\right\} \quad (103)$$

Обобщение этих формул на случай анизотропного кристалла в присутствии магнитного поля и взаимодействия электрона с несколькими ветвями фононного спектра не представляет труда и было сделано в работах [40, 41, 75, 106].

Выражение (102) представляет собой некоторое разложение адмитанса. Однако электропроводность $\sigma(\omega)$, полученная из (92), (102), не обнаруживает ожидаемого резонансного характера и очень сильно зависит от выбора нулевого приближения Y_0. Как показано в [105], намного более содержательным с физической точки зрения является разложение импеданса $Z(\omega) = Y^{-1}(\omega)$. Из (102) имеем

$$Z(\omega) = \frac{Z_0(\omega)}{1 + Z_1(\omega)/Z_0(\omega)}.$$

Теперь, если $Z_1(\omega)/Z_0(\omega) \ll 1$:

$$Z(\omega) = Z_0(\omega) - Z_1(\omega) = \omega^2 - \chi(\omega). \tag{104}$$

Формула (104) и берется в качестве приближенного выражения для импеданса полярона. Электропроводность $\sigma(\omega) = ie^2\omega/Z(\omega)$, полученная с помощью (104), обнаруживает ожидаемый резонансный характер. Первый член в правой части (104) — чисто индуктивный член, характерный для свободной частицы. Второй член учитывает влияние конечного времени жизни вследствие электрон-фононного взаимодействия.

В частном случае, когда в качестве аппроксимирующего функционала Φ_0 берется функционал линейной модели (18) [или одноосцилляторной модели Фейнмана (16)], функция $D(u)$ принимает вид, приведенный ФХИП [105]:

$$D(u) = \frac{1}{\nu^2}\left\{-iu + \frac{u^2}{\beta} + \frac{\nu^2-1}{W\nu}\,\frac{1-e^{iW\nu u} - e^{-W\nu(iu+\beta)} + e^{-\beta W\nu}}{1-e^{-\beta W\nu}}\right\}. \tag{105}$$

В работе [75] при рассмотрении тензора электропроводности полярона в магнитном поле был использован аппроксимирующий функционал Φ_0 несколько иного вида, чем (101).

Результаты Клюканова и Покатилова справедливы для всех частот и напряженности магнитного поля, но лишь для слабого электрон-фононного взаимодействия. В пределе $\omega_c \to 0$ ($h \to 0$) они совпадают с результатом [105] [если в последнем положить $\nu = 1$ ($\alpha \ll 1$)].

Частотная и температурная зависимость электропроводности полярона. Выражения (92), (103), (104) и их обобщение на случай, когда на систему действует однородное магнитное поле [41, 75, 106, 107], позволяют изучать поведение электропроводности полярона при произвольных значениях параметров α, β, ω и h. Резюмируем главную информацию, вытекающую из этих формул.

а. Реактивная часть импеданса. Эффективная масса. При нулевой температуре ($\beta \to \infty$) и $\omega < 1$ из формул (103), (104) следует, что импеданс полярона действительная величина и дается формулой:

$$Z(\omega) = \omega^2\left\{1 - \frac{2\alpha\nu^3}{3\sqrt{\pi}\,\omega^2}\int_0^\infty \frac{dt\,e^{-t}(1-\operatorname{ch}\omega t)}{\left[t + \frac{\nu^2-1}{W\nu}(1-e^{-W\nu t})\right]^{3/2}}\right\}. \tag{106}$$

Таким образом, при $\omega < 1$ и $\beta = \infty$, когда нет тепловых фононов, которые могли бы рассеять полярон и замедлить его движение, полярон ускоряется без диссипации под действием приложенного поля. Если существуют фононы с нулевой частотой, такие, как длинноволновые акустические фононы, сопротивление конечно и при нулевой температуре. Поскольку в модели Пекара—Фрелиха учитывается только взаимодействие электрона с продольными оптическими фононами, сопротивление полярона появляется при $\omega = 1$. Конечно, в постоянном поле полярон в конечном счете приобретает достаточную энергию, чтобы испустить один оптический фонон и тем самым диссипировать энергию, но этот эффект нелинеен по полю и не описывается в теории линейного отклика. При очень низких частотах выражение (106) переходит в формулу:

$$Z(\omega) = -m_{\Phi}^{*}(\alpha)\,\omega^2, \tag{107}$$

где эффективная масса $m_{\Phi}^{*}(\alpha)$ определяется формулой (51). Таким образом, при нулевой температуре и низких частотах внешнего поля полярон ведет себя подобно частице с массой $m_{\Phi}^{*}(\alpha)$.

В общем случае конечных температур для $\operatorname{Re} Z(\omega)$ и $\operatorname{Im} Z(\omega)$ имеем [105]:

$$\operatorname{Im} Z(\omega) = \frac{2\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \frac{\operatorname{sh}\frac{\beta\omega}{2}}{\operatorname{sh}\beta/2} \int_0^{\infty} \frac{dt \cos t \cos \omega t}{\left\{\frac{t^2}{\beta} + \frac{\beta}{4} + \frac{v^2-1}{Wv}\left[\frac{\operatorname{ch}\frac{\beta W v}{2} - \cos Wvt}{\operatorname{sh}(\beta W v/2)}\right]\right\}^{3/2}};$$

$$\operatorname{Re} Z(\omega) = \omega^2 - \frac{2\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \times$$

$$\times \int_0^{\beta/2} \frac{d\tau\,[1 - \operatorname{ch}\omega\tau]\,C(\tau)}{\left[\tau\left(1 - \frac{\tau}{\beta}\right) + \frac{v^2-1}{Wv}\,\frac{1 - e^{-Wv\tau} - e^{-Wv(\beta-\tau)} + e^{-\beta W v}}{1 - e^{-\beta W v}}\right]^{3/2}} +$$

$$+ \frac{2\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \frac{\operatorname{sh}\frac{\beta\omega}{2}}{\operatorname{sh}\beta/2} \int_0^{\infty} \frac{dt \cos t \sin \omega t}{\left[\frac{t^2}{\beta} + \frac{\beta}{4} + \frac{v^2-1}{Wv}\,\frac{\operatorname{ch}\frac{\beta W v}{2} - \cos Wvt}{\operatorname{sh}\frac{\beta W v}{2}}\right]^{3/2}}.$$

Для свободной частицы массы M и времени жизни τ импеданс имеет вид:

$$Z(\omega) = \frac{iM\omega}{\tau} + M\omega^2.$$

Тогда для полярона при $\beta \gg 1$ и $\omega \ll 1$ имеем:

$$M = 1 + \frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\beta/2} dt \frac{t^2 e^{-t}}{\left[t\left(1 - \frac{t}{\beta}\right) + \frac{v^2-1}{Wv}\left(1 - e^{-Wvt}\right)\right]^{3/2}};$$

$$\tau = \lim_{\omega \to 0} \frac{\operatorname{Im} Z(\omega)}{\omega \operatorname{Re} Z(\omega)} = M \lim_{\omega \to 0} \frac{\omega}{\operatorname{Re} Z(\omega)}.$$

Выражение для M совпадает с формулой (72) для эффективной массы полярона при низких температурах. При более высоких температурах существенный вклад дает и слагаемое в выражении для $\operatorname{Re} Z(\omega)$, пропорциональное $\frac{\operatorname{sh}\beta\omega/2}{\sin\beta/2}$. Соответствующее выражение для эффективной массы тогда совпадает с формулой, полученной в [75] для случая слабой связи. Однако с ростом температуры время жизни τ очень сильно падает и квазичастичная картина нарушается.

Подвижность полярона. Подвижность полярона определяется через $\operatorname{Re} Z(\omega)$ [105]:

$$\mu^{-1}=\lim_{\omega\to 0}\frac{\operatorname{Im} Z(\omega)}{e\omega}=$$

$$=\frac{\alpha\beta^{5/2}v^3}{3e\sqrt{\pi}\operatorname{sh}\beta/2}\int_0^\infty\frac{\cos u\,du}{\left[u^2+\frac{\beta^2}{4}+\beta\frac{v^2-1}{Wv}\frac{\operatorname{ch}\frac{\beta Wv}{2}-\cos Wvt}{\operatorname{sh}\frac{\beta Wv}{2}}\right]^{3/2}}.$$

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

$$\tau=\frac{3}{2\beta}\frac{e}{2\alpha v^3}\exp\left\{\frac{v^2-1}{Wv}+\beta\right\},$$

а при высоких температурах ($\beta\to 0$, $v\to 1$)

$$\mu=\frac{3\sqrt{\pi}}{8}\frac{e\beta^{1/2}}{\alpha}.$$

В пределе слабой связи и при произвольной температуре имеем

$$\mu=\frac{3e\sqrt{\pi}\operatorname{sh}\beta/2}{2\alpha\beta^{3/2}K_1(\beta/2)},$$

где $K_1(z)$ — цилиндрическая функция мнимого аргумента.

Как уже отмечалось, подвижность, полученная в [105] при низких температурах, отличается фактором $3/2\ \beta$ от общепринятого выражения для низкотемпературной подвижности полярона. Причина, видимо, состоит в том, что разложение (104) для импеданса не справедливо при $\omega=0$. Отметим однако, что выражение (89), физически разумное при всех значениях α и β, получено двумя независимыми способами и приводит к правильной температурной зависимости подвижности при $\beta\to 0$ ($\mu\sim\beta^{1/2}$).

в. Поляронные эффекты в оптическом районе спектра. Частотная зависимость импеданса, полученная в [105], особенно интересна, так как она показывает сильную дисперсию, характер которой зависит главным образом от α для частот, больших 1. Для того чтобы найти дисперсию при нулевой температуре, удобно разложить выражение для $\operatorname{Im} Z(\omega)$ по степеням параметра

$R = (\nu^2 - 1)/W\nu$. Тогда получается [107]:

$$\operatorname{Im} Z(\omega) = \frac{2\alpha\nu^3}{3\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{-3/2} (-1)^n \frac{R^n 2^n}{(2n+1)!!} \times$$
$$\times (\omega - 1 - nW\nu)^{n+1/2}\, \theta(\omega - 1 - nW\nu)\, e^{-R(\omega - 1 - nW\nu)}, \qquad (108)$$

где $\theta(x) = 1$, если $x > 0$, $\theta(x) = 0$, если $x < 0$ и $C^{-3/2}$ — известные числовые коэффициенты. При фиксированной частоте ω это выражение представляет собой конечную величину. Первые два слагаемых этой суммы получены впервые в [105]. Первый порог в $\operatorname{Im} Z(\omega)$ появляется при $\omega = 1$ и соответствует поглощению одного кванта электромагнитного поля с испусканием одного оптического фонона. Следующий порог возникает при $\omega = 1 + W\nu$ и соответствует переходу полярона в возбужденное состояние энергии $E_0 + W\nu$ с испусканием одного оптического фонона. Аналогична интерпретация порогов, которые появляются при $\omega = 1 + nW\nu$. Здесь уместно вспомнить, что Пекар в своем варианте теории сильной связи [1] нашел, что энергия наинизшего возбужденного состояния равна $0{,}1395\ \alpha^2$, а в теории Фейнмана $W\nu = \frac{4\alpha^2}{9\pi} = 0{,}1415\ \alpha^2$ при $\alpha \gg 1$. В случае сильной связи электрон локализован в создаваемой им поляризационной яме. Возбужденные состояния этой ямы не являются стационарными, так как после оптического перехода атомы решетки будут двигаться к новым равновесным положениям. Электрон в этом возбужденном состоянии имеет конечное время жизни, которое растет с ростом α и релаксирует к другому возбужденному состоянию, соответствующему новому равновесному положению ионов. В литературе эти возбужденные состояния получили соответственно названия франк-кондоновских и релаксированных (или самосогласованных) состояний. Точное вычисление энергий, масс и радиусов релаксированных возбужденных состояний полярона в пределе сильной связи приводится в [109]. В интерпретации [105] пороги в частотной зависимости $\operatorname{Im} Z(\omega)$ соответствуют переходам к франк-кондоновским состояниям, а релаксированные состояния не наблюдаются. Максимумы в $\operatorname{Im} Z\ \omega)$, которые появляются, когда ω становится равной энергии этих нестабильных возбужденных состояний, уширены из-за их малого времени жизни относительно испускания фононов. При увеличении α увеличивается число максимумов в $\operatorname{Im} Z(\omega)$, а ширина уменьшается. При не слишком сильной связи $\alpha \leqslant 3$ эффекты времени жизни замывают пороговую структуру и остается только однофононный пик при $\omega \gtrsim 1$. Таким образом, чтобы можно было наблюдать пороговую структуру в $\operatorname{Im} Z(\omega)$, α должно быть порядка 5 или больше.

Однако, как показано в [107, 110], спектр оптического поглощения свободных поляронов не определяется только функцией $\operatorname{Im} Z(\omega)$, а зависит также от реактивной части $\operatorname{Re} Z(\omega)$. Действительно, коэффициент оптического поглощения $\Gamma(\omega)$ пропорционален $\operatorname{Re}\sigma(\omega)$, который зависит как от $\operatorname{Re} Z(\omega)$, так и от $\operatorname{Im} Z(\omega)$:

$$\Gamma(\omega) \sim \operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{e^2\omega \operatorname{Im} Z(\omega)}{[\operatorname{Re} Z(\omega)^2 + \operatorname{Im} Z(\omega)]^2}.$$

Частотная зависимость $\Gamma(\omega)$ при $\beta = \infty$ исследовалась в работах [107, 110]. В случае $\alpha < 1$ аналитические расчеты приводят к результатам работы [111], полученным по теории возмущений, и спектр поглощения характеризуется острым однофононным пиком при $\omega \gtrsim 1$.

Численные расчеты при $\alpha = 1, 3, 5, 6, 7, 11$ показывают, что структура $\Gamma(\omega)$ сложнее, нежели частотная зависимость $\operatorname{Im} Z(\omega)$. Острые пики при частотах $\omega \lesssim W\nu$ появляются вместе с широкими максимумами при $\omega \gtrsim W\nu$, когда α принимает значения 5, 6, 7, 11. Они интерпретируются соответственно как переходы в релаксированные и франк-кондоновские состояния. При $\alpha \gg 1$ поведение $\Gamma(\omega)$ качественно согласуется с результатами работы [112]. Отметим, что однофононный пик, предсказанный теорией слабой связи, наблюдался в CdO [113], но структуры, связанные с возбужденными состояниями свободных поляронов, пока не наблюдались. Однако для поляронов, связанных в кулоновском потенциале, переходы в возбужденные состояния приводят к появлению дополнительных линий в спектре поглощения света [114, 115].

г. Циклотронный резонанс и гальваномагнитные явления. Обобщение результатов [105] на случай анизотропного электрона, взаимодействующего с разными фононными модами в присутствии постоянного магнитного поля $\mathbf{h}$, позволяет изучать циклотронный резонанс поляронов и исследовать поведение магнетосопротивления, холловской подвижности и других наблюдаемых величин. Наиболее общие выражения для импеданса $\overleftrightarrow{Z}(\omega)$ получены Торнбером [41] и имеет вид:

$$\left.\begin{aligned}
&\overleftrightarrow{Z}(\omega) = \overleftrightarrow{m}\,\omega^2 + \frac{\mathrm{i}e\omega}{c}\,\epsilon\cdot\mathbf{h} - \int_0^\infty dt\,(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}) \operatorname{Im}\overleftrightarrow{S}(t);\\
&S_{ij}(t) = 2\sum_{n,\,\mathbf{k}} k_i k_j Q_n^2(\mathbf{k})\, C_{\omega n(\mathbf{k})}(-\mathrm{i}t)\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot\overleftrightarrow{D}(t)\cdot\mathbf{k}};\\
&\overleftrightarrow{D}(t) = 4\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \frac{1}{\overleftrightarrow{Z_0}(\omega)}\,\overleftrightarrow{G}(-\omega)\,\frac{1}{\overleftrightarrow{Z_0^+}(\omega)}\,(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t});\\
&\overleftrightarrow{Z_0}(\omega) = \overleftrightarrow{m}\,\omega^2 + \mathrm{i}\frac{e}{c}\,\omega\epsilon\cdot\mathbf{h} + 4\omega^2\int_{-\infty}^{\infty} dW\,\frac{P}{W}\,\frac{\overleftrightarrow{G}(W)}{W^2-\omega^2-\mathrm{i}\varepsilon},\\
&\text{где } \epsilon \text{ — полностью антисимметричный тензор ранга 3.}
\end{aligned}\right\} \quad (109)$$

Для оптического полярона в случае анизотропной зоны проводимости, если магнитное поле направлено вдоль оси z, наиболее общий выбор $\overleftrightarrow{G}(W)$ дается выражением

$$G_{ij}(W) = G_j(W)\,\delta_{ij};\ G_1(W) = G_2(W) = G_\perp(W).$$

Тогда тензор импеданса имеет вид:

$$Z_{jj}(\omega,\ \omega_c) = \frac{\mathrm{i}M_j\omega}{\tau_j}(1-\mathrm{i}\omega\tau_j);\quad Z_{12}(\omega,\ \omega_c) =$$

$$= -Z_{21}(\omega,\ \omega_c) = \mathrm{i}\omega\omega_c^* M_\perp;$$

$$Z_{13} = Z_{23} = Z_{31} = Z_{32} = 0,$$

где $\omega_c^* = \dfrac{eh}{cM_\perp}$; $M_1 = M_2 = M_\perp$; $\tau_1 = \tau_2 = \tau_\perp$;

$$M_i(\omega,\ \omega_c) = 1 - \frac{1}{\omega^2}\,\mathrm{Im}\int\limits_0^\infty dt\,(1-\cos\omega t)\,S_i(t);$$

$$S_i(t) = 2\sum_{\mathbf{k}} Q^2(k)\,k_i^2 C(-\mathrm{i}t)\exp\left\{-\frac{1}{2}(k_1^2+k_2^2)\,D_\perp(t) - \frac{1}{2}k_3^2 D_3(t)\right\};$$

$$Z_{ii}^0(\omega,\ \omega_c) = \omega^2\left\{1 + 4\int\limits_{-\infty}^{\infty} dW\,\frac{P}{W}\,\frac{G_i(W)}{W^2-\omega^2-\mathrm{i}\varepsilon}\right\};\ Z_{12}^0 = -Z_{21}^0 = \mathrm{i}\omega\omega_c.$$

Результаты [75] получаются при $G_i(W) = 0$. Частота циклотронного резонанса определяется масимумом $\mathrm{Re}\,\sigma_\perp(\omega,\ \omega_c)$. Если магнитное поле слабое, то $\omega_c^* \ll 1$ и можно пренебрегать частотной зависимостью величин $\tau_\perp(\omega,\ \omega_c)$ и $M_\perp(\omega,\ \omega_c)$. Тогда максимум достигается при

$$(\omega/\omega_c^*)^2 = 1 - 1/(\omega_c^*\tau)^2.$$

При низких температурах ($e^\beta \gg 1$) $\omega_c^*\tau_\perp \gg 1$ и частота циклотронного резонанса равна ω_c^*. Тогда циклотронная масса $m_c = M_\perp(\omega_c^*,\ \omega_c)$ и отличается от эффективной массы полярона $M(\alpha,\ \beta)$ (72) только зависимостью от магнитного поля. Однако, поскольку $\omega_c^* < \omega_c \ll 1$:

$$m_c = M + O(\omega_c^2).$$

При более высоких температурах ($\beta \gtrsim 1$) условие $\omega_c^*\tau_\perp \gg 1$ не выполняется. Частота циклотронного резонанса отличается от ω_c^*, и циклотронная масса m_c не совпадает с $M_\perp(\omega_c^*,\ \omega_c)$. Имеем:

$$m_c = \frac{M_\perp(\omega_c^*,\ \omega_c)}{\sqrt{1-(\omega_c^*\tau)^{-2}}} \simeq M_\perp(0,\ 0)\left\{1 + \frac{1}{2(\omega_c^*\tau_\perp)^2} + \ldots\right\};\ \omega_c^* < \omega_c \ll 1.$$

Циклотронная масса m_c, в отличие от параметра $M_\perp(0,\ 0)$, всегда больше единицы. Поэтому отрицательный поляронный эффект, полученный в работе [75][$M_\perp(0,\ 0) < 1$ при $\beta \gtrsim 1$], если бы удалось наблюдать циклотронный резонанс поляронов при таких температурах, не должен иметь места для циклотронной массы m_c. Величину $M_\perp(0, 0)$ можно интерпретировать как эффективную массу полярона только при низких температурах.

Магнетосопротивление $\overleftrightarrow{\rho}(\omega_c)$ определяется через импеданс $\overleftrightarrow{Z}(\omega, \omega_c)$ по формуле

$$\overleftrightarrow{\rho}(\omega_c) = \lim_{\omega \to 0} \frac{\overleftrightarrow{Z}(\omega, \omega_c)}{ie^2\omega}.$$

Тогда для продольного $\rho_{33}(\omega_c)$ и поперечного $\rho_\perp(\omega_c)$ магнетосопротивлений имеем:

$$\rho_{33}(\omega_c) = \frac{M_3(0, \omega_c)}{e^2\tau_3(0, \omega_c)}; \quad \rho_\perp(\omega_c) = \frac{M_\perp(0, \omega_c)}{e^2\tau_\perp(0, \omega_c)}.$$

В [41] рассмотрено поведение ρ_{33} и $\rho_\perp$ в случае слабых полей ($\omega_c \ll 1$) и найдено, что

$$\rho_{33}(\omega_c) = \rho_0 + r_{\|}\omega_c^2, \quad \rho_\perp(\omega_c) = \rho_0 + r_\perp\omega_c^2,$$

где ρ_0 — удельное сопротивление в отсутствие магнитного поля и $r_{\|} = \frac{1}{2} r_\perp$.

В [75] изучалось поведение продольного и поперечного магнетосопротивлений в случае слабой связи и сильного магнитного поля ($\omega_c \sim 1$). Продольное магнетосопротивление при низких температурах состоит из неосциллирующей и осциллирующей частей. Неосциллирующая часть растет линейно с ω_c, что находится в согласии с экспериментальными данными. Осциллирующая часть мала и имеет максимум при $\omega_c = 1$. Осцилляции продольного магнетосопротивления в сильных полях тоже наблюдаются в экспериментах в полярных кристаллах [116]. Поперечное сопротивление испытывает резонансные осцилляции. Вследствие пренебрежения дисперсией оптических фононов и другими механизмами, ограничивающими высоту осцилляций, $\rho_\perp(\omega_c)$ логарифмически расходится в точках $\omega_c = 1/N$. Результаты [75] согласуются с полученными в [117] по теории возмущений.

Зависимость магнетосопротивления от магнитного поля связана с влиянием поля на рассеяние электрона на оптических фононах. Поскольку электрон рассеивается во всех направлениях, магнитное поле влияет на сопротивление электрона, движущегося как в направлении поля, так и перпендикулярно ему. Электропроводность — величина, обратная сопротивлению,— имеет еще дополнительную, кинематическую зависимость от поля

$$\sigma_\perp(\omega_c) = \frac{e^2\tau_\perp(0, \omega_c)}{M_\perp(0, \omega_c)} \frac{1}{1 + \omega_c^{*2}\tau_\perp^2(0, \omega_c)}; \quad \sigma_{33}(\omega_c) = \frac{e^2\tau_3(0, \omega_c)}{M_3(0, \omega_c)}.$$

Холловская подвижность μ_H определяется выражением

$$\mu_H = c \mid R_H \mid \sigma_\perp,$$

где $R_H = E_2/hj_1 = \rho_{21}/h$ — постоянная Холла. Из выражения для импеданса следует:

$$R_H = -\frac{1}{ec}; \quad \mu_H = \frac{e\tau_\perp(0, \omega_c)}{M_\perp(0, \omega_c)} \frac{1}{1+\omega_c^{*2}\tau_\perp^2(0, \omega_c)},$$

так что холловская подвижность совпадает с дрейфовой подвижностью $\mu(\omega_c)$ в присутствии магнитного поля в рамках данного приближения.

Оптимальный выбор аппроксимирующего функционала в задачах электропереноса. Аппроксимирующий функционал $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (101) полностью определяется импедансом $Z_0(\omega)$. Действительно, из определения функции $Z_0(\omega)$ следует:

$$G(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\operatorname{Im} Z_0(\omega)}{1-e^{-\beta\omega}}.$$

С другой стороны, функцию $Z_0(\omega)$ можно определить из вариационного принципа для свободной энергии равновесной системы. Поскольку $Z_0^{-1}(\omega)$ должна быть аналитичной при $\operatorname{Im}\omega > 0$, она определяется аналитическим продолжением $Z_0^{-1}(i\omega_n)$ на верхнюю полуплоскость, которое осуществляется заменой $i\omega_n$ на $\omega + i\varepsilon$ [см. (70а)]. В случае, когда присутствует магнитное поле, можно ожидать (хотя это не доказано), что неравенство (13) для свободной энергии выполняется и позволяет определить тензор импеданса аппроксимирующей модели $\overleftrightarrow{Z}_0(\omega)$.

Конечно, нет a priori никакой гарантии того, что тот $Z_0(\omega)$, который определяет оптимальную оценку свободной энергии, приводит также к хорошему приближению для импеданса или электропроводности полярона. Однако более подробное обсуждение этого вопроса, проведенное в работах [118, 119], показало, что существуют хорошие аргументы в пользу того, что вариационный принцип для свободной энергии приводит к хорошему приближению и для импеданса полярона $Z(\omega)$. Аргументы связаны с тем, что приближенные формулы для импеданса (103), (104) удовлетворяют флуктуационно-диссипационной теореме (ФДТ) [118] и ряду точных правил сумм, выведенных для модели Пекара — Фрелиха [118, 119], если $Z_0(\omega)$ выбирается из условия минимума для свободной энергии: $Z_0(i\omega_n) = Z(i\omega_n)$. Значит, оптимальная оценка для свободной энергии получается с помощью аппроксимирующей модели, импеданс которой совпадает с импедансом полярона, вычисленным в первом приближении по формулам (103), (104). Иначе говоря, приближенное выражение для импеданса $Z(\omega)$ есть импеданс модели $Z_0(\omega)$ при оптимальном выборе параметров.

Флуктуационно-диссипационная теорема связывает фурье-образ функции линейного отклика системы на внешнее возмущение с временной корреляционной функцией, сопряженной данному полю динамической величины. В случае координаты x имеем:

$$\operatorname{Im} Z^{-1}(\omega) = \frac{1-e^{-\beta\omega}}{1+e^{-\beta\omega}} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt\, e^{i\omega t} \langle [x(t),\ x(0)]_+ \rangle.$$

Поскольку $Z_0(\omega)$ есть точный импеданс некоторой квантовостатистической модели, для него ФДТ выполняется точно. Следовательно, ФДТ выполняется точно и для $Z(\omega)$, если корреляционная функция $\langle [x(t),\ x(0)]_+ \rangle$ вычисляется в том же приближении, что импеданс [118].

Отметим, что такой результат также является аргументом в пользу разложения (104) для импеданса, поскольку импеданс, полученный из формулы (102), не удовлетворяет ФДТ [118].

В самом деле, условие самосогласованности $\overleftrightarrow{Z}_0(\omega) = \overleftrightarrow{Z}(\omega)$ более общее, чем вариационный принцип для свободной энергии, оно применимо и тогда, когда невозможно записать неравенство (13) (например, при наличии постоянного, однородного, статического электрического поля). С помощью ФДТ (для динамической величины $\hat{\mathbf{p}}$) можно также получить следующее соотношение между средней кинетической энергией электрона и коэффициентом поглощения [118]:

$$\left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} \right\rangle = -\frac{3}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}} \operatorname{Im} \frac{\omega^2}{Z(\omega)}. \tag{110}$$

Кроме того, для гамильтониана Пекара — Фрелиха с помощью масштабных преобразований можно доказать следующее тождество [118]:

$$\left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} \right\rangle \equiv -\frac{1}{2}\alpha \frac{\partial F(\alpha,\ \beta)}{\partial \alpha}. \tag{111}$$

Из (110) и (111) следует [118]

$$F(\alpha,\ \beta) - F(0,\ \beta) = \frac{3}{\pi} \int_0^\alpha \frac{d\alpha'}{\alpha'} \int_0^\infty \frac{1+e^{-\beta\omega}}{1-e^{-\beta\omega}} \operatorname{Im} \frac{\omega^2}{Z(\omega,\ \alpha')}\, d\omega. \tag{112}$$

Выражения (110) — (112) были получены впервые при нулевой температуре в работе [119]. Там же было доказано при помощи численных расчетов, что правило суммы (112) выполняется для энергии основного состояния и импеданса, полученного ФХИП, с точностью до численной погрешности. Такой результат является, конечно, аргументом в пользу приближения ФХИП для импеданса.

Однако, как доказано в [118], правило суммы (112) точно выполняется для свободной энергии (32) и целого семейства разных выражений для импеданса [в том числе и для (104)]. Поэтому (112) оказывается довольно слабым критерием для оценки точности того или иного приближения для импеданса.

Альтернативный метод получения результатов ФХИП [134]. В подходе ФХИП имеются трудности, которые не преодолены до сих пор. Первая состоит в том, что математически он очень сложен, так как для вычисления функции линейного отклика используется неравновесная матрица плотности, что приводит к появлению двойного континуального интеграла (96) по траекториям, определенным на бесконечном временном интервале. Однако та же задача может быть решена с помощью формулы Кубо в рамках равновесной теории, где может быть использован более простой одномерный интеграл по траекториям, определенным в конечном промежутке [0, β]. Вторая трудность заключается в том, что переход от формулы (102) к выражению (104) математически некорректен и оправдывается только физическими аргументами. Действительно, существует некоторая неоднозначность получения в этом подходе выражения для импеданса (см. [118]). Наконец, третья трудность состоит в том, что выражение для дрейфовой подвижности при низких температурах отличается множителем 3/2 β от правильного результата. Источник этой трудности и путь ее преодоления до сих пор остаются неясными.

Как известно [37], электропроводность $\sigma(\omega)$ может быть получена с помощью формулы Кубо

$$\sigma(\omega)=\frac{e^2}{3\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{dE}{E}\,\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_R(E)}{E+\omega+i\varepsilon}, \tag{113}$$

где для простоты мы рассматриваем изотропный случай в отсутствие магнитного поля. Здесь $\tilde{g}_R(E)$ — фурье-образ двухвременной запаздывающей коммутаторной функции Грина:

$$g_R(t-s)=i\theta(t-s)\langle[\hat{\mathbf{v}}_H(t),\ \hat{\mathbf{v}}_H(s)]\rangle$$

и $\bar{\mathbf{v}}_H(t)$ — оператор электронной скорости в представлении Гейзенберга. Функция $\tilde{g}_R(E)$ аналитична в верхней полуплоскости комплексного переменного E и, следовательно, может быть получена аналитическим продолжением из точек $i\omega_n$ ($n=1, 2, \ldots$). Для определения $\tilde{g}_R(i\omega_n)$ введем температурную функцию Грина [120]

$$G(\tau-\sigma)=\langle T\{\hat{\mathbf{v}}_H(\tau)\,\hat{\mathbf{v}}_H(\sigma)\}\rangle;\quad \tau,\ \sigma\in[0,\ \beta];$$

$$\tilde{G}(\omega_n)=\int\limits_0^{\beta}d\tau\, e^{i\omega_n\tau}G(\tau),$$

где $\hat{v}_H(\tau) = e^{\hat{H}\tau}\hat{v}e^{\hat{H}\tau}$ и $T\{\hat{A}(\tau)\hat{B}(\sigma)\} = \theta(\tau-\sigma)\hat{A}(\tau)\hat{B}(\sigma) + \theta(\sigma-\tau)\hat{B}(\sigma)\hat{A}\tau$. Как хорошо известно,

$$\tilde{g}_R(i\omega_n) = \tilde{G}(i\omega_n) \quad n = 1, 2 \ldots,$$

так что для нахождения $\tilde{g}_R(\omega)$ достаточно вычислить $\tilde{G}(\omega_n)$.

Получим теперь континуальное представление для $G(\tau-\sigma)$. Сначала запишем ее через операторы в представлении взаимодействия

$$G(\tau-\sigma) = \frac{\mathrm{Sp}\{e^{-\beta\hat{H}_0}T[\hat{\mathbf{v}}(\tau)\hat{\mathbf{v}}(\sigma)\hat{\sigma}(\beta)]\}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}}},$$

где $\hat{H}_0$, $\hat{v}(\tau)$, $\hat{\sigma}(\beta)$ определяются формулами (62). Теперь введем производящий функционал

$$Z(\mathbf{y}) = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}_0}T\exp\left\{-\int_0^\beta d\tau\left[\hat{H}_i(\tau) + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{v}}^2(\tau) + i\dot{\mathbf{y}}(\tau)\cdot\hat{\mathbf{v}}(\tau)\right]\right\}.$$

Нетрудно проверить, что

$$Z(0) = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}}; \quad G(\tau-\sigma) = -\frac{1}{Z(0)}\left.\frac{\delta^2 Z(\mathbf{y})}{\delta\dot{\mathbf{y}}(\tau)\,\delta\dot{\mathbf{y}}(\sigma)}\right|_{\mathbf{y}=0}. \tag{114}$$

С другой стороны, $Z(\mathbf{y})$ можно выразить через интеграл по мере Винера [36]

$$Z(\mathbf{y}) = \int\limits_{\mathbf{x}(0)=0} D\mathbf{x}\, e^{-\frac{1}{2}\int_0^\beta d\tau\dot{\mathbf{x}}^2(\tau)}\, W_0(\dot{\mathbf{x}}+\dot{\mathbf{y}}),$$

где

$$W_0(\dot{\mathbf{x}}) = \mathrm{Sp}\, e^{-\beta\hat{H}_0}T\exp\left[-\int_0^\beta d\tau\{\hat{H}_i(\tau) + i\dot{\mathbf{x}}(\tau)\cdot\hat{\mathbf{v}}(\tau)\}\right];$$

$$W_0(\dot{\mathbf{x}}) = \Omega\delta[\mathbf{x}(\beta)-\mathbf{x}(0)]\prod_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}}(\dot{\mathbf{x}})$$

и $W_{\mathbf{k}}(\dot{\mathbf{x}})$ определяется формулой (64а). С учетом (114) и (64б) после интегрирования по частям получаем:

$$G(\tau-\sigma) = 3\delta(\tau-\sigma) - \langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\dot{\mathbf{x}}(\sigma)\rangle_S, \tag{115}$$

где $S[\mathbf{x}]$ определяется выражением (10). Очевидно, что (115) более простое математическое выражение, чем формула (96). Обобщение (115) на учет эффектов анизотропии, внешнего магнитного поля, фононной дисперсии и взаимодействия с разными ветвями фононного спектра не представляет принципиальных трудностей.

Чтобы получить с помощью (113) и (115) результаты ФХИП, следует заменить в (115) $S[\mathbf{x}]$ на $S_0[\mathbf{x}]$ [см. формулу (25)]. Приближенное выражение для $\tilde{G}(\omega_n)$, которое получается после вычисления континуального интеграла, имеет вид:

$$\tilde{G}(\omega_n)=3\left[1+\frac{\omega_n^2}{Z_0(\mathrm{i}\omega_n)}\right], \tag{116}$$

где $Z_0(\mathrm{i}\omega_n)$ определяется выражением, получаемым из вариационного принципа для свободной энергии. Приближенное решение этого уравнения можно получить, используя для $\Phi(\tau)$ выражение (70а). Тогда имеем

$$Z_0(\mathrm{i}\omega_n)=-\omega_n^2-\frac{2}{3}\frac{\alpha v^3}{3\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\beta/2} d\tau C(\tau)(1-\cos\omega_n\tau)\,f^{-3/2}(\tau). \tag{117}$$

Аналитическое продолжение (116), (117) в верхнюю полуплоскость дает

$$\tilde{g}_R(\omega)=3\left[1-\frac{\omega^2}{Z(\omega)}\right],$$

где $Z(\omega)$ определяется формулой (106). Используя это выражение в формуле Кубо (113), получаем результат ФХИП

$$\sigma(\omega)=\frac{\mathrm{i}e^2\omega}{Z(\omega)}. \tag{118}$$

Проведенное здесь рассмотрение гораздо проще, чем в работе [105], и выражение для $\sigma(\omega)$ получается «автоматически» без каких-либо дополнительных предположений. Конечно, трудность, связанная с низкотемпературным поведением дрейфовой подвижности, еще остается. При нахождении (118) сделано два приближения. Первое заключалось в замене действия $S[\mathbf{x}]$ на $S_0[\mathbf{x}]$ при получении (116) из (115). Второе — в использовании и (117). Так как последнее приближение является точным до степеней порядка α (при $\alpha \ll 1$), оно не может служить источником вышеупомянутой трудности, которая присутствует уже в низшем порядке. С другой стороны, можно попытаться учесть в (115) другие члены разложения $\langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\cdot\dot{\mathbf{x}}(\sigma)\rangle_S$ по степеням $(S-S_0)$:

$$\langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\cdot\dot{\mathbf{x}}(\sigma)\rangle_S=\langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\cdot\dot{\mathbf{x}}(\sigma)\rangle_{S_0}+$$
$$+\sum_{n-1}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\cdot\dot{\mathbf{x}}(\sigma)(S_0-S)^n\rangle_{S_0}-\langle\dot{\mathbf{x}}(\tau)\,\dot{\mathbf{x}}(\sigma)\rangle_{S_0}\langle(S_0-S)^n\rangle_{S_0}}{\langle e^{S_0-S}\rangle_{S_0}}. \tag{119}$$

Нетрудно доказать, что первая поправка [соответствующая $n=1$ в (119)] равна нулю: это просто следствие того, что S_0 определялось вариационным принципом для свободной энергии. Поскольку при малом α $\langle S_0-S\rangle_{S_0}$ пропорционально α, можно было бы заключить, что (115) является тоже точным выражением до степеней порядка α. Однако этот момент требует дополнительного рассмотрения по той причине, что при $\alpha \ll 1$ и $\beta \gg 1$ $\langle S_0 - S \rangle_{S_0}$ пропорционально $\alpha\beta$ [11] и разложение могло бы оказаться несправедливым при низких температурах.

Предположение о несправедливости разложения при низких температурах хорошо согласуется с тем известным фактом [23, 41, 121], что квадратичная аппроксимация всегда приводит к максвелловской функции распределения для импульса полярона в статическом электрическом поле, а использование функции распределения квазимаксвелловского вида при решении стационарного уравнения Больцмана приводит при низких температурах к появлению дополнительного фактора $3/2\ \beta$ в выражении для подвижности [21, 22]. Однако для электрона, взаимодействующего только с оптическими фононами, единственным механизмом релаксации при низких температурах является испускание оптических фононов за счет энергии, полученной от электрического поля. Этот процесс носит сильно неупругий и анизотропный характер, поэтому функция распределения в слабом поле резко отличается от максвелловского вида [122]. При более высоких температурах распределение по импульсам для полярона хорошо аппроксимируется максвелловским, так как его тепловая энергия всегда достаточна, чтобы испускать фононы и, возможно, также его рассеяние на уже существующих тепловых фононах. Поэтому при слабой связи и высоких температурах ($\beta \ll 1$) формула (118) приводит к такой же температурной зависимости для дрейфовой подвижности, что и уравнение Больцмана.

7. ПОЛЯРОН В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Поведение поляронов в сильных электрических полях представляет большой экспериментальный и теоретический интерес. Поляронные эффекты в сильных полях (порядка 10^3 В/см или больше) определяют большие потери энергии электронов в полярных диэлектриках [123, 124] и приводят к ряду специфических нелинейных явлений электропереноса [122, 125—127]. Адекватное микроскопическое описание этих ситуаций требует развития новых методов изучения кинетических явлений, учитывающих сильное электрон-фононное взаимодействие, неупругий характер отдельных актов рассеяния на оптических фононах и сильную интерференцию между ними [39—41, 121, 128—131].

Как известно, кинетическое уравнение Больцмана применимо для описания поляронов в электрическом поле только в случае слабой связи, относительно слабых полей и низких частот. Условия, при которых больцмановское описание несправедливо, ярко иллюстрируются примером, приведенным в [39] о потерях энергии электронов в диэлектрической части ряда электронных приборов (подробнее см. [123, 124]). В присутствии сильного электрического поля (порядка 10^6 В/см), энергия, потерянная электронами на единицу расстояния, достигает значения 0,01—0,06 эВ/Å. Типичное значение для Al_2O_3 ($\alpha \simeq 2{,}7$) равно 0,03 эВ/Å. Акустические фононы могут дать вклад не более 10^{-4} эВ/Å, а механизмы образования пары электрон — дырка не играют большую роль при таких полях, потому что энергетическая щель для этих материалов очень велика ($\gg 10$ эВ). Поскольку энергия оптических фононов в этих соединениях порядка 0,05—0,1 эВ (в Al_2O_3 имеются продольные оптические фононы с энергиями 0,060, 0,064 и 0,078 эВ], для получения величины потери такого порядка в терминах отдельных актов испускания фононов необходимо брать длины свободного пробега порядка 3—4 Å или времени свободного пролета электронов порядка $2\cdot 10^{-15}$ с. Если учесть, что при комнатной температуре существенно и поглощение фононов, то эти параметры на самом деле еще больше. Ясно, что последовательное описание этого явления в рамках больцмановского приближения или с помощью теории линейного отклика невозможно.

В [39] развит новый подход к изучению кинетики поляронов в сильном статическом электрическом поле. Целью работы является получение соотношения $E = E(v)$ между напряженностью внешнего поля E и скоростью v, достигнутой электроном (предполагается, что при не слишком сильных полях достигается стационарное состояние, в котором электрон движется с постоянной скоростью). Подход работы [39] основан на уравнении баланса для полного импульса системы с использованием преобразования Галилея для перехода в систему отсчета, движущуюся вместе с электроном. Точные выражения, представленные через интегралы по траекториям, аппроксимируются моделью, где электрон взаимодействует с распределением осцилляторов. Полученная картина физически разумна при всех значениях α, β и E, но авторы отмечают две трудности, которые до сих пор не удалось преодолеть.

1. Результаты, полученные на основе уравнения баланса для импульса, не совпадают с теми, которые получаются исходя из уравнения баланса для энергии.

2. В пределе слабого поля полученная ими подвижность не совпадает с той, которая получается на основе уравнения Больцмана (отличается, как в [105], фактором $3/2\ \beta$).

Как выяснилось позже [21, 22], результат теорий Торнбера и Фейнмана (только в пределе слабой связи) можно получить из уравнения Больцмана, если предположить, что его стационарное решение имеет вид квазимаксвелловского распределения. Действительно, с одной стороны, аппроксимация модели полярона квадратичным функционалом всегда приводит к функции распределения по импульсам квазимаксвелловского типа [23, 41, 121], причем эффективная температура полярона не зависит от напряженности электрического поля. В то же время исследования точного решения уравнения Больцмана [92, 98, 99, 131] и экспериментальные данные по измерению дрейфовой скорости поляронов в сильных электрических полях при низких температурах [122, 125—127] ясно показывают, что функция распределения по импульсам резко отличается от максвелловской. Качественно это связано с тем, что при низких температурах и сильных полях доминирующим механизмом релаксации является испускание оптических фононов — процесс сильно неупругого и анизотропного характера, который приводит к специфическому поведению носителей заряда, известный под названием «streaming motion». Поведение поляронов при низких температурах в сильных полях отличается от обычного поведения горячих электронов, которые хорошо описываются максвелловской функцией распределения (с некоторой эффективной температурой и средней скоростью), потому что для последних доминирующий механизм релаксации (рассеяние на акустических фононах и на других электронах) — почти изотропный и квазиупругий. При более высоких температурах ($\beta \simeq 1$) полярон может испускать оптические фононы за счет своей тепловой энергии и возможно также поглощение уже существующих тепловых фононов, так что характер механизмов релаксации меняется, уровень хаотизации достаточен и можно ожидать, что ситуация более адекватно описывается квазимаксвелловской функцией распределения.

Несмотря на вышеупомянутые трудности теория, развитая в [39], представляет собой пока единственную микроскопическую теорию полярона с произвольной связью в сильном электрическом поле. Она объясняет потери энергии электронов при прохождении через ионный кристалл и создает наглядную физическую картину процессов релаксации, обусловленных взаимодействием с оптическими фононами. Поэтому представляет большой интерес подробное изложение этого подхода и обсуждение сути присущих ему приближений.

Метод уравнения баланса. Полярон в постоянном однородном поле напряженности E описывается гамильтонианом (90) при частном выборе $E(t) = Ee^{\varepsilon t}$ $(t > t_0)$. Предположим, что при $t - t_0 \to \infty$ достигается стационарное состояние, в котором электрон движется с постоянной скоростью $\mathbf{v}$. Уравнение движения для оператора электронного импульса

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{p}} = \mathrm{i}\,[\hat{H},\ \hat{\mathbf{p}}]$$

приводит в стационарном состоянии к условию [39]

$$e\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} R_{\mathbf{k}}. \tag{120}$$

Оно описывает баланс между импульсом, который электрон приобретает за единицу времени от электрического поля, и импульсом, который передается решетке из-за взаимодействия с фононами:

$$R_{\mathbf{k}} = \mathrm{i}Q(k)\,\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{+} e^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \rangle;$$

$$\langle \ldots \rangle = \lim_{t_0 \to -\infty} \mathrm{Sp}\,\{\hat{\rho}(t)\ldots\}.$$

Величина $R_{\mathbf{k}}$ зависит от параметров α, β и E и представляет собой разницу между числом испущенных и поглощенных фононов с импульсом $\mathbf{k}$ за единицу времени в стационарном состоянии.

Аналогичное условие имеется и для баланса энергии в системе. Для этого можно исходить из тождества

$$\frac{d\hat{H}}{dt} \equiv \mathrm{i}\,[\hat{H},\ \hat{H}] = 0.$$

В стационарном состоянии имеем:

$$\frac{d}{dt}\left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \left[\hat{H},\ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2}\right] \right\rangle = 0;$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{H}_{\mathrm{int}} \rangle = \mathrm{i}\,\langle [\hat{H},\ \hat{H}_{\mathrm{int}}] \rangle = 0.$$

Тогда $\langle [\hat{H}_{\mathrm{ph}},\ \hat{H}] \rangle + \langle [eEx,\ \hat{H}] \rangle = 0$, что приводит к условию:

$$eEv = \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k}};\ \ \mathbf{v} = \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle. \tag{121}$$

Формула (121) выражает баланс между энергией, которую электрон приобретает за единицу времени от электрического поля, и энергией, которую передает решетке из-за взаимодействия с фононами. Континуальное представление для $R_{\mathbf{k}}$ получено в работе [39]. Оно может быть написано в виде

$$R_{\mathbf{k}} = 2Q^2(k)\,\mathrm{Re}\int_0^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{-\varepsilon t}\left\{ \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}}{1-\mathrm{e}^{-\beta}} \langle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]} \rangle_{\Phi} - \right.$$

$$\left. - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}}{\mathrm{e}^{\beta}-1} \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]} \rangle_{\Phi} \right\}, \tag{122}$$

где функционал Φ определяется формулами (97) при $E(t) = E'(t) = Ee^{-\varepsilon t}$.

С помощью (122) условия баланса (120) и (121) принимают вид:

$$e\mathbf{E} = 2\mathrm{Re} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}Q^2(k) \int_0^{\infty} dt\, \mathrm{e}^{-\varepsilon t}\left\{ \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}}{\mathrm{e}^{\beta}-1} + \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}}{1-\mathrm{e}^{-\beta}} \right\} \times$$

$$\times \langle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]} \rangle_{\Phi}; \tag{123}$$

$$eEv = 2\,\mathrm{Re} \sum_{\mathbf{k}} Q^2(k) \int_0^{\infty} dt \mathrm{e}^{\varepsilon t} \left\{ \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t}}{1-\mathrm{e}^{-\beta}} - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}}{\mathrm{e}^{\beta}-1} \right\} \times$$

$$\times \langle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]} \rangle_{\Phi}. \tag{124}$$

Формулы (123) и (124) — точные выражения. Их обобщение на случай, когда кристалл анизотропен, электрон взаимодействует с несколькими ветвями фононного спектра, на систему действует внешнее магнитное поле, а также переменное электрическое поле, получено в работах [40, 41, 129].

Однако, как уже было отмечено, правые части формул (123) и (124) не зависят явно от скорости $\mathbf{v}$. Поэтому выражение (123) не позволяет найти соотношение $E(v)$ без дополнительных предположений, позволяющих превратить (хотя бы приближенным образом) функцию $R_{\mathbf{k}}(\alpha, \beta, \mathbf{E})$ в функцию от α, β и $\mathbf{v}$. В этом суть подхода [39] и сделанных там приближений.

Для получения результатов работы [39] сделаем замену функциональных переменных:

$$\mathbf{r}(t)=\mathbf{R}(t)+\mathbf{v}t; \quad \mathbf{r}'(t)=\mathbf{R}'(t)+\mathbf{v}t. \tag{125}$$

Из (123), (124) имеем:

$$e\mathbf{E}=2\operatorname{Re}\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}Q^2(k)\int_0^\infty dt\, e^{-\varepsilon t}\left[\frac{e^{it}}{e^{\beta}-1}+\frac{e^{-it}}{1-e^{-\beta}}\right]\times$$
$$\times e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}t}\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(0)]}\rangle_{\Phi'};$$

$$eEv=2\operatorname{Re}\sum_{\mathbf{k}}Q^2(k)\int_0^\infty dt\, e^{-\varepsilon t}\left[\frac{e^{-it}}{1-e^{-\beta}}-\frac{e^{it}}{e^{\beta}-1}\right]\times$$
$$\times e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}t}\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(0)]}\rangle_{\Phi'},$$

где
$$\Phi'(\mathbf{R}, \mathbf{R}')=\int_0^\infty dt\left\{\frac{1}{2}[\dot{\mathbf{R}}^2(t)-\dot{\mathbf{R}}'^2(t)]+Ee^{-\varepsilon t}[x(t)-x'(t)]\right\}+$$
$$+V'(\mathbf{R})-V'^*(\mathbf{R}')+U'(\mathbf{R}, \mathbf{R}');$$

$$V'(\mathbf{R})=i\sum_{\mathbf{k}}Q^2(k)\int_0^\infty dt\int_0^t ds\, e^{-\varepsilon(t+s)}C[i(t-s)]\, e^{i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(s)]+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}(t-s)};$$

$$U'(\mathbf{R}, \mathbf{R}')=-i\sum_{\mathbf{k}}Q^2(k)\int_0^\infty dt\int_0^\infty ds\, e^{-\varepsilon(t+s)}\times$$
$$\times C[i(t-s)]\, e^{i\mathbf{k}[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(s)]+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}(t-s)}.$$

После такой формальной замены переменных, которая не меняет физического смысла и содержание имеющихся выражений, в работе [39] сделаны следующие приближения:

а) замена переменных (125) интерпретируется как переход в систему отсчета S', движущуюся вместе с электроном;

б) предполагается, что для наблюдателя в S' корреляционная функция $\langle\exp\{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(0)]\}\rangle_{\Phi'}$, которая определяется флуктуациями электрона относительно его средней траектории, такая же, как для наблюдателя в системе S в отсутствие электрического поля.

Тогда:

$$\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{R}(t)-\mathbf{R}(0)]}\rangle_{\Phi'} \to \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]}\rangle_{\Phi}|_{E=E'=0};$$

в) корреляционная функция $\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]}\rangle_{\Phi}|_{E=E'=0}$ вычисляется в квадратичной аппроксимации, т. е. заменой функционала Φ на Φ_0 [см. формулу (101)], т. е.

$$\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]}\rangle_{\Phi}|_{E=E'=0} \to \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]}\rangle_{\Phi_0}|_{E=E'=0}.$$

Последняя корреляционная функция выражается гауссовым интегралом и вычисляется точно. Результат имеет вид:

$$\langle e^{-i\mathbf{k}\cdot[\mathbf{r}(t)-\mathbf{r}(0)]}\rangle_{\Phi_0}|_{E=E'=0} = e^{-\frac{k^2}{2}K_\beta(t)},$$

где

$$K_\beta(t) = \frac{1}{\pi i}\int_0^\infty d\omega \left(\frac{1-e^{i\omega t}}{1-e^{-\beta\omega}} + \frac{1-e^{-i\omega t}}{e^{\beta\omega}-1}\right)\left(\frac{1}{Z_0^*(\omega)} - \frac{1}{Z_0(\omega)}\right)$$

и $Z_0(\omega)$ определяется формулой (103). В частном случае одноосцилляторной модели Фейнмана функция $K_\beta(t)$ дается формулой:

$$K_\beta(t) = \frac{1}{v^2}\left\{\frac{\beta}{4} + \frac{t^2}{\beta} + \frac{v^2-1}{Wv}\,\frac{\operatorname{ch}\frac{\beta Wv}{2} - \cos Wvt}{\operatorname{sh}\frac{\beta Wv}{2}}\right\}.$$

После этих приближений в пределе $\varepsilon \to 0$ выражения (123) и (124) принимают окончательный вид:

$$e\mathbf{E} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}Q^2(k)\int_{-\infty}^{\infty} dt\, C(it)\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}t - \frac{k^2}{2}K_\beta(t)}; \tag{126}$$

$$eEv = \sum_{\mathbf{k}} Q^2(k)\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}t - \frac{k^2}{2}K_\beta(t)}\left[\frac{e^{-it}}{1-e^{-\beta}} - \frac{e^{it}}{e^{\beta}-1}\right]. \tag{127}$$

Таким образом, в рамках приближений [39] эффект внешнего электрического поля состоит лишь в том, что под его влиянием электрон приобретает некоторую среднюю скорость $\mathbf{v}$, но не отражается на флуктуации электрона относительно его средней траектории. Поэтому эффективная температура электронов не зависит от напряженности поля.

Как уже было сказано, формула (126) в пределе слабого поля приводит к выражению (89) для дрейфовой подвижности. Другая трудность этого подхода состоит в том, что формулы (126) и (127) не эквивалентны, они приводят к одинаковым результатам, только если $K_\beta(t)$ не зависит от t. Авторы работы [39] предпочитают формулу (126), потому что она физически разумна для всех значений параметров α, β и E, в то время как (127) приводит к выражению для дрейфовой подвижности, согласно которому подвижность растет с температурой. Таким образом, приближенное решение задачи полярона в электрическом поле, полученное в [39], не гарантирует сохранение энергии в системе.

Отметим также, что переход в систему отсчета S' через замену переменных (125) отличается от способа, использованного в разд. 3 при определении эффективной массы полярона. В приближении [39] не учитывается доплеровский сдвиг фононных частот для наблюдателя, движущегося со скоростью $\mathbf{v}$. Однако процедура, использованная в разд. 3, ограничивается рассмотрением случая бесконечно малых скоростей и требует обобщения при ее применении к задаче, где электрон движется с конечной скоростью.

Поведение полярона в электрическом поле. В работе [39], на основе формулы (126) и с помощью численных расчетов получено семейство кривых $E(\mathbf{v})$ при $\alpha = 3, 5, 7$ и $\beta = 20; 10; 5; 1; 0{,}1; 0{,}01; 0{,}001$, которое позволяет изучать всю физическую картину потери энергии полярона в сильном поле. Все результаты можно проинтерпретировать в терминах конкуренции механизмов поглощения и испускания оптических фононов поляроном массы $m_0^* = \nu^2$.

Главные особенности полученной картины следующие.

а. Потери энергии на единицу расстояния $eE(v)$ растут с v и достигают максимума eE_1 при некоторой пороговой скорости $v_1(\alpha, \beta)$. При $E > E_1$ электрон-фононное взаимодействие уже не может удержать электрон, который будет беспредельно ускоряться под действием электрического поля. Конечно, в реальном кристалле тут же начнут действовать другие механизмы потери энергии, которые не учтены в гамильтониане Пекара — Фрелиха и которые определяют релаксации при таких полях (например, межзонные переходы). При $v > v_1$ производная $dE/dv < 0$, что соответствует нестабильному режиму, в котором v теряет физический смысл стационарной скорости. Потери при фиксированной скорости монотонно растут с температурой и с параметром связи α.

б. При низких температурах ($\beta \gg 1$) скорость v_1 приблизительно совпадает со скоростью v_0, необходимой для испускания оптического фонона: $\frac{1}{2} m_0^* v_0^2 = \hbar\omega_0$ ($v_0 = \sqrt{2}/\nu$ в использованной нами системе единиц). Это следствие того, что при $v \leqslant v_1$ и $\beta \gg 1$ доминирующим механизмом релаксации является испускание оптических фононов. С ростом α скорость v_1 уменьшается из-за роста эффективной массы полярона. При увеличении температуры v_1 растет и заметно отличается от v_0 (при $\beta < 1$, $v_1 > \sqrt{2} > v_0$) потому, что рассеяние на тепловых фононах начинает играть существенную роль.

в. При $v < v_1$ имеются два режима: линейный режим, где релаксация определяется рассеянием на тепловых фононах при малых скоростях, и нелинейный, почти независимый от температуры режим, где потери определяются испусканием оптических фононов при более высоких скоростях. Если $\beta > 2$, полярон очень быстро переходит в этот нелинейный режим, который характеризуется быстрым приобретением энергии от электрического поля и ее потерей путем испускания фононов.

В [39] оценивались также максимальные потери энергии для Al_2O_3. Авторы использовали значения $\hbar\omega_0 = 0{,}07$ эВ, $\varepsilon_\infty = 3{,}1$, $\varepsilon_0 = 9{,}0$ и $m = m_e$, тогда $\alpha = 2{,}7$ и при низких температурах получается $eE_1 = 0{,}025$ эВ/Å, в хорошем согласии с экспериментальным значением 0,03 эВ/Å [123].

В работе [121] развит альтернативный метод получения результатов работы [39], основанный на уравнении движения для операторов в представлении Гейзенберга, и явно доказано, что функция распределения по импульсам в приближении [39] имеет вид:

$$f(\mathbf{p}) = \left(\frac{\beta_e}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{\beta_e}{2}(\mathbf{p}-\mathbf{v})^2\right\},$$

где β_e — эффективная обратная температура, зависящая от α и β, которая выражается формулой

$$\beta_e = \beta v^2 \left\{1 + (v^2 - 1)\frac{\beta W v}{2} \operatorname{cth}\frac{\beta W v}{2}\right\}^{-1}.$$

Отметим, что при $\beta \to \infty$ $\frac{\beta}{\beta_e} \to 0$, если $v \neq 1$. Это значит, что при низких температурах эффективная температура сильно отличается от температуры решетки даже в случае слабой связи.

Анализ экспериментальных данных по подвижности в AgBr и AgCl при $T = 4{,}2$ К и сильных полях показывает, что предельная скорость поляронов $\mathbf{v}_1 < 3\sqrt{2}/4 \simeq 1{,}06$ [122]. Результаты работы [39] дают $v_1 \simeq v_0 = \sqrt{2}/v = 1{,}23$ для AgBr ($\alpha = 1{,}6$). Сравнение проведено в работе [121], где разногласие объясняется тем, что непараболичность закона дисперсии полярона приводит к увеличению эффективной массы со скоростью и что для учета этого эффекта необходимо принимать во внимание зависимость вариационных параметров v и W от скорости. Отметим, что это возможно сделать на основе неравенства (70) при $\beta = \infty$.

Мы признательны академику Н. Н. Боголюбову за интерес и внимание к нашим работам по теории полярона. Мы благодарны Н. Н. Боголюбову (мл.), Е. А. Кочетову, В. Д. Лахно, В. Б. Приезжеву, С. М. Смондыреву за обсуждение различных аспектов работы.

Мы очень признательны С. Н. Горшкову, внимательно прочитавшему рукопись и сделавшему ряд ценных замечаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Пекар С. И.** Исследования по электронной теории кристаллов. М.; Гостехиздат, 1951.
2. **Fröhlich H.**— Advances Phys., 1954, v. 3, N 11, p. 325.
3. **Ландау Л. Д.**— Phys. Z. der Sovjet union, 1933, v. 3, N 6, p. 664.
4. **Пекар С. И.**— УФН, 1953, т. 50, вып. 2, с. 197.

5. **Боголюбов Н. Н., Тябликов С. В.**— ЖЭТФ, 1949, т. 19, с. 256.
6. **Боголюбов Н. Н.**— УМЖ, 1950, т. 2, № 2, с. 3.
7. **Тябликов С. В.**— ЖЭТФ, 1951, т. 21, с. 377.
8. **Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S.**— Philos. Mag., 1950, v. 41, p. 221.
9. **Lee T. D., Low F. E., Pines D.**— Phys. Rev., 1953, v. 90, p. 297.
10. **Gross E. P.**— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 660.
11. **Feynman R. P.**— Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 1004.
12. **Polarons** and Excitons/Ed. by C. Kuper and G. Whitfield. Edinburgh, Oliver and Boyd, 1963.
13. **Appel J.**— Solid State Phys., 1968, v. 21, p. 1; Поляроны/Под ред. Ю. А. Фирсова. М.: Наука, 1975.
14. **Polarons** in Ionic Crystals and Ionic Semiconductors/Ed. by J. T. Devreese. Amsterdam, North-Holland, 1972.
15. **Linear** and Nonlinear Transport in Solids/Ed. by J. T. Devreese and R. Evrard. N. Y., Plenum Press, 1976.
16. **Recent** Developments in Condensed Matter Physics. Vol. 1/Ed. by J. T. Devreese. N. Y., Plenum Press, 1981.
17. **Proc.** of the 1979 Intern. Summer School on New developments in Semiconductor Physics, held in Szeged, Hungary, Springer Verlag, West Berlin, 1980.
18. **Path** Integrals and their Applications in Quantum, Statistical and Solid State Physics/Ed. by G. J. Papadopoulos and J. T. Devreese. N.Y., Plenum Press, 1978.
19. **Functional** Integration. Theory and Applications/Ed. by E. P. Antoine and E. Tirapegui. N.Y., Plenum Press, 1980.
20. **Кривоглаз М. А., Пекар С. И.**— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1957, т. XXI, № 1, с. 3.
21. **Боголюбов Н. Н.** Preprint JINR, E17-11822, Dubna, 1978.
22. **Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.)** — ЭЧАЯ, 1980, т. 11, вып. 2, с. 245.
23. **Боголюбов Н. Н., Боголюбов Н. Н. (мл.)** ОИЯИ, Р17-81-65, Дубна, 1981.
24. **Боголюбов Н. Н. (мл.), Плечко В. Н.** ОИЯИ, Р17-81-834, Дубна, 1981.
25. **Винецкий В. Л.**— ЖЭТФ, 1961, т. 40, вып. 5, с. 1459.
26. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Матвеев В. А., Смондырев М. А.**— ТМФ, 1977, т. 30, с. 183.
27. **Platzman P. M.**— Phys. Rev., 1962, v. 125, N 6, p. 1961.
28. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.** Сообщение ОИЯИ, Р2-10234, Дубна, 1976.
29. **Кочетов Е. А.** Сообщение ОИЯИ, Р2-80-305, Дубна, 1980.
30. **Matsuura M.**— Canad. J. Phys., 1974, v. 52, N 1, p. 1.
31. **Haken H.**— Z. Physik, 1957, Bd 147, S. 323.
32. **Москаленко В. А.**— ДАН СССР, 1958, т. 119, с. 678.
33. **Osaka K.**— Progr. Theor. Phys., 1959, v. 22, N 3, p. 437.
34. **Фейнман Р. П., Хиббс А.** Квантовая механика и интегралы по траекториям. Пер. с англ., М.: Мир, 1968.
35. **Фейнман Р. П.** Статистическая механика: Пер. с англ. М.: Мир, 1978.
36. **Gelfand I. M., Yaglom A. M.**— Math. Phys., 1966, v. 16, N 1, p. 48.
37. **Тябликов С. В.** Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1965.
38. **Родригес К., Федянин В. К.** ОИЯИ, Р17-80-745, Дубна, 1980.
39. **Thornber K. K., Feynman R. P.**— Phys. Rev. B, 1970, v. 1, N 10, p. 4099.
40. **Thornber K. K.**— In ref. [15].
41. **Thornber K. K.**— Phys. Rev. B, 1971, v. 3, N 6, p. 1929.
42. **Adamowsky J., Gerlach B., Leschke M.**— In ref. [19].
43. **Родригес К., Федянин В. К.** ОИЯИ, Р17-81-8, Дубна, 1981; Phys. Stat. Sol., 1982, v. 110, p. 105; Physica. 1982, v. 112A, p. 615—630.
44. **Schultz T. D.**— Phys. Rev., 1959, v. 116, p. 526.
45. **Luttinger J. M., Lu Ch. Y.**— Phys. Rev. B, 1980, v. 21, N 10, p. 4251.
46. **Marshall J. T., Mills L. R.**— Phys. Rev. B, 1970, v. 2, p. 3143.
47. **Hohler G., Mullensiefen A.**— Z. Phys., 1959, Bd 157, S. 159—165.
48. **Rössler J.**— Phys. Stat. Sol. (b), 1968, v. 25, p. 311.

49. **Okamoto K., Abe R.**— J. Phys. Soc. Japan, 1971, v. 31, N 5, p. 1337.
50. **Okamoto K., Abe R.**— J. Phys. Soc. Japan, 1972, v. 33, N 2, p. 343.
51. **Larsen D.**— Phys. Rev., 1968, v. 172, p. 967.
52. **Larsen D.**— Phys. Rev., 1969, v. 187, p. 1147.
53. **Gross E. P.**— Ann. Phys. (N.Y.), 1959, v. 8, p. 78.
54. **Matz D., Burkey B. C.**— Phys. Rev. B, 1971, v. 3, p. 3487.
55. **Manka R.**— Phys. Lett. A, 1978, v. 67, p. 311.
56. **Manka R.**— Phys. Stat. Sol. (b), 1979, v. 93, p. 53.
57. **Manka R., Suffczynsky M.**— J. Phys. C, 1980, v. 13, p. 6369.
58. **Lépine Y., Matz D.**— Phys. Stat. Sol. (b), 1979, v. 96, p. 797.
59. **Tokuda N.**— J. Phys. C, 1980, v. 13, N 30, p. L851.
60. **Shoji H., Tokuda N.**— J. Phys. C, 1981, v. 14, N 9, p. 1231.
61. **Lu Chin-Yuan.**— J. Phys., 1981, suppl. v. 42, N 12, p. 6—481.
62. **Whitfield G., Engineer M.**— Phys. Rev. B, 1975, v. 12, p. 5472.
63. **Hawton M. H., Paranjape V. V.**— Phys. Lett., 1979, v. 75A, p. 115.
64. **Родригес К., Федянин В. К.** JINR E17-80-724, Dubna, 1980; Докл. АН СССР, 1981, т. 259, № 5, с. 1088.
65. **Hellwarth R. W., Platzman P. M.**— Phys. Rev., 1962, v. 128, p. 1599.
66. **Marshall J. T., Chawla M. S.**— Phys. Rev. B, 1970, v. 2, p. 4283.
67. **Saitoh M.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, N 3, p. 886.
68. **Saitoh M.**— J. Phys. Soc. Japan, 1981, v. 40, N 7, p. 2295.
69. **Arisawa K., Saiton M.**— Phys. Lett. A, 1981, v. 82A, N 9, p. 462.
70. **Yakanit V. Sa.**— Phys. Rev. B, 1979, v. 19, N 4, p. 2377.
71. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.**— В кн.: Тр. X Международной школы молодых ученых. Баку, 1976, ОИЯИ Д-2-10533, Дубна, 1977.
72. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Матвеев В. А., Смондырев М. А.**— ТМФ, 1977, т. 30, с. 183.
73. **Yokota T.**— Ann. Inst. Statist. Mechanics, 1954, v. 5, p. 107.
74. **Fulton T.**— Phys. Rev., 1956, v. 103, p. 1712.
75. **Клюканов А. А., Покатилов Е. П.**— ЖЭТФ, 1971, т. 60, с. 312.
76. **Бальмуш Н. И., Покатилов Е. П., Клюканов А. А.**— ФТТ, 1974, т. 16, с. 3131.
77. **Кочетов Е. А., Смондырев М. А.** ОИЯИ, Р2-80-328, Дубна, 1980.
78. **Saitoh M.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, N 3, p. 878.
79. **Кочетов Е. А., Смондырев М. А.** ОИЯИ, Р2-80-268, Дубна, 1980.
80. **Струков В. К., Федянин В. К.** ОИЯИ, Р17-81-84, Дубна, 1980.
81. **Matz D. R.**— In ref. [14], p. 463.
82. **Родригес К., Федянин В. К.** ОИЯИ, Р17-81-169, Дубна, 1981.
83. **Hodby J. W.**— J. Phys C, 1971, v. 4, N 1, p. 1.
84. **Waldman J., Larsen D. M., Tannenwald P. E. e. a.**— Phys. Rev. Lett., 1969, v. 23, N 18, p. 1033.
85. **Baxter J. Д., Ascarelli G., Rodriguez S.**— Phys. Rev. Lett., 1971, v. 27, N 2, p. 100.
86. **Tamura H., Masumi T.**— J. Phys. Soc. Japan, 1971, v. 30, p. 1763.
87. **Tamura H., Masumi T.**— J. Phys. Soc. Japan, 1971, v. 30, p. 897.
88. **Kanazawa K. K., Brown F. C.**— Phys. Rev., 1964, v. 135, p. A1757.
89. **Tamura H.**— Solid State Commun., 1972, v. 10, p. 297.
90. **Hodby J. W.**— Ibid., 1969, v. 7, p. 811.
91. **Гастев С. В., Соколов Н. С.**— ФТТ, 1980, вып. 22, с. 976.
92. **Devreese J. T., Evrard R.**— In ref. [15].
93. **Струков В. К., Федянин В. К.** ОИЯИ, Р17-11954, Дубна, 1978.
94. **Родригес К., Федянин В. К.**— В кн.: Тр. II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Д17-81-758, Дубна, 1981, с. 104.
95. **Ascarelli G., Baxter J. E.**— Solid State Commun., 1972, v. 10, p. 315.
96. **Peeters F. M., Devreese J. T.**— Ibid., 1981, v. 39, p. 445.
97. **Thornber K. K.**— In ref. [18], p. 359.
98. **Devreese J. T., Evrard R.**— Phys. Stat. Sol. (b), 1976, v. 78, p. 85.
99. **Devreese J. T.**— Solid State Commun., 1981, v. 39, N 11, p. 163.

100. **Kadanoff L. P.**— Phys. Rev., 1963, v. 130, N 4, p. 1364.
101. **Kadanoff L. P., Revzen M. I.**— Nuovo cimento, 1964, v. 33, N 2, p. 397.
102. **Platzman F. M.**— In ref. [12], p. 123.
103. **Osaka Y.**— Prog. Theoret. Phys., 1961, v. 25, N 4, p. 517.
104. **Langreth D. C., Kadanoff L. F.**— Phys. Rev., 1964, v. 133, N 4A, p. A1070.
105. **Feynman R. P., Hellwarth R. W., Iddings C. K., Platzman F. M.**— Phys. Rev., 1962, v. 127, N 4, p. 1004.
106. **Thornber K. K.**— In ref. [14], p. 361.
107. **Devreese J. T.**— In ref. [14], p. 83.
108. **Покатилов Е. П., Фомин В. М.**— ТМФ, 1978, т. 36, № 2, с. 252.
109. **Балабаев Н. К., Лахно В. Д.**— ТМФ, 1980, т. 45, № 1, с. 139.
110. **Devreese J. T., de Sitter J., Goovaerts M.**— Phys. Rev. B, 1972, v. 5, p. 2367.
111. **Гуревич В. Д., Ланг И. Г., Фирсов Ю. А.**— ФТТ, 1962, т. 4, вып. 5, с. 1252.
112. **Kartheuser E., Evrard R., Devreese J. T.**— Phys. Rev. Lett., 1969, v. 22, N 3, p. 94.
113. **Finkenrath H., Unle N., Waidelich W.**— Solid State Commun., 1969, v. 7, p. 11.
114. **Brandt R. C.**— In ref. [14], p. 227.
115. **Балабаев Н. К., Лахно В. Д.** ОНТИ, НЦБИ, Пущино, 1979.
116. **Парфеньев Р. В., Шалый С. С., Муждаба В. М.**— ЖЭТФ, 1964, т. 7, с. 444.
117. **Гуревич В. П., Фирсов Ю. А.**— Там же, с. 734.
118. **Thornber K. K.**— Phys. Rev. B, 1974, v. 9, N 8, p. 3489.
119. **Lemmens L. F., de Sitter J., Devreese J. T.**— Phys. Rev. B, 1973, v. 8, p. 2717.
120. **Абрикосов А. А., Дзялошинский И. Е., Горьков П. П.** Методы квантовой теории поля в статистической механике. М.: Физматгиз, 1962.
121. **Peeters F. M., Devreese J. T.**— Phys. Rev. B, 1981, v. 23, N 4, p. 1936.
122. **Komiyama S., Masumi T., Kajita K.**— Phys. Rev. B, 1979, v. 20, N 12, p. 5192.
123. **Handy R. M.**— J. Appl. Phys., 1966, v. 37, p. 4620.
124. **Savoye E. D., Anderson D. E.**— J. Appl. Phys., 1967, v. 38, p. 3245.
125. **Hughes R. C.**— Phys. Rev. Lett., 1975, v. 35, N 7, p. 449.
126. **Masumi T.**— In ref. [16], p. 543.
127. **Komiyama S., Kajita K., Masumi T.**— In ref. [16], p. 563.
128. **Peeters F. M., Devreese J. T.**— In ref. [19], p. 303.
129. **Фомин В. М.**— ТМФ, 1981, т. 49, № 1, с. 102.
130. **Chems A., Matulis A.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, suppl. A, p. 337.
131. **Devreese J. T., Brosens F., Evrard R., Kartheuser E.**— J. Phys. Soc. Japan, 1980, v. 49, suppl. A, p. 341.
132. **Горшков С. Н., Лахно В. Д., Родригес К., Федянин В. К.** ОИЯИ, E17-83-645, Дубна, 1983.
133. **Кочетов Е. А., Кулешов С. П., Смондырев М. А.**— ЭЧАЯ, 1982, т. 13, вып. 3.
134. **Горшков С. Н., Родригес К., Федянин В. К.**— ТМФ, 1983, т. 56, № 3, с. 467.
135. **Горшков С. Н., Родригес К., Федянин В. К.** ОИЯИ, P17-83-95, Дубна, 1983.