

An Improvement of the Feynman Action in the Theory of Polaron I

東大教養・基礎科学科 阿部 龍 蔵
岡 本 謙 一

(4月19日受理)

序

Feynman がポーロン問題に於いて、経路積分法に基ずく変分法を適用して以来、同様の取り扱いによる多くの研究がなされている。経路積分法は、ポーロン問題に於いて、その繁雑な数学形式にかかわらず、結合定数 α のすべての領域にわたって、同一の数学形式で与えられる長所を持っている。又、結合定数のすべての領域に於いて、結合定数の適用範囲を持った理論と比較して基底状態のエネルギーにより一致を示すか、あるいはより低い値を与える。

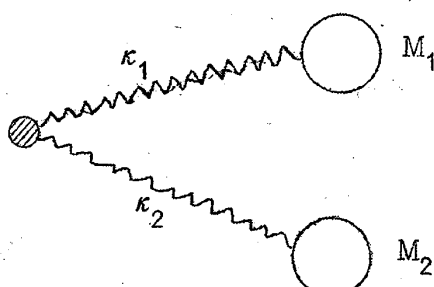
Feynman 理論は、trial を作用として、1つのバネで結びつけられた two-coupled particle model を用いる。我々は図1に示されるように three-coupled particle model を用いて、Feynman 理論を拡張した。我々の形式では、変分パラメーターが4個であり、その極限状態として Feynman 理論を含んでいる。

我々が Feynman 理論を拡張した理由は次のとおりである。ポーロン問題に於いて、正確な作用は、クーロン型のポテンシャルエネルギーを持つ。図2にみられるように Feynman 理論は、クーロン型ポテンシャルの束縛状態を調和振動子のポテンシャルエネルギーで cover しようとしている。従って深い束縛状態に対して、この近似は十分ではない。残念ながら経路積分法で正確に計算できるのは、ポテンシャルエネルギーが2次形式に限られている。従って一般に Feynman 理論を拡張した manycoupled particle model の trial action

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{x}_t}{dt} \right)^2 dt - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N c_n \int_0^T \int_0^T dt ds (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_s)^2 e^{-\omega_n |t-s|}$$

を用いるのが自然な拡張で、Feynman 理論より低い基底状態を与える、よい trial action と考えられる。我々は簡単のため $N=2$ の場合を考え、4つのパラメーターで変分を行なうことにより、Feynman 理論より低い基底状態エネルギーを、結合定数 α が十分小さい時 ($\alpha \ll 1$) 及び中間領域の $\alpha=3$ の場合に得た。しかし基底状態のエネルギーの下がり方は、期待した程ではなく (せいぜい Feynman 理論の 0.1% 程度の補正) あらためて Feynman 理論のよいことを確認した。ポーラロン質量の方は、基底状態のエネルギーの時よりも大きい 0.4% 程度の補正を示した。§1 に於いて簡単に Feynman 理論を review した。§2 に於いて、基底状態のエネルギー及び、ポーラロン質量の計算が示された。図1, 2 は定性的な図である。

図1 S_{trial} の物理的意味 ; three-coupled particle model

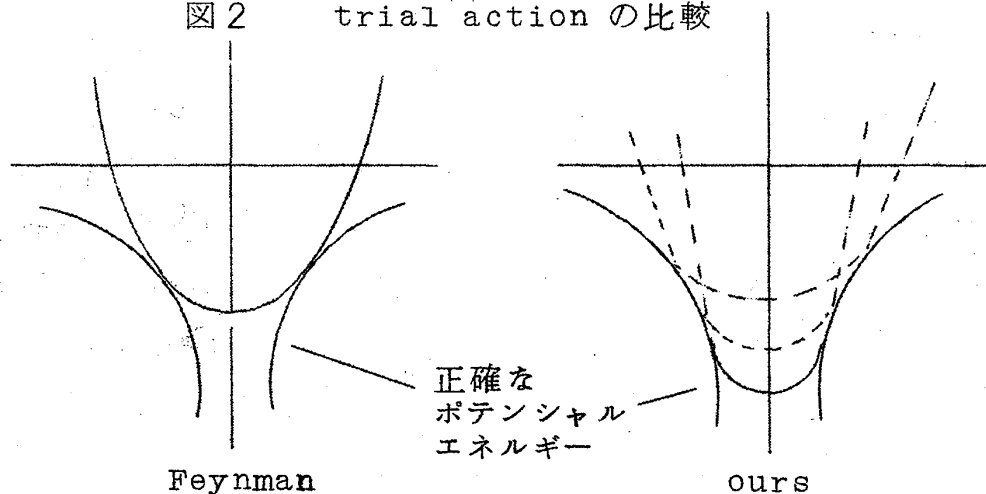


$$\kappa_1 = M_1 \omega_1^2 \quad \kappa_2 = M_2 \omega_2^2$$

$$4C_1 = M_1 \omega_1^3 \quad 4C_2 = M_2 \omega_2^3$$

$$H = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{r}})^2 + \frac{M_1}{2} (\dot{\mathbf{R}}_1)^2 + \frac{M_2}{2} (\dot{\mathbf{R}}_2)^2 + \frac{\kappa_1}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)^2 + \frac{\kappa_2}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)^2$$

図2 trial action の比較



§ 1 Feynman 理論について

ハミルトニアンを無次元化するため, $\hbar \rightarrow 1$, $\omega \rightarrow 1$, $m \rightarrow 1$ の単位を取る。 ω は光学的フォノンの周波数, m はバンド質量である。ポーラロンのハミルトニアン

$$H = \frac{P^2}{2} + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + i \left(\frac{2\sqrt{2}\alpha}{V} \right)^{1/2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k} (a_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{X}} - a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{X}}) \quad (1.1)$$

を経路積分の形式に書きなおす。シュレディンガー方程式のかわりに $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -H\psi$ なる時間を純虚数に取った方程式を考えると, この方程式に対応する確率振幅 K は,

$$K = \int_0^T \exp S \mathcal{D}\mathbf{X}_t$$

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{X}_t}{dt} \right)^2 dt + 2^{-3/2} \alpha \int_0^T \int_0^T |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} e^{-|t-s|} dt ds \quad (1.2)$$

で与えられる。ここに $\mathcal{D}\mathbf{X}_t$ は経路積分の意味ですべての経路について和を取ることを意味している。 T が十分大きい時, $T \rightarrow \infty$ で, K は漸近的に $K \sim e^{-E_0 T}$ となる。ここに E_0 は基底状態のエネルギーである。変分原理の出発は, 次の不等式である。

$\langle \exp f \rangle \geq \exp \langle f \rangle$, ここに $\langle \dots \rangle$ は

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{\int_0^T (\dots) \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t}{\int_0^T \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t} \quad \text{で定義される。} \quad (1.3)$$

S_1 は, 任意の trial な作用である。

Feynman は S_1 として

$$S_1 = -\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{X}_t}{dt} \right)^2 dt - \frac{C}{2} \int_0^T \int_0^T (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-W|t-s|} dt ds \quad \text{を用いた。} \quad (1.4)$$

上の不等式に従って

$$\begin{aligned} \int \exp S \mathcal{D}\mathbf{X}_t &= \int \exp (S - S_1) \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \\ &= \langle \exp(S - S_1) \rangle \int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \geq \exp \langle S - S_1 \rangle \int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \quad (1.5) \end{aligned}$$

T が十分大きい時 $\exp \langle S - S_1 \rangle = e^{st}$, $\int \exp S \mathcal{D}\mathbf{X}_t \sim e^{-ET}$, $\int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \sim e^{-E_1 T}$ とおいて $e^{-ET} \geq e^{-(E_1 - s)T}$ が成立する。従って $E \leq E_1 - s$ より変分原理が成立する。 $E_1 - s$ は 2 変数, C と W の関数である。Feynman は以上の原理より弱い相互作用の時, 基底状態のエネルギー E に対して, $E = -\alpha - 1.23 \left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 + \dots$, ポーラロン質量 m^* に対して $m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + 0.025 \alpha^2 + \dots$ を得た。又, 強い相互作用の時 $E = -0.106 \alpha^2 - 2.83$, $m^* = 2.02 \left(\frac{\alpha}{10}\right)^4$ を得た。又 Shultz は Feynman の式を数値計算して, 結合定数 α のいくつかの値について, E と m^* を求めた。特に $\alpha = 3$ の時 $E = -3.1333$, $m^* = 1.89$ である。

§ 2 基底状態エネルギーとポーラロン質量の計算

我々は, trial action S_1 として

$$\begin{aligned} S_1 &= -\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{X}_t}{dt} \right)^2 dt - \frac{C_1}{2} \int_0^T \int_0^T dt ds (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_1 |t-s|} \\ &\quad - \frac{C_2}{2} \int_0^T \int_0^T dt ds (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_2 |t-s|} \quad (2.1) \end{aligned}$$

を用いる。 $\omega_1 > \omega_2 > 0$, $C_1 > 0$, $C_2 > 0$ と仮定する。我々の求めるエネルギー E は

$$E = E_1 - s$$

$$s = \frac{1}{T} \langle S - S_1 \rangle = A + B + C \quad (2.2a)$$

$$A = \frac{1}{T} \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_0^T dt ds e^{-|t-s|} \langle |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} \rangle \quad (2.2b)$$

$$B = \frac{1}{T} \frac{C_1}{2} \int_0^T dt ds e^{-\omega_1 |t-s|} \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle \quad (2.2c)$$

$$C = \frac{1}{T} \frac{C_2}{2} \int_0^T dt ds e^{-\omega_2 |t-s|} \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle \quad (2.2d)$$

で与えられる。

Feynman 同様 $|\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} = \int \frac{d\mathbf{K}}{2\pi^2 K^2} \exp(i\mathbf{K}(\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s))$ を用いて A は,

$$A = \frac{1}{T} \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int_0^T dt ds e^{-|t-s|} \int \frac{d\mathbf{K}}{2\pi^2 K^2} \langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)] \rangle \quad (2.3)$$

で与えられる。

$$ii) \langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_0)] \rangle = \int \exp S_1 \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_0)] \mathcal{D}\mathbf{X}_t / \int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \quad (2.4)$$

分母を I とおくと,

$$I = \int \exp \left[-\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{X}}{dt} \right)^2 dt - \frac{C_1}{2} \int_0^T \int_0^T (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_1 |t-s|} dt ds - \frac{C_2}{2} \int_0^T \int_0^T (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_2 |t-s|} dt ds + \int_0^T \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{X}_t dt \right] \mathcal{D}\mathbf{X}_t \quad (2.5)$$

となる。ここに $\mathbf{f}(t) = i\mathbf{K}(\delta(t-\tau) - \delta(t-0))$ である。(2.5) において 3つの座標成分にわけ、特に、X成分だけ考える。又、積分に最も効く経路 $\mathbf{X}'$ からの寄与のみ取り出すと、Iは重要でない定数項を除いて、

$$I = \exp \left[-\frac{1}{2} \int_0^T (\dot{\mathbf{X}}'_t)^2 dt - \frac{C_1}{2} \int_0^T (\mathbf{X}'_t - \mathbf{X}'_s)^2 e^{-\omega_1 |t-s|} dt ds - \frac{C_2}{2} \int_0^T (\mathbf{X}'_t - \mathbf{X}'_s)^2 e^{-\omega_2 |t-s|} dt ds + \int_0^T \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{X}'_t dt \right] \quad (2.6)$$

となる。ここに $\mathbf{X}'_t$ は次の微分方程式を満たし境界条件 $\mathbf{X}'(0) = \mathbf{X}'(T) = 0$ を満足する。

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X'_t}{dt^2} = & \frac{4C_1}{\omega_1} X'_t - 2C_1 \int_0^T X'_s e^{-\omega_1 |t-s|} ds + \frac{4C_2}{\omega_2} X'_t \\ & - 2C_2 \int_0^T X'_s e^{-\omega_2 |t-s|} ds - f(t) \end{aligned} \quad (2.7)$$

(2.7) の解を用いて $I = \exp \left[\frac{1}{2} \int_0^T f(t) X'(t) dt \right]$ となる。上の方程式は $Y_t = \frac{\omega_1}{2} \int_0^T X'_s e^{-\omega_1 |t-s|} ds$, $Z_t = \frac{\omega_2}{2} \int_0^T X'_s e^{-\omega_2 |t-s|} ds$ と変形し,

$$\frac{d^2 X'_t}{dt^2} = \frac{4C_1}{\omega_1} (X'_t - Y_t) + \frac{4C_2}{\omega_2} (X'_t - Z_t) - f(t) \quad (2.8a)$$

$$\frac{d^2 Y_t}{dt^2} = \omega_1^2 (Y_t - X'_t) \quad (2.8b)$$

$$\frac{d^2 Z_t}{dt^2} = \omega_2^2 (Z_t - X'_t) \quad (2.8c)$$

となる。これらの式は、容易に分解され解くことができる。 $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T ds$ に効かない項を無視して (2.4) は,

$$\langle \exp [iK(X_\tau - X_\sigma)] \rangle = \exp \left(-\frac{K^2}{2} G(|\tau - \sigma|) \right) \quad (2.9a)$$

$$\begin{aligned} G(|\tau - \sigma|) &= \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+^3} (1 - e^{-v_+ |\tau - \sigma|}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(v_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - v_-^2)}{v_-^3} (1 - e^{-v_- |\tau - \sigma|}) \right\} + \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+^2 v_-^2} |\tau - \sigma| \end{aligned} \quad (2.9b)$$

$$v_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[v_1^2 + v_2^2 \pm \sqrt{(v_1^2 - v_2^2)^2 + \frac{64C_1 C_2}{\omega_1 \omega_2}} \right] \quad (2.9c)$$

$$v_1^2 = \omega_1^2 + \frac{4C_1}{\omega_1} \quad v_2^2 = \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} \quad (2.9a)$$

で与えられる。我々は、 $\omega_1 > \omega_2 > 0$ と仮定した。又 $C_1, C_2 > 0$ より $v_+ > \omega_1 > \omega_2$, $\omega_1 > v_- > \omega_2$ が成立する。 C_1, C_2 は $v_{\pm}, \omega_1, \omega_2$ を用いて

$$\frac{4C_1}{\omega_1} = \frac{-1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} (v_+^2 - \omega_1^2)(v_-^2 - \omega_1^2) \quad (2.10a)$$

$$\frac{4C_2}{\omega_2} = \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} (v_+^2 - \omega_2^2)(v_-^2 - \omega_2^2) \quad (2.10b)$$

とあらわされる。(2.9a)の結果は、 $K=0$ で正確ゆえ、正しく規格化されている。従ってAは

$$A = \alpha \pi^{-1/2} \int_0^\infty \frac{e^{-y}}{\sqrt{G(y)}} dy \quad \text{で与えられる。} \quad (2.11)$$

$\langle (X_\tau - X_\sigma)^2 \rangle$ は、(2.9a)の両辺を K^2 のオーダーまで展開することにより得られる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \langle (X_\tau - X_\sigma)^2 \rangle &= \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \left[\frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+^3} (1 - e^{-v_+ |\tau - \sigma|}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{(v_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - v_-^2)}{v_-^3} (1 - e^{-v_- |\tau - \sigma|}) \right] + \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+^2 v_-^2} |\tau - \sigma| \end{aligned} \quad (2.12)$$

Bについての積分は簡単に実行され、

$$\begin{aligned} B &= \frac{3C_1}{2T} \int_0^T dt \int_0^T ds e^{-\omega_1 |t-s|} \left\{ \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \frac{1}{v_+^3} (v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2) (1 - e^{-v_+ |t-s|}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \frac{(v_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - v_-^2)}{v_-^3} (1 - e^{-v_- |t-s|}) + \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+^2 v_-^2} |t-s| \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{3C_1}{(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \frac{(v_+ - \omega_1)(v_+^2 - \omega_2^2)}{\omega_1 v_+^2} + \frac{(v_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1 - v_-)}{\omega_1 v_-^2} + \frac{\omega_2^2(v_+^2 - v_-^2)}{v_+^2 v_-^2} \right\} \\
 &= \frac{3C_1 (v_+ v_- + \omega_2^2)}{\omega_1 v_+ v_- (v_+ + v_-)} \quad (2.13)
 \end{aligned}$$

C も同様にして

$$C = \frac{3C_2 (v_+ v_- + \omega_1^2)}{\omega_2 v_+ v_- (v_+ + v_-)} \quad (2.14)$$

$$B + C = \frac{3}{4} \left\{ -\frac{(\omega_1^2 + v_+ v_-)(\omega_2^2 + v_+ v_-)}{v_+ v_- (v_+ + v_-)} + (v_+ + v_-) \right\} \quad (2.15)$$

E_1 を求めるために C_1, C_2 を r 倍したあらたな trial-action S_1 を考える。

$$\begin{aligned}
 S_1 = & -\frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{d\mathbf{X}_t}{dt} \right)^2 dt - 2C_1 r \int_0^T \int_0^T dt ds (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_1 |t-s|} \\
 & - 2C_2 r \int_0^T \int_0^T dt ds (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_2 |t-s|}
 \end{aligned}$$

$\int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X} \sim e^{-E_1 T}$ に注意して,

$$\frac{\partial E_1}{\partial r} = \frac{1}{r} (B + C) \quad (2.16)$$

ここに $B + C$ は C_1, C_2 を $C_1 r, C_2 r$ におきかえたことにより, (2.9c) (2.9d) を通して (2.17a) (2.17b) にみられるように r に依存する。 $r = 0$ の時 $E_1 = 0$ に注意する。

$$v_+ v_- = \sqrt{\omega_1^2 \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} r \omega_1^2 + \frac{4C_1}{\omega_1} r \omega_2^2} \quad (2.17a)$$

$$v_+ + v_- = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2 + \frac{4C_1}{\omega_1} r + \frac{4C_2}{\omega_2} r + 2 \sqrt{\omega_1^2 \omega_2^2 + \frac{4C_1}{\omega_1} r \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} r \omega_1^2}} \quad (2.17b)$$

$t = v_+ v_-$ とおく。

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \int_0^1 \frac{dr}{r} \frac{3}{4} \left[- \frac{(\omega_1^2 + v_+ v_-)(\omega_2^2 + v_+ v_-)}{v_+ v_- (v_+ + v_-)} + (v_+ + v_-) \right] \\
 &= \frac{3}{2} \frac{1}{\sqrt{\frac{4C_1}{\omega_1} \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} \omega_1^2}} \\
 &\quad \times \int_{\omega_1 \omega_2}^{v_+ v_-} dt \left[\frac{(\frac{4C_1}{\omega_1} + \frac{4C_2}{\omega_2}) t + (\frac{4C_1}{\omega_1} \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} \omega_1^2)}{\sqrt{(\frac{4C_1}{\omega_1} + \frac{4C_2}{\omega_2}) t^2 + 2(\frac{4C_1}{\omega_1} \omega_2^2 + \frac{4C_2}{\omega_2} \omega_1^2) t + (\frac{4C_1}{\omega_1} \omega_2^4 + \frac{4C_2}{\omega_2} \omega_1^4)}} \right] \\
 &= \frac{3}{2} \frac{1}{\sqrt{v_+^2 v_-^2 - \omega_1^2 \omega_2^2}} \left[\sqrt{(v_+^2 + v_-^2 - \omega_1^2 - \omega_2^2) t^2 + 2(v_+^2 v_-^2 - \omega_1^2 \omega_2^2) t} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{v_+^2 v_-^2 (\omega_1^2 + \omega_2^2) - \omega_1^2 \omega_2^2 (v_+^2 + v_-^2)}{\omega_1 \omega_2} \right]_{\omega_1 \omega_2}^{v_+ v_-} \\
 &= \frac{3}{2} (v_+ + v_- - \omega_1 - \omega_2) \tag{2.18}
 \end{aligned}$$

以上より求めるエネルギーの表式は,

$$E = \frac{3}{4} \frac{1}{v_+ v_- (v_+ + v_-)} \left[v_+ v_- (v_+ + v_- - \omega_1 - \omega_1)^2 + (v_+ v_- - \omega_1 \omega_2)^2 \right] - A \tag{2.19}$$

$$A = \alpha \pi^{-1/2} \int_0^\infty dy e^{-y} [G(y)]^{-1/2} \text{ となる。}$$

$C_2 \rightarrow 0$ の極限の時 $v_+ \rightarrow v_1$, $v_- \rightarrow \omega_2$ となり (2.19) は,

$$E \rightarrow \frac{3}{4} \frac{1}{v_1} (v_1 - \omega_1)^2 - \pi^{-1/2} \alpha v_1 \int_0^\infty \left[\omega_1^2 \tau + \frac{(v_1^2 - \omega_1^2)}{v_1} (1 - e^{-v_1 \tau}) \right]^{-1/2} e^{-\tau} d\tau$$

になり Feynman の表式と一致する。

特に $\alpha \ll 1$ の弱い相互作用の時 $v_+ = \omega_1(1 + \epsilon_1)$, $v_- = \omega_2(1 + \epsilon_2)$,

$\epsilon_1 > 0, \epsilon_2 > 0$ において

$$E = \frac{3}{4} \omega_1 \epsilon_1^2 + \frac{3}{4} \omega_2 \epsilon_2^2 + \frac{3\omega_1\omega_2}{(\omega_1 + \omega_2)} \epsilon_1 \epsilon_2 - \alpha (1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_1 P_1 - \epsilon_2 P_2) \quad (2.20a)$$

$$P_1 = \frac{2}{\omega_1} (\sqrt{1 + \omega_1} - 1) \quad P_2 = \frac{2}{\omega_2} (\sqrt{1 + \omega_2} - 1) \quad (2.20b)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \epsilon_1} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \epsilon_2} = 0 \quad \text{より}$$

$$\epsilon_1 = \frac{(\omega_1 + \omega_2)^2}{(\omega_1 - \omega_2)^2} \left[\frac{2}{3\omega_1} (1 - P_1) - \frac{4}{3(\omega_1 + \omega_2)} (1 - P_2) \right] \alpha \quad (2.21a)$$

$$\epsilon_2 = \frac{(\omega_1 + \omega_2)^2}{(\omega_1 - \omega_2)^2} \left[\frac{2}{3\omega_2} (1 - P_2) - \frac{4}{3(\omega_1 + \omega_2)} (1 - P_1) \right] \alpha \quad (2.21b)$$

(2.21a), (2.21b) を (2.20a) に代入してエネルギー E は

$$E = -\alpha - \frac{\alpha^2}{3} \left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{\omega_1 - \omega_2} \right)^2 \left[\frac{Q_1^2}{\omega_1} - \frac{4Q_1 Q_2}{\omega_1 + \omega_2} + \frac{Q_2^2}{\omega_2} \right] \quad (2.22)$$

$Q_1 = 1 - P_1, Q_2 = 1 - P_2$ となる。

ω_1, ω_2 を変分パラメーターとして数値計算することにより, $\omega_1 = 12.9 \pm 0.05, \omega_2 = 2.0 \pm 0.05, v_+ = 12.9 + 0.141\alpha, v_- = 2.0 + 0.141\alpha$ が得られ, $E = -\alpha - 0.01258318\alpha^2 + \dots$ となり Feynman より低い値となる。E. Haga による L-L-P 流の波動関数のおつりの項を摂動であつかう方法によると $E = -\alpha - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{3\pi} \right) \alpha^2 = -\alpha - 0.0125978\alpha^2$ となり我々によい一致を示す。Höhler-Müllensiefen による 4 次摂動の計算では $E = -\alpha - 0.015920\alpha^2$ である。表 1 は, 各々の比較を示している。

$\alpha = 3.0$ の時 4 つのパラメーターで変分を行った時 $v_+ = 15.4, \omega_1 = 15.0, v_- = 2.65, \omega_2 = 2.0$ に対して, $E = -3.1357$ となる。表 2 で他の理論との比較を行なう。

表1 Weak coupling の場合の各理論の比較 (α^2 の係数)

	Feynman	拡張された Feynman (ours)	Haga	4 次摂動
E	$-\frac{1}{81}$ =-0.012345	-0.012583	-0.012598	-0.015920

表2 $\alpha = 3.0$ の時の各理論の比較

	Feynman -Schultz	拡張された Feynman (ours)	Larsen	
E	-3.1333	-3.1357	-3.1421	

ポーロン質量は, Feynman 同様, 始点と終点の座標をずらせた経路にそって
の経路積分で求める。

$$\langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)] \rangle = \exp\left[-\frac{\mathbf{K}^2}{2}G(|\tau - \sigma|) + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}(\tau - \sigma)\right] \quad (2.23)$$

$$A = \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T ds \int \frac{d\mathbf{K}}{2\pi^2 K^2} \exp\left[-\frac{\mathbf{K}^2}{2}G(|t-s|)\right] \\ \times \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}(t-s)] \times e^{-|t-s|} \quad (2.24)$$

$\exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{U}(t-s)] = 1 - \frac{\mathbf{K}^2}{6} U^2(t-s)^2 + \dots$ と展開して,

$$A = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy e^{-y} [G(y)]^{-1/2} - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{U^2}{6} \int_0^\infty dy e^{-y} y^2 [G(y)]^{-3/2} + \dots \quad (2.25)$$

となる。

$$\langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle = 3G(|t-s|) + U^2(t-s)^2$$

阿部龍蔵・岡本謙一

$$\begin{aligned}
 B &= \frac{C_1}{2} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt e^{-\omega_1 |t-s|} (\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_s)^2 \\
 &= \frac{3C_1}{\omega_1} \frac{(v_+ v_- + \omega_2^2)}{(v_+ + v_-) v_+ v_-} - \frac{1}{2} \frac{U^2}{\omega_1^2} \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_-^2 - \omega_1^2)}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

同様にして C も

$$C = \frac{3C_2}{\omega_2} \frac{(v_+ v_- + \omega_1^2)}{(v_+ + v_-) v_+ v_-} + \frac{1}{2} \frac{U^2}{\omega_2^2} \frac{(v_+^2 - \omega_2^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \quad (2.27)$$

E_1 もエネルギーを求めた時と同様に

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \int_0^1 \frac{dr}{r} (B+C) \\
 &= \frac{3}{2} (v_+ + v_- - \omega_1 - \omega_2) + \frac{U^2}{2} \\
 &\quad + \frac{U^2}{2} \frac{1}{(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \left\{ \frac{(v_+^2 - \omega_2^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{\omega_2^2} + \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(\omega_1^2 - v_-^2)}{\omega_1^2} \right\} \quad (2.28)
 \end{aligned}$$

$$E = E_1 - (B+C) - A$$

$$\begin{aligned}
 &= E(0) + \frac{U^2}{2} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{U^2}{6} \int_0^\infty dy y^2 e^{-y} [G(y)]^{-3/2} = E(0) + \frac{m^*}{2} U^2 \\
 &\quad (2.29)
 \end{aligned}$$

従って

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dy e^{-y} y^2 [G(y)]^{-3/2} \quad (2.30)$$

が得られる。

weak-coupling の時

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} - \frac{\alpha}{2} \epsilon_1 \left\{ \frac{P_1}{(\omega_1 + 1)^{1/2}} - 1 \right\} - \frac{\alpha}{2} \epsilon_2 \left\{ \frac{P_2}{(\omega_2 + 1)^{1/2}} - 1 \right\}$$

(2.21a), (2.21b) を代入して

$$\begin{aligned}
 m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} - \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{\omega_1 - \omega_2} \right)^2 & \left[\frac{2}{3\omega_1} (1 - P_1) \right. \\
 & \left. - \frac{4}{3(\omega_1 + \omega_2)} (1 - P_2) \right] \left[\frac{P_1}{(\omega_1 + 1)^{1/2}} - 1 \right] \\
 & - \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{\omega_1 - \omega_2} \right)^2 \left[\frac{2}{3\omega_2} (1 - P_2) - \frac{4}{3(\omega_1 + \omega_2)} (1 - P_1) \right] \left[\frac{P_2}{(\omega_2 + 1)^{1/2}} - 1 \right]
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

となり，上で求めたパラメーターを用いて， $m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + 0.0344 \alpha^2$ となる。Feynman 理論は， $m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + 0.025 \alpha^2$ である。 $\alpha = 3.0$ の時上で得られたパラメーターを用いて $m^* = 1.8963$ となる。 $\alpha = 3.0$ の時 Feynman-Schultz と比較して表 3 に示す。

表 3 Feynman-Schultz との比較 ($\alpha = 3.0$)

	Feynman - Schultz	ours	補正の割合
E	-3.1333	-3.1357	0.077%
m^*	1.8890	1.8963	0.386%

§ 3 Discussion

我々は 4 つのパラメーターを用いて経路積分法により Feynman 理論を拡張した。その結果，Feynman 理論より低いポーラロンの基底状態のエネルギーの上限が得られた。しかし補正は，期待した程大きいものでなく，Feynman 理論のよいことが再確認された。我々は，結合定数 α の他のいくつかの値に対して数値計算を実行し，ポーロン質量の補間式を作る予定である。又，得られた変分パラメーターを用いて，最近 J.T.Marshall et al のやっているよう

阿部龍蔵・岡本謙一

に、弱い磁場のベキ級数展開を行ない、磁場の1次の項にポーロン質量が逆比例することを利用して同様な質量の補間式を求め、Feynman-Schultz流の方法で得られた質量の補間式と比較できるだろう。又、Osaka理論の $T = 0^\circ\text{K}$ の移動度の結合定数 α に対してプロットしたグラフもいくらか修正されるであろう。我々は trial action として、我々が用いたものと異なり、計算可能なより真の作用に近いもの、及び経路積分法を用いたポーロンの分散関係の形式を持している。最後に数値計算は東京大学計算センターの HITAC 5020 E を用いた。数値計算を実行するにあたり、有益な助言を与えて下さった、東大理学部有馬研の鈴木宜之氏に謝意を表します。

references

- R.P.Feynman 1955 Phys. Rev. 97 660
- T.D.Schultz 1959 Phys. Rev. 116 526
- Y.Osaka 1959 Prog. Theor. Phys. 22 437
- Y.Osaka 1961 Prog. Theor. Phys. 25 517
- P.M.Platzman 1962 Phys. Rev. 125 1961
- R.P.Feynman, R.W.Hellwarth, C.Iddings & P.M.Platzman
1962 Phys. Rev. 127 1004
- R.W.Hellwarth, P.M.Platzman 1962 Phys. Rev. 128 1599
- J.T.Marshall, M.S.Chawla 1970 Phys. Rev. B2 No.10 4283
- J.T.Marshall, Laney, R.Mills 1970 Phys. Rev. B2 No.8
3143