1953 УКРАИНСКИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ т. V, № 2
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ

Вопросы трансляционной инвариантности в теории адиабатического приближения

С. В. Тябликов

В работе исследуется поведение собственных функций и собственных значений для задачи о частице, взаимодействующей с системой осцилляторов и находящейся в локальном внешнем поле, при уменьшении интенсивности внешнего поля до нуля.

1. В настоящей статье мы ставим своей целью исследование вопросов трансляционной инвариантности для одного вида задач, встречающихся в квантовой механике, именно: задач о взаимодействии одной частицы с квантовым полем для случая адиабатического приближения.

Основная идея адиабатического приближения состоит в том, чтобы рассматривать часть координат сложной системы как „медленно меняющиеся" по сравнению с остальными, что соответствует введению малого параметра при операторах кинетической энергии для этих координат. При этом можно показать, что собственные значения оператора энергии системы нулевого приближения зависят от этих координат, как от параметров, и играют в более высоких приближениях роль потенциальной энергии для „медленно меняющихся" переменных. Метод адиабатического приближения, разработанный первоначально М. Борном и Р. Оппенгеймером для теории молекул [1], годен в тех случаях, когда задача не имеет вырождения и, в частности, трансляционного вырождения. Однако непосредственное применение его становится весьма затруднительным, если оператор нулевого приближения инвариантен по отношению к какой-либо группе преобразований (вырожден).

Для задач с трансляционным вырождением, встречающихся при исследовании взаимодействия частицы с квантовым полем, теория адиабатического приближения была разработана Н. Н. Боголюбовым и автором [2, 3], причем основная идея метода заключалась в том, чтобы сначала снять трансляционное вырождение и затем уже применять адиабатическую теорию возмущений. В вопросах этого типа представляется интересным исследование предельного перехода в теории адиабатического приближения от невырожденной задачи к задаче с трансляционным вырождением. В этой статье мы имеем в виду исследование поведения собственных функций и собственных значений в задаче о частице, взаимодействующей с квантовым полем и находящейся, кроме того, в некотором локальном внешнем поле, при уменьшении интенсивности внешнего поля до нуля.

Ниже мы ограничимся рассмотрением случая скалярного поля, в соответствии с чем будем считать, что гамильтониан системы имеет вид

$$H=\frac{p^2}{2m}+\tau U(r)+\sum_{(f)}A_f e^{i(f,r)}q_f+\frac{1}{2}\sum_{(f)}E(f)(q_{-f}q_f+\varepsilon^4 p_{-f}p_f), \qquad (1)$$

где r и p — канонически сопряженные координата и импульс частицы; q_f, p_f — соответственно координата и импульс f-го осциллятора поля; $\tau U(r)$ — потенциальная энергия частицы во внешнем поле ($U(r)\to 0$ при $|r|\to\infty$); τ и ε — безразмерные параметры ($\varepsilon \ll 1$); f — волновой вектор элементарного возбуждения.

2. Покажем прежде всего, что при $\tau=0$ частоты трех осцилляторов поля обращаются в нуль и что соответственно у системы появляются три трансляционные степени свободы.

Если считать, что $\tau \neq 0$, то очевидно, что в рассматриваемой задаче нет трансляционного вырождения. Поэтому для приведения оператора (1) к виду, удобному для применения теории возмущений, достаточно произвести простое преобразование координат осцилляторов поля

$$\left.\begin{aligned} q_f&=r_f+\varepsilon Q_f,\\ p_f&=\frac{1}{\varepsilon}P_f,\end{aligned}\right\} \qquad (2)$$

где Q_f и P_f — новые канонические сопряженные операторы координаты и импульса осциллятора, а r_f — c — число. Гамильтониан H преобразуется при этом к виду

$$H=H_0+\varepsilon H_1+\varepsilon^2 H_2, \qquad (3)$$

где

$$\left.\begin{aligned} H_0&=\frac{p^2}{2m}+\tau U(r)+\sum A_f r_f e^{i(f,r)}+\frac{1}{2}\sum E(f)|r_f|^2,\\ H_1&=\sum (A_f e^{i(f,r)}+E(f)r_{-f})Q_f,\\ H_2&=\frac{1}{2}\sum E(f)(Q_{-f}Q_f+P_{-f}P_f).\end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

Для определения собственных функций и собственных значений далее удобно использовать операторную форму теории возмущений [4].

Обозначим через $\varphi_n(r)$ и ε_n собственные функции и собственные значения уравнения

$$(\varepsilon_n-H_0)\varphi_n(r)=0, \qquad (5)$$

где H_0 определяется по формулам (4). Так как оператор H_0 не действует на переменные Q_f, то очевидно, что собственная функция C_0 нулевого приближения имеет вид

$$C_0(r;\ldots,Q_f,\ldots)=\varphi_0(r)\,\theta(Q_f), \qquad (6)$$

где $\theta(Q_f)$ — некоторая функция от координат осцилляторов, оставшаяся пока неизвестной. Обозначим через P оператор, проектирующий произвольную волновую функцию C на линейное подпространство функций нулевого приближения C_0:

$$PC=\varphi_0(\overset{*}{\varphi}_0, C)=\varphi_0(r)\,\theta(Q_f)=C_0, \qquad P^2=P, \tag{7}$$

(круглые скобки обозначают скалярное произведение функций).

Далее можно показать, что собственные значения E оператора (3) определяются из уравнений первого, второго и т. д. приближений для функции C_0:

$$\left.\begin{aligned}&(E-\varepsilon_0)\,C_0=\varepsilon PH_1PC_0\\&(E-\varepsilon_0)\,C_0=P\{\varepsilon H_1+\varepsilon^2H_2-\varepsilon^2(H_1-PH_1P)\,(H_0-\varepsilon_0)^{-1}(H_1-PH_1P)\}\,PC_0,\ldots\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

а собственная функция C имеет соответственно вид

$$C=(1+\varepsilon(H_0-\varepsilon_0)^{-1}(PH_1P-H_1)+\varepsilon^2\ldots)\,C_0. \tag{9}$$

Ниже мы будем удерживать члены до ε^2 включительно в выражении для энергии и до ε — в волновой функции.

Используя (4), мы получаем из уравнения (8) первого приближения

$$(E-\varepsilon_0)\,C_0=\sum(A_fI_f^{(0,0)}+E(f)\,r_{-f})\,Q_fC_0; \quad I_f^{(0,0)}=\int e^{i(f,r)}\,|\varphi_0(r)|^2\,dr.$$

Так как энергия системы E не может зависеть от координат, то, следовательно, должны обращаться в нуль коэффициенты при Q_f, что позволяет определить остававшиеся неизвестными c — числа r_f:

$$r_{-f}=-\frac{A_f}{E(f)}I_f^{(0,0)}. \tag{10}$$

Подставляя затем r_f в (5) и (8), мы получаем явный вид уравнений для определения функций $\varphi_n(r)$ и $\theta(Q_f)$:

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r+\tau U(r)-\sum_{(f)}\frac{|A_f|^2}{E(f)}I_{-f}^{(0,0)}e^{i(f,r)}-W_n\right\}\varphi_n(r)=0, \tag{11}$$

$$(E-\varepsilon_0)\,C_0=\varepsilon^2\left\{\frac{1}{2}\sum_{(f)}E(f)\,(Q_{-f}Q_f+P_{-f}P_f)-\sum_{(g,f)}B_{g,f}Q_gQ_f\right\}C_0, \tag{12}$$

где

$$B_{g,f}=A_gA_f\sum_{(n\neq0)}\frac{I_g^{(0,n)}I_f^{(n,0)}}{\varepsilon_n-\varepsilon_0};$$

$$I_f^{(0,n)}=\int e^{i(f,r)}\overset{*}{\varphi}_0(r)\,\varphi_n(r)\,dr; \quad W_0=\varepsilon_0-\frac{1}{2}\sum\frac{|A_f|^2}{E(f)}\,|I_f^{(0,0)}|^2. \tag{13}$$

Производя в уравнении (12) замену переменных

$$P_f=E^{-\frac{1}{2}}(f)\,\bar{P}_f, \quad Q_f=E^{\frac{1}{2}}(f)\,\bar{Q}_f,$$

где $\bar{P}_f$ и $\bar{Q}_f$ — новые канонические сопряженные операторы импульса и координаты, видим, что задача определения собственных значений уравнения (12) сводится к задаче о приведении к главным осям квадратичной формы

$$\frac{1}{2}\sum_{(f)} E^2(f)\overline{Q}_{-f}\overline{Q}_f - \sum_{(g,f)} B_{g,f} E^{\frac{1}{2}}(g) E^{\frac{1}{2}}(f) \overline{Q}_g \overline{Q}_f.$$

Последнее легко произвести с помощью ортогонального преобразования координат

$$\overline{Q}_f = \sum_{(\nu)} a_{f\nu} q_\nu; \quad \overline{P}_f = \sum_{(\nu)} \overset{+}{a}_{f\nu} p_\nu,$$

где $a_{f\nu}$ — собственные векторы системы

$$E^2(f)\, a_{f\nu} - \overset{*}{A}_f E^{\frac{1}{2}}(f) \sum_{(g,n)} A_g E^{\frac{1}{2}}(g) \frac{I_{-g}^{(0,n)} I_g^{(n,0)} + I_g^{(0,n)} I_{-f}^{(n,0)}}{\varepsilon_n - \varepsilon_0} a_{g\nu} = \lambda_\nu^2 a_{f\nu}, \tag{14}$$

удовлетворяющие обычным условиям ортогональности и нормировки:

$$\sum_{(\nu)} a_{f\nu} \overset{+}{a}_{\nu g} = \delta_{f,g}; \quad \sum_{(f)} \overset{+}{a}_{\mu f} a_{f\nu} = \delta_{\mu,\nu}.$$

Уравнение (12) преобразуется при этом к виду

$$(E - \varepsilon_0)\, C_0 = \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{(\nu)} (p_\nu^2 + \lambda_\nu^2 q_\nu^2)\, C_0. \tag{15}$$

Соответственно, собственные значения энергии с точностью до величин порядка ε^2 имеют вид

$$E = W_0 + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \frac{|A_f|^2}{E(f)} |I_f^{(0,0)}|^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\sum_{(\nu)} \lambda_\nu \left(n_\nu + \frac{1}{2}\right); \quad (n_\nu = 0, 1, 2, \ldots), \tag{16}$$

где W_0, λ_ν — собственные значения уравнений (11), (14).

Покажем теперь, что при $\tau = 0$ частоты трех осцилляторов $\lambda_\nu (\nu = 1, 2, 3)$ обращаются в нуль. Для этого заметим, что если $\varphi_0(r)$ решение уравнения (11) при $\tau = 0$, то и $\varphi_0(r + a)$, где a — произвольный вектор, будет решением этого уравнения, принадлежащим тому же собственному значению, что и $\varphi_0(r)$. Дифференцируя затем уравнение для функции $\varphi_0(r + a)$ по a^α $(\alpha = 1, 2, 3)$, получаем

$$\frac{\partial\varphi_0}{\partial a^\alpha} = \sum_{(f,n)} \frac{|A_f|^2}{E(f)} \frac{\varphi_n(r) I_f^{(n,0)}}{W_n - W_0} \int e^{-i(f,r')} \left(\frac{\partial\overset{*}{\varphi}_0}{\partial a^\alpha}\varphi_0 + \overset{*}{\varphi}_0 \frac{\partial\varphi_0}{\partial a^\alpha}\right) dr'.$$

Вводя далее обозначения

$$R_{f\alpha} = \int e^{-i(f,r)} \left(\frac{\partial\overset{*}{\varphi}_0}{\partial a^\alpha}\varphi_0 + \overset{*}{\varphi}_0 \frac{\partial\varphi_0}{\partial a^\alpha}\right) dr \qquad (\alpha = 1, 2, 3),$$

не трудно видеть, что из выражения для $\frac{\partial\varphi_0}{\partial a^\alpha}$ следует тождество

$$R_{f,\alpha} = \sum_{(g,n)} \frac{|A_g|^2}{E(g)} \frac{I_{-f}^{(0,n)} I_g^{(n,0)} + I_g^{(0,n)} I_{-f}^{(n,0)}}{W_n - W_0} R_{g\alpha},$$

в силу которого уравнение (14) имеет три решения $a_{f\alpha} = \frac{\overset{*}{A}_f R_{f\alpha}}{E^{\frac{3}{2}}(f)}$ $(a = 1, 2, 3)$, принадлежащие собственному значению $\lambda_\alpha = 0$.

Для исследования поведения этих корней при $\tau \neq 0$ можно поступить так же, как в теории возмущений для вырожденного уровня, а именно: разложить соответствующие величины в (14) по степеням τ и искать решения трех уравнений для $\nu = 1, 2, 3$ в виде линейной комбинации решений $a^0_{f\alpha} = \frac{\overset{*}{A}_f R_{f\alpha}}{E^{\frac{3}{2}}(f)}$. При этом собственные значения λ_a определятся из соответствующего скалярного уравнения 3-й степени. Однако ввиду некоторой громоздкости этого способа мы проведем исследование другим методом и заметим только, что при малых τ частоты $\lambda_\alpha (a = 1, 2, 3)$ будут порядка $\tau^{\frac{1}{2}}$.

3. Мы видели, что если согласно методу адиабатического приближения преобразовать переменные поля по формулам (2), то при $\tau = 0$ частоты трех осцилляторов поля обращаются в нуль. Очевидно, что этому соответствует появление трех трансляционных степеней свободы. Поэтому для исследования предельного перехода при $\tau \to 0$ удобнее воспользоваться такими преобразованиями переменных, которые при $\tau = 0$ позволяли бы учитывать трансляционную инвариантность задачи.

Для этой цели удобно использовать преобразование переменных, применявшееся при исследовании адиабатического приближения для частицы, взаимодействующей с квантовым полем [2, 3]:

$$\left.\begin{aligned} r &= q + \lambda \\ q_f &= (r_f + \varepsilon Q_f) e^{-i(f, q)} \end{aligned}\right\}, \tag{17}$$

где q, λ, Q_f — новые переменные. Так как новых переменных на три больше, чем старых, то на переменные Q_f накладываются три дополнительных условия

$$\sum_{(f)} f^\alpha \overset{*}{S}_f Q_f = 0 \qquad (\alpha = 1, 2, 3). \tag{18}$$

Опуская детали вычислений, которые совпадают с соответствующими вычислениями работы [3], запишем выражение для гамильтониана системы H в новых переменных с точностью до величин порядка ε^2 включительно

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\lambda + \tau U(\lambda + \varepsilon Q) + \sum A_f r_f e^{i(f, \lambda)} + \frac{1}{2}\sum E(f) |r_f|^2 +$$

$$+ \varepsilon \sum (A_f e^{i(f, \lambda)} + E(f) r_{-f}) Q_f + \varepsilon^2 \frac{I^2}{2\mu} +$$

$$+ \frac{\varepsilon^2}{2}\sum E(f)(Q_{-f} Q_f + P'_{-f} P'_f) + \varepsilon^3 \ldots, \tag{19}$$

где

$$\mu = \frac{\hbar^2}{3}\sum f^2 \frac{|r_f|^2}{E(f)}, \quad Q^\alpha = \frac{1}{\varepsilon} q^\alpha, \quad I^\alpha = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q^\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, 3). \tag{20}$$

$$P'_f = P_f - \overset{*}{S}_f \sum (f, g) U_g P_g.$$

Разлагая далее для простоты $U(\lambda + \varepsilon Q)$ в ряд по степеням ε, можем записать:

$$\left.\begin{aligned} H &= H_0 + \varepsilon H_1 + \varepsilon^2 H_2 + \cdots, \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_\lambda + \tau U(\lambda) + \sum A_f r_f e^{i(f,\lambda)} + \frac{1}{2}\sum E(f)\,|r_f|^2, \\ H_1 &= \sum (A_f e^{i(f,\lambda)} + E(f)\,r_{-f})\,Q_f + \tau \sum_{(\alpha)} Q^\alpha \frac{\partial U(\lambda)}{\partial \lambda^\alpha}, \\ H_2 &= \frac{I^2}{2\mu} + \frac{\tau}{2}\sum Q^\alpha Q^\beta \frac{\partial^2 U(\lambda)}{\partial\lambda^\alpha\,\partial\lambda^\beta} + \frac{1}{2}\sum E(f)\,(Q_{-f}Q_f + P'_{-f}P'_f) \end{aligned}\right\}. \tag{21}$$

Для нахождения собственных значений и собственных функций оператора H мы используем тот же метод теории возмущений, что и выше.

Замечая, что оператор H_0 действует только на переменную λ, запишем собственную функцию нулевого приближения C_0 в виде

$$C_0 = \varphi_0(\lambda)\,C'(Q; \ldots, Q_f, \ldots),$$

где $\varphi_0(\lambda)$ — собственная функция уравнения (11). Ограничиваясь далее рассмотрением только основного состояния для частицы [т. е. основного состояния уравнения (11)], можно считать, что $\varphi_0(\lambda)$ зависит лишь от $|\lambda|$. В этом случае $\left(\overset{*}{\varphi}_0, \frac{\partial U}{\partial\lambda^\alpha}\varphi_0\right) = 0$ и потому c — числа r_f по-прежнему определяются формулами (10), а уравнение второго приближения для функции C_0 имеет вид

$$(E - \varepsilon_0)\,C_0 = \varepsilon^2\left\{\frac{I^2}{2\mu} + \frac{\tau}{2}\sum_{(\alpha)} Q^\alpha Q^\alpha \overline{U}'' + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2}\sum_{(f)} E(f)\,(Q_{-f}Q_f + P'_{-f}P'_f) - \sum_{(g,f)} B_{g,f}\,Q_g\,Q_f\right\} C_0, \tag{22}$$

где

$$\overline{U}'' = \left(\overset{*}{\varphi}_0, \frac{\partial^2 U}{\partial\lambda^{\alpha^2}}\varphi_0\right); \quad \mu = \frac{\hbar^2}{3}\sum f^2 \frac{|A_f|^2}{E^3(f)}\,|I_f^{(0,0)}|^2, \tag{23}$$

а величины $B_{g,f}$ определяются формулами (13). Так как переменные Q^α и Q_f в уравнении (22) разделились, то очевидно, что C_0 имеет вид

$$C_0(\lambda; Q; \ldots, Q_f, \ldots) = \varphi_0(\lambda)\,\psi_m(Q)\,\theta(\ldots, Q_f, \ldots), \tag{24}$$

где ψ_m и θ — собственные функции уравнений

$$\left(\frac{I^2}{2\mu} + \frac{\tau\overline{U}''}{2}Q^2 - w_m\right)\psi_m(Q) = 0, \tag{25}$$

$$\left\{\frac{1}{2}\sum_{(f)} E(f)\,(Q_{-f}Q_f + P'_{-f}P'_f) - \sum_{(g,f)} B_{g,f}Q_gQ_f - E_F\right\}\theta(Q_f) = 0, \tag{26}$$

а φ_0 — собственная функция уравнения (11).

Полная энергия системы соответственно выражается следующим образом:

$$E = W_0 + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \frac{|A_f|^2}{E(f)}\,|I_f^{(0,0)}|^2 + \varepsilon^2 w_m + \varepsilon^2 E_F. \tag{27}$$

В нашем приближении уравнение (25) есть уравнение гармонического осциллятора и его собственные значения и собственные функции имеют вид

$$w_m = \hbar \bar{\omega} \sum_{(\alpha)} \left(m_\alpha + \frac{1}{2} \right); \quad \bar{\omega} = \sqrt{\frac{\tau \bar{U}''}{\mu}} \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (m_\alpha = 0, 1, 2, \ldots)$$

$$\psi_m(Q) = e^{-\frac{Q^2}{2x_0^2}} \prod_{(\alpha)} H_{m_\alpha}\left(\frac{Q^\alpha}{x_0}\right), \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \omega}}, \tag{28}$$

где $H_m(\xi)$ — нормированные полиномы Чебышева-Эрмита.

При $\tau \to 0$ частоты трех осцилляторов Q^α стремятся к нулю, как $\tau^{\frac{1}{2}}$ $\left(\bar{\omega} = \sqrt{\frac{\tau \bar{U}''}{\mu}}\right)$, как это уже отмечалось выше, в то время как частоты остальных осцилляторов изменяются относительно мало. При этом осцилляторные волновые функции по переменным Q^α переходят в собственные функции свободной частицы: $\psi_m(Q) \to e^{i(k, Q)}$, где k — произвольный постоянный вектор. Физический смысл k заключается в том, что этот вектор представляет величину, пропорциональную полному импульсу P рассматриваемой системы $\left(P = \frac{\hbar k}{\varepsilon}\right)$ [2, 3], который, как это и должно быть, является интегралом движения лишь при отсутствии внешнего поля. Изменение остальных величин $[W_n, E_F, \varphi_n(\lambda), \theta(\ldots, Q_f, \ldots)]$ относительно невелико и не представляет особого интереса; при $\tau = 0$ они принимают свои предельные значения.

Следует отметить, что, поскольку в силу дополнительных условий (18) число осцилляторов Q_f на три меньше, чем q_f, то осцилляторные степени свободы Q^α можно интерпретировать как выделение из общей совокупности осцилляторов трех осцилляторов, обладающих отличными от остальных свойствами. Эти весьма своеобразные степени свободы можно рассматривать как „переданные" от поля к частице, поскольку ее поведение определяется в основном переменными λ^α и Q^α. Частица при этом приобретает как бы внутренние степени свободы. При уменьшении интенсивности внешнего поля до нуля $(\tau \to 0)$ эти колебательные степени свободы переходят в трансляционные степени свободы. Движение частицы можно при этом рассматривать как поступательное перемещение центра тяжести с импульсом $P = \frac{\hbar k}{\varepsilon}$ и флуктуационных колебаний около него, вызванных взаимодействием частицы с полем и описываемых переменной λ.

В заключение автор выражает свою признательность Н. Н. Боголюбову за обсуждение работы и ряд ценных замечаний.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Born u. R. Oppenheimer, Ann. d. Phys. 84, 457 (1927).
2. Н. Н. Боголюбов, Укр. матем. журнал, 2, 3 (1950).
3. С. В. Тябликов, ЖЭТФ, 21, 377 (1951).
4. Н. Н. Боголюбов и С. В. Тябликов, Вестник МГУ, № 3, 35 (1949); Н. Н. Боголюбов, Лекції з квантової статистики, Вид-во „Радянська школа", Київ, 1949.

Получена 19 января 1953 г.
Москва.