

Двухузельная модель и ее связь с моделью поляронного кристалла

© Ю.А. Фирсов, Е.К. Кудинов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 1 июля 1997 г.)

Рассмотрена симметричная двухузельная одноэлектронная модель в рамках теории возмущения по перекрытию электронных волновых функций на разных узлах. Отмечена существенная роль двукратного вырождения уровней невозмущенного гамильтониана. Показано, что вследствие этого члены ряда теории возмущения для поправки к энергии невозмущенного уровня приводят к различному эффекту в зависимости от четности порядка. Именно члены четного порядка приводят к сдвигу уровней (аналогу поляронного сдвига в модели поляронного кристалла), а члены нечетного порядка — к их расщеплению (аналогу ширины поляронной зоны). При этом сдвиг уровней убывает при возрастании константы электрон-колебательной связи степенным образом, а расщепление — экспоненциально. Это находится в полном соответствии с известными результатами теории полярона малого радиуса.

Рассматриваемая далее двухузельная модель относится к классу двухуровневых моделей электронно-колебательной системы, которые в свое время широко использовались как в физике молекул при описании молекулярных спектров, так и в физике твердого тела для рассмотрения электронной структуры локализованных дефектов (см., например, работы [1,2], инициировавшие на протяжении десятков лет огромное число публикаций). Данная модель может рассматриваться как предельная тривиализация холстейновской модели полярона малого радиуса [3–5]. Из-за простоты она допускает достаточно полное ее исследование. Результаты последнего могут выявить существенные характеристики поляронного кристалла, которые в реальной модели усмотреть затруднительно ввиду ее сложности.

В настоящее время внимание ряда исследователей привлекает именно последний аспект модели [6–8]. Однако результаты разных авторов зачастую противоречат друг другу. Помимо этого, на наш взгляд, имеет место тенденция проводить численные расчеты там, где вполне возможно аналитическое рассмотрение.

Заметим, что [4] и последующая серия работ 60-х гг. (см. [5]) были посвящены исследованию кинетики поляронов в рамках теории возмущения, малым параметром которой полагалась ширина затравочной электронной зоны. Квантово-механические вопросы затрагивались лишь по мере их связи с кинетикой.¹

В настоящей работе рассматривается квантовая механика двухузельного аналога поляронной модели с помощью теории возмущения по J — аналогу ширины затравочной поляронной зоны (т.е. в тех границах, в которых рассматривалась кинетика). Мы ограничиваемся исследованием одноэлектронной задачи.

¹ Авторы использовали эту модель при исследовании междузонного поглощения света поляроном малого радиуса [9].

1. Гамильтониан задачи

Запишем гамильтониан двухузельной модели в следующем виде:

$$H = H_0 + V,$$

$$H_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} - g(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)x,$$

$$V = -J(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1), \quad \hat{n}_i \equiv \hat{a}_i^+ \hat{a}_i, \quad (1)$$

$\hat{p}_x = -i\hbar d/dx$ — оператор импульса, \hat{a}_i^+ , \hat{a}_i — операторы рождения и уничтожения электрона на узле i , $i = 1, 2$, M , ω — масса и частота колебаний ядер, x — ядерная координата, g — константа электронно-колебательной связи, J — энергетическая константа, зависящая от перекрытия электронных волновых функций на разных узлах и определяющая расщепление электронных уровней при $g = 0$. Мы опустили в (1) спиновый индекс, поскольку в отсутствие спин-орбитального взаимодействия учет спина приводит только к двукратному спиновому вырождению каждого уровня системы. Поскольку мы рассматриваем только одноэлектронные состояния, справедливо операторное соотношение

$$\hat{n}_1 + \hat{n}_2 = 1. \quad (2)$$

Выражая \hat{p}_x , x через Бозе-операторы b^+ , b

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(b^+ + b),$$

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}(b^+ - b), \quad [b, b^+] = 1, \quad (3)$$

гамильтониан (1) можно записать и так:

$$H = \hbar\omega \left(b^+ b + \frac{1}{2} \right) - g\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \times (b^+ + b)(\hat{n}_1 - \hat{n}_2) - J(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1). \quad (4)$$

Далее мы будем рассматривать задачу о диагонализации гамильтониана (1) с помощью теории возмущения

по V . Собственные функции невозмущенного гамильтониана H_0 можно выбрать в виде собственных функций эрмитова оператора $\hat{\sigma}_z = \hat{n}_1 - \hat{n}_2$

$$\begin{aligned}\Psi_{1n}^0(x) &= \psi_n(x - x_0)a_1^+|0\rangle, \quad \sigma_z = 1, \\ \Psi_{2n}^0(x) &= \psi_n(x + x_0)a_2^+|0\rangle, \quad \sigma_z = -1,\end{aligned}\quad (5)$$

где $\psi_n(x)$ — нормированные собственные функции гармонического осциллятора с квантовым числом n , $x_0 = g/(M\omega^2)$. Соответствующие собственные значения есть

$$E_n = -\frac{g^2}{2M\omega^2} + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6)$$

Величина $E_p = g^2/2M\omega^2 = (1/2)M\omega^2x_0^2$ — аналог поляронного сдвига. В соответствии с (5) каждое собственное значение (6) двукратно вырождено. Это вырождение состояний невозмущенного гамильтониана является фундаментальной чертой модели, и именно с ним связаны нетривиальные черты рассматриваемой задачи. Набор функций (5) является ортонормированной системой, удовлетворяющей условию полноты²

$$\sum_{n=0}^{\infty} \Psi_{in}^0(x)\Psi_{i'n}^0(x') = \delta_{ii'}\delta(x-x'). \quad (7)$$

Функции (5) выражаются через функции несмещенного осциллятора,

$$\begin{aligned}\Psi_{in}^0(x) &\equiv \psi_n(x - \hat{\sigma}_z x_0)a_i^+|0\rangle \\ &= \exp(-ix_0\hat{p}_x/\hbar)(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)\psi_n(x)a_i^+|0\rangle.\end{aligned}\quad (8)$$

Оператор³

$$U = \exp(ix_0\hat{p}_x/\hbar)(\hat{n}_1 - \hat{n}_2) \quad (9)$$

является унитарным, $U^+ = U^{-1}$. Преобразуя с помощью (9) гамильтониан (4) с учетом (3), нетрудно получить для гамильтониана $\tilde{H} = UHU^{-1}$ следующее выражение

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \tilde{H}_0 + V, \quad \tilde{H}_0 = \hbar\omega\left(b^+b + \frac{1}{2}\right) - E_p, \\ \tilde{V} &= -J\left[\exp(-q(b^+ - b))a_1^+a_2\right. \\ &\quad \left. + \exp(q(b^+ - b))a_2^+a_1\right] \\ &\equiv -J\left(\exp(2ix_0\hat{p}_x/\hbar)a_1^+a_2\right. \\ &\quad \left. + \exp(-2ix_0\hat{p}_x/\hbar)a_2^+a_1\right).\end{aligned}\quad (10)$$

Здесь $q = \sqrt{2}x_0/l$, где $l = \sqrt{\hbar/M\omega}$ — осцилляторная длина.⁴ Функции нулевого приближения преобразованного гамильтониана (10) выражаются через функции

² Индекс i играет роль дискретной переменной, принимающей значения 1, 2.

³ Напомним, что оператор $\exp(ia\hat{p}_x/\hbar)$ преобразует $f(x)$ в $f(x+a)$.

⁴ Преобразование, аналогичное (9), предложено в работе [4] и широко использовалось при исследовании свойств полярона малого радиуса. Оно приводит к значительному упрощению формализма теории возмущений.

несмещенного осциллятора (далее мы ставим над функциями в представлении несмещенных осцилляторов знак "тильда")

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}_{1n}^0(x) &= \psi_n(x)a_1^+|0\rangle, \quad \sigma_z = 1, \\ \tilde{\Psi}_{2n}^0(x) &= \psi_n(x)a_2^+|0\rangle, \quad \sigma_z = -1.\end{aligned}\quad (5a)$$

2. Симметрия модели

Волновая функция стационарного состояния гамильтониана (1) имеет следующий общий вид:

$$\Psi = \Phi_1(x)\hat{a}_1^+|0\rangle + \Phi_2(x)\hat{a}_2^+|0\rangle, \quad (11)$$

где $\Phi_i(x)$ — некоторые функции x . Заметим, что гамильтониан не меняется при инверсии \hat{I}

$$x \rightarrow -x, \quad \hat{a}_1, \hat{a}_2 \rightarrow \hat{a}_2, \hat{a}_1, \quad (12)$$

т.е. $[\hat{I}, H] = 0$, и, следовательно, волновые функции стационарных состояний должны иметь определенную четность,

$$\hat{I}\Psi = \Phi_1(-x)\hat{a}_2^+|0\rangle + \Phi_2(-x)\hat{a}_1^+|0\rangle = \pm\Psi$$

(\hat{I} обозначает оператор инверсии⁵). Отсюда

$$\Phi_1(x) = \pm\Phi_2(-x), \quad \Phi_2(x) = \pm\Phi_1(-x). \quad (13)$$

Этот элемент симметрии (аналог трансляционной инвариантности поляронного кристалла) обеспечивает эквивалентность узельных состояний 1 и 2. Принимая во внимание (13), волновую функцию стационарного состояния можно представить в виде

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_s(x)\hat{a}_1^+|0\rangle + s\Phi_s(-x)\hat{a}_2^+|0\rangle), \quad (14)$$

где $s = \pm 1$.⁶ При $s = 1$ функция (14) четна, при $s = -1$ нечетна. Функция (14) нормирована на единицу, если

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (\Phi_s(x))^2 dx = 1.$$

Поскольку гамильтонианы (1) и (10) эквивалентны (отличаются на каноническое преобразование), все сказанное в этом разделе относится и к собственным функциям (10).

⁵ Если записать гамильтониан (1) в форме матрицы

$$\begin{vmatrix} A(x) & \gamma \\ \gamma & A(-x) \end{vmatrix},$$

то оператор указанного преобразования есть $\hat{I} = I(x)\sigma_x$, где $I(x)$ — оператор замены $x \rightarrow -x$, а σ_x — матрица Паули. Легко видеть, что $\hat{I}\hat{H}\hat{I}^{-1} = H$.

⁶ Во избежание недоразумений подчеркнем, что симметрия не требует, чтобы функция $\Phi_s(x)$ имела определенную четность.

3. Теория возмущений

Мы будем искать стационарные состояния нашей задачи с помощью теории возмущения, считая V малой добавкой. Гамильтониан выбираем в форме (10). Подставим в уравнение Шредингера

$$(\tilde{H}_0 - \tilde{V}) \tilde{\Psi} = E \tilde{\Psi} \quad (15)$$

волновую функцию в виде (14). Получим два уравнения для $\tilde{\Phi}_s(x)$

$$(\tilde{H}_0 - E) \tilde{\Phi}_s(x) - sJ \exp(-q(b^+ - b)) \tilde{\Phi}_s(-x) = 0, \quad (16)$$

$$-J \exp(q(b^+ - b)) \tilde{\Phi}_s(x) + s(\tilde{H}_0 - E) \tilde{\Phi}_s(-x) = 0. \quad (16a)$$

Очевидно, что уравнение (16a) преобразованием $x \rightarrow -x$ переводится в (16).⁷ Таким образом, задача сводится к решению одного уравнения.

Отметим одно важное обстоятельство. Теория возмущения в нашем случае представит поправку ΔE к невозмущенному значению энергии в виде разложения по параметру J . В результате действия возмущения каждый уровень с заданным n , двукратно вырожденный в нулевом приближении, испытает сдвиг и расщепление. Ввиду сохранения четности каждый расщепленный дублет состоит из пары состояний, противоположной четности, причем, как отмечалось выше, четность определяется знаковым параметром $s = \pm 1$. Но, как видно из (16), параметр s и параметр разложения J входят только в виде произведения sJ . Поэтому выражение для поправки ΔE_n к уровню n будет иметь вид

$$\Delta E_n = \Delta^{\text{even}} E_n + s \Delta^{\text{odd}} E_n, \quad (17)$$

где $\Delta^{\text{even}} E_n$ — сумма по четным, а $\Delta^{\text{odd}} E_n$ — сумма по нечетным степеням J указанного разложения. Таким образом, $\Delta^{\text{even}} E_n$ определяет смещение центра тяжести дублета, а $2|\Delta^{\text{odd}} E_n|$ — его расщепление. Обозначим уровень с четностью s как E_{ns} . Тогда можно утверждать, что сдвиг ΔE_n уровня n есть

$$\Delta E_n = \frac{1}{2}(E_{n1} + E_{n-1}), \quad (17a)$$

а расщепление дублета δE_n равно

$$\delta E_n = |E_{n1} - E_{n-1}|. \quad (17b)$$

Разложим функции $\tilde{\Phi}_s(x)$ в ряд по осцилляторным функциям⁸ $\psi_n(x)$

$$\tilde{\Phi}_s(x) = \sum_{n_1=0}^{\infty} C_{n_1 s} \psi_{n_1}(x), \quad (18)$$

подставим это разложение в (16), умножим обе части на $\psi_n(x)$ и проинтегрируем от $-\infty$ до $+\infty$. Получим систему уравнений

$$(E_n - E) C_n - sJ \sum_{n_1=0}^{\infty} (-1)^{n_1} A_{nn_1} C_{n_1} = 0, \quad (19)$$

определяющую C_n и E при заданном $s = \pm 1$. Здесь обозначено

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - E_p,$$

$$\hat{A} = \exp(-q(b^+ - b)), \quad A_{nn'} = \langle n | \hat{A} | n' \rangle. \quad (20)$$

В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением лишь низшего невозмущенного состояния $n = 0$. Соответственно в разложении (18) полагаем $C_0 = 1$.⁹ Из (19) следует

$$E = E_0 - sJ A_{00} - sJ \sum_{n_1=1}^{\infty} (-1)^{n_1} A_{0n_1} C_{n_1}, \quad (21)$$

$$C_n = \frac{sJ}{E_n - E} A_{n0} + \frac{sJ}{E_n - E} \sum_{m_1=1}^{\infty} (-1)^{m_1} A_{nm_1} C_{m_1}, \quad n \neq 0. \quad (22)$$

Представляя E и C_n в виде разложений по степеням J

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)} + \dots,$$

$$C_n = C_n^{(0)} + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + C_n^{(3)} + \dots \quad (23)$$

(здесь и далее $n \neq 0$) и подставляя их в (22), находим $E^{(i)}$, $C_n^{(i)}$. Приведем выражения для C_n с точностью до второго, а для E — до третьего порядков

$$C_n^{(0)} = 0, \quad C_n^{(1)} = \frac{sJ}{E_n - E_0} A_{n0},$$

$$C_n^{(2)} = \frac{sJ}{E_n - E_0} \sum_{n_1 \neq 0} (-1)^{n_1} A_{nn_1} \frac{sJ}{E_{n_1} - E_0} A_{n_1 0} - \frac{(sJ)^2}{(E_n - E_0)^2} A_{n0} A_{00}, \quad (24)$$

$$E^{(1)} = -sJ A_{00}, \quad E^{(2)} = -sJ \sum_{n_1 \neq 0} (-1)^{n_1} A_{0n_1} \frac{sJ}{E_{n_1} - E_0} A_{n_1 0},$$

$$E^{(3)} = -sJ \sum_{n_1 \neq 0} (-1)^{n_1} A_{0n_1} \frac{sJ}{E_{n_1} - E_0} \times \sum_{n_2 \neq 0} A_{n_1 n_2} \frac{sJ}{E_{n_2} - E_0} (-1)^{n_2} A_{n_2 0} + sJ \sum_{n_1 \neq 0} (-1)^{n_1} A_{0n_1} \frac{(sJ)^2}{(E_{n_1} - E_0)^2} A_{n_1 0} A_{00}. \quad (25)$$

Заметим, что имеют место соотношения

$$A_{nn'} = A_{n'n}^{-1}, \quad A_{nn'} = (-1)^{n+n'} A_{n'n}^{-1}, \quad (26)$$

($\hat{A}^{-1} = \exp[q(b^+ - b)]$), в чем можно убедиться непосредственным вычислением. Используя их и подставляя

⁹ Норма $\tilde{\Phi}_s(x)$ при этом отлична от единицы, но в нашем рассмотрении это несущественно.

⁷ Согласно (3), при этом выражение $b^+ - b$ меняет знак.

⁸ Далее мы всюду опускаем индекс s у коэффициентов C_{ns} .

$E_n - E_0 = n\hbar\omega$, представим (24), (25) как

$$\begin{aligned} C_n^{(0)} &= 0, \quad C_n^{(1)} = \frac{sJ}{n\hbar\omega} A_{0n}^{-1}, \\ C_n^{(2)} &= \left(\frac{sJ}{\hbar\omega}\right)^2 \sum_{n_1 \neq 0} \frac{A_{0n_1} A_{n_1 n}^{-1}}{n n_1} - \left(\frac{sJ}{\hbar\omega}\right)^2 \frac{A_{00} A_{0n}^{-1}}{n^2}, \\ E^{(1)} &= -sJA_{00}, \quad E^{(2)} = -\frac{(sJ)^2}{\hbar\omega} \sum_{n_1 \neq 0} \frac{A_{0n_1}^{-1} A_{n_1 0}}{n_1}, \\ E^{(3)} &= -\frac{(sJ)^3}{(\hbar\omega)^2} \sum_{n_1 \neq 0} \sum_{n_2 \neq 0} \frac{A_{0n_1} A_{n_1 n_2}^{-1} A_{n_2 0}}{n_1 n_2} \\ &\quad + \frac{(sJ)^3}{(\hbar\omega)^2} A_{00} \sum_{n_1 \neq 0} \frac{A_{0n_1}^{-1} A_{n_1 0}}{n_1^2}. \end{aligned} \quad (27)$$

4. Вычисление поправок к энергии

Поднимем энергетические знаменатели (которые в (27), (28) все положительны) в экспоненту с помощью интегрального тождества

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_1 n_2 \dots n_k} &= \int_0^\infty \exp(-x_1 n_1) dx_1 \\ &\quad \times \int_0^{x_1} \exp(-x_2 (n_2 - n_1)) dx_2 \dots \\ &\quad \times \int_0^{x_{k-1}} \exp(-x_k (n_k - n_{k-1})) dx_k, \end{aligned} \quad (29)$$

которое проверяется интегрированием по частям. Рассмотрим для конкретности преобразование двойной суммы в выражении для $E^{(3)}$

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n_1 \neq 0} \sum_{n_2 \neq 0} \frac{A_{0n_1} A_{n_1 n_2}^{-1} A_{n_2 0}}{n_1 n_2} \\ &= \int_0^\infty dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \sum_{n_1 \neq 0} \sum_{n_2 \neq 0} (A_{0n_1} \exp(-x_1 n_1)) \\ &\quad \times (\exp(x_2 n_1) A_{n_1 n_2}^{-1}) \exp(-x_2 n_2) A_{n_2 0}. \end{aligned}$$

Выражения в скобках правой части можно представить как

$$(\hat{A}(x_1))_{0n_1}, \quad (\hat{A}^{-1}(x_2))_{n_1 n_2},$$

где $\hat{A}(x) = \exp(xb^+ b) \hat{A} \exp(-xb^+ b)$ ("представление взаимодействия" с мнимым временем $-ix$). Преобразуем

двойную сумму так, чтобы суммирование проводилось по полной системе функций

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n_1=0}^\infty \sum_{n_2=0}^\infty A_{0n_1}(x_1) A_{n_1 n_2}^{-1}(x_2) A_{n_2 0} \\ &\quad - A_{00} \sum_{n_1=0}^\infty A_{0n_1}(x_1) A_{n_1 0}^{-1}(x_2) \\ &\quad - A_{00} \sum_{n_2=0}^\infty A_{0n_2}^{-1}(x_2) A_{n_2 0} + A_{00}^3 \end{aligned}$$

(в диагональных матричных элементах зависимость от x выпадает). Выражение для S можно записать и так:

$$\begin{aligned} S &= \langle 0 | \hat{A}(x_1) \hat{A}^{-1}(x_2) \hat{A} | 0 \rangle - \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{A}(x_1) \hat{A}^{-1}(x_2) | 0 \rangle \\ &\quad - \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{A}^{-1}(x_2) \hat{A} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle^3. \end{aligned} \quad (30)$$

В результате выражение S представляется через средние по основному состоянию от произведений операторов

$$\hat{A}(x) = \exp(-q(e^{xb^+} - e^{-xb})),$$

$$\hat{A}^{-1}(x) = \exp(q(e^{xb^+} - e^{-xb})). \quad (31)$$

Такое преобразование может быть проведено во всех порядках ряда теории возмущений для E .

Средние от произведений операторов (31) легко вычисляются с помощью следующих операторных соотношений, справедливых для Бозе-операторов¹⁰:

$$\begin{aligned} \exp(a_1 b^+ - a_2 b) &= \exp(a_1 b^+) \exp(-a_2 b) \exp(-a_1 a_2 / 2) \\ &= \exp(-a_2 b) \exp(a_1 b^+) \exp(a_1 a_2 / 2), \end{aligned} \quad (32a)$$

$$\langle 0 | \exp(Ab) \exp(Bb^+) | 0 \rangle = \exp(AB). \quad (32b)$$

Используя (32a), можно произведение операторов (31) под знаком среднего привести к виду $\exp(Ab) \exp(Bb^+)$, после чего использовать (32b).

1) П е р в ы й п о р я д о к. Из (25) имеем $E^{(1)} = -sJA_{00}$; следовательно, расщепление дублета $n = 0$ в этом порядке есть

$$\begin{aligned} 2|J|A_{00} &= 2|J| \langle 0 | \exp(-q(b^+ - b)) | 0 \rangle \\ &= 2|J| \exp(-q^2/2) = 2|J| \exp(-x_0^2/l^2). \end{aligned} \quad (33)$$

Данный член убывает экспоненциально с ростом константы электрон-колебательной связи. Нетрудно показать, что

$$A_{00} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x - x_0) \psi_0(x + x_0) dx,$$

т.е. экспоненциальная малость является следствием экспоненциального убывания перекрытия смещен-

¹⁰ Соотношения (32a) являются частным случаем операторного соотношения $\exp(\hat{P} + \hat{Q}) = \exp(\hat{P}) \exp(\hat{Q}) \exp((-1/2)[\hat{P}, \hat{Q}])$, справедливого, если коммутатор операторов \hat{P} и \hat{Q} есть c -число.

ных осцилляторных функций основного состояния $\psi_0(x \pm x_0) \sim \exp(-(1/2)(x \pm x_0)^2)$ с увеличением связи (расстояние $2x_0$ между центрами растет).

2) В т о р о й п о р я д о к. Как отмечалось выше, член второго порядка (как любой член четного порядка) приводит только к сдвигу уровней, но не расщеплению их. Преобразуем $E^{(2)}$ из (28) указанным выше способом

$$E^{(2)} = -\frac{J^2}{\hbar\omega} \int_0^\infty dx \left(\sum_{n=0}^\infty A_{0n}^{-1}(x) A_{n0} - A_{00}^2 \right) \\ = -\frac{J^2}{\hbar\omega} \int_0^\infty dx \left(\langle 0 | \exp[q(\exp(x)b^+ - \exp(-x)b)] \right. \\ \left. \times \exp(-q(b^+ - b)) | 0 \rangle - \exp(-q^2) \right)$$

(в предыдущем разделе мы получили $A_{00} = \exp(-q^2/2)$). Используя (32), получаем после некоторых преобразований

$$E^{(2)} = -\frac{J^2}{4E_p} f(q), \\ f(q) = q^2 \exp(-q^2) \int_0^q \frac{dz}{z} (\exp(z) - 1), \quad (34)$$

$E_p = (1/4)\hbar\omega q^2$. При $q \rightarrow \infty$ $f(q) \rightarrow 1$, а $E^{(2)} \rightarrow -J \cdot (J/4E_p) \sim 1/q^2$. Экспоненциальная малость отсутствует.

3) Т р е т и й п о р я д о к. Как и член первого порядка, этот член вносит вклад в расщепление уровня. Согласно (28), вклад $E^{(3)}$ состоит из двух членов. Первый пропорционален величине S (30) и равен

$$E_1^{(3)} = -s \frac{J^3}{(\hbar\omega)^2} S.$$

Он приводится к виду

$$E_1^{(3)} = -s \frac{J^3}{(\hbar\omega)^2} \exp(-q^2/2) \\ \times \int_0^1 \frac{dx_1}{x_1} \int_0^1 \frac{dx_2}{x_2} \left[\exp(-q^2(1-x_1)(1-x_2)) \right. \\ \left. - \exp(-q^2(1-x_1)) - \exp(-q^2(1-x_2)) \right. \\ \left. + \exp(-q^2) \right]. \quad (35)$$

Вклад последних трех членов в скобках, очевидно, экспоненциально мал ($\sim \exp(-3q^2/2)$ или $\sim \exp(-q^2/2)$). Показатель экспоненты первого члена равен $-q^2(1-x_1)(1-x_2) \leq 0$ и, очевидно, не может компенсировать стоящий перед интегралом множитель $\exp(-q^2/2)$.

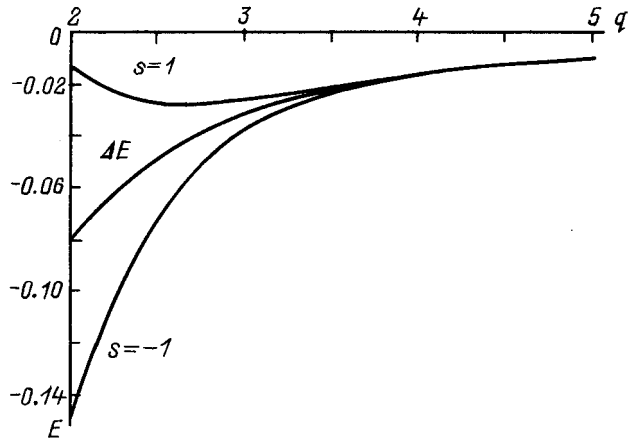


Рис. 1. Энергия дублета E_s и энергетический "центр тяжести" ΔE для основного состояния $n = 0$ как функции параметра электронно-колебательной связи q . Значение $J/\hbar\omega = 0.5$. В целях наглядности мы опустили область $0 \leq q \leq 2$. В ней при изменении q от двух до нуля E_1 и E_{-1} расходятся, достигая при $q = 0$ значений соответственно -0.5 и $+0.5$. Заметим, что q совпадает с величиной 2α , введенной в [8].

Второй вклад $E_2^{(3)}$ содержит множитель $A_{00} = \exp(-q^2/2)$. Сумма по n отличается от суммы в $E^{(2)}$ фактором $1/n^2$ вместо $1/n$, а интеграл будет отличаться от (34) наличием множителя $\ln(1/z)$. Как и (34), этот интеграл убывает с ростом q степенным образом. Поэтому $E_2^{(3)}$, как и $E_1^{(3)}$, будет $\sim \exp(-q^2/2)$. Заметим, что упомянутую экспоненциальную малость уже нельзя объяснить, как в первом порядке, экспоненциально малым перекрытием невозмущенных функций на разных узлах. В общие выражения (24)–(26) под знаком суммы входят интегралы $A_{n_1 n_2}$, $n_i \neq 0$, которые в окрестности некоторого $n \neq 0$ всегда порядка единицы (подробнее об этом см. п. 2 раздела 5).

Обратим внимание на то, что основной вклад в рассматриваемые интегралы вносит окрестность верхнего предела, что в переменных x_i соответствует окрестности $(x_1 = 0, x_2 = 0 \dots)$.

На рис. 1 представлены в зависимости от q энергии компонент дублета основного состояния

$$E_s = \pm J \exp(-q^2/2) - \frac{J^2}{4E_p} f(q), \quad (36)$$

отсчитанные от E_p . С ростом q компоненты экспоненциально быстро сближаются, а их энергии при дальнейшем росте q убывают как q^{-2} .

Вычисления поправок к энергии в низших порядках обнаруживают существенное различие в характере их поведения с ростом константы g электрон-колебательной связи. Именно вклады, ответственные за сдвиг центра тяжести дублета основного состояния (т.е. четного порядка по J), убывают с ростом g степенным образом, в то время как вклады, ответственные за расщепление

дублета (нечетного порядка по J), убывают экспоненциально. Мы не располагаем доказательством того, что это различие реализуется во всех порядках теории возмущений,¹¹ однако полагаем, что изложенного в данной работе достаточно, чтобы отнестись к высказанному утверждению серьезно.

Одно важное различие между членами ряда четного и нечетного порядков для энергии основного ($n = 0$) состояния легко усмотреть во всех порядках теории возмущений. После выполнения процедуры поднятия энергетических знаменателей в экспоненту и перехода к суммированию по полному набору состояний (см. выше) члены ряда будут иметь вид произведений выражений типа

$$\langle 0 | \hat{A}^{-1}(x_1) \hat{A}(x_2) \hat{A}^{-1}(x_3) \hat{A}(x_4) \dots \hat{A}^{-1}(x_{2k-1}) \hat{A}(x_{2k}) | 0 \rangle$$

для четного числа $2k$ операторов и

$$\langle 0 | \hat{A}(x_1) \hat{A}^{-1}(x_2) \hat{A}(x_3) \dots \hat{A}^{-1}(x_{2k-2}) \hat{A}(x_{2k-1}) | 0 \rangle$$

для нечетного числа. При этом операторы \hat{A} и \hat{A}^{-1} чередуются. Если положить в таком выражении все x_i равными, то член с четным числом операторов будет равен единице, поскольку $\hat{A}^{-1}(x) \hat{A}(x) = 1$. В члене же с нечетным числом операторов останется один нескомпенсированный оператор, и результатом будет $\hat{A}^{-1}(x) = \exp(-q^2/2)$. Отсюда следует, что при совпадающих аргументах член ряда теории возмущений нечетного порядка экспоненциально мал $\sim \exp(-q^2/2)$, а член четного порядка такой малости не содержит.¹²

5. Волновая функция

1) Теория возмущений для волновой функции. Процедура вычисления поправок к волновой функции является более громоздкой, и мы ограничиваемся нахождением поправки первого порядка. Используя (27), получим выражение для $\tilde{\Phi}_s(x)$

$$\tilde{\Phi}_s(x) = \psi_0(x) + \frac{SJ}{\hbar\omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} A_{0n}^{-1} \psi_n(x). \quad (37)$$

Более наглядным является выражение в представлении смещенных осцилляторов. Используя выражение (9) для U , общее выражение для волновой функции (11), а также связь двух рассматриваемых представлений волновой функции

$$\Psi = U^{-1} \tilde{\Psi},$$

нетрудно получить, что в этом представлении

$$\Phi_s(\bar{x}) = \tilde{\Phi}_s(\bar{x} - \bar{x}_0) \quad (38)$$

¹¹ Мы убедились, что в четвертом порядке ситуация сохраняется.

¹² Что, конечно, не означает, что отдельные слагаемые в члене четного порядка не могут быть порядка $\exp(-q^2/2)$. Напомним также, что выше мы отметили, что основной вклад в вычисленных поправках вносит окрестность ($x_i = 0$). Заметим также, что рассмотрение свойств ряда теории возмущений может оказаться базой для доказательства экспоненциальной малости расщепления во всех порядках.

(мы ввели безразмерные переменные $\bar{x} = x/l$, $\bar{x}_0 = x_0/l$). Учитывая (38), а также (20), получаем

$$\Phi_s(\bar{x}) = \psi_0(\bar{x} - \bar{x}_0) + \frac{SJ}{\hbar\omega} \times \int_{-\infty}^{+\infty} K(\bar{x} - \bar{x}_0, \bar{x}' - \bar{x}_0) \psi_0(\bar{x} + \bar{x}_0) d\bar{x}', \quad (39)$$

где

$$K(\bar{x}, \bar{x}') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \psi_n(\bar{x}) \psi_n(\bar{x}') = \int_0^1 \frac{dz}{z} \sum_{n=1}^{\infty} z^n \psi_n(\bar{x}) \psi_n(\bar{x}'). \quad (40)$$

Подставляя явные выражения для осцилляторных функций, получим

$$K(\bar{x}, \bar{x}') = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\bar{x}^2 + \bar{x}'^2)\right) \times \int_0^1 \frac{dz}{z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(z/2)^2}{n!} H_n(\bar{x}) H_n(\bar{x}'), \quad (41)$$

где $H_n(\bar{x})$ — полиномы Эрмита. Сумма в (41) равна (см., например, [10])

$$\frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left(\frac{2z\bar{x}\bar{x}' - z^2(\bar{x}^2 + \bar{x}'^2)}{1-z^2}\right) - 1. \quad (42)$$

Используя (40)–(42), можно записать $\Phi_s(\bar{x})$ следующим образом:

$$\Phi_s(\bar{x}) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\bar{x} - \bar{x}_0)^2\right) + \frac{SJ}{\pi^{1/4}\hbar\omega} \exp\left(-\frac{1}{2}(\bar{x} - \bar{x}_0)^2 - \bar{x}_0^2\right) \times \int_0^1 \frac{dz}{z} \left[\exp(-z^2\bar{x}_0^2 - 2z\bar{x}_0(\bar{x} - \bar{x}_0)) - 1 \right] \quad (43)$$

(мы записали ψ_0 в явном виде). При малых \bar{x}_0 $\Phi_s(\bar{x})$ имеет максимум в окрестности \bar{x}_0 . С возрастанием \bar{x}_0 появляется второй максимум в области $x < 0$. При $\bar{x}_0 \rightarrow \infty$ положение максимумов стремится к $\pm\bar{x}_0$, причем значение функции при $-\bar{x}_0$ убывает как $1/\bar{x}_0^2$. Характер поведения функции изображен на рис. 2.

2) Перекрывание волновых функций. Пусть задан гамильтониан

$$H = H_0 + \lambda V. \quad (44)$$

Для простоты будем считать, что V не зависит от λ . Пусть Ψ_n — собственная функция H , нормированная на единицу,

$$H\Psi_n = E_n\Psi_n. \quad (45)$$

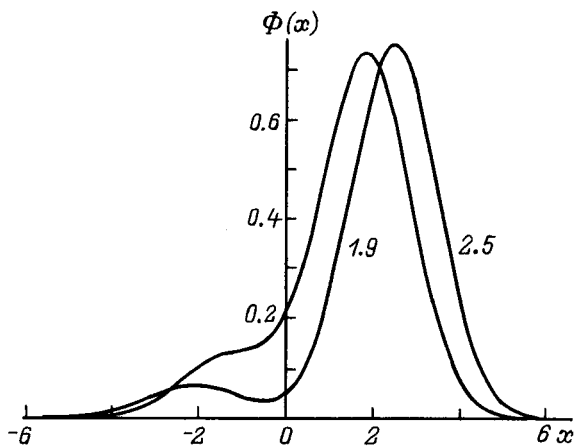


Рис. 2. Координатная часть волновой функции основного состояния как функция x (в единицах x_0) для значений $x_0 = 1.9$ и 2.5 . $J/\hbar\omega = 1$.

Тогда имеем общее соотношение¹³

$$\frac{dE_n}{d\lambda} = \int \Psi_n^* V \Psi_n dv. \quad (46)$$

Применим это соотношение к нашей функции $\tilde{\psi}_s$. Имеем

$$\tilde{\psi}_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\Phi}_s(x) \hat{a}_1^+ |0\rangle + s \tilde{\Phi}_s(-x) \hat{a}_2^+ |0\rangle \right), \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \tilde{V} = & -J \left[\exp(-q(b^+ - b)) \hat{a}_1^+ \hat{a}_2 \right. \\ & \left. + \exp(q(b^+ - b)) \hat{a}_2^+ \hat{a}_1 \right]. \end{aligned} \quad (48)$$

Роль λ играет $-J$. Получим

$$\frac{dE_s}{dJ} = \frac{1}{J} \int \tilde{\psi}_s^* \tilde{V} \tilde{\psi}_s dv. \quad (49)$$

Воспользовавшись формулами (17a), (17b) для сдвига и расщепления основного состояния, получаем соотношения

$$\frac{d}{dJ} \Delta E = \frac{1}{2J} \left((\tilde{\Psi}_1 \tilde{V} \tilde{\Psi}_1) + (\tilde{\Psi}_{-1} \tilde{V} \tilde{\Psi}_{-1}) \right), \quad (50)$$

$$\frac{d}{dJ} \delta E = \frac{1}{2J} \left| (\tilde{\Psi}_1 \tilde{V} \tilde{\Psi}_1) - (\tilde{\Psi}_{-1} \tilde{V} \tilde{\Psi}_{-1}) \right|. \quad (51)$$

Выражения $(\tilde{\Psi}_s \tilde{V} \tilde{\Psi}_s)$ равны

$$(\tilde{\Psi}_1 \tilde{V} \tilde{\Psi}_1) = -J \int \tilde{\Phi}_1(x - x_0) \tilde{\Phi}_1(-x - x_0) dx, \quad (52)$$

$$(\tilde{\Psi}_{-1} \tilde{V} \tilde{\Psi}_{-1}) = J \int \tilde{\Phi}_{-1}(x - x_0) \tilde{\Phi}_{-1}(-x - x_0) dx. \quad (53)$$

¹³ Это соотношение часто используется в статистической механике. Достаточно продифференцировать по λ тождество $E_n = \int \Psi_n^* (H_0 + \lambda V) \Psi_n$. Член с производными от Ψ -функций выпадает в силу (45), эрмитовости H и нормированности Ψ_n .

В соответствии с установленным ранее правилом функции $\tilde{\Phi}_s(x)$ имеют вид

$$\tilde{\Phi}_s(x) = \tilde{\Phi}_g(x) + s \tilde{\Phi}_u(x), \quad (54)$$

где $\tilde{\Phi}_g$ — сумма членов четных по J , а $\tilde{\Phi}_u$ — сумма нечетных членов. Нетрудно сообразить, что в (50) войдут только четные по J порядки, а в (51) — только нечетные, что обеспечивает надлежащие порядки малости.

Видно, что выражения (50), (51) позволяют найти интегралы перекрытия функций Φ_s , относящихся к разным узлам, если известны только уровни энергии E_s (не требуется вычисления волновых функций). Так, используя выражение (36) для энергии, вычисленной с точностью до J^2 , с помощью (49), (52), (53) получим для модуля интеграла перекрытия

$$\begin{aligned} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_s(x - x_0) \Phi_s(-x - x_0) dx \right| &= \left| \frac{dE_s}{dJ} \right| \\ &= \left| s \exp(-q^2/2) + \frac{J}{2E_p} f(q) \right|. \end{aligned}$$

Этот результат можно получить и непосредственным вычислением с использованием приближенных волновых функций этого раздела.

Из всего сказанного выше следует, что интеграл перекрытия не содержит экспоненциальной малости $\exp(-q^2/2)$, но в разности интегралов, относящихся к компонентам дублета, главные члены сокращаются, и она оказывается экспоненциально малой.¹⁴

6. Обсуждение результатов

Основным результатом данной работы следует считать обнаружение специфики ряда теории возмущения по J для энергии E_s основного состояния рассматриваемой модели: сумма членов порядка определяет центр тяжести ΔE дублета $n = 0$, в то время как сумма членов нечетного порядка по модулю равна половине расщепления δE дублета. При этом δE пропорционально величине $\exp(-q^2/2)$, т. е. убывает экспоненциально при стремлении константы g электрон-колебательной связи к бесконечности, в то время как ΔE убывает степенным образом. Подчеркнем, что при достаточно больших значениях g главным членом в ряду теории возмущения для E_s является член второго порядка $\sim J^2$. Упомянутая специфика является проявлением отмеченного в разделе 1 двукратного вырождения уровней невозмущенного гамильтониана H_0 .

В работах [7,8] был предпринят численный расчет волновых функций и уровней энергии рассматриваемой модели. Мы проанализировали часть полученного там

¹⁴ Мы полагаем, что дифференцирование по J не меняет оценки величин ΔE и δE (предварительное исследование показало, что сходная картина реализуется и в двухэлектронной задаче).

расчетного материала, связанного с затронутым в данной работе вопросом, и установили, что он хорошо описывается в рамках теории возмущений по J вплоть до совпадения порядков численных величин. Это относится к данным, приведенным на рис. 1 и 2, а также к данным, представляемым формулами (49)–(52) нашей статьи. Однако с интерпретацией авторами [7,8] полученных ими результатов и выводами, которые они делают, мы согласиться не можем.

Необходимо отметить, что авторы [8] часто ссылаются на работы [4,5] (обозначая их как LF) в аспекте полемики. Из [8] следует, что "подход LF" они отождествляют с низшим ($\sim J$) порядком теории возмущения. Мы не согласны с подобным отождествлением, во-первых, потому, что результат $\sim J$ принадлежит Холстейну (так этот подход и следовало бы называть), во-вторых, поскольку необходимость выхода за рамки низшего приближения авторам [4,5] (и других работ этого цикла) была ясна с самого начала и значительное число конкретных результатов было получено именно в этом направлении. Фактически, все полемические замечания в [8] относительно "подхода LF" основаны на упомянутом отождествлении.

Продемонстрируем сказанное на конкретных примерах. На рис. 1, *a* работы [8]¹⁵ приведена зависимость вычисленной ими величины

$$\varepsilon = (1/2)\langle a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \rangle$$

для основного состояния $n = 0$ от константы электрон-колебательной связи g .¹⁶ Авторы сравнивают свой результат с величиной

$$\varepsilon_1 = (1/2)\langle a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \rangle_1,$$

вычисленной в низшем порядке ($\sim J$) теории возмущений, и отмечают, что зависимость от g вычисленной величины резко отличается от экспоненциального убывания ε_1 . На рис. 1, *b* работы [8] изображено отношение $\varepsilon/\varepsilon_1$ от $\gamma = J/\hbar\omega$. Это отношение при разумных значениях $J/\hbar\omega$ может составлять много порядков, что свидетельствует о несостоятельности низшего порядка теории возмущений. Дело, однако, в том, что главным членом пертурбационного ряда для ε при больших g является член второго порядка $\varepsilon_2 \sim J^2$ (см. (34)), который не содержит экспоненциальной малости (см. раздел 4 настоящей работы). Поэтому для корректного сравнения численных расчетов с теорией возмущения следует использовать не $\varepsilon/\varepsilon_1$, а $\varepsilon/\varepsilon_2$. В области не слишком больших $J/\hbar\omega$ и достаточно больших g это отношение будет порядка единицы.¹⁷ Таким образом,

¹⁵ Ссылки на [8] даются по ее препринту. Мы используем для величин обозначения, принятые в настоящей статье.

¹⁶ Авторы [8] используют не вполне корректную запись $\varepsilon = \langle a_1^+ a_2 \rangle$. Согласно (51), (52), величина ε связана с интегралом перекрытия колебательных амплитуд $\Phi(x)$ волновой функции основного состояния, относящихся к разным узлам.

¹⁷ Мы убедились в этом, воспользовавшись данными рис. 1, *b* из [8] и формулами (34), (48), при этом расхождение численных значений оказывается в пределах 30%.

декларируемое в работе [8] расхождение между численным расчетом и вычислениями по теории возмущений является следствием некорректного использования ее авторами теории возмущения. Во избежание недоразумений заметим, что величину ε нельзя рассматривать как характеристику зоны, как это представлено в [8], так как она характеризует одно квантовое состояние (один из термов дублета), а зона есть группа состояний. В рассматриваемой модели при заданном n имеются два состояния Ψ_s , $s = \pm 1$, на которые расщепляется двукратно вырожденное состояние гамильтониана H_0 при учете $V \sim J$. Эту пару состояний с энергиями E_s и следует рассматривать как прообраз зоны, а $\delta E = |E_1 - E_{-1}|$ — как ее ширину. Согласно (50)–(52), δE связана с разностью интегралов перекрытия в состояниях Ψ_1 и Ψ_{-1} и, как показано выше, экспоненциально мала при больших g , так как неэкспоненциальные члены в разности сокращаются. На рис. 4 работы [8] представлены величины $n(k = \pi)_{\pm} = (1/2)(1 - \langle a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1 \rangle_{\pm})$, которые являются с точностью до постоянного слагаемого величинами $\varepsilon_{\pm 1}$ для четного (1) и нечетного (–1) термов основного состояния. Как видно из рис. 1, *b* работы [8], с ростом константы электрон-колебательной связи они быстро сближаются, сливаясь в единую кривую, которая стремится к горизонтальной асимптоте по закону, близкому к следующему из теории возмущений g^{-2} . Сравнение с рис. 1 нашей работы обнаруживает полную аналогию поведения рассматриваемых термов при больших g (примечательно, что слияние кривых на обоих рисунках происходит при близких значениях константы связи ~ 1.8), и мы не сомневаемся, что численный расчет показал бы, что расстояние между кривыми $n(k = \pi)_{\pm}$ убывает с ростом g экспоненциально, откуда следует и экспоненциальное убывание ширины зоны. Обнаружение этого факта могло бы стимулировать более тщательное исследование пертурбационного ряда для рассматриваемой задачи. К сожалению, авторы [8] такого исследования не провели. По нашему мнению, в рассматриваемой области параметров (большие g и малые J) нет необходимости в численных расчетах, поскольку рассмотрение в рамках теории возмущения по J достаточно полно представляет картину, а серьезных оснований предполагать наличие особенности при $J = 0$ нет.¹⁸

Однако численные расчеты могут быть весьма полезны для области больших J . Приведем соображения о том, что можно ожидать с увеличением J . Величину δE можно представить в виде ряда по нечетным степеням $|J|$ следующим образом:

$$\delta E = |J| = |J| \exp(-q^2/2) \sum_{k=0}^{\infty} D_k J^{2k}, \quad (A)$$

где коэффициенты D_k убывают с ростом g не быстрее, чем степени g^{-1} . Мы полагаем, что этот ряд сходится

¹⁸ Об этом свидетельствует и то, что авторы [8] не упоминают о каких-либо трудностях, связанных со сходимостью вычислительной процедуры.

при достаточно малых $|J|$. Представляет принципиальный интерес выяснить поведение ряда из (А) с возрастанием $|J|$. Ясно, что при любом значении константы g можно выбрать $|J|$ настолько большим, что электрон-колебательную связь

$$V' = -g(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)x$$

допустимо рассматривать как малое возмущение гамильтониана

$$H'_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{M\omega^2 x^2}{2} - J(\hat{a}_1^+ \hat{a}_2 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1). \quad (\text{В})$$

В этом случае в нулевом по V' приближении $\delta E = 2|J|$. Подобный результат не может быть получен без существенной перестройки разложения (А). Это свидетельствует в пользу того, что радиус сходимости этого ряда конечен, т. е. $\delta E(J)$ как функция $|J|$ имеет особенность.¹⁹

Представляется целесообразным исследование простейшей модели поляронного кристалла — упрощенной модели Холстейна, в которой колебательная система моделируется приписыванием каждому узлу решетки осциллятора с одной степенью свободы и частотой ω (дисперсия отсутствует!) и линейной электрон-колебательной связью рассмотренного выше типа. Такая система не обладает диссипативными свойствами и поэтому непригодна для рассмотрения кинетических задач.²⁰ Однако она допускает адекватное рассмотрение равновесных задач, а ее простота позволяет надеяться, что в ее рамках можно продвинуться дальше, чем это позволяют сделать более изощренные модели.

В качестве конкретной проблемы приложения этой модели можно предложить исследование в ее рамках биполярной модели (введя в простейшем виде члены взаимодействия), так как ее рассмотрение на основе модели Холстейна [11] приводит к громоздким и трудноинтерпретируемым выражениям. В то же время биполярная модель заслуживает внимания как чрезвычайно наглядная (по сравнению с моделью BCS) модель сверхпроводимости.

Авторы выражают благодарность Ю. Раннингеру за присылку препринта статьи [8].

Список литературы

- [1] K. Huang, A. Rhys. Proc. Roy. Soc. **A204**, 406 (1950).
- [2] М.А. Кривоглаз, С.И. Пекар. Тр. Ин-та физики АН УССР **4**, 37 (1953).
- [3] T. Holstein. Ann. Phys. **8**, 325, 343 (1959).
- [4] И.Г. Ланг, Ю.А. Фирсов. ЖЭТФ **43**, 5, 1843 (1962).
- [5] Поляроны. Сборник / Под ред. Ю.А. Фирсова. Наука, М. (1975).
- [6] A.S. Alexandrov, V.V. Kabanov, D.K. Ray. Phys. Rev. **B49**, 14, 9915 (1994).
- [7] J. Ranninger, U. Thibblin. Phys. Rev. **B45**, 7730 (1992).
- [8] E.V.L. de Mello, J. Ranninger. Phys. Rev. **B55**, 14872 (1997).
- [9] Е.К. Кудинов, Ю.А. Фирсов. ФТТ **7**, 3, 546 (1965).
- [10] H. Bateman, A. Erdélyi. Higher Transcendental Functions. Toronto London MC Graw-Hill Book Company, N.Y. (1953). V. 2. (Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции. Наука, М. (1968).)
- [11] А.С. Александров. ЖФХ **57**, 2, 273 (1983).

¹⁹ На это же указывает и различие между гамильтонианами H_0 и H'_0 : состояния первого вырождены, а второго — нет. Заметим также, что при возрастании J при $J > J_c = 2E_p$ меняется структура адиабатических термов: у них исчезают минимумы в точках $x \neq 0$. Это может породить особенность по J в точке J_c .

²⁰ Именно кинетическим явлениям были посвящены работы по поляронам [3,4], поэтому данная модель не привлекла внимания их авторов, хотя они, разумеется, понимали применимость их методики к квантовомеханической задаче.