Об улучшаемых оценках для поляронных систем во внешнем потенциале

Н. Н. Боголюбов (мл.)^a, А. В. Солдатов^b

*Математический институт имени В. А. Стеклова РАН,
Россия, 119991, Москва, ул. Губкина, д. 8.*

E-mail: ^a nikolai_bogolubov@hotmail.com, ^b soldatov@mi.ras.ru

Статья поступила 13.03.2016, подписана в печать 18.05.2016.

Предложен вариационный подход, позволяющий получать регулярным способом последовательность улучшаемых оценок сверху для энергии основного состояния разнообразных моделей поляронов, удерживаемых во внешнем электростатическом потенциале. Предлагаемый подход применим для произвольной величины электрон-фононного взаимодействия и допускает обобщение на случай систем поляронного типа, находящихся во внешнем постоянном магнитном поле.

Ключевые слова: полярон, символ Вика, когерентное состояние, квантовая точка, оценка сверху, основное состояние, вариационный метод.

УДК: 51-72, 538.9. PACS: 02, 71.38.-k, 73.21.-b.

Введение

Как известно, электрон проводимости совместно с индуцированной им поляризацией в ионном кристалле или полярном полупроводнике образует квазичастицу, называемую поляроном. Физические свойства полярона включают в себя в числе прочих энергию связи, эффективную массу, мобильность и импеданс, которые могут существенно отличаться от соответствующих свойств зонного электрона проводимости без учета вызываемой им поляризации. Концепция полярона была впервые предложена довольно давно Л. Д. Ландау [1] и затем С. И. Пекаром [2, 3], который исследовал наиболее важные свойства неподвижного полярона в предельном случае очень сильного электрон-фононного взаимодействия. Позднее Ландау и Пекар [4] исследовали собственную энергию и эффективную массу полярона для адиабатического режима, или режима сильной связи. С тех пор многие известные исследователи, в их числе Г. Фрелих, Р. Фейнман и Н. Н. Боголюбов, внесли вклад в развитие теории поляронов [5–8, 10, 11].

Многочисленные математические методы были разработаны и адаптированы в процессе широких исследований разнообразных аспектов физики поляронов. По своему замыслу и структуре большинство этих методов предназначались для исследования проблемы полярона в двух противоположных предельных случаях слабого и сильного электрон-фононного взаимодействия. В то же время в большинстве практически важных случаев экспериментально наблюдаемые поляроны формируются под воздействием электрон-фононного взаимодействия промежуточной интенсивности. С этой точки зрения вариационные методы исследования имеют определенное преимущество перед остальными методами, так как они позволяют в принципе получать результаты в форме оценок, которые справедливы для всего

диапазона интенсивностей электрон-фононного взаимодействия.

По причине всевозрастающего практического значения систем малых размеров и/или пониженной размерности, таких как квантовые точки, ямы и нити, исследование поляронных эффектов в таких системах приобретает все большее значение, так как электрон-фононное взаимодействие способно оказывать сильное влияние на свойства этих систем. До известной степени эти системы могут быть достаточно удовлетворительно описаны посредством квантовых моделей поляронов, удерживаемых во внешних электростатических потенциалах, создаваемых внешними электродами либо являющихся следствием наличия примесных ионов доноров или акцепторов в основном объеме вещества. Таким образом, возникает задача построения оценок сверху для энергии основного состояния полярона во внешнем электростатическом потенциале как функции модельных параметров соответствующей модели полярона. В настоящей работе предлагается возможный подход к решению этой проблемы, основанный на обобщенном вариационном методе, который позволяет в принципе получить последовательность улучшаемых оценок сверху для энергии основного состояния для разнообразных моделей поляронов во внешнем потенциале во всем диапазоне интенсивностей электрон-фононного взаимодействия.

1. Модели полярона во внешнем потенциале

В настоящей работе будет рассмотрен широкий класс квантовых моделей, описывающих поляроны различного типа, удерживаемые во внешнем электростатическом потенциале. В общем случае гамильтониан таких моделей имеет вид

$$H = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hbar \sum_{\mathbf{k}} \omega(k) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} +$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(V^*(k) b_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}} + \text{h.c.} \right) + U(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где $V(k)$ — формфактор электрон-фононного взаимодействия, а $\omega(k)$ — закон дисперсии фононов. Например,

$$\omega(k) = \omega, \quad V(k) = -i \frac{\hbar\omega}{k} \left(4\pi\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \right)^{1/2},$$

для известной трехмерной модели полярона, предложенной Г. Фрелихом [7]. (О разнообразных моделях поляронов см. также [11–16] и цит. лит.)

Операторы импульса $\hat{\mathbf{p}}$ и координаты $\hat{\mathbf{r}}$ электрона удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям

$$[\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij},$$

и операторы $b_{\mathbf{k}}^+$, $b_{\mathbf{k}}$, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^+] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}] = 0,$$

являются бозе-операторами рождения и уничтожения продольных оптических фононов с энергией $\hbar\omega$ и волновым вектором $\mathbf{k}$. Предполагается, что значения волнового вектора квазинепрерывны и могут принимать значения

$$\mathbf{k} = \left\{ \frac{2\pi}{La} n_1, \frac{2\pi}{La} n_2, \frac{2\pi}{La} n_3 \right\},$$

$$n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{1}{2}(L-1), \quad i = 1, 2, 3,$$

где a^3 объем элементарной кристаллической ячейки, а L^3 — число таких ячеек в объеме V кристалла. Далее для удобства предполагается, что $\hbar = \omega = m = 1$. Удерживающий внешний потенциал $U(\hat{\mathbf{r}})$ вводится в виде

$$U(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} U(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}}, \quad U(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2)$$

Для краткости и наглядности предполагается, что

$$U(\mathbf{k}) = U(k) \text{ и также что } \inf_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) = U(0), \quad (3)$$

так что минимум удерживающего потенциала расположен в начале координат $\mathbf{r} = 0$.

2. Формализм символа Вика в моделях полярона

В результате унитарного преобразования

$$\tilde{H} = U^+ H U, \quad U = \prod_{\mathbf{k}} e^{-i b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) \mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}}, \quad U^+ U = 1,$$

исходный гамильтониан (1) может быть преобразован в гамильтониан

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) \mathbf{k} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \right)^2 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(k) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \\ & + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(V^*(k) b_{\mathbf{k}}^+ e^{-i(1-\chi(\mathbf{k}))\mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}} + \text{h.c.} \right) + U(\hat{\mathbf{r}}), \end{aligned}$$

энергия основного состояния которого совпадает с энергией основного состояния исходного гамильтониана. Следуя [17, 18], операторы импульса и координаты электрона можно представить в виде линейных комбинаций бозе-операторов

$$\hat{\mathbf{p}} = i \left(\frac{\eta}{2} \right)^{1/2} (\mathbf{b}^+ - \mathbf{b}), \quad \hat{\mathbf{r}} = \left(\frac{1}{2\eta} \right)^{1/2} (\mathbf{b} + \mathbf{b}^+),$$

где

$$\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z), \quad [b_i, b_j] = 0, \quad [b_i, b^+_j] = \delta_{ij},$$

и η есть произвольный положительный параметр. Вследствие известного операторного соотношения

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} \cdot e^{-(1/2)[\hat{A}, \hat{B}]}, \quad (4)$$

которое выполняется при условии, что коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}]$ является комплексным числом, все экспоненциальные операторные функции в гамильтониане $\tilde{H}$ могут быть факторизованы и гамильтониан может быть представлен в виде

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & \frac{1}{2} \left(i \sqrt{\frac{\eta}{2}} (\mathbf{b}^+ - \mathbf{b}) - \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) \mathbf{k} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \right)^2 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(k) b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \\ & + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(V^*(k) b_{\mathbf{k}}^+ e^{-[(1-\chi(\mathbf{k}))^2/4\eta]k^2} e^{-i(1-\chi(\mathbf{k}))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}^+} \times \right. \\ & \quad \left. \times e^{-i(1-\chi(\mathbf{k}))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}} + \text{h.c.} \right) + \\ & + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} U(k) e^{-k^2/4\eta} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}^+} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}}. \quad (5) \end{aligned}$$

Известно, что стандартная вариационная оценка сверху для энергии основного состояния гамильтониана

$$E_0 \leq \langle \Psi | \tilde{H} | \Psi \rangle \quad (6)$$

справедлива для произвольного пробного вектора состояния Ψ . Выберем Ψ в виде прямого произведения когерентных состояний [19], т. е.

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = & \prod_{\mathbf{k}} \otimes |z_{\mathbf{k}}\rangle \otimes |\mathbf{z}\rangle, \quad |\mathbf{z}\rangle = |z_x\rangle \otimes |z_y\rangle \otimes |z_z\rangle, \\ b_{\mathbf{k}} |z_{\mathbf{k}}\rangle = & z_{\mathbf{k}} |z_{\mathbf{k}}\rangle, \quad \mathbf{b} |\mathbf{z}\rangle = \mathbf{z} |\mathbf{z}\rangle, \quad \mathbf{z} = (z_x, z_y, z_z), \\ b_i |z_i\rangle = & z_i |z_i\rangle, \quad i = x, y, z, \end{aligned}$$

в результате чего из неравенства (6) следует оценка сверху

$$E_0 \leq \inf_{\{\mathbf{z}, \mathbf{z}^*, \{z_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}^*\}\}} W(\mathbf{z}, \mathbf{z}^*, \{z_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}^*\}, \eta, \chi(\mathbf{k})), \quad (7)$$

где выражение

$$\begin{aligned} W(\mathbf{z}, \mathbf{z}^*, \{z_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}}^*\}, \eta, \chi(\mathbf{k})) = & \\ = & \frac{1}{2} \left(i \sqrt{\frac{\eta}{2}} (\mathbf{z}^* - \mathbf{z}) - \sum_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}) \mathbf{k} z_{\mathbf{k}}^* z_{\mathbf{k}} \right)^2 + \frac{3\eta}{4} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \left(\omega(k) + \frac{k^2}{2} \chi^2(\mathbf{k}) \right) z_{\mathbf{k}}^* z_{\mathbf{k}} + \\ & + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-[(1-\chi(\mathbf{k}))^2/4\eta]k^2} \times \\ & \quad \times \left(V^*(k) z_{\mathbf{k}}^* e^{-i(1-\chi(\mathbf{k}))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^* + \mathbf{z})} + \text{h.c.} \right) + \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} U(k) e^{-k^2/4\eta} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^*+\mathbf{z})} \quad (8)$$

является так называемым символом Вика для гамильтониана (5), зависящим от параметров $\chi(\mathbf{k})$ и η , и абсолютный минимум в правой части неравенства (7) определяется над множеством комплексных чисел $\mathbf{z}^*$, $\mathbf{z}$, $\{z_{\mathbf{k}}^*, z_{\mathbf{k}}\}$. Осуществляя замену переменных

$$\begin{aligned} z_{\mathbf{k}} &= z'_{\mathbf{k}} e^{-i(1-\chi(\mathbf{k}))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^*+\mathbf{z})}, \\ z_{\mathbf{k}}^* &= z'^*_{\mathbf{k}} e^{+i(1-\chi(\mathbf{k}))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^*+\mathbf{z})}, \end{aligned} \quad (9)$$

переходя, как обычно, от суммирования к интегрированию по всей области значений волновых векторов фононов $\mathbf{k}$ и принимая во внимание пространственную симметрию системы, можно прийти к следующей оценке сверху для энергии основного состояния гамильтониана (5):

$$E_0 \leq \inf_{\{\eta, \chi(k)\}} \left\{ \frac{3\eta}{4} - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^2 \frac{|V(k)|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/2\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)} + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 U(k) e^{-k^2/4\eta} \right\}, \quad (10)$$

где k_D — волновой вектор Дебая. Далее предполагается, как обычно, что $k_D \rightarrow \infty$. Вариационные уравнения для параметров $\chi(k)$ и η имеют вид

$$\frac{1-\chi(k)}{\eta} \left(\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k) \right) - \chi(k) = 0, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{3}{4} - \frac{\alpha}{\pi\sqrt{2}\eta^2} \int_0^\infty dk k^2 \frac{(1-\chi(k))^2}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)} \exp\left(\frac{(1-\chi(k))^2}{2\eta}k^2\right) + \\ + \frac{1}{8\pi^2\eta^2} \int_0^\infty dk k^4 U(k) e^{-k^2/4\eta} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Выражение для $\chi(k)$ в явном виде, как функции переменных k и η , может быть получено из уравнения (11) и подставлено в уравнение (12), результатом чего явится замкнутое, хотя и громоздкое уравнение для единственного неизвестного вариационного параметра η , допускающее численное решение. Приближенный анализ оценки (10) для случая модели свободного полярона Фрелиха (т. е. для модели полярона без внешнего потенциала, $U(\mathbf{r}) = 0$) был предпринят в [20], где было показано, что даже более слабые оценки, полученные на основе оценки (10), способны вполне удовлетворительно аппроксимировать энергию основного состояния полярона, на уровне лучших оценок сверху, полученных другими методами. Например, даже очень грубый выбор вариационных параметров

$$\chi(k) = 1, \quad \eta \rightarrow 0,$$

приводит к известной классической оценке сверху

$$E_0 \leq -\alpha$$

в пределе слабого взаимодействия $\alpha \ll 1$, в то время как альтернативный, не менее грубый выбор

$$\chi(k) = 0, \quad \eta = \left(\frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} \right)^2, \quad E_0 \leq -\frac{\alpha^2}{3\pi}$$

немедленно воспроизводит главное слагаемое в оценке сверху, полученной Р. Фейнманом [8, 9] в противоположном пределе сильного взаимодействия $\alpha \gg 1$.

3. Последовательность улучшенных оценок сверху

Оценка сверху типа оценки (10) уже достаточно хороша в том смысле, что она аппроксимирует энергию основного состояния полярона во всем диапазоне интенсивности электрон-фононного взаимодействия и может воспроизводить уже известные оценки сверху. Далее мы предпримем попытку улучшить эту оценку регулярным образом. Рассмотрим эффективный гамильтониан

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}(\{z'_{\mathbf{k}}, z'^*_{\mathbf{k}}\}, \{\mathbf{z}^*, \mathbf{z}\}, \eta, \chi(k)) = \\ = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{k}} \chi(k) \mathbf{k} z'^*_{\mathbf{k}} z'_{\mathbf{k}} \right)^2 + \\ + \sum_{\mathbf{k}} \left(\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k) \right) z'^*_{\mathbf{k}} z'_{\mathbf{k}} + \\ + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \left(V^*(k) z'^*_{\mathbf{k}} e^{+i(1-\chi(k))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^*+\mathbf{z})} \times \right. \\ \left. \times e^{-i(1-\chi(k))\mathbf{k}\mathbf{r}} + \text{h.c.} \right) + \\ + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} U(k) e^{-k^2/4\eta} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}^+} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} z'_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{\sqrt{V}} \frac{V^*(k) e^{-[(1-\chi(k))^2/4\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)}, \\ z'^*_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{\sqrt{V}} \frac{V(k) e^{-[(1-\chi(k))^2/4\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)}, \end{aligned} \quad (13)$$

который может быть получен из исходного гамильтониана (5), если ограничить усреднение в выражении (6) усреднением только относительно фононного состояния $\prod_{\mathbf{k}} \otimes |z_{\mathbf{k}}\rangle$ и положить значения $z_{\mathbf{k}}^*$, $z_{\mathbf{k}}$ равным тем фиксированным значениям, которые следуют из выражений (9), (11), (12) и (13), так что

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}}(\{\mathbf{z}^*, \mathbf{z}\}, \eta, \chi(k)) = \tilde{H}_{\text{eff}}(\{\mathbf{z}^*, \mathbf{z}\}, \eta, \chi(k)) + \frac{3}{4}\eta + \\ + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V(k)|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/2\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{eff}}(\{\mathbf{z}^*, \mathbf{z}\}, \eta, \chi(k)) = -\frac{\eta}{4} (\mathbf{b}^+ \mathbf{b}^+ - 2\mathbf{b}^+ \mathbf{b} + \mathbf{b}\mathbf{b}) + \\ + \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} U(k) e^{-k^2/4\eta} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}^+} e^{-i\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}\mathbf{b}} - \\ - \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V(k)|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/4\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)} \times \end{aligned}$$

$$\times e^{+i(1-\chi(k))\sqrt{1/2\eta}\mathbf{k}(\mathbf{z}^*+\mathbf{z})} e^{-i(1-\chi(k))\mathbf{k}\sqrt{1/2\eta}(\mathbf{b}^++\mathbf{b})}. \quad (14)$$

Таким образом, проблема построения лучших оценок, нежели оценка (10), сводится к поиску наименьшей оценки сверху для энергии основного состояния эффективного гамильтониана (14).

Теперь воспользуемся тем преимуществом, что пробное состояние $|\mathbf{z}\rangle = |0\rangle$ уже предоставляет достаточно хорошую оценку (10) во всем диапазоне значений константы взаимодействия α , и прибегнем к обобщенному вариационному методу [21] для последовательного систематического улучшения этой оценки. Как было показано в [21], для гамильтониана квантовой системы $\hat{H}$ и пробного состояния $|\psi\rangle$ такого, что $\langle\psi|\psi\rangle = 1$,

$$E_0 \leq \min(a_1^{(n)}, \dots, a_n^{(n)}) \leq \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle,$$

где вещественные числа $(a_1^{(n)}, \dots, a_n^{(n)})$ являются корнями полиномиального уравнения n -го порядка

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n X_i x^{n-i} = 0.$$

Коэффициент уравнения $X_0 \equiv 1$, а все остальные коэффициенты X_i , $1 \leq i \leq n$ удовлетворяют системе n линейных уравнений

$$\mathcal{M}\mathbf{X} + \mathbf{Y} = 0,$$

где

$$Y_i = M_{2n-i}, \quad \mathcal{M}_{ij} = M_{2n-(i+j)}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n, \\ M_m = \langle\psi|\hat{H}^m|\psi\rangle.$$

Предполагается, что все моменты M_m конечны. Как было показано в [21], справедливо следующее неравенство:

$$\min(a_1^{(n+1)}, \dots, a_{n+1}^{(n+1)}) \leq \min(a_1^{(n)}, \dots, a_n^{(n)}).$$

Таким образом, в первом порядке обобщенное неравенство сводится к общепринятой в квантовой механике вариационной оценке сверху для энергии основного состояния

$$E_0 \leq a_1^{(1)}, \quad a_1^{(1)} = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle, \quad (15)$$

в то время как эта оценка улучшается во втором и последующих порядках

$$E_0 \leq \min(a_1^{(2)}, a_2^{(2)}) = \\ = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \frac{K_3}{2K_2} - \left[\left(\frac{K_3}{2K_2} \right)^2 + K_2 \right]^{1/2}, \quad (16) \\ a_1^{(2)} = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \frac{K_3}{2K_2} - \sqrt{\left(\frac{K_3}{2K_2} \right)^2 + K_2}, \\ a_2^{(2)} = a_1^{(2)} + 2\sqrt{\left(\frac{K_3}{2K_2} \right)^2 + K_2},$$

так что улучшенная оценка (16) будет лежать ниже традиционной оценки (15) для большинства имеющих физический смысл квантовых моделей и большинства физически осмысленных вариантов выбора

пробного состояния $|\psi\rangle$. Здесь K_2 и K_3 обозначают центральные моменты вида

$$K_2 = \langle\psi|(\hat{H} - \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle)^2|\psi\rangle, \quad K_3 = \langle\psi|(\hat{H} - \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle)^3|\psi\rangle.$$

Следовательно, для того, чтобы построить последовательность улучшаемых оценок сверху для энергии основного состояния гамильтониана (14), достаточно вычислить моменты этого гамильтониана вида

$$M_m = \langle 0 | \left(\tilde{H}_{\text{eff}}(\{0, 0\}, \eta, \chi(k)) \right)^m | 0 \rangle.$$

Средние такого типа могут быть явно вычислены при помощи операторных тождеств

$$[b, f(b^+)] = \frac{df(b^+)}{db^+}, \quad [b^+, f(b)] = -\frac{df(b)}{db}, \quad [b, b^+] = 1,$$

которые справедливы для произвольной операторнозначной функции $f(b)$, допускающей разложение в ряд Тейлора, а также при помощи операторного тождества (4).

После соответствующих алгебраических преобразований получим

$$M_1 = -\frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^2 \frac{|V(k)|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/2\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)} + \\ + \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 U(k) e^{-k^2/4\eta}, \\ M_2 = \frac{3}{8}\eta^2 - \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^4 \frac{|V(k)|^2 (1-\chi(k))^2 e^{-\frac{(1-\chi(k))^2}{2\eta}k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2}\chi^2(k)} + \\ + \frac{1}{16\pi^6} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \times \\ \times \frac{|V(\mathbf{k})|^2 |V(\mathbf{k}')|^2 e^{-[(1-\chi(\mathbf{k}))^2/4\eta]k^2} e^{-[(1-\chi(\mathbf{k}'))^2/4\eta]k'^2}}{\left(\omega(\mathbf{k}) + \frac{k^2}{2}\chi^2(\mathbf{k})\right) \left(\omega(\mathbf{k}') + \frac{k'^2}{2}\chi^2(\mathbf{k}')\right)} \times \\ \times e^{-(1/4\eta)((1-\chi(\mathbf{k}))\mathbf{k} + (1-\chi(\mathbf{k}'))\mathbf{k}')^2} + \\ + \frac{1}{64\pi^6} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| < \infty} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' U(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}') e^{-(1/4\eta)k^2} \times \\ \times e^{-(1/4\eta)k'^2} e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2} - \\ - \frac{1}{16\pi^6} \int_{|\mathbf{k}| < \infty, |\mathbf{k}'| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \times \\ \times \frac{U(\mathbf{k}) |V(\mathbf{k}')|^2 e^{-(1/4\eta)k^2} e^{-[(1-\chi(\mathbf{k}'))^2/4\eta]k'^2}}{\omega(\mathbf{k}') + \frac{k'^2}{2}\chi^2(\mathbf{k}')} \times \\ \times e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + (1-\chi(\mathbf{k}'))\mathbf{k}')^2} + \\ + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty dk U(k) k^4 e^{-(1/4\eta)k^2}, \\ M_3 = -\frac{3}{8}\eta^3 - \frac{1}{64\pi^9} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' d\mathbf{k}'' \times \\ \times \frac{|V(\mathbf{k})|^2 |V(\mathbf{k}')|^2 |V(\mathbf{k}'')|^2}{\left(\omega(\mathbf{k}) + \frac{k^2}{2}\chi^2(\mathbf{k})\right) \left(\omega(\mathbf{k}') + \frac{k'^2}{2}\chi^2(\mathbf{k}')\right) \left(\omega(\mathbf{k}'') + \frac{k''^2}{2}\chi^2(\mathbf{k}'')\right)} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times e^{-[(1-\chi(k))^2/4\eta]k^2 - [(1-\chi(k'))^2/4\eta]k'^2 - [(1-\chi(k''))^2/4\eta]k''^2} \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)((1-\chi(k))\mathbf{k} + (1-\chi(k'))\mathbf{k}' + (1-\chi(k''))\mathbf{k}'')^2} + \\
& + \frac{1}{64\pi^6} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \times \\
& \times \frac{|V(\mathbf{k})|^2 |V(\mathbf{k}')|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/4\eta]k^2} e^{-[(1-\chi(k'))^2/4\eta]k'^2}}{\left(\omega(\mathbf{k}) + \frac{k^2}{2} \chi^2(k)\right) \left(\omega(\mathbf{k}') + \frac{k'^2}{2} \chi^2(k')\right)} \times \\
& \times \left((1-\chi(k))^2 k^2 + (1-\chi(k'))^2 k'^2 \right) \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)((1-\chi(k))\mathbf{k} + (1-\chi(k'))\mathbf{k}')^2} - \\
& - \frac{\eta^2}{8\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^2 \frac{|V(\mathbf{k})|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/2\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2} \chi^2(k)} \times \\
& \times \left((1-\chi(k))^4 \frac{k^4}{4\eta^2} + 6 \right) + \\
& + \frac{1}{512\pi^9} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''| < \infty} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' d\mathbf{k}'' U(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}') U(\mathbf{k}'') \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)k^2 - (1/4\eta)k'^2 - (1/4\eta)k''^2} e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{k}'')^2} + \\
& + \frac{1}{256\pi^6} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| < \infty} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' U(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}') \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)k^2} e^{-(1/4\eta)k'^2} \left(k^2 + k'^2 \right) e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2} + \\
& + \frac{\eta^2}{16\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 U(k) e^{-(1/2\eta)k^2} \left(\frac{k^4}{4\eta^2} + 6 \right) + \\
& + \frac{3}{128\pi^9} \int_{|\mathbf{k}| < \infty, |\mathbf{k}'|, |\mathbf{k}''| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' d\mathbf{k}'' \times \\
& \times \frac{U(\mathbf{k}) |V(\mathbf{k}')|^2 |V(\mathbf{k}'')|^2}{\left(\omega(\mathbf{k}') + \frac{k'^2}{2} \chi^2(k')\right) \left(\omega(\mathbf{k}'') + \frac{k''^2}{2} \chi^2(k'')\right)} \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)k^2 - [(1-\chi(k'))^2/4\eta]k'^2 - [(1-\chi(k''))^2/4\eta]k''^2} \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + (1-\chi(k'))\mathbf{k}' + (1-\chi(k''))\mathbf{k}'')^2} - \\
& - \frac{3}{256\pi^9} \int_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'| < \infty, |\mathbf{k}''| \leq k_D} \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{k}' d\mathbf{k}'' U(\mathbf{k}) U(\mathbf{k}') |V(\mathbf{k}'')|^2}{\omega(k'') + \frac{k''^2}{2} \chi^2(k'')} \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)k^2 - (1/4\eta)k'^2 - [(1-\chi(k''))^2/4\eta]k''^2} \times \\
& \times e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + (1-\chi(k''))\mathbf{k}'')^2} - \\
& - \frac{1}{64\pi^6} \int_{|\mathbf{k}| < \infty, |\mathbf{k}'| \leq k_D} d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \times \\
& \times \frac{U(\mathbf{k}) |V(\mathbf{k}')|^2 e^{-(1/4\eta)k^2} e^{-[(1-\chi(k'))^2/4\eta]k'^2}}{\omega(k') + \frac{k'^2}{2} \chi^2(k')} \times \\
& \times \left(k^2 + (1-\chi(k'))^2 k'^2 \right) e^{-(1/4\eta)(\mathbf{k} + (1-\chi(k'))\mathbf{k}')^2},
\end{aligned}$$

после чего улучшенная оценка для энергии основного состояния исходного гамильтониана (1) во втором порядке обобщенной вариационной схемы примет вид

$$E_0 \leq \frac{3\eta}{4} - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_D} dk k^2 \frac{|V(\mathbf{k})|^2 e^{-[(1-\chi(k))^2/2\eta]k^2}}{\omega(k) + \frac{k^2}{2} \chi^2(k)} +$$

$$+ \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk k^2 U(k) e^{-k^2/4\eta} + \frac{K_3}{2K_2} - \left[\left(\frac{K_3}{2K_2} \right)^2 + K_2 \right]^{1/2}, \quad (17)$$

где

$$K_2 = M_2 - M_1^2, \quad K_3 = M_3 - 3M_2M_1 + 2M_1^3.$$

Видно, что в каждом последующем порядке обобщенной вариационной схемы приходится вычислять интегралы хотя и возрастающей размерности, но, в сущности, однотипные, если принимать поведение их подинтегральных выражений как достаточно быстро убывающих функций от волновых векторов. До некоторого предела все эти интегралы могут быть частично вычислены аналитически, так что их размерность понизится, что значительно упрощает их окончательное вычисление численными методами. Уместно отметить, что оценка (17) может быть дополнительно улучшена путем минимизации правой части неравенства (17) относительно вариационных параметров η , $\chi(k)$, вместо того чтобы просто использовать значения этих параметров, найденные в процессе минимизации оценки сверху, полученной в предыдущем порядке обобщенной вариационной схемы. Эта задача может быть решена численными методами.

Заключение

Показано, что достаточно общий вариационный подход к исследованию широкого класса квантовых моделей поляронов, удерживаемых во внешнем электростатическом потенциале, может быть развит на основе метода когерентных состояний, дополненного обобщенным вариационным методом. Предложенный подход концептуально прост и позволяет осуществлять вычисление физически важных характеристик поляронных систем аналитическими и численными методами. В сущности, этот подход позволяет регулярным образом свести проблему улучшения известных вариационных оценок сверху для энергии основного состояния моделей поляронов во внешнем электростатическом потенциале к чисто вычислительной проблеме численной оценки некоторых типовых, хотя и многомерных интегралов. Естественные обобщения предложенного подхода могут включать в себя рассмотрение разнообразных моделей поляронов во внешних сферически несимметричных потенциалах и находящихся одновременно под воздействием внешнего постоянного магнитного поля. Такие обобщения могут быть особенно важны для исследования поляронных эффектов в квантовых системах малых размеров и/или пониженной размерности.

Список литературы

1. Landau L.D. // Phys. Z. Sowietunion. 1933. **3**. P. 884.
2. Пекар С.И. // Журн. эксп. теор. физ. 1946. **16**. С. 341.
3. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. М.; Л., 1951.

4. Ландау Л.Д., Пекар С.И. // Журн. эксп. теор. физ. 1948. **18**. С. 419.
5. Fröhlich H. // Proc. Roy. Soc. A. 1937. **160**. P. 230.
6. Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S. // Philos. Mag. 1950. **41**. P. 221.
7. Fröhlich H. // Adv. Phys. 1954. **3**. P. 325.
8. Feynman R.P. // Phys. Rev. 1955. **97**. P. 660.
9. Feynman R.P. Statistical Mechanics. Reading, MA, 1972.
10. Bogolyubov N.N. // Ukrainian Math. J. 1950. **II**. P. 2.
11. Bogolyubov N.N., Bogolyubov N.N., Jr. Aspects of the Polaron Theory. JINR Communications. P-17-81-65. Dubna, 1981.
12. Bogolyubov N.N., Bogolyubov N.N., Jr. Aspects of the Polaron Theory. Equilibrium and Nonequilibrium Problems. Singapore, 2008.
13. Appel J. // Sol. St. Phys. 1968. **21**. P. 1.
14. Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors / Ed. by J. T. Devreese. Amsterdam, 1972.
15. Linear and Nonlinear Transport in Solids / Ed. by J. T. Devreese and R. Evrard. New York, 1976.
16. Devreese J.T. Polarons. Encyclopedia of Applied Physics. V. 14. P. 383. VCH Publishers, 1996.
17. Bogolyubov N.N. Jr., Kireev A.N., Kurbatov A.M., Sankovich D.P. // Proc. of V.A. Steklov Math. Inst. 1989. **191**. P. 17.
18. Bogolyubov N.N. Jr., Soldatov A.V. // Mod. Phys. Lett. B. 1993. **7**. P. 1773.
19. Perelomov A.M. Generalized Coherent States and Their Applications. Berlin, 1986.
20. Bogolyubov N.N. Jr., Soldatov A.V. // Ukr. J. Phys. 2009. **54**, N 8–9. P. 873.
21. Soldatov A.V. // Int. J. Mod. Phys. B. 1995. **9**, N 22. P. 2899.

On improvable bounds for polaron systems in an external potential

N. N. Bogolubov, Jr.^a, A. V. Soldatov^b

Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences.

Gubkina Str. 8, Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^anikolai_bogolubov@hotmail.com, ^bsoldatov@mi.ras.ru.

A variational approach is proposed that allows one to obtain in a regular way a sequence of improvable upper bounds for the ground-state energy of various polaron models confined in an external electrostatic potential. The proposed approach can be used for an arbitrary electron–phonon interaction constant and allows generalization to the case of polaron-type systems in a constant external magnetic field.

Keywords: polaron, Wick’s symbol, coherent state, quantum dot, upper bound, ground state, variational method.

PACS: 02, 71.38.–k, 73.21.–b.

Received 13 March 2016.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2016. **71**, No. 4. Pp. 356–362.

Сведения об авторах

1. Боголюбов Николай Николаевич (мл.) — доктор физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН, профессор, гл. науч. сотрудник; тел.: (499) 941-01-73, e-mail: nikolai_bogolubov@hotmail.com, bogolubv@mi.ras.ru.
2. Солдатов Андрей Владимирович — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник, доцент; тел.: (499) 941-03-63, e-mail: soldatov@mi.ras.ru.