Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем

Н. Н. Боголюбов

При исследовании движения частицы в квантовом поле обычно рассматривают гамильтониан

$$H = H_p + H_v + H_{int},$$

в котором H_p соответствует собственной энергии частицы, H_v — энергии квантового поля, H_{int} — энергии взаимодействия частицы с полем.

Для того чтобы иметь дело с дискретным спектром, всю систему рассматривают в некотором конечном пространственном объеме V, например в кубе со стороной $L = V^{\frac{1}{3}}$, и налагают граничные условия периодичности. При этом, разумеется, всегда имеют в виду предельный переход $V \to \infty$, соответствующий переходу к непрерывному спектру.

Если рассматриваемое квантовое поле может быть разложено на невзаимодействующие осцилляторы, то

$$H_v = \frac{1}{2} \sum_{(f)} h\omega_f (b_f \overset{+}{b}_f + \overset{+}{b}_f b_f),$$

где ω_f — частоты осцилляторов; b_f, $\overset{+}{b}_f$ — квантовые амплитуды с известными перестановочными соотношениями, соответствующими статистике Бозе. Значки f, при конечном V, образуют дискретный спектр, переходящий в непрерывный при $V \to \infty$. Так, например, во многих задачах f является „квазиволновым" вектором с компонентами $\left(\frac{2\pi}{L} n_1, \frac{2\pi}{L} n_2, \frac{2\pi}{L} n_3\right)$, где n_1, n_2, n_3 — целые, положительные и отрицательные, числа.

Для нерелятивистской частицы при отсутствии внешнего поля

$$H_p = \frac{p^2}{2\mu} = -\frac{h^2}{2\mu} \Delta_r .$$

Таким же выражением можно воспользоваться и при наличии внешнего поля, если только применим метод эквивалентной массы.

Типичной формой энергии взаимодействия является выражение пространственно однородное, линейно зависящее от квантованных функций поля, например:

$$H_{\text{int}} = \int K(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}' + \int \overset{*}{K}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\overset{+}{\psi}(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}'.$$

Разлагая $\psi(\boldsymbol{r})$ по плоским волнам, нормированным в объеме V,

$$\psi(r) = \sum_{(f)} b_f \frac{e^{i(fr)}}{\sqrt{V}},$$

приходим к выражению вида

$$H_{\text{int}} = \sum_{(f)} \left\{ \mathfrak{A}_f e^{i(fr)} b_f + \overset{*}{\mathfrak{A}}_f e^{-i(fr)} \overset{+}{b}_f \right\},$$

в котором $\mathfrak{A}_f$, $\overset{*}{\mathfrak{A}}_f$ пропорциональны $\dfrac{1}{\sqrt{V}}$.

В настоящей статье мы воспользуемся указанными типичными выражениями для H_p, H_v, H_{int}, и, таким образом, примем, что

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\sum_{(f)} h\omega_f (b_f \overset{+}{b}_f + \overset{+}{b}_f b_f) + \sum_{(f)} \left\{ \mathfrak{A}_f e^{i(fr)} b_f + \mathfrak{A}_f e^{-i(fr)} \overset{+}{b}_f \right\}. \tag{1}$$

Гамильтонианы этого вида рассматриваются в самых разнообразных задачах.

Упомянем хотя бы задачи о движении частицы примеси [1], [2], [3], в гелии II, о движении электрона в полупроводнике [4], о взаимодействии нуклона со скалярным мезонным полем в нерелятивистском приближении.

Гамильтонианы несколько более сложной, но по существу совершенно аналогичной формы рассматриваются также в нерелятивистских теориях взаимодействия электрона с электромагнитным полем, нуклона с псевдоскалярным и векторным мезонным полем и т. п.

Заметим, что хотя рассматриваемый гамильтониан (1) и является одним из простейших в задачах о взаимодействии частицы с квантовым полем, точное решение соответствующего волнового уравнения является невозможным, во всяком случае при современном состоянии науки.

Приходится поэтому прибегать к приближенным методам теории возмущений.

Известные обычные схемы этой теории непосредственно прилагаются для рассмотрения случаев слабой связи частицы с полем, когда в выражении гамильтониана главными членами являются H_p и H_v, а H_{int} будет малым возмущающим членом.

Однако в ряде задач связь частицы с полем не может считаться *слабой*.

Укажем, например, на случаи сильной связи, когда H_{int} пропорциональна не малому, а большему параметру, а также на математически весьма сходные случаи „адиабатической связи“, когда малой является „кинетическая энергия“ поля.

Возьмем для определенности конкретный пример, а именно рассмотрим движение электрона в ионном кристалле с помощью модели, предложенной С. И. Пекаром [4].

В этой модели наличие периодического поля ионной решетки учитывается по методу эффективной массы и потому считается, что

$$H_p = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}.$$

Взаимодействие электрона с решеткой рассматривается как обусловленное его взаимодействием с поляризационными (оптическими) волнами, соответствующими инерционной поляризации. Сама ионная решетка заменяется здесь диэлектрическим континуумом.

Исходя из этих представлений, H_{int} берется в виде

$$H_{\text{int}} = -e\int \frac{(\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')\,(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}))}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|^3}\,d\boldsymbol{r}',$$

где $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})$ — вектор, соответствующий инерционной части удельной поляризации.

Так как H_{int} отлична от нуля только для продольных волн, поперечные волны можно полностью исключить из рассмотрения и в качестве квантового поля, с которым взаимодействует электрон, принять поле продольных волн.

Тогда, разложив $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})$ на плоские волны, нормированные в объеме V, можем написать

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \sum_{(f)} \frac{\boldsymbol{f}}{|\boldsymbol{f}|} P_f \frac{e^{i(\boldsymbol{f}\boldsymbol{r})}}{\sqrt{V}}; \qquad \overset{+}{P}_f = P_{-f}$$

и рассматривать P_f как обобщенные комплексные координаты, характеризующие поле.

С помощью этого разложения получим

$$H_{\text{int}} = 4\pi e \sum_{(f)} \frac{1}{|\boldsymbol{f}|\,V^{\frac{1}{2}}} P_f e^{i(\boldsymbol{f}\boldsymbol{r})}.$$

Наконец, энергия поля, в теории Пекара, будет

$$H_v = \frac{1}{2}\sum_{(f)} \frac{4\pi}{c_f}(P_f P_{-f} + \dot{P}_f \dot{P}_{-f}) = \frac{1}{2}\sum_{(f)} \left\{\frac{4\pi}{c_f} P_f P_{-f} - \frac{h^2\omega_f^2 c_f}{4\pi}\,\frac{\partial^2}{\partial P_f \partial P_{-f}}\right\},$$

где ω_f — частоты оптических колебаний ионов, c_f — некоторые постоянные.

Таким образом, полный гамильтониан, описывающий движение электрона в ионном кристалле, в рассматриваемой модели представляется выражением вида

$$H = -\frac{h^2}{2\mu}\Delta_r + 4\pi e \sum_{(f)} \frac{1}{|f| V^{\frac{1}{2}}} P_f e^{i(fr)} + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \frac{4\pi}{c_f} P_f P_{-f} - \\ - \frac{h^2}{8\pi}\sum_{(f)} \omega_f^2 c_f \frac{\partial^2}{\partial P_f \partial P_{-f}}. \tag{2}$$

В ряде случаев частоты колебаний ионов являются достаточно малыми. Тогда в выражении H первые три члена будут главными, а четвертый — соответствующий кинетической энергии продольных поляризационных колебаний ионов — будет малым, и мы получим здесь типичный пример той связи, которую мы назвали адиабатической.

С помощью введения квантовых Бозе-амплитуд

$$b_f = \sqrt{\frac{2\pi}{h\omega_f c_f}} P_f + \sqrt{\frac{h\omega_f c_f}{8\pi}} \frac{\partial}{\partial P_{-f}}; \quad \overset{+}{b}_f = \sqrt{\frac{2\pi}{h\omega_f c_f}} P_{-f} - \sqrt{\frac{h\omega_f c_f}{8\pi}} \frac{\partial}{\partial P_f}$$

гамильтониан (2) приводится к ранее указанной общей форме (1) с коэфициентами

$$\mathfrak{A}_f = \frac{e}{|f|}\sqrt{\frac{2\pi h\omega_f c_f}{V}}.$$

Чтобы математически оформить допущение о малости частот ω_f, можем считать $\sqrt{\omega_f}$ пропорциональным некоторому малому параметру ε. Тогда $\mathfrak{A}_f$ окажется пропорциональным ε, а $h\omega_f$ — пропорциональным ε^2. Поэтому и в общем случае системы, описываемой гамильтонианом (1), мы будем говорить об адиабатической связи, если можно положить

$$\mathfrak{A}_f = \varepsilon \mathfrak{B}_f; \quad h\omega_f = \varepsilon^2 \nu_f. \tag{3}$$

Адиабатический характер связи, определяемой гамильтонианом (1) с коэфициентами (3), становится особенно ясным, если перейти от Бозе-амплитуд к комплексным координатам

$$q_f = \frac{b_f + \overset{+}{b}_{-f}}{\varepsilon\sqrt{2}}; \quad \overset{+}{q}_f = q_{-f} \tag{4}$$

и канонически сопряженным импульсам

$$-i\frac{\partial}{\partial q_f} = p_f = i\varepsilon\frac{\overset{+}{b}_f - \dot{b}_{-f}}{\sqrt{2}}; \quad \overset{+}{p}_f = p_{-f}. \tag{5}$$

В самом деле, тогда гамильтониан (1) с коэфициентами (3) может быть записан в виде выражения

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+\sum_{(f)} A_f q_f\, e^{i(\boldsymbol{fr})}+\frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu_f q_{-f} q_f+\frac{\varepsilon^4}{2}\sum_{(f)}\nu_f p_{-f} p_f;$$

$$A_f=\frac{\mathfrak{B}_f+\overset{*}{\mathfrak{B}}_{-f}}{\sqrt{2}} \tag{6}$$

в которое кинетическая энергия поля входит с малым параметром.

Заметим, что ряд задач, в которых кинетическая энергия могла рассматриваться в качестве малого возмущения, уже был исследован с помощью теории возмущения.

Укажем, например, на задачи о влиянии движения ядер на энергетические уровни электронов в молекуле [5]. Однако для всех этих решенных задач характерно отсутствие трансляционного вырождения.

В нашем же случае задачи о взаимодействии частицы с полем всегда есть трансляционное вырождение, поскольку гамильтониан (1) является инвариантным по отношению к группе преобразований

$$\begin{gathered}\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\bar{a};\quad \bar{a}=\text{const},\\ b_f\to b_f e^{-i(f\bar{a})};\quad \overset{+}{b}_f\to\overset{+}{b}_f e^{i(f\bar{a})},\end{gathered} \tag{7}$$

или, в комплексных координатах

$$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\bar{a},\quad q_f\to q_f e^{-i(f\bar{a})}. \tag{8}$$

Благодаря наличию вырождения известные методы адиабатического приближения оказываются здесь неприменимыми и необходимо было построить новую особую форму теории возмущений.

Изложение этой новой схемы, разработанной автором совместно с С. В. Тябликовым, и составит предмет настоящей статьи.

Сделаем только пока ряд предварительных замечаний. Так, ввиду инвариантности гамильтониана по отношению к группе преобразований (7) сохранится полный импульс системы

$$\boldsymbol{p}+\sum_{(f)} h\boldsymbol{f}\overset{+}{b}_f b_f=\boldsymbol{P}=\text{const}.$$

С помощью переменных (4), (5) полный импульс можно также представить в виде

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}-ih\sum_{(f)}\boldsymbol{f} q_f p_f. \tag{9}$$

Так как $\boldsymbol{P}$ коммутирует с H, мы можем использовать этот вектор для нумерации энергетических уровней. Возьмем какую-либо независимую систему наблюдаемых $\ldots\alpha_j\ldots$, коммутирующих с H, образующую вместе с $\boldsymbol{P}$ полную систему, и обозначим энергетические уровни и соответствующие собственные функции через

$$E = E_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots}; \quad \Psi = \Psi_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots}$$

Покажем сейчас, что производная

$$\frac{\partial E_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots}}{\partial \boldsymbol{P}}$$

представляет среднюю скорость частицы для состояния $\Psi_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots}$ В самом деле, совершим в гамильтониане (1) каноническое преобразование:

$$b_f \to e^{-i(\boldsymbol{f}\boldsymbol{r})} \zeta_f; \quad \overset{+}{b}_f \to e^{i(\boldsymbol{f}\boldsymbol{r})} \overset{+}{\zeta}_f,$$

$$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}; \quad \boldsymbol{p} \to \boldsymbol{P} - h \sum_{(f)} \boldsymbol{f} \overset{+}{\zeta}_f \zeta_f.$$

Тогда

$$H = \frac{\left(\boldsymbol{P} - h \sum\limits_{(f)} \boldsymbol{f} \overset{+}{\zeta}_f \zeta_f\right)^2}{2\mu} + \sum_{(f)} \left\{ \mathfrak{A}_f \zeta_f + \overset{*}{\mathfrak{A}}_f \overset{+}{\zeta}_f \right\} + \sum_{(f)} h\omega_f \left(\overset{+}{\zeta}_f \zeta_f + \frac{1}{2} \right)$$

и

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{1}{\mu} \left(\boldsymbol{P} - h \sum_{(f)} \boldsymbol{f} \overset{+}{\zeta}_f \zeta_f \right),$$

причем здесь компоненты $\boldsymbol{P}$ можем считать уже c-числами.

Напишем волновое уравнение

$$(H - E_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots}) \Psi_{\boldsymbol{P}, \dots \alpha_j \dots} = 0$$

и продиференцируем его по $\boldsymbol{P}$. Получим

$$(H - E) \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{P}} + \left(\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{P}} - \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{P}} \right) \Psi = 0,$$

или

$$(H - E) \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{P}} + \left(\dot{\boldsymbol{r}} - \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{P}} \right) \Psi = 0,$$

откуда

$$\left(\overset{*}{\Psi} \cdot \left(\dot{\boldsymbol{r}} - \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{P}} \right) \Psi \right) = 0,$$

то есть

$$\frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{P}} = (\overset{*}{\Psi} \cdot \dot{\boldsymbol{r}} \Psi),$$

что и показывает справедливость сделанного утверждения.

Переходя теперь к формулировке новой схемы адиабатического приближения применительно к гамильтониану типа (6), заметим, что для придания волновому уравнению более удобного вида целесообразно будет совершить некоторые преобразования переменных. Чтобы уяснить их физический смысл, представим себе, как должно совершаться движение частицы для состояний вблизи низшего энергетического уровня. Очевидно, на равномерное и прямолинейное движение частицы должно налагаться флюктуационное движение — „дрожь“, обусловленное ее взаимодействием с нульпункт-колебаниями поля.

Пусть $\boldsymbol{q}$ будет частью $\boldsymbol{r}$, которая относится к равномерному прямолинейному движению, а $\overline{\lambda}$ — ее флюктуационной частью.

Имея в виду группу преобразований (8), нам представляется естественным так произвести замену переменных, чтобы все изменение здесь перевести на $\boldsymbol{q}$, сводя (8) к чистой трансляции $\boldsymbol{q}$, не затрагивающей λ и новых координат поля.

Следует, поэтому положить

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{q} + \overline{\lambda}, \quad q_f = G_f e^{-i(f\boldsymbol{q})}$$

и рассматривать (8) как преобразования

$$\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{q} + \overline{a},$$

при которых $\overline{\lambda}$ и G_f остаются неизменными. С другой стороны, если бы параметр ε точно равнялся нулю, то есть если бы кинетической энергией поля можно было полностью пренебречь, переменные G_f коммутировали бы с полной энергией и энергетические уровни можно было бы рассматривать как функции G_f

$$E = E(\ldots G_f \ldots).$$

Для низшего энергетического уровня G_f имели бы определенные числовые значения, а именно такие, для которых

$$E(\ldots G_f \ldots) = \min.$$

Ввиду этого в рассматриваемом случае малого, но отличного от нуля ε, положим

$$G_f = u_f + \varepsilon Q_f; \quad u_{-f} = \overset{*}{u}_f; \quad Q_{-f} = \overset{+}{Q}_f;$$

где u_f — некоторые числа, которые впоследствии будут определены, а Q_f — новые переменные. Мы приходим, таким образом, к замене переменных

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{q} + \overline{\lambda}; \quad q_f = (u_f + \varepsilon Q_f)\, e^{-i(f\boldsymbol{q})}. \tag{10}$$

Эти преобразования вводят вместо переменных $\boldsymbol{r}, \ldots q_f \ldots$ переменные $\boldsymbol{q}, \overline{\lambda}, \ldots Q_f \ldots$, число которых на три больше, чем было, и потому нам надо наложить, например, на Q_f три независимых дополнительных условия.

Возьмем какие-либо комплексные числа v_f, удовлетворяющие „соотношениям вещественности“

$$v_{-f} = \overset{*}{v}_f$$

и наложим на Q_f три дополнительных условия

$$\sum_{(f)} \boldsymbol{f} \overset{*}{v}_f Q_f = 0. \tag{11}$$

Для упрощения вычислений нам будет удобно так выбирать v_f, чтобы выполнялись соотношения ортогональности

$$\sum_{(f)} f^\alpha f^\beta \overset{*}{v}_f u_f = \delta_{\alpha,\beta}, \tag{12}$$

где f^α, f^β — компоненты вектора $\boldsymbol{f}$.

Собственно говоря, эти последние соотношения не ограничивают свободы выбора v_f, поскольку при произвольных v_f мы можем добиться выполнения (12) соответствующим линейным преобразованием в пространстве $\boldsymbol{f}$.

Приняв дополнительные условия (11), мы имеем среди новых переменных $\boldsymbol{q}, \overline{\lambda}, \ldots Q_f \ldots$ столько же независимых, сколько было и раньше.

Рассмотрим теперь волновое уравнение

$$(H - E)\Psi = 0,$$

в котором

$$H = -\frac{h^2}{2\mu}\Delta_r + \sum_{(f)} A_f q_f e^{i(fr)} + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f q_{-f} q_f - \frac{\varepsilon^1}{2}\sum_{(f)} \nu_f \frac{\partial}{\partial q_{-f}} \frac{\partial}{\partial q_f} \tag{13}$$

и начнем преобразовывать его к новым переменным, исходя из обычных формул преобразования производных

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} = \sum_{(f)} \frac{\partial Q_f}{\partial \boldsymbol{r}} \frac{\partial}{\partial Q_f} + \sum_{(1 \leqslant \alpha \leqslant 3)} \frac{\partial q^\alpha}{\partial \boldsymbol{r}} \frac{\partial}{\partial q^\alpha} + \sum_{(1 \leqslant \alpha \leqslant 3)} \frac{\partial \lambda^\alpha}{\partial \boldsymbol{r}} \frac{\partial}{\partial \lambda^\alpha},$$

$$\frac{\partial}{\partial q_k} = \sum_{(f)} \frac{\partial Q_f}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial Q_f} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}}\right) + \left(\frac{\partial \overline{\lambda}}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial \overline{\lambda}}\right). \tag{14}$$

Заметим прежде всего, что соотношение

$$\sum_{(f)} \boldsymbol{f} \overset{*}{v}_f (q_f e^{i(fq)} - u_f) = 0, \tag{15}$$

вытекающее из (10), (11), показывает, что $\boldsymbol{q}$ является функцией q_f, не зависящей от $\boldsymbol{r}$.

Замечая также, что

$$Q_f = \frac{1}{\varepsilon}(q_f e^{i(fr)} - u_f)$$

найдем из (14)

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} = \frac{\partial}{\partial \overline{\lambda}},$$

$$-i\frac{\partial}{\partial q_k} = \frac{1}{\varepsilon} e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{q})} P'_k + \left[\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k}\left(-i\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}}\right) + i\frac{\partial}{\partial \overline{\lambda}} + i\sum_{(f)} \boldsymbol{f} Q_f P'_f\right], \tag{16}$$

где

$$P'_k = P_k - \overset{*}{v}_k \sum_{(f)} (\boldsymbol{k}\boldsymbol{f}) u_f P_f; \qquad P_k = -i\frac{\partial}{\partial Q_k}.$$

Чтобы полностью раскрыть выражение (16), нам надо найти $\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k}$. Продиференцируем для этого (15). Имеем

$$\boldsymbol{k}\overset{*}{v}_k e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{q})} + i\sum_{(f)} \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{f}\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k}\right)\overset{*}{v}_f q_f e^{i(\boldsymbol{f}\boldsymbol{q})} = 0,$$

или

$$\boldsymbol{k}\overset{*}{v}_k e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{q})} + i\sum_{(f)} \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{f}\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k}\right)\overset{*}{v}_f (u_f + \varepsilon Q_f) = 0.$$

Отсюда, ввиду соотношений ортогональности (12)

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k} = i\boldsymbol{k}\overset{*}{v}_k e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{q})} - \varepsilon\sum_{(f)} \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{f}\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k}\right)\overset{*}{v}_f Q_f = 0. \tag{17}$$

Разлагая искомые величины в ряд по степеням малого параметра, получим

$$e^{-(\boldsymbol{k}\boldsymbol{q})}\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial q_k} = i\overset{*}{v}_k\left\{\boldsymbol{k} - \varepsilon\sum_{(f)} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{f}\boldsymbol{k})\overset{*}{v}_f Q_f + \varepsilon^2\sum_{(f,g)} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{f}\boldsymbol{g})(\boldsymbol{g}\boldsymbol{k})\overset{*}{v}_f\overset{*}{v}_g Q_f Q_g + \varepsilon^3\ldots\right\}.$$

Подставив эти ряды в формулы (16), а затем, совместно с (10) в формулу (13), найдем явное выражение оператора H в новых переменных, представленное разложением по степеням ε. Легко убедиться, что переменная $\boldsymbol{q}$ не содержится явно в преобразованном операторе H, как это и должно быть в силу инвариантности H по отношению к трансляциям $\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{q} + \overline{a}$.

Переменная $\boldsymbol{q}$ войдет в H лишь через посредство канонически сопряженного с ней импульса.

Выясним физический смысл этой величины.

Имеем благодаря (10)

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} = \sum_{(1\leq\alpha\leq3)} \frac{\partial r^\alpha}{\partial \boldsymbol{q}}\frac{\partial}{\partial r^\alpha} + \sum_{(f)} \frac{\partial q_f}{\partial \boldsymbol{q}}\frac{\partial}{\partial q_f} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} - i\sum_{(f)} \boldsymbol{f} q_f \frac{\partial}{\partial q_f}$$

и потому

$$-ih\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} = \boldsymbol{p} - i\sum_{(f)} h\boldsymbol{f} q_f p_f.$$

Таким образом, видим на основании (9), что рассматриваемая величина является полным импульсом системы

$$-ih\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} = \boldsymbol{P}$$

Поскольку $\boldsymbol{q}$ не входит явно в преобразованный оператор H, мы можем исключить эту переменную, положив

$$\Psi = e^{\frac{i}{h}(\boldsymbol{Pq})} F(\overline{\lambda}, \ldots Q_f, \ldots).$$

Получим тогда для F волновое уравнение, в которое $\boldsymbol{P}$ будет входить уже как обычный c-вектор.

Нам будет удобно ввести вместо вектора $\boldsymbol{P}$ вектор

$$\boldsymbol{I} = \varepsilon^2 \boldsymbol{P}. \tag{18}$$

Дело в том, что, как показывают несложные подсчеты, если бы мы считали $\boldsymbol{P}$ величиной „нулевого порядка“, то зависимость полной энергии от $\boldsymbol{P}$ появилась бы лишь начиная с четвертого приближения, в членах порядка $\varepsilon^4 \boldsymbol{P}^2$.

Считая $\boldsymbol{P}$ величиной порядка $\frac{\boldsymbol{I}}{\varepsilon^2}$ (где $\boldsymbol{I}$ — величина „нулевого порядка“), мы увидим эту зависимость уже в нулевом приближении.

Заметим, наконец, что для возможности разложения волновой функции в ряд по возрастающим степеням малого параметра нам надо будет совершить еще одно простое преобразование волновой функции

$$F = e^{i\sum\limits_{(f)}\frac{s_f}{\varepsilon}Q_f} \Phi, \tag{19}$$

сводящееся к замене в волновом уравнении полевых импульсов $-i\frac{\partial}{\partial Q_f}$ на $-i\frac{\partial}{\partial Q} + \frac{s_f}{\varepsilon}$.

Здесь s_f — некоторые комплексные числа, которые впоследствии будут определены. При этом для обеспечения вещественности показателя

$$\sum_{(f)} s_f Q_f$$

мы будем требовать, чтобы

$$s_{-f} = \overset{*}{s}_f.$$

Далее, так как переменные Q_f связаны условиями (11), мы, без ограничения общности выбора s_f, можем положить

$$\sum_{(f)} \boldsymbol{f} u_f s_f = 0. \tag{19$_1$}$$

В самом деле, если какие-либо s_f' не удовлетворяют этим соотношениям, мы всегда можем написать

$$s_f' = s_f + (fX)\,\overset{*}{v}_f; \quad X = \sum_{(k)} k u_k s_k'$$

и ввести, таким образом, новые величины s_f, которые, с одной стороны, уже удовлетворяют условиям (19_1), а с другой стороны, благодаря (11), не изменяют значения рассматриваемого показателя

$$\sum_{(f)} s_f' Q_f = \sum_{(f)} s_f Q_f.$$

Выполнив все вышеуказанные преобразования, получим окончательно волновое уравнение в виде

$$(H_0 + \varepsilon H_1 + \varepsilon^2 H_2 + \ldots - E)\,\Phi = 0, \tag{20}$$

причем

$$H_0 = -\frac{h^2}{2\mu}\Delta_\lambda + \sum_{(f)} A_f u_f e^{i(f\lambda)} + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f |u_f|^2 + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f \left| s_f + \frac{i\overset{*}{v}_f}{h}(If)\right|^2;$$

$$H_1 = \sum_{(f)} \nu_f \left(\overset{*}{s}_f - \frac{iv_f}{h}(If)\right) P_f' +$$
$$+ \sum_{(f)} \left\{ A_f e^{i(f\lambda)} + \nu_f \overset{*}{u}_f - \left(s_f + \frac{i\overset{*}{v}_f}{h}(If)\right) \sum_{(g)} \nu_g \left(\overset{*}{s}_g - \frac{iv_g}{h}(Ig)\right)(gf)\,\overset{*}{v}_g \right\} Q_f;$$

$$H_2 = \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f Q_{-f} Q_f + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f \left\{ P_{-f}' + v_f \sum_{(g)} (fg)\left(s_g + \frac{i\overset{*}{v}_g}{h}(Ig)\right) Q_g \right\} \left\{ P_f' - \right.$$
$$\left. - \overset{*}{v}_f \sum_{(g)} (fg)\left(s_g + \frac{i\overset{*}{v}_g}{h}(Ig)\right) Q_g \right\} +$$
$$+ \sum_{(k,f,g)} \nu_k \left(\overset{*}{s}_k - \frac{iv_k}{h}(Ik)\right)(fg)(kf)\left(s_g + \frac{i\overset{*}{v}_g}{h}(Ig)\right) \overset{*}{v}_k \overset{*}{v}_f Q_f Q_g -$$
$$- \sum_{(k,f)} \nu_k \left(\overset{*}{s}_k - \frac{iv_k}{h}(Ik)\right) \overset{*}{v}_k (kf)\, Q_f P_f' - \tag{21}$$
$$- \sum_{(k)} \nu_k \left(\overset{*}{s}_k - \frac{iv_k}{h}(Ik)\right) \overset{*}{v}_k \left(k \cdot \frac{\partial}{\partial \lambda}\right) - \frac{i}{2}\sum_{(k)} \nu_k v_k k^2 \left(s_k + \frac{i\overset{*}{v}_k}{h}(Ik)\right).$$

Следует подчеркнуть, что в этом уравнении переменные Q_f связаны тремя соотношениями (11). Так как импульсы $P_f = -i\dfrac{\partial}{\partial Q_f}$ входят в выражение H лишь в комбинациях

$$P_k' = P_k - \overset{*}{v}_k \sum_{(f)} (kf)\, u_f P_f$$

и так как тождественно

$$P'_k \sum_{(f)} f\overset{*}{v}_f Q_f - \sum_{(f)} f\overset{*}{v}_f Q_f P'_k = 0,$$

то вектор $\sum_{(f)} f\overset{*}{v}_f Q_f$ коммутирует с H и соотношения (11) действительно являются совместимыми с волновым уравнением (20).

Применим теперь к этому уравнению обычную схему теории возмущений и положим

$$\Phi = \Phi_0 + \varepsilon\Phi_1 + \varepsilon^2\Phi_2 + \ldots; \quad E = E_0 + \varepsilon E_1 + \varepsilon^2 E_2 + \ldots$$

Получим тогда

$$\begin{aligned} &(H_0 - E_0)\,\Phi_0 = 0, \\ &(H_0 - E_0)\,\Phi_1 = -H_1\Phi_0 + E_1\Phi_0, \\ &(H_0 - E_0)\,\Phi_2 = -H_2\Phi_0 - H_1\Phi_1 + E_2\Phi_0 + E_1\Phi_1. \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{22}$$

В силу своего определения (21) оператор H_0 не действует на переменные Q_f волновых функций, и потому первое из уравнений (22) имеет решения вида

$$\Phi_0 = \varphi(\bar{\lambda})\,\theta(\ldots Q_f \ldots)$$

с произвольными функциями $\theta(\ldots Q_f \ldots)$.

Полагая

$$E_0 = W + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f |u_f|^2 + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \nu_f \left| s_f + \frac{i\overset{*}{v}_f}{h}(\boldsymbol{I}\boldsymbol{f}) \right|^2, \tag{23}$$

видим также, что $\varphi(\bar{\lambda})$ удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\bar{\lambda}} + \sum_{(f)} A_f u_f e^{i(f\bar{\lambda})} - W \right)\varphi(\bar{\lambda}) = 0. \tag{24}$$

Предположим, что низший уровень $W = W_0$ для этого уравнения принадлежит к дискретному спектру и отделен энергетической щелью от уровней непрерывного спектра.

Предположим также, что уровень W_0 для уравнения (24) является невырожденным и обозначим соответствующую нормированную собственную функцию через $\varphi_0(\bar{\lambda})$. Тогда, желая исследовать для рассматриваемой системы — частицы в квантовом поле — энергетические уровни, достаточно близкие к низшему уровню, мы должны положить в (23)

$$W = W_0. \tag{25}$$

Соответствующее общее решение первого из уравнений (22) будет

$$\Phi_0 = \varphi_0(\overline{\lambda})\, \theta_0(\ldots Q_f \ldots)$$

с неопределенной пока функцией θ_0.

Рассмотрим теперь второе из уравнений (22) и заметим, что тождественно

$$\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\,(H_0 - E_0)\,\Phi_1\, d\overline{\lambda} = 0.$$

Поэтому

$$\left\{\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\, H_1\, \varphi_0(\overline{\lambda})\, d\overline{\lambda} - E_1\right\}\theta_0 = 0. \tag{26}$$

Но оператор

$$\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\, H_1\, \varphi_0(\overline{\lambda})\, d\overline{\lambda} \tag{27}$$

является линейной формой по отношению к Q_f, P'_f и потому уравнение (26) не может иметь регулярного решения, за исключением того случая, когда оператор (27) является тождественным нулем и когда, следовательно, оно удовлетворится при $E_1 = 0$ произвольной функцией θ_0.

Ввиду этого выберем неопределенные до сих пор величины u_f и s_f так, чтобы аннулировать оператор (27).

Приравнивая здесь нулю коэфициенты при Q_f, найдем

$$A_f \int e^{i(f\lambda)} |\varphi_0(\overline{\lambda})|^2\, d\overline{\lambda} + \nu_f \overset{*}{u}_f -$$

$$- \left(s_f + \frac{i\overset{*}{v}_f}{h}(If)\right) \sum_{(g)} \nu_g \left(s_g - \frac{iv_g}{h}(If)\right)(gf)\,\overset{*}{v}_g = 0. \tag{28}$$

Приравнять нулю все коэфициенты при P'_f мы не имеем возможности, поскольку величины s_f уже связаны тремя соотношениями (19_1), но этого и не потребуется.

В самом деле, ввиду (21), (28) для исчезновения оператора (27) мы должны обеспечить равенство

$$\sum_{(f)} \nu_f \left(\overset{*}{s}_f - \frac{iv_f}{h}(If)\right) P'_f = 0 \tag{29}$$

при всех возможных P'_f. Но, по самому их определению P'_f удовлетворяют соотношениям

$$\sum_{(f)} f u_f P'_f = 0.$$

Таким образом (29) будет выполнено, если мы выберем s_f так, чтобы

$$\nu_f \left(\overset{*}{s}_f - \frac{iv_f}{h}(If)\right) = -iu_f(fC), \tag{30}$$

где C — некоторый вектор, который должен быть определен с помощью соотношений (19_1).

Подставив найденные из (30) значения

$$s_f = -\frac{i\overset{*}{v}_f}{h}(\boldsymbol{If}) + \frac{i\overset{*}{u}_f}{\nu_f}(\boldsymbol{Cf}) \tag{31}$$

в эти соотношения, получим уравнение, связывающее $\boldsymbol{C}$ с $\boldsymbol{I}$

$$\boldsymbol{I} = h\sum_{(f)} \boldsymbol{f}\frac{(\boldsymbol{Cf})}{\nu_f}|u_f|^2. \tag{32}$$

Подставив далее значения (30) в уравнения (28), получаем для определения u_f следующие выражения:

$$u_f = -\frac{\overset{*}{A}_f \nu_f}{\nu_f^2 - (\boldsymbol{Cf})^2}\int e^{-i(\boldsymbol{f}\bar{\lambda})}|\varphi_0(\bar{\lambda})|^2 d\bar{\lambda}. \tag{33}$$

Найденные формулы (31), (32), (33) позволяют определить s_f, u_f, если известна функция $\varphi_0(\bar{\lambda})$.

Для определения этой последней мы имели уравнение (24), которое теперь мы можем записать в виде

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\bar{\lambda}} + U(\bar{\lambda}) - W_0\right)\varphi_0(\bar{\lambda}) = 0, \tag{34}$$

$$U(\bar{\lambda}) = -\sum_{(f)} \frac{\nu_f |A_f|^2 \int e^{-i(\boldsymbol{f}\bar{\lambda})}|\varphi_0(\bar{\lambda})|^2 d\bar{\lambda}}{\nu_f^2 - (\boldsymbol{Cf})^2} e^{i(\boldsymbol{f}\bar{\lambda})}. \tag{35}$$

Заметим, что, так как для применимости излагаемой теории требуется, чтобы уровень W_0 был невырожден, мы можем всегда считать вещественной собственную функцию $\varphi(\lambda)$. Для ее фактического приближенного определения целесообразно использовать ее экстремальное свойство

$$I(\varphi) = \frac{h^2}{\mu}\int\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\bar{\lambda}}\right)^2 d\bar{\lambda} - \sum_{(f)}\frac{\nu_f |A_f|^2}{\nu_f^2 - (\boldsymbol{Cf})^2}\left|\int e^{-i(\boldsymbol{f}\bar{\lambda})}\varphi^2(\bar{\lambda})\, d\bar{\lambda}\right|^2 = \min \tag{36}$$

при условии

$$\int \varphi^2(\bar{\lambda})\, d\bar{\lambda} = 1. \tag{37}$$

Прежде чем приступить к обсуждению свойств полученного первого приближения, продолжим рассмотрение второго из уравнений (22) и заметим, что на основании вышесказанного это уравнение представимо в форме

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\bar{\lambda}} + U(\bar{\lambda}) - W_0\right)\boldsymbol{\Phi}_1 = -\left(H_1 - \int \overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\, H_1\, \varphi_0(\bar{\lambda})\, d\bar{\lambda}\right)\varphi_0(\bar{\lambda})\, \theta_0(\ldots Q_f \ldots).$$

Для нахождения Φ_1 рассмотрим собственные функции $\varphi_n(\bar{\lambda})$ $(n \neq 0)$ для уравнения

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\lambda}+U(\bar{\lambda})-W_n\right)\varphi_n(\bar{\lambda})=0, \tag{38}$$

образующие совместно с $\varphi_0(\lambda)$ полную ортонормированную систему собственных функций.

Тогда, очевидно,

$$\Phi_1=-\sum_{(n\neq 0)}\varphi_n(\bar{\lambda})\frac{\int\overset{*}{\varphi}_n(\bar{\lambda})\,H_1\,\varphi_0(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}}{W_n-W_0}\theta_0(\ldots Q_f\ldots)+\varphi_0(\bar{\lambda})\,\theta_1(\ldots Q_f\ldots), \tag{39}$$

где $\theta_1(\ldots Q_f\ldots)$ пока произвольная функция. Суммирование здесь, очевидно, включает также интегрирование по непрерывному спектру.

Рассмотрим теперь третье из уравнений (22) и запишем его в виде

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\lambda}+U(\bar{\lambda})-W_0\right)\Phi_2=-H_2\varphi_0\theta_0+E_2\varphi_0\theta_0-H_1\Phi_1.$$

Условие разрешимости этого уравнения будет

$$\int\overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\,H_2\varphi_0(\bar{\lambda})\,\theta_0\,d\bar{\lambda}+\int\overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\,H_1\Phi_1\,d\bar{\lambda}-E_2\theta_0=0$$

или, принимая во внимание (39)

$$(\Gamma-E_2)\,\theta_0(\ldots Q_f\ldots)=0$$

$$\Gamma=\int\overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\,H_2\varphi_0(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}- \tag{40}$$

$$-\sum_{(n\neq 0)}\frac{\int\overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\,H_1\,\varphi_n(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}\int\overset{*}{\varphi}_n(\bar{\lambda})\,H_1\,\varphi_0(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}}{W_n-W_0}.$$

Таким образом, условие разрешимости уравнения второго приближения приводит к уравнению для определения θ_0, E_2. Совершенно аналогично условие разрешимости уравнения третьего приближения дает уравнение для определения θ_1, E_3 и т. д.

Выяснив теперь процесс последовательного получения коэфициентов наших степенных разложений, обратимся к рассмотрению первого приближения.

Так как $E_1=0$, то в этом приближении энергия системы будет, на основании (23), (30):

$$E_0=W_0+\frac{1}{2}\sum_{(f)}|u_f|^2\left(\nu_f+\frac{(fC)^2}{\nu_f}\right). \tag{41}$$

Отсюда, диференцируя, найдем

$$\frac{\partial E_0}{\partial C^\alpha} = \frac{\partial W_0}{\partial C^\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{(f)} \left(\frac{\partial \overset{*}{u}_f}{\partial C^\alpha} u_f + \overset{*}{u}_f \frac{\partial u_f}{\partial C^\alpha} \right) \left(\nu_f + \frac{(\boldsymbol{f}\boldsymbol{C})^2}{\nu_f} \right) +$$
$$+ \sum_{(f)} f^\alpha \frac{|u_f|^2}{\nu} (\boldsymbol{f}\boldsymbol{C}). \tag{42}$$

С другой стороны, продиференцировав уравнение (24), получим

$$\left\{ -\frac{h^2}{2\mu} \Delta_{\bar\lambda} + \sum_{(f)} A_f u_f e^{i(f\bar\lambda)} - W_0 \right\} \frac{\partial \varphi_0(\bar\lambda)}{\partial C^\alpha} +$$
$$+ \sum_{(f)} A_f \frac{\partial u_f}{\partial C^\alpha} e^{i(f\bar\lambda)} \varphi_0(\bar\lambda) - \frac{\partial W_0}{\partial C^\alpha} \varphi_0(\bar\lambda) = 0.$$

Откуда

$$\frac{\partial W_0}{\partial C^\alpha} = \sum_{(f)} A_f \int e^{i(f\bar\lambda)} |\varphi_0(\bar\lambda)|^2 \, d\bar\lambda \frac{\partial \eta_f}{\partial C^\alpha} = - \sum_{(f)} \left(\nu_f - \frac{(\boldsymbol{f}\boldsymbol{C})^2}{\nu_f} \right) \overset{*}{u}_f \frac{\partial u_f}{\partial C^\alpha}$$

и потому, на основании (42) и (32)

$$\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial C^\alpha} = - \sum_{(f)} \left(\nu_f - \frac{(\boldsymbol{f}\boldsymbol{C})^2}{\nu_f} \right) \overset{*}{u}_f \frac{\partial u_f}{\partial C^\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{(f)} \left(\frac{\partial \overset{*}{u}_f}{\partial C^\alpha} u_f + \overset{*}{u}_f \frac{\partial u_f}{\partial C^\alpha} \right) \left(\nu_f + \frac{(\boldsymbol{f}\boldsymbol{C})^2}{\nu_f} \right) +$$
$$+ \sum_{(f)} \frac{f^\alpha |u_f|^2}{\nu_f} (\boldsymbol{f}\boldsymbol{C}) = \frac{1}{h} \sum_{(1 \leq \beta \leq 3)} C^\beta \frac{\partial I^\beta}{\partial C^\alpha}.$$

Имеем, следовательно,

$$\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial I^\alpha} = \sum_{(1 \leq \gamma \leq 3)} \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial C^\gamma} \frac{\partial C^\gamma}{\partial I^\alpha} = \frac{1}{h} \sum_{(1 \leq \beta \leq 3)} C^\beta \left\{ \sum_{(1 \leq \gamma \leq 3)} \frac{\partial I^\beta}{\partial C^\gamma} \frac{\partial C^\gamma}{\partial I^\alpha} \right\} =$$
$$= \frac{1}{h} \sum_{(1 \leq \beta \leq 3)} C^\beta \frac{\partial I^\beta}{\partial I^\alpha} = \frac{1}{h} C^\alpha,$$

то есть

$$\boldsymbol{C} = h \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial \boldsymbol{I}} = \frac{h}{\varepsilon^2} \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial \boldsymbol{P}}.$$

Но, в принятом приближении $\mathcal{E}_0$ есть энергия системы и потому

$$\frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial \boldsymbol{P}} = \boldsymbol{v}_{\text{ср}},$$

где $\boldsymbol{v}_{\text{ср}}$ — средняя скорость частицы. Таким образом, мы видим, что вектор $\boldsymbol{C}$, с точностью до множителя $\frac{h}{\varepsilon^2}$, представляет эту среднюю скорость.

Мы можем перейти теперь к определению эффективной массы частицы.

Обозначим через $\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})$, $W_{0,0}$ значения $\varphi_0(\overline{\lambda})$, W_0 для $C=0$. Имеем

$$\left(-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\overline{\lambda}}+U_0(\overline{\lambda})-W_{0,0}\right)\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})=0,$$
$$U_0(\overline{\lambda})=-\sum_{(f)}\frac{|A_f|^2}{\nu_f}\int e^{-i(f\overline{\lambda})}|\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})|^2 d\overline{\lambda}. \tag{43}$$

Предположим для простоты, что $|A_f|^2$, ν_f являются радиально симметричными функциями квазиволнового вектора f и что $\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})$ — радиально симметрична по отношению к $\overline{\lambda}$. Тогда, разлагая E_0 по степеням C, получим, останавливаясь на члене, пропорциональном C^2

$$E_0=E_{0,0}+\frac{1}{6}\sum_{(f)}\frac{hf^2}{\nu_j}|u_f^{(0)}|^2 C^2, \tag{44}$$

где

$$E_{0,0}=W_{0,0}+\frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu_f|u_f^{(0)}|^2$$

$$u_f^{(0)}=-\frac{A_f^*}{\nu_f}\int e^{-i(f\overline{\lambda})}|\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})|\, d\overline{\lambda}$$

или

$$E_0=E_{0,0}+\frac{v_{\text{ср}}^2}{2}\sum_{(f)}\frac{h^2 f^2}{3\nu_f\varepsilon^4}|u_f^{(0)}|^2.$$

Таким образом, в первом приближении эффективная масса будет

$$\mu_{\text{эфф}}=\frac{1}{3}\sum_{(f)}\frac{h^2 f^2}{3\nu_f\varepsilon^4}|u_f^{(0)}|^2.$$

Заметим, что для ранее указанного случая движения электрона в ионном кристалле уравнение (43) в форме соответствующего вариационного принципа и формула (44) для энергии были впервые получены С. И. Пекаром [6] с помощью полуклассической теории, в которой электрон рассматривался квантово, а поле — классически. Исходя из такой же полуклассической теории, Л. Д. Ландау и С. И. Пекар [7] впервые получили и формулу для эффективной массы.

Мы можем здесь, еще в рамках первого приближения, найти поправку к формуле (44), показывающую отклонение зависимости между энергией и скоростью от квадратичной.

Для этой цели достаточно определить из уравнений (34), (35) выражения $\varphi_0(\overline{\lambda})$, W_0 с точностью до членов порядка C^2 включительно.

Подставляя разложения по степеням C:

$$\varphi_0(\overline{\lambda})=\varphi_{0,0}(\overline{\lambda})+\sum_{(\alpha,\beta)}C^\alpha C^\beta\Psi_{\alpha,\beta}(\overline{\lambda})+\ldots$$

$$W_0=W_{0,0}+\sum_{(\alpha,\beta)}C^\alpha C^\beta S_{\alpha,\beta}+\ldots$$

в эти уравнения, получим для определения $\Psi_{\alpha,\beta}$, $S_{\alpha,\beta}$ линейные уравнения:

$$\left\{-\frac{h^2}{2\mu}\Delta_{\bar\lambda}+U_0(\bar\lambda)-W_{0,0}\right\}\Psi_{\alpha,\beta}(\bar\lambda)-$$

$$-2\sum_{(f)}\frac{|A_f|^2}{\nu_f}e^{i(f\bar\lambda)}\int e^{-i(f\bar\lambda)}\varphi_0(\bar\lambda)\Psi_{\alpha,\beta}(\bar\lambda)\,d\bar\lambda=$$

$$=\left\{\sum_{(f)}\frac{|A_f|^2}{\nu_f^2}f^\alpha f^\beta e^{i(f\bar\lambda)}\int e^{-i(f\bar\lambda)}|\varphi_0(\bar\lambda)|^2\,d\bar\lambda+S_{\alpha,\beta}\right\}\varphi_0(\bar\lambda).$$

Кроме того, в силу условия нормировки, имеем

$$\int\Psi_{\alpha,\beta}(\bar\lambda)\varphi_0(\bar\lambda)\,d\bar\lambda=0.$$

Нетрудно заметить, что в рассматриваемом случае

$$\Psi_{\alpha,\beta}(\bar\lambda)=\lambda^\alpha\lambda^\beta\Psi(|\bar\lambda|);\qquad S_{\alpha,\beta}=W_{0,1}\,\delta_{\alpha,\beta}.$$

Поэтому в соответствующем разложении

$$\begin{gathered}u_f=u_f^{(0)}+\sum_{(\alpha,\beta)}C^\alpha C^\beta u_f^{(\alpha,\beta)}+\ldots\\ u_f^{(\alpha,\beta)}=\frac{f^\alpha f^\beta}{\nu_f^2}u_f^{(0)}-2\frac{A_f^*}{\nu_f}\int e^{-i(f\bar\lambda)}\varphi_0(\bar\lambda)\lambda^\alpha\lambda^\beta\Psi(|\bar\lambda|)\,d\bar\lambda\end{gathered}\tag{45}$$

можем написать

$$u_f^{(\alpha,\beta)}=A_f^*f^\alpha f^\beta\varrho_1(|f|),$$

причем $\varrho_1(|f|)$ будет вещественной радиально симметричной функцией квазиволнового вектора. Очевидно имеем также

$$u_f^{(0)}=A_f^*\varrho_0(|f|),$$

где $\varrho_0(|f|)$ — вещественная радиально симметричная функция f.

Следовательно, подставив разложение (45) в формулу (32), найдем

$$I=\frac{h}{3}\sum_{(f)}\frac{f^2}{\nu_f}|A_f|^2\varrho_0^2(|f|)\,C+\frac{4h}{5}\sum_{(f)}\frac{f^4C^2}{\nu_f}|A_f|^2\varrho_0(|f|)\varrho_1(|f|)\,C,$$

откуда

$$E_0=E_{0,0}+\frac{C^2}{6}\sum_{(f)}\frac{f^2}{\nu}|A_f|^2\varrho_0^2(|f|)+\frac{3C^4}{5}\sum_{(f)}\frac{f^4|A_f|^2}{\nu_f}\varrho_0(|f|)\varrho_1(|f|).\tag{46}$$

Таким образом, мы можем дать оценку для пределов применимости квадратичного закона зависимости энергии от скорости частицы.

Перейдем теперь к уравнению второго приближения (40).

Раскрыв их с помощью формул (21), получим

$$\left\{\frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu_f P''_{-f}P''_f + \frac{i}{2}\sum_{(f)}(\boldsymbol{Cf})(Q_f P''_f + P''_f Q_f) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu_f Q_{-f}Q_f + \frac{1}{2}\sum_{(f,g)}\mathfrak{A}_{f,g}Q_{-f}Q_g - E'\right\}\theta_0(\ldots Q_f\ldots)=0, \qquad (47)$$

где

$$E' = E_2 - i\int \overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\left(\boldsymbol{C}\ \frac{\partial}{\partial\bar{\lambda}}\right)\varphi_0(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}$$

$$\mathfrak{A}_{f,g} = -2A_f^* A_g \sum_{(n\neq 0)} \frac{\int \overset{*}{\varphi}_0(\bar{\lambda})\,e^{-i(f\bar{\lambda})}\varphi_n(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda}}{W_n - W_0}\int \overset{*}{\varphi}_n(\bar{\lambda})\,e^{i(g\bar{\lambda})}\varphi_0(\bar{\lambda})\,d\bar{\lambda} \qquad (48)$$

и

$$P''_f = P'_f - i\overset{*}{v}_f\frac{(\boldsymbol{Cg})(\boldsymbol{gf})}{\nu_g}\overset{*}{u}_g Q_g =$$
$$= P_f - \overset{*}{v}_f\sum_{(g)}(\boldsymbol{gf})\,u_g P_g - i\overset{*}{v}_f\sum_{(g)}\frac{(\boldsymbol{Cg})(\boldsymbol{gf})}{\nu_g}\overset{*}{u}_g Q_g. \qquad (49)$$

Как видно, задача решения уравнений (47) сводится к задаче диагонализации квадратичной формы. Заметим, что знак этой формы связан со свойствами минимума в вариационной задаче (36), (37).

Так, нетрудно показать, что если $\varphi_0(\bar{\lambda})$ действительно реализует минимум, и если, следовательно, соответствующая вторая вариация будет положительной, то и рассматриваемая квадратичная форма Ω будет положительной. Эта вторая вариация всегда исчезает для вариаций вида (являющихся решениями соответствующего уравнения Якоби):

$$\delta\varphi = \left(\frac{\partial\varphi_0(\bar{\lambda})}{\partial\bar{\lambda}}\cdot\delta\boldsymbol{x}\right)$$

при произвольном постоянном $\delta\boldsymbol{x}$, поскольку интегралы (36), (37) не меняются при замене $\varphi(\bar{\lambda})$ на $\varphi(\bar{\lambda}+\bar{\lambda}_0)$.

Если теперь вторая вариация существенно положительна для всех иных $\delta\varphi$, то можно показать, что квадратичная форма Ω будет определенно положительной и будет обращаться в нуль лишь, когда тождественно:

$$\ldots Q_f = 0\ldots; \qquad \ldots P'_f = 0\ldots$$

В этом случае определенной положительности рассматриваемая квадратичная форма диагонализируется посредством канонического преобразования

$$Q_f = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{(\omega)}\left\{\Psi_\omega(f)\overset{+}{b}_\omega + \overset{*}{\Psi}_\omega(-f)\,b_\omega\right\},$$
$$P'_f = \frac{i}{\sqrt{2}}\sum_{(\omega)}\left\{X_\omega(-f)\overset{+}{b}_\omega - \overset{*}{X}_\omega(f)\,b_\omega\right\}, \qquad (50)$$

вводящего вместо комплексных координат и импульсов, связанных соотношениями

$$\sum_{(f)} f \overset{*}{v}_f Q_f = 0; \quad \sum_{(f)} f u_f P'_f = 0,$$

обычные квантовые Бозе-амплитуды b_ω, $\overset{+}{b}_\omega$.

В этом преобразовании $\Psi_\omega(f)$, $X_\omega(f)$ представляют систему „собственных функций", определяемую уравнениями:

$$\overline{\mathcal{E}}_\omega \Psi_\omega(f) = \nu_f \tilde{X}_\omega(f) - u_f \sum_{(g)} (\boldsymbol{fg}) \nu_g \overset{*}{v}_g \tilde{X}_\omega(g) +$$

$$+ (\boldsymbol{Cf}) \Psi_\omega(f) - u_f \sum_{(g)} (\boldsymbol{fg}) (\boldsymbol{gC}) \overset{*}{v}_g \Psi_\omega(g);$$

$$\overline{\mathcal{E}}_\omega X_\omega(f) = \nu_f \Psi_\omega(f) + \sum_{(g)} \mathfrak{A}_{f,g} \Psi_\omega(g) -$$

$$- v_f \sum_{(g)} (\boldsymbol{fg}) \overset{*}{u}_g \Big\{ \nu_g \Psi_\omega(g) + \sum_{(k)} \mathfrak{A}_{g,k} \Psi_\omega(k) \Big\} + \tag{51}$$

$$+ (\boldsymbol{Cf}) \Big\{ \frac{u_f}{\nu_f} \sum_{(g)} (\boldsymbol{Cg}) (\boldsymbol{fg}) \overset{*}{v}_g \Psi_\omega(g) + \tilde{X}_\omega(f) + \frac{u_f}{\nu_f} \sum_{(g)} (\boldsymbol{fg}) \nu_g \overset{*}{v}_g \tilde{X}_\omega(g) \Big\} -$$

$$- v_f \sum_{(g)} (\boldsymbol{fg}) (\boldsymbol{gC}) \Big\{ \frac{u_g}{\nu_g} \sum_{(k)} (\boldsymbol{gk}) (\boldsymbol{kC}) \overset{*}{v}_k \Psi_\omega(k) + \tilde{X}_\omega(g) +$$

$$+ \frac{u_g}{\nu_g} \sum_{(k)} \boldsymbol{gk}) \nu_k \overset{*}{v}_k \tilde{X}_\omega(k) \Big\},$$

где

$$\tilde{X}_\omega(f) = X_\omega(f) + v_f \sum_{(g)} \frac{(\boldsymbol{fg}) (\boldsymbol{gC})}{\nu_g} \overset{*}{u}_g \Psi_\omega(g) \tag{52}$$

и согласованными с ними условиями ортонормировки:

$$\sum_{(f)} f \overset{*}{v}_f \Psi_\omega(f) = 0; \quad \sum_{(f)} f \overset{*}{u}_f X_\omega(f) = 0,$$

$$\sum_{(f)} \Big\{ \Psi_{\omega_1}(f) \overset{*}{X}_{\omega_2}(f) + \overset{*}{\Psi}_{\omega_2}(f) X_{\omega_1}(f) \Big\} = 2\delta(\omega_1 - \omega_2), \tag{53}$$

$$\sum_{(f)} \Big\{ \Psi_{\omega_1}(-f) X_{\omega_2}(f) - \Psi_{\omega_2}(f) X_{\omega_1}(-f) \Big\} = 0.$$

Соответствующие собственные значения $\overline{\mathcal{E}}_\omega$ в рассматриваемом случае все положительны.

Выполнив каноническое преобразование в уравнении (47), получим уравнение

$$\left\{\sum_{(\omega)} \overline{\mathcal{E}}_{\omega}\left(n_{\omega}+\frac{1}{2}\right)-E'\right\}\theta_0=0; \qquad n_{\omega}=\overset{+}{b}_{\omega}\, b_{\omega}, \tag{54}$$

решение которого очевидно.

Таким образом, энергия системы во втором приближении будет

$$E=W_0+\frac{1}{2}\sum_{(f)}|u_f|^2\left(\nu_f+\frac{(Cf)^2}{\nu_f}\right)+\varepsilon^2\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\left(C\cdot i\frac{\partial}{\partial\overline{\lambda}}\right)\varphi_0(\overline{\lambda})\,d\overline{\lambda}+$$

$$+\varepsilon^2\sum_{(\omega)}\overline{\mathcal{E}}_{\omega}\left(n_{\omega}+\frac{1}{2}\right) \tag{55}$$

и, в частности, для низшего энергетического уровня

$$E=W_0+\frac{1}{2}\sum_{(f)}|u_f|^2\left(\nu_f+\frac{(Cf)^2}{\nu_f}\right)+\varepsilon^2\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\left(C\cdot i\frac{\partial}{\partial\overline{\lambda}}\right)\varphi_0(\overline{\lambda})\,d\overline{\lambda}+\frac{\varepsilon^2}{2}\sum_{(\omega)}\overline{\mathcal{E}}_{\omega}.$$

С другой стороны, для абсолютного нуля температуры, при отсутствии частицы энергия чистого поля равняется

$$\frac{1}{2}\sum_{(k)}h\omega_k=\frac{\varepsilon^2}{2}\sum_{(k)}\nu_k.$$

Поэтому за энергию частицы в поле мы должны принять, при абсолютном нуле температуры, выражение:

$$E_p=W_0+\frac{1}{2}\sum_{(f)}|u_f|^2\left(\nu_f+\frac{(Cf)^2}{\nu_f}\right)+\varepsilon^2\int \overset{*}{\varphi}_0(\overline{\lambda})\left(C\cdot i\frac{\partial}{\partial\overline{\lambda}}\right)\varphi_0(\overline{\lambda})\,d\overline{\lambda}+$$

$$+\frac{\varepsilon^2}{2}\sum_{(\omega)}(\overline{\mathcal{E}}_{\omega}-\nu_{\omega}). \tag{56}$$

Разлагая данное выражение в ряд по степеням скорости

$$E_p=E_p^0+\frac{\mu_{\text{эфф}}}{2}v_{\text{ср}}^2, \tag{57}$$

получим поправки порядка ε^2 к E_p^0 — энергии связи частицы с полем и к эффективной массе.

В общем случае, разлагая по степеням $v_{\text{ср}}$ выражение (55) (с исключенной энергией чистого поля), нетрудно заметить, что соответствующие поправки будут зависеть от температуры.

Фактическое выполнение вычислений сильно затрудняется сложностью определения собственных значений из системы (51).

Однако нам, в сущности, нет необходимости уметь вычислять индивидуальные $\overline{\mathcal{E}}_{\omega}$.

Достаточно иметь способ определения сумм типа

$$\sum_{(\omega)}\left\{\overline{\mathcal{E}}_{\omega}F(\overline{\mathcal{E}}_{\omega})-\nu_{\omega}F(\nu_{\omega})\right\}.$$

Так как эти суммы являются симметричными функциями $\overline{\mathcal{E}}_{\omega}$, можно разработать методику их вычисления непосредственно по данным коэфициентам уравнения (51), не прибегая к нахождению индивидуальных $\overline{\mathcal{E}}_{\omega}$.

Изложение такого способа составит предмет следующей статьи.

В заключение заметим, что развитая выше теория первого приближения не изменится, если мы возьмем в уравнении (24) не минимальный, а какой-либо другой дискретный уровень (если только он не окажется вырожденным).

Таким образом, мы бы исследовали возможные возбужденные состояния частицы в поле.

Переход ко второму приближению показывает, что эти состояния являются квазистационарными и обладают конечным временем жизни.

Случай вырожденных состояний требует особого рассмотрения и некоторого усовершенствования замены переменных (10).

ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Ахиезер и И. Я. Померанчук, ЖЭТФ, **16**, 391, 1946.
2. С. В. Тябликов, ЖЭТФ, **18**, 1023, 1948.
3. С. В. Тябликов, Доповіді АН Української РСР № 6, 3, 1950.
4. С. И. Пекар, ЖЭТФ, **19**, 769, 1949.
5. M. Born u. Oppenheimer, Ann. der Physik, **84**, 457, 1927.
6. С. И. Пекар, ЖЭТФ, **16**, 341, 1946.
7. Л. Д. Ландау и С. И. Пекар, ЖЭТФ, **18**, 419, 1948.

Поступило 20. III 1950.