ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р2 - 7659

Е.П.Солодовникова, А.Н.Тавхелидзе

ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ
В АДИАБАТИЧЕСКОЙ И СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P2 - 7659

Е.П.Солодовникова, А.Н.Тавхелидзе

ЗАДАЧА ДВУХ ТЕЛ
В АДИАБАТИЧЕСКОЙ И СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

Направлено в ТМФ

Солодовникова Е.П., Тавхелидзе А.Н.

P2 - 7659

Задача двух тел в адиабатической и сильной связи

В работе рассмотрена задача двух тел неслабого взаимодействия. Преобразование Н.Н.Боголюбова обобщено на случай двух тел так, чтобы выделить движение центра инерции и описать относительное движение частиц.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1974

Solodovnikov E.P., Tavkhelidze A.N.

P2 - 7659

Two-Body Problem in Adiabatic and Strong Coupling

The two-body problem of strong interaction is considered. The Bogolubov transformation is generalized for the case of two bodies so as to underline the inertia centre motion and to describe the relative particle motion.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

1. Введение

В основе современных представлений о свойствах систем с неслабым взаимодействием лежит простое соображение, кажущееся почти очевидным: если связь полей столь сильна, что в первом приближении можно пренебречь свободной энергией поля, переносящего взаимодействие, то здесь роль этого поля сводится лишь к созданию некоторого эффективного классического потенциала. Потенциал этот, конечно, не мал, и основное состояние системы с сильным взаимодействием значительно отличается от стационарных состояний свободных полей. Тем не менее, можно надеяться, что после того как найдено основное состояние системы, поправки, связанные с квантовой природой поля - переносчика взаимодействия, будут малыми возмущениями и появится возможность построения итерационной схемы вычисления этих поправок. Однако прямолинейная реализация такой программы приводит к противоречию с требованием учета точных законов сохранения, вытекающих из свойств симметрии гамильтониана системы. Поясним это на примере нерелятивистской частицы, взаимодействующей со скалярным полем. Такая система описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + g\sum_f \mathcal{G}_f\, e^{i\vec{f}\vec{x}}\, b_f + \overset{*}{\mathcal{G}}\, e^{-i\vec{f}\vec{x}}\, b_f^+ + \frac{\epsilon^2}{2}\sum_f \omega_f \qquad /1/$$

$$(b_f^+ b_f + b_f b_f^+)\,.$$

В гамильтониан /1/ включены нулевые колебания свободного поля /фононов/. Безразмерные постоянные g и ϵ^2 позволяют предусмотреть все возможные соотношения между энергией свободных фононов, кинетической энергией частицы и энергией взаимодействия. В дальнейшем будет рассматриваться случай адиабатической связи $g = \epsilon$.

Удобно перейти от операторов b_f, b_f^+ к комплексным координатам и импульсам

$$q_f = \epsilon \frac{b_f + b_{-f}^+}{\sqrt{2}}, \qquad p_f = i \frac{b_f^+ - b_{-f}}{\epsilon \sqrt{2}}. \qquad /2/$$

Эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[q_f, p_{f'}] = i\delta_{ff'} \qquad /3/$$

и условиям действительности

$$\overset{*}{q}_f = q_{-f}. \qquad /4/$$

Гамильтониан /1/ после такого преобразования принимает вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + \sum_f A_f e^{i\vec{f}\vec{x}} q_f + \frac{1}{2}\sum_f \omega_f \overset{*}{q}_f q_f + \frac{\epsilon^4}{2}\sum \omega_f \overset{*}{p}_f p_f, \qquad /5/$$

$$A_f = \sqrt{2}\,\mathcal{G}_f.$$

В первом приближении, когда малый параметр ϵ можно положить равным нулю, гайзенберговы уравнения движения для операторов q_f приводят к решению

$$q_f(t) = \text{const}. \qquad /6/$$

Поэтому можно предположить, что к интересующей нас итерационной схеме приводит преобразование, выделяющее в операторах q_f большую классическую составляющую и учитывающее квантовую природу фононов как малую поправку

$$q_f = u_f + \epsilon Q_f, \qquad \overset{*}{Q}_f = Q_{-f}, \qquad /7/$$

где u_f – с-числа, удовлетворяющие условиям действительности $\overset{*}{u}_f = u_{-f}$.

Выделив в гамильтониане /5/ слагаемые нулевой степени ϵ, получим выражение

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2\mu}\vec{p}^{\,2} + \sum A_f e^{i\vec{f}\vec{x}} u_f + \frac{1}{2}\sum \omega_f \overset{*}{u}_f u_f, \qquad /8/$$

зависящее только от переменной $\vec{x}$. Волновая функция системы в первом приближении распадается на произведение

$$\Psi(\vec{x}, Q_f) = \phi_0(\vec{x})\, \theta_0(Q_f), \qquad /9/$$

а коэффициенты u_f определяются затем из условия регулярности функции $\theta_0(Q_f)$ x/. Таким образом создается впечатление возможности построения эффективной итерационной процедуры и в случае сильной связи. Однако такой подход к решению задачи внутренне противоречив. Гамильтониан /1/ инвариантен, например, относительно преобразований

$$\vec{x} \to \vec{x} + \vec{a}, \quad b_f \to e^{-i\vec{f}\vec{a}} b_f \qquad /10/$$

с некоторым произвольным постоянным вектором $\vec{a}$. Инвариантность гамильтониана относительно преобразования /10/ приводит к закону сохранения полного импульса системы. Это означает, что гамильтониан /5/ коммутирует с оператором полного импульса

$$\vec{P} = \vec{p} - i\sum_f \vec{f} q_f p_f \qquad /11/$$

и в качестве стационарных волновых функций системы всегда могут быть взяты собственные функции оператора

---

x/Это условие требует обращения в нуль оператора, линейного по Q_f, и эквивалентно условию минимума энергии системы.

полного импульса /11/. Однако факторизующиеся функции вида /9/ не могут быть одновременно собственными функциями операторов /11/ и /8/, если только уравнение /8/ не сводится к уравнению для свободной частицы. Чтобы примирить это противоречие, в работе /1/ было предложено каноническое преобразование

$$\vec{x} = \vec{\lambda} + \vec{q}\,, \qquad /12/$$

$$q_f = e^{-i\vec{f}\vec{q}}(u_f + \epsilon\, Q_f)\,. \qquad /13/$$

Поскольку преобразование /12-13/ вводит три новые переменные q^α, координаты поля Q_f связываются тремя дополнительными условиями. Как это делается, будет описано позднее. Сейчас отметим только, что из формул /12/ и /13/ вытекает, что оператор $-i\,\partial/\partial\vec{q}$ является оператором полного импульса системы в новом представлении. Это следует непосредственно из правила дифференцирования

$$-i\frac{\partial}{\partial q^\alpha} = -i\frac{\partial x^\beta}{\partial q^\alpha}\cdot\frac{\partial}{\partial x^\beta} - i\sum \frac{\partial q_f}{\partial q^\alpha}\,\frac{\partial}{\partial q_f}\,. \qquad /14/$$

Вычисление явного выражения для оператора p_f показывает, что переменная $\vec{q}$ не содержится явно в преобразованном гамильтониане /5/. Поэтому волновую функцию системы всегда можно выбрать в виде

$$\Psi(\vec{\lambda}, \vec{q}, Q_f) = \exp(i\vec{P}\vec{q})\;\theta(\vec{\lambda}, Q)\,, \qquad /15/$$

после чего вопрос о разделении переменных λ и Q_f уже не связан с условием выполнения законов сохранения. В работе /1/ было показано, что преобразование /12/, /13/ позволяет представить волновую функцию основного состояния системы в виде произведения

$$\theta(\vec{\lambda}, Q) = \phi_0(\vec{\lambda})\;\theta_0(Q_f) \qquad /16/$$

и построить эффективную итерационную схему, учитывающую квантовую природу фононов.

С групповой точки зрения преобразование /12/, /13/ вводит в качестве новых независимых переменных параметры группы симметрии гамильтониана. Новые переменные $\vec{\lambda}$ и Q_f не реагируют на преобразования группы, поэтому, представляя волновую функцию системы в виде /15/, мы реализуем представление группы трансляций и автоматически учитываем закон сохранения полного импульса. С другой стороны, преобразование /12/ можно рассматривать как разбиение вектора частицы на два слагаемых. Вектор $\vec{\lambda}$ инвариантен относительно трансляций и описывает колебательное движение частицы внутри потенциальной ямы, создаваемой классической составляющей скалярного поля. Вектор $\vec{q}$ описывает трансляционное движение потенциальной ямы, причем движение это не равномерно, а совершается в соответствии с законом сохранения полного импульса.

2. Выделение движения центра инерции и относительного движения в системе двух частиц, сильно взаимодействующих со скалярным полем

Приведенные в предыдущем разделе соображения о свойствах движения частицы, сильно взаимодействующей со скалярным полем, помогают понять особенности двухчастичной задачи. Гамильтониан такой системы, записанный в переменных q_f, p_f, равен

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\mu}\vec{p}_1^{\,2} + \frac{1}{2\mu}\vec{p}_2^{\,2} + \sum_f A_f\left(e^{i\vec{f}\vec{x}_1} + e^{i\vec{f}\vec{x}_2}\right) q_f + \frac{1}{2}\sum \omega_f \overset{*}{q}_f q_f + \qquad /17/$$

$$+\frac{\epsilon^4}{2}\sum \omega_f \overset{*}{p}_f p_f\,.$$

Так как кинетическая энергия скалярного поля и в этом случае малая величина, основной эффект взаимодействия вновь сводится к приготовлению полем потенциальных ям для каждой из частиц. Поэтому целесообразно разбить радиусы-векторы каждой из частиц на части, описывающие колебательные движения внутри потенциальных ям и трансляционные смещения этих ям:

$$\vec{x}_1 = \vec{\lambda}_1 + \vec{q}_1 \qquad /18/$$

$$\vec{x}_2 = \vec{\lambda}_2 + \vec{q}_2. \qquad /19/$$

Переменные $\vec{q}_I$ и $\vec{q}_2$ следует рассматривать как независимые, так как движение потенциальных ям должно быть кинематически независимым. Удобно перейти от переменных $\vec{q}_1$ и $\vec{q}_2$ к переменным, связанным с движением центра масс и относительным движением частиц:

$$\vec{q}_1 = \vec{q} + \vec{\lambda}, \qquad /20/$$

$$\vec{q}_2 = \vec{q} - \vec{\lambda}. \qquad /21/$$

Дополним преобразования /18/, /19/ преобразованием координат поля

$$q_f = e^{-i\vec{f}\vec{q}} \{ u_f e^{-i\vec{f}\vec{\lambda}} + u_f e^{i\vec{f}\vec{\lambda}} + \epsilon Q_f \}, \qquad /22/$$

где числа u_f и переменные Q_f должны удовлетворять условиям действительности

$$\overset{*}{u}_f = u_{-f}, \quad \overset{*}{Q}_f = Q_{-f} \qquad /23/$$

и на переменные Q_f следует наложить шесть дополнительных условий. Чтобы выбрать эти условия, выясним смысл преобразования /22/. В одночастичной задаче числа u_f, фигурирующие в преобразовании /19/, однозначно связаны с коэффициентами Фурье эффективного потенциала частицы, поэтому преобразование /13/ соответствует выделению из поля классической составляющей, движущейся вместе с частицей. Формулы /18/-/22/ показывают, что преобразование /22/ выделяет из координат поля две кинетически независимые классические составляющие, движущиеся вместе с частицами. Удобно сформулировать дополнительные условия для Q_f в виде соотношений

$$\sum_f Q_f N^{(i)}_{f\alpha} = 0, \quad i = 1,2; \quad \alpha = 1,2,3, \qquad /24/$$

где $N^{(i)}_{f\alpha}$ - две трехстолбцовые матрицы. Вместе с этими матрицами можно определить также матрицы $M^{(i)}_{\alpha f}$, удовлетворяющие соотношениям

$$\sum_f M^{(i)}_{\alpha f} N^{(k)}_{f\beta} = \delta_{ik}\, \delta_{\alpha\beta}, \qquad /25/$$

и построить следующие матрицы:

$$A^{(i)}_{ff'} = \delta_{ff'} - \sum_\alpha N^{(i)}_{f\alpha} M^{(i)}_{\alpha f'}, \qquad /26/$$

$$A_{ff'} = \sum_\ell A^{(1)}_{f\ell} A^{(2)}_{\ell f'} = \sum_\ell A^{(2)}_{f\ell} A^{(1)}_{\ell f'} = \delta_{ff'} - \sum_{i,\alpha} N^{(i)}_{f\alpha} M^{(i)}_{\alpha f'}. \qquad /27/$$

При этом справедливы соотношения

$$\sum_f M^{(i)}_{\alpha f} A_{ff'} = 0, \quad \sum_{f'} A_{ff'} N^{(i)}_{f'\alpha} = 0, \qquad /28/$$

из которых следует, что

$$\sum_\ell A^{(i)}_{f\ell'} A^{(i)}_{\ell f'} = A^{(i)}_{ff'}, \quad \sum_\ell A_{f\ell} A_{\ell f'} = A_{ff'}, \qquad /29/$$

т.е. матрицы $A^{(i)}_{ff'}$, $A_{ff'}$ - проекционные, причем из определений матриц /27/, /28/ следует, что при проектировании, осуществляемом при помощи каждой из матриц $A^{(i)}$, число независимых переменных уменьшается на три, а действие матрицы A уменьшает число независимых переменных на шесть. Поэтому переменные Q_f, удовлетворяющие условиям /24/, можно представить в виде суперпозиции независимых переменных z_f:

$$Q_f = \sum_{f'} z_{f'} A_{f'f} \qquad /30/$$

и сформулировать условия /24/ следующим образом:

$$Q_f = \sum Q_{f'} A_{f'f} \,, \qquad /31/$$

явно подчеркивая, что Q_f - это переменные, связанные с подпространством, выделяемым проекционной матрицей А. Естественно, что дифференциальные операторы $\frac{\partial}{\partial Q_f}$ также удовлетворяют условиям, связанным с выделением подпространства:

$$\sum_f M^{(i)}_{\alpha f} \frac{\partial}{\partial Q_f} = 0 \,, \qquad /32/$$

$$\sum_{f'} A_{ff'} \frac{\partial}{\partial Q_{f'}} = \frac{\partial}{\partial Q_f} \,. \qquad /33/$$

Условия /24/ вполне аналогичны условиям, сформулированным при анализе одночастичной задачи /1/. Для дальнейшего удобно сделать следующее обобщение - допустить, что $M^{(i)}_{\alpha f}$ и $N^{(i)}_{f\alpha}$ могут быть функциями переменной $\vec\lambda$. Это предположение не противоречит условию /25/, которое позволило построить проекционные операторы нужного порядка. Поэтому даже в том случае, когда $M^{(i)}_{\alpha f}$ и $N^{(i)}_{f\alpha}$ рассматриваются как функции $\vec\lambda$, условия /24/ и /31/ по-прежнему уменьшают число независимых переменных на шесть.

Записывая дополнительные условия /24/ в виде

$$\sum \{ q_f e^{i\vec f\vec q} - u_f e^{-i\vec f\vec\lambda} - u_f e^{i\vec f\vec\lambda} \} N^{(i)}_{f\alpha} = 0 \,, \qquad /34/$$

легко убедиться, что переменные $\vec q$ и $\vec\lambda$ можно рассматривать как функции только переменных поля q_f, но не координат частиц $\vec x_1$ и $\vec x_2$. Действительно, условия /34/ дают нам шесть независимых соотношений, из которых можно определить шесть величин q^α и λ^α как функции q_f. Соотношения /34/ позволяют найти производные векторов $\vec q$ и $\vec\lambda$ по переменным поля. Дифференцируя /34/ по q_f, получаем соотношения

$$N^{(i)}_{f\alpha} e^{i\vec f\vec q} + i \frac{\partial q_\beta}{\partial q_f} \sum_\ell \ell_\beta (u_\ell e^{-i\vec\ell\vec\lambda} + u_\ell e^{i\vec\ell\vec\lambda}) N^{(i)}_{\ell\alpha}$$

$$+ i \frac{\partial \lambda}{\partial q} \sum_\ell \ell_\beta (u_\ell e^{-i\vec\ell\vec\lambda} - u_\ell e^{i\vec\ell\vec\lambda}) N^{(i)}_{\ell\alpha} + \qquad /35/$$

$$+ i\epsilon \frac{\partial q^\beta}{\partial q_f} \sum_\ell \ell_\beta Q_\ell N^{(i)}_{\ell\alpha} + \epsilon \frac{\partial \lambda^\beta}{\partial q_f} \sum_\ell Q_\ell N^{(i)}_{\ell\alpha,\beta} = 0 \,.$$

Здесь и в дальнейшем символ $F,_\alpha$ означает производную по вектору λ^α:

$$F,_\alpha = \frac{\partial F}{\partial \lambda^\alpha} \,. \qquad /36/$$

Из соотношения /35/ следует, что подстановка

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial q_f} = i e^{i\vec f\vec q} \tilde S_{f\alpha} \,, \qquad /37/$$

$$\frac{\partial \lambda^\alpha}{\partial q_f} = i e^{i\vec f\vec q} T_{f\alpha} \qquad /38/$$

исключает переменную $\vec q$ и соотношения /35/ превращаются в уравнения для функций $\tilde S_{f\alpha}$, $\tilde T_{f\alpha}$, зависящих только от переменных $\vec\lambda$ и Q_f. Соотношения /35/ можно значительно упростить, если выбрать

$$M^{(1)}_{\alpha f} = f_\alpha u_f e^{-i\vec f\vec\lambda} \,, \quad M^{(2)}_{\alpha f} = f_\alpha u_f e^{i\vec f\vec\lambda} \,. \qquad /39/$$

Определяя матрицы $S_{f\alpha}$ и $T_{f\alpha}$:

$$2S_{f\alpha} = N^{(1)}_{f\alpha} + N^{(2)}_{f\alpha}, \quad 2T_{f\alpha} = N^{(1)}_{f\alpha} - N^{(2)}_{f\alpha} \qquad /40/$$

и четыре матрицы третьего порядка

$$a_{\alpha\beta} = \sum_f f_\alpha Q_f S_{f\beta}, \quad b_{\alpha\beta} = -i\sum_f Q_f S_{f\beta,\alpha}, \qquad /41/$$

$$c_{\alpha\beta} = \sum_f f_\alpha Q_f T_{f\beta}, \quad d_{\alpha\beta} = -i\sum_f Q_f T_{f\beta,\alpha}, \qquad /42/$$

преобразуем /35/ в уравнения для матриц $\tilde{\tilde{S}}_{f\alpha}$ и $\tilde{\tilde{T}}_{f\alpha}$:

$$\tilde{\tilde{S}}_{f\alpha} = S_{f\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{S}}_{f\beta} a_{\beta\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{T}}_{f\beta} b_{\beta\alpha}, \qquad /43/$$

$$\tilde{\tilde{T}}_{f\alpha} = T_{f\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{S}}_{f\beta} C_{\beta\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{T}}_{f\beta} d_{\beta\alpha}. \qquad /44/$$

Эти уравнения легко решить последовательными приближениями. В частности, с точностью до второго порядка по ϵ

$$\tilde{\tilde{S}}_{f\alpha} = S_{f\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{S}}^{(1)}_{f\alpha} + \epsilon^2\,S^{(2)}_{f\alpha}, \qquad /45/$$

$$\tilde{\tilde{T}}_{f\alpha} = T_{f\alpha} - \epsilon\,\tilde{\tilde{T}}^{(1)}_{f\alpha} + \epsilon^2\,\tilde{\tilde{T}}^{(2)}_{f\alpha}, \qquad /46/$$

где

$$\tilde{\tilde{S}}^{(i)}_{f\alpha} = \tilde{\tilde{S}}^{(i-1)}_{f\beta} a_{\beta\alpha} + \tilde{\tilde{T}}^{(i-1)}_{f\beta} b_{\beta\alpha}, \qquad /47/$$

$$\tilde{\tilde{T}}^{(i)}_{f\alpha} = \tilde{\tilde{S}}^{(i-1)}_{f\beta} C_{\beta\alpha} + \tilde{\tilde{T}}^{(i-1)}_{f\beta} d_{\beta\alpha}, \quad \tilde{\tilde{S}}^{(0)}_{f\alpha} = S_{f\alpha}, \quad \tilde{\tilde{T}}^{(0)}_{f\alpha} = T_{f\alpha}. \qquad /48/$$

Выражения для производных $\vec{q}$ и $\vec{\lambda}$ по переменным поля q_f /37/, /38/ позволяют найти явный вид оператора p_f в новых переменных

$$p_f = -i\frac{\partial}{\partial q_f} = -i\sum_{f'}\frac{\partial Q_{f'}}{\partial q_f}\frac{\partial}{\partial Q_{f'}} + \frac{\partial q^\alpha}{\partial q_f}\left(-i\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right) + \sum\frac{\partial\lambda^\alpha_i}{\partial q_f}\left(-i\frac{\partial}{\partial\lambda^\alpha_i}\right). \qquad /49/$$

Выражая Q_f через z_f по формуле /22/ и учитывая условия /31/, а также следующее из этих условий соотношение

$$\sum_{f,\ell} Q_f A_{f\ell,\alpha}\frac{\partial}{\partial Q_\ell} = 0, \qquad /50/$$

легко получить соотношение

$$-i\sum_{f'}\frac{\partial Q_{f'}}{\partial q_f}\frac{\partial}{\partial Q_{f'}} = e^{i\vec{f}\vec{q}}\left\{\frac{1}{\epsilon}P_f - \tilde{\tilde{S}}_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'} P_{f'}\right\}, \qquad /51/$$

в котором операторы P_f определяются соотношением

$$P_f = -i\sum_{f'} A_{ff'}\frac{\partial}{\partial Q_{f'}} \qquad /52/$$

и удовлетворяют условиям

$$\sum_f M^{(i)}_{\alpha f} P_f = 0. \qquad /53/$$

Поскольку в силу определения переменных $\vec{\lambda}_1$, $\vec{\lambda}_2$ и $\vec{\lambda}$

$$\frac{\partial\lambda^\alpha_1}{\partial q_f} = -ie^{i\vec{f}\vec{q}}\left(\tilde{\tilde{S}}_{f\alpha} + \tilde{\tilde{T}}_{f\alpha}\right), \qquad /54/$$

$$\frac{\partial\lambda^\alpha_2}{\partial q_f} = -ie^{i\vec{f}\vec{q}}\left(\tilde{\tilde{S}}_{f\alpha} - \tilde{\tilde{T}}_{f\alpha}\right), \qquad /55/$$

то выражению /49/ для оператора P_f можно придать вид:

$$P_f = e^{i\vec{f}\vec{q}}\,\{\frac{1}{\epsilon}P_f - \overset{\approx}{S}_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'}P_{f'} + i\overset{\approx}{S}_{f\alpha}(-i\frac{\partial}{\partial q^\alpha}) + i\overset{\approx}{T}_{f\alpha}(-i\frac{\partial}{\partial \lambda^\alpha})$$

$$-i(\overset{\approx}{S}_{f\alpha} + \overset{\approx}{T}_{f\alpha})(-i\frac{\partial}{\partial \lambda_1^\alpha}) - i(\overset{\approx}{S}_{f\alpha} - \overset{\approx}{T}_{f\alpha})(-i\frac{\partial}{\partial \lambda_2^\alpha})\}\,. \qquad /56/$$

Возвращаясь к началу раздела, заметим, что преобразования /18/-/22/ показывают, что переменная $\vec{q}$ действительно имеет смысл координаты центра инерции системы, поскольку канонически сопряженный с q^α оператор

$$-i\frac{\partial}{\partial q^\alpha} = -i\frac{\partial x_1^\beta}{\partial q^\alpha}\frac{\partial}{\partial x_1^\beta} - i\frac{\partial x_2^\beta}{\partial q^\alpha}\frac{\partial}{\partial x_2^\beta} - i\sum_f \frac{\partial q_f}{\partial q^\alpha}\frac{\partial}{\partial q_f}$$

$$= -i\frac{\partial}{\partial x_1^\alpha} - i\frac{\partial}{\partial x_2^\alpha} - i\sum f_\alpha q_f p_f \qquad /57/$$

совпадает с оператором полного импульса системы. Кроме того, экспоненциальная зависимость оператора P_f от переменной $\vec{q}$, определяемая выражением /42/, приводит к тому, что переменная $\vec{q}$ выпадает из гамильтониана /17/, преобразованного к новым переменным, поэтому полный импульс системы действительно сохраняется.

3. Разложение гамильтониана в ряд по степеням малого параметра

Подставляя выражение оператора P_f /56/ в гамильтониан /17/, нетрудно убедиться, что вторые производные по переменным $\vec{q}$ и $\vec{\lambda}$ входят в гамильтониан с малым параметром ϵ^4. Причину этого легко понять, анализируя результаты одночастичной задачи /1/. Полный импульс

системы в одночастичной задаче пропорционален большой величине ϵ^{-2}. Поскольку основной вклад в полный импульс системы дает пассивно движущаяся с частицей классическая составляющая поля, величина которой не меняет своего порядка при переходе к двухчастичной системе, то и в рассматриваемом случае полный импульс пропорционален ϵ^{-2}. Волновую функцию, описывающую состояние с определенным полным импульсом, следует выбрать в виде:

$$\Psi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2, \vec{\lambda}, \vec{q}, Q) = \exp(i\frac{\vec{J}\vec{q}}{\epsilon^2})\,\Phi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2, \vec{\lambda}, Q)\,, \qquad /58/$$

что приводит к преобразованию оператора полного импульса

$$-i\frac{\partial}{\partial \vec{q}} \to \frac{1}{\epsilon^2}\vec{J} - i\frac{\partial}{\partial \vec{q}}\,. \qquad /59/$$

После этого эффекты, связанные с движением системы как целого будут учтены уже в нулевом порядке по ϵ. Таким образом, малый параметр при производных по переменным $\vec{q}$ в гамильтониане системы связан с большим полным импульсом системы. В одночастичной задаче было выяснено /1/, что пропорциональность полного импульса большой величине ϵ^{-2} приводит к тому, что эффективная масса частицы в поле также становится большой величиной, пропорциональной ϵ^{-4}. Очевидно, что структура гамильтониана /17/ в новых переменных должна быть такой, что, по крайней мере, в первом приближении оператор второго порядка по переменным $\vec{\lambda}$ при больших $|\vec{\lambda}|$ должен сводиться к выражению

$$-\frac{1}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial \vec{\lambda}^2}\,, \qquad /60/$$

где μ - приведенная эффективная масса частиц. Поскольку при $|\vec{\lambda}| \to \infty$ эффективные массы каждой из частиц должны стремиться к одночастичному пределу, то оператор /60/ должен содержать малый параметр ϵ^4. Малость производных по $\vec{\lambda}$ соответствует, таким образом, большой эффективной массе частицы в поле. Малый параметр при операторах P_f, естественно, соответствует малой энергии фононов. Преобразование /22/, изменяющее масштаб переменных q_f, повысило порядок соответствующих импульсов P_f, что позволит учесть квантовую природу фононов уже во втором порядке по ϵ. В работе /1/ была развита строгая итерационная схема учета переменных Q_f, которая становится возможной после преобразования волновой функции

$$\Phi(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2,\vec\lambda,Q) = \exp\left(\frac{i}{\epsilon}\sum_f t_f Q_f\right)\Phi'(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2,\vec\lambda,Q). \qquad /61/$$

Числа t_f в формуле /61/ должны удовлетворять условию действительности

$$t_f^* = t_{-f} \qquad /62/$$

и, кроме того, их всегда можно выбрать так, чтобы выполнялось соотношение

$$\sum_f M^{(i)}_{\alpha f}\, t_f = 0. \qquad /63/$$

Преобразование /61/ вызывает преобразование операторов

$$P_f \to \frac{1}{\epsilon} t_f + P_f. \qquad /64/$$

При анализе относительного движения частиц естественно также изменить масштаб переменной $\vec\lambda$:

$$\vec\lambda = \epsilon\vec\xi, \qquad /65/$$

что позволит учесть относительное движение уже во втором порядке по ϵ, но на этом аналогия между переменными $\vec\lambda$ и Q_f кончается. Причина этого заключается в различии потенциалов, соответствующих переменным $\vec\lambda$ и Q_f. Потенциальная энергия, соответствующая переменным Q_f, это потенциальная энергия осциллятора с малой частотой, где параметр малости входит в гамильтониан в виде малого множителя при потенциале. Естественно, что в этом случае можно применить строгую теорию возмущений. Потенциальная энергия, соот-

ветствующая переменной $\vec\lambda$, это, вообще говоря, немалая функция, удовлетворяющая условию обращения в нуль при $|\vec\lambda|\to\infty$. Преобразование /65/ превращает потенциальную энергию относительного движения в слабо меняющуюся функцию переменной $\vec\xi$, однако разложение этой функции в ряд по степеням ϵ незаконно, поскольку такая процедура, если ограничиться конечным числом слагаемых ряда, не позволяет рассматривать большие значения $\vec\xi$. Таким образом, задача описания относительного движения - это типично адиабатическая задача и при анализе движения двух частиц в поле следует скомбинировать теорию возмущений по переменным Q_f с адиабатическими методами по переменной $\vec\lambda$. Как и в одночастичной задаче, совершим преобразование /61/ с той разницей, что величины t_f теперь следует считать функциями $\vec\lambda$. Поэтому преобразование оператора /64/ будет сопровождаться преобразованием относительного импульса

$$-i\frac{\partial}{\partial\lambda^\alpha} \to \frac{1}{\epsilon}\sum Q_f\, t_{f,a} - i\frac{\partial'}{\partial\lambda^\alpha}. \qquad /66/$$

Совершив затем преобразование /65/, можно указать разложение оператора P_f по степеням ϵ /но не $\epsilon\vec\xi$ /. Приведем выражение для P_f с точностью до слагаемых нулевой степени по ϵ:

$$P_f = e^{i\vec f\vec q}\Big\{\frac{1}{\epsilon^2}(t_f + iS_{f\alpha}J_\alpha) + \frac{1}{\epsilon}\Big(P_f - S_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'}t_{f'} - i\tilde{\tilde S}^{(1)}_{f\alpha}J_\alpha$$

$$+ iT_{f\alpha}\sum_{f'} Q_{f'}\, t_{f',\alpha} + iT_{f\alpha}\Big(-i\frac{\partial}{\partial\xi^\alpha}\Big)\Big) + \tilde{\tilde S}^{(1)}_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'}\, t_{f'} + i\tilde{\tilde S}^{(2)}_{f\alpha}J_\alpha$$

$$- S_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'}P_{f'} - i\tilde{\tilde T}^{(1)}_{f\alpha}\sum_{f'} Q_{f'}\, t_{f',\alpha} - i\tilde{\tilde T}^{(1)}_{f\alpha}\Big(-i\frac{\partial}{\partial\xi^\alpha}\Big)$$

$$/67/$$

$$- iN^{(1)}_{f\alpha}\Big(-i\frac{\partial}{\partial\lambda_1^\alpha}\Big) - iN^{(2)}_{f\alpha}\Big(-i\frac{\partial}{\partial\lambda_2^\alpha}\Big)\Big\}.$$

Приведенного выражения для P_f достаточно, чтобы найти гамильтониан системы с точностью до второго порядка по ϵ, когда уже можно учесть кинетическую энергию фононов и относительного движения. Чтобы не приводить длинных выкладок, приведем здесь условие отсутствия в гамильтониане системы линейных по P_f слагаемых, которые должны появиться в гамильтониане в первом порядке по ϵ, в то время как билинейные по P_f слагаемые появляются лишь во втором порядке по ϵ. Поэтому требование обращения в нуль линейного по P_f оператора вытекает из условия регулярности волновой функции по переменным Q_f. Оператор, линейный по переменным P_f, обращается в нуль в первом порядке по ϵ, если

$$\omega_f\,(t_f + iS_{f\alpha}J_\alpha) = ic^\alpha \overset{*}{E}_{\alpha f}, \qquad /68/$$

где

$$E_{\alpha f} = M^{(1)}_{\alpha f} + M^{(2)}_{\alpha f}. \qquad /69/$$

Из условия /68/ вытекает, что полный импульс системы можно записать в виде

$$J_\alpha = \frac{1}{2}\Sigma\,\frac{c^\beta \overset{*}{E}_{\beta f}}{\omega_f} M^{(1)}_{\alpha f} = \frac{1}{2}\Sigma\,\frac{c^\beta \overset{*}{E}_{\beta f}}{\omega_f} M^{(2)}_{\alpha f}. \qquad /70/$$

Действительную векторную функцию c^β в /68/ следует выбрать так, чтобы полный импульс системы не зависел от переменной $\vec{\lambda}$. После этого можно несколько упростить выражение для оператора

$$P_f = e^{i\vec{f}\vec{q}}\,\{\frac{1}{\epsilon^2}\,i\,\frac{c^\beta \overset{*}{E}_{\beta f}}{\omega} + \frac{1}{\epsilon}(P'_f + iT_{f\alpha}L_\alpha) - S_{f\alpha}\sum_{f'} f'_\alpha Q_{f'} P_{f'}$$

$$-iS_{f\alpha}C_{\alpha\beta}L_\beta - iT_{f\alpha}d_{\alpha\beta}L_\beta + iS_{f\alpha}(-i\frac{\partial}{\partial q^\alpha}) -$$

$$-iN^{(1)}_{f\alpha}(-i\frac{\partial}{\partial\lambda^\alpha_1}) - iN^{(2)}_{f\alpha}(-i\frac{\partial}{\partial\lambda^\alpha_2})\}, \qquad /71/$$

где операторы P'_f и L_α определяются равенствами

$$P'_f = P_f - iS_{f\alpha}D_\alpha, \qquad /72/$$

$$D_\alpha = \sum_f f_\alpha Q_f \frac{c^\beta \overset{*}{E}_{\beta f}}{\omega_f}, \qquad /73/$$

$$L_\alpha = -i\frac{\partial}{\partial\xi^\alpha} - b_{\alpha\beta}J_\beta + \sum_f Q_f\,t_{f,\alpha}. \qquad /74/$$

Воспользовавшись соотношением /68/, можно исключить из определения операторов L_α производные $t_{f,\alpha}$ и привести L_α к виду, аналогичному выражению для оператора P_f:

$$L_\alpha = -i\frac{\partial}{\partial\xi^\alpha} - R_\alpha + ic^\gamma{}_{,\alpha}\Sigma\frac{1}{\omega_f}Q_f\overset{*}{E}_{\gamma f}, \qquad /75/$$

где вектор R_α равен

$$R_\alpha = \sum_f f_\alpha Q_f \frac{c^\beta \overset{*}{F}_{\beta f}}{\omega_f}, \qquad /76/$$

$$F_{\alpha f} = M^{(1)}_{\alpha f} - M^{(2)}_{\alpha f}. \qquad /77/$$

Заметим, что в силу определений /39/, /69/ и /77/ величины $E_{\alpha f}$ и $F_{\alpha f}$ удовлетворяют соотношениям

$$\overset{*}{E}_{\alpha f} = -E_{\alpha,-f}, \quad \overset{*}{F}_{\alpha f} = -F_{\alpha,-f}, \qquad /78/$$

а в силу условия ортонормировки /25/ этим же соотношениям должны удовлетворять и величины $S_{f\alpha}$ и $T_{f\alpha}$. Поэтому векторы D_α и R_α действительны, оператор P_f', как и P_f, удовлетворяет условию

$$\overset{*}{P}{}_f' = P'_{-f} \,, \qquad /79/$$

а оператор L_α эрмитов.

Прежде чем привести явный вид гамильтониана системы во втором порядке по ϵ, заметим, что все функции $\vec{\xi}$, входящие в выражение оператора P_f, зависят от комбинации $\epsilon\vec{\xi}$, поэтому коммутатор оператора L_α с остальными величинами есть величина первого порядка малости по ϵ по сравнению с самими величинами. Поэтому в разложении гамильтониана системы по степеням ϵ

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \epsilon\,\mathcal{H}_1 + \epsilon^2\,\mathcal{H}_2 \qquad /80/$$

очень просто выделить слагаемые $\mathcal{H}_0$ и $\mathcal{H}_1$.

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2\mu}\,\vec{p}_1^{\,2} + \frac{1}{2\mu}\,\vec{p}_2^{\,2} + \frac{1}{2}\sum\left(\omega_f + \frac{(\vec{c}\vec{f})^2}{\omega_f}\right) d_f \qquad /81/$$

$$+ \sum_f A_f\, e^{i\vec{f}\vec{\lambda}}\, u_f\,(1 + e^{2i\vec{f}\vec{\lambda}}) + \sum_f A_f\, e^{i\vec{f}\vec{\lambda}}\, u_f\,(1 + e^{-2i\vec{f}\vec{\lambda}}) \,,$$

где

$$\vec{p}_i = -i\,\frac{\partial}{\partial\vec{\lambda}_i} \,, \qquad d_f = 2\,|u_f|^2\,(1 + e^{2i\vec{f}\vec{\lambda}}) \,, \qquad /82/$$

$$\mathcal{H}_1 = \sum_f A_f\,(e^{i\vec{f}\vec{\lambda}_1}\, e^{i\vec{f}\vec{\lambda}} + e^{i\vec{f}\vec{\lambda}_2} + e^{-i\vec{f}\vec{\lambda}})\, Q_f + \qquad /83/$$

$$\sum\omega_f\,\overset{*}{u}_f\,(e^{i\vec{f}\vec{\lambda}} + e^{-i\vec{f}\vec{\lambda}})\,Q_f - \sum\frac{(\vec{c}\vec{f})^2}{\omega_f}\,(e^{if\lambda} + e^{-i\vec{f}\vec{\lambda}})\,\overset{*}{u}_f\,Q_f \,.$$

Оператор $\mathcal{H}_1$ линеен по переменным Q_f, слагаемые, ли-

нейные по операторам P_f, обратились в нуль в силу условия /68/. Заметим, что выбор произвольной комбинации матриц $M_{\alpha f}^{(i)}$ в виде $E_{\alpha f}$, необходимый для непротиворечивого определения полного импульса по формуле /70/, приводит к обращению в нуль коэффициентов при операторах L_α в первом порядке по ϵ.

4. *Применение адиабатической теории возмущений. Одночастичные потенциалы*

Ограничимся здесь простейшим вариантом адиабатической теории возмущений. Этого будет достаточно, чтобы получить одночастичные потенциалы и выяснить основные свойства относительного движения. Уравнение Шредингера с гамильтонианом /80/ имеет вид

$$(\mathcal{H}_0 + \epsilon\,\mathcal{H}_1 + \epsilon^2\,\mathcal{H}_2 - E)\,\Psi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2, \vec{\xi}, Q) = 0 \,. \qquad /84/$$

Оператор $\mathcal{H}_0$, определяемый соотношением /81/, зависит лишь от переменных $\vec{\lambda}_1$, $\vec{\lambda}_2$ и $\vec{\lambda}$, причем дифференциальных операторов по $\vec{\lambda}$ $\mathcal{H}_0$ не содержит. Поэтому можно надеяться, что хорошим приближением задачи /84/ будет решение, основанное на представлении волновой функции системы в виде произведения

$$\Psi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2, \vec{\xi}, Q) = \phi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2; \vec{\alpha})\,\theta(\xi, Q) \,, \qquad /85/$$

причем функция $\phi(\vec{\lambda}_1, \vec{\lambda}_2; \vec{\lambda})$ удовлетворяет уравнению

$$(\mathcal{H}_0 - E(\vec{\lambda}))\,\phi = 0 \,, \qquad /86/$$

содержащему переменную $\vec{\lambda}$ как параметр. Функция $\theta(\vec{\xi}, Q)$ в этом случае удовлетворяет уравнению

$$(\epsilon\,\langle\mathcal{H}_1\rangle + \epsilon^2\,\langle\mathcal{H}_2\rangle + E(\vec{\lambda}) - E)\,\theta = 0 \,, \qquad /87/$$

символ $\langle\ldots\rangle$ здесь и далее будет означать усреднение по волновой функции $\phi(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2,\vec\lambda)$. Оператор $<\mathcal{H}_1>$ - линейный оператор по переменным с коэффициентами, зависящими только от λ. Чтобы обеспечить регулярность функции $\theta(\vec\xi,Q)$ по переменным Q_f, потребуем, чтобы оператор $<\mathcal{H}_1>$ обращался в нуль. Напомним, что ранее был обращен в нуль аналогичный линейный оператор по переменным P_f. Необходимость этого теперь также оправдывается требованием регулярности функции $\theta(\vec\xi,Q)$. Поскольку оператор $\mathcal{H}_1$ содержит коэффициенты u_f /см. /83//, то условие $<\mathcal{H}_1>=0$ позволяет найти эти коэффициенты. Они определяются уравнениями

$$\overset{*}{u}_f\left(\omega_f-\frac{(\vec f\vec c)^2}{\omega_f}\right)^2\left(e^{i\vec f\vec\lambda}+e^{-i\vec f\vec\lambda}\right)=-A_f\{<e^{i\vec f\vec\lambda}>e^{i\vec f\vec\lambda}+ \qquad /88/$$

$$<e^{i\vec f\vec\lambda}>e^{-i\vec f\vec\lambda}\}.$$

После этого уравнение /86/ сводится к уравнению Шредингера

$$\left(\frac{1}{2\mu}\vec p_1^{\,2}+\frac{1}{2\mu}\vec p_2^{\,2}+V(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2,\vec\lambda)-W_0\right)\phi=0, \qquad /89/$$

в котором роль энергии играет параметр

$$W_0=E(\vec\lambda)-\frac{1}{2}\Sigma\left(\omega_f+\frac{(\vec c\vec f)^2}{\omega_f}\right)d_f, \qquad /90/$$

а потенциал определяется выражением

$$V(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2,\vec\lambda)=\sum_f A_f u_f\left(e^{i\vec f\vec\lambda}+e^{-i\vec f\vec\lambda}\right)\left(e^{i\vec f\vec\lambda_1}+e^{i\vec f\vec\lambda}+e^{i\vec f\vec\lambda_2}e^{-i\vec f\vec\lambda}\right) \qquad /91/$$

с коэффициентами u_f, полученными из уравнения /88/. Отметим две особенности потенциала /91/. Во-первых, этот потенциал допускает разделение переменных $\vec\lambda_1$ и $\vec\lambda_2$, во-вторых, хотя потенциалы для разных частиц при конечных значениях $\vec\lambda$ различны, в предельном случае $|\vec\lambda|\to\infty$ потенциал /91/ принимает вид:

$$V(\lambda_1,\lambda_2)=\sum_f A_f u_f e^{i\vec f\vec\lambda_1}+\Sigma A_f u_f e^{i\vec f\vec\lambda_2}, \qquad /92/$$

т.е. в пределе асимптотически больших относительных расстояний потенциал сводится к сумме одинаковых функций переменных $\vec\lambda_1$ и $\vec\lambda_2$. Поскольку принятое нами приближение рассчитано на описание основного состояния системы, следует взять в качестве волновой функции $\phi(\vec\lambda_1,\vec\lambda_2)$ произведение волновых функций основных состояний $\phi_0(\vec\lambda_1)\phi_0(\vec\lambda_2)$. В этом случае формфакторы $<e^{i\vec f\vec\lambda_1}>$ и $<e^{i\vec f\vec\lambda_2}>$ совпадают и коэффициенты u_f равны

$$\overset{*}{u}_f\left(\omega_f-\frac{(\vec c\vec f)^2}{\omega_f}\right)=-A_f<e^{i\vec f\vec\lambda_i}>. \qquad /93/$$

Эти выражения совпадают с аналогичными выражениями для коэффициентов u_f, полученными в одночастичной задаче /1/. Таким образом, потенциальные ямы, приготовленные частицами после выделения из поля классической составляющей, в пределе больших относительных расстояний становятся одинаковыми для каждой частицы и совпадают с соответствующей одночастичной потенциальной ямой.

Следуя работе /1/, нетрудно выяснить физический смысл вектора $\vec c$ и найти эффективную массу двухчастичной конфигурации. Прежде всего, из уравнения /89/ легко найти частную производную W_0 по вектору $\vec c$:

$$\frac{\partial W_0}{\partial\vec c}=<\frac{\partial V}{\partial\vec c}>. \qquad /94/$$

Принимая во внимание явный вид потенциала /91/ и соотношение /88/, нетрудно найти, что

$$<\frac{\partial V}{\partial\vec c}>=-\frac{1}{2}\sum_f\left(\omega_f-\frac{(\vec f\vec c)^2}{\omega_f}\right)\frac{\partial d_f}{\partial\vec c}. \qquad /95/$$

Используя соотношение /90/, легко найти также частную производную энергии системы в нулевом приближении $E(\vec\lambda)$ по вектору $\vec c$:

$$\frac{\partial E(\vec\lambda)}{\partial \vec c} = \sum_f \frac{(\vec f \vec c)}{\omega_f} \frac{\partial d_f}{\partial \vec c} + \sum \vec f \frac{(\vec f \vec c)}{\omega_f} d_f . \qquad /96/$$

Используя соотношения /70/, полный импульс системы можно представить в виде:

$$\vec J = \sum \vec f \frac{(\vec f \vec c)}{\omega_f} d_f \qquad /97/$$

и показать справедливость равенства:

$$\sum_\alpha c_\alpha \frac{\partial J_\alpha}{\partial c_\beta} = \frac{\partial E(\vec\lambda)}{\partial c_\beta}, \qquad /98/$$

из которого следует, что

$$\frac{\partial E_0(\vec\lambda)}{\partial J_\alpha} = c_\alpha . \qquad /99/$$

Поскольку производная полной энергии системы по составляющим полного импульса определяет вектор средней скорости, заключаем, что средняя скорость двухчастичной конфигурации $\vec v$ определяется равенством

$$\vec v = \epsilon^2 \vec c . \qquad /100/$$

Из соотношения /100/ следует, что эффективная масса двухчастичной конфигурации равна:

$$\mu_{\text{эфф.}} = \frac{1}{\epsilon^4} \cdot \frac{1}{3} \sum_f \frac{\vec f^{\,2}}{\omega_f} d_f^{(0)}, \qquad /101/$$

где $d_f^{(0)}$ - значения коэффициентов d_f, вычисленные при нулевой средней скорости. Заметим, что при $|\vec\lambda| \to \infty$ эффективная масса двухчастичной конфигурации, как и следовало ожидать, сводится к сумме эффективных масс отдельных частиц. В общем случае эффективная масса,

как и средняя скорость, зависят от относительного расстояния между частицами.

5. Относительное движение частиц

Относительное движение частиц и движение фононов описывается уравнением:

$$(\epsilon^2 \langle H_2 \rangle + E(\vec\lambda) - E)\,\theta(\xi, Q) = 0. \qquad /102/$$

Энергия двухчастичной конфигурации $E(\vec\lambda)$ играет в уравнении /102/ роль потенциала взаимодействия частиц. Используя стандартные методы теории молекул, легко показать, что справедливо соотношение

$$\frac{\partial E(\vec\lambda)}{\partial \vec\xi} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial \vec\xi} \right\rangle, \qquad /103/$$

а поскольку коммутатор оператора L_α с остальными функциями ξ, входящими в оператор $\langle H_2 \rangle$, есть величина порядка ϵ^2, то в принятом приближении можно считать, что $E(\vec\lambda)$- единственная зависящая от $\vec\xi$ величина в операторе энергии относительного движения. Из выражения для оператора импульса P_f /71/ видно, что довольно сложная в общем случае структура оператора $\langle H_2 \rangle$ значительно упрощается, когда $\vec c = 0$, что соответствует относительному движению частиц при неподвижном центре инерции системы. Этот простой случай как раз и наиболее интересен при анализе относительного движения. При $\vec c = 0$ оператор $\langle H_2 \rangle$ сводится к следующему:

$$\langle H_2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_f \omega_f \overset{*}{Q}_f Q_f + \frac{1}{2} \sum_f \omega \,[\overset{*}{P}_f - i \overset{*}{T}_{f\alpha} (-i \frac{\partial}{\partial \xi^\alpha})] \qquad /104/$$

$$[P_f + i T_{f\alpha} (-i \frac{\partial}{\partial \xi^\alpha})].$$

Оператор

$$-\frac{1}{2} \sum_f \omega_f \overset{*}{T}_{f\alpha} \frac{\partial}{\partial \xi^\alpha} (T_{f\beta} \frac{\partial}{\partial \xi^\beta}) \qquad /105/$$

должен играть роль оператора кинетической энергии относительного движения. В принятом приближении оператор /105/ можно заменить на

$$-\frac{1}{2}\Sigma\omega_f \overset{*}{T}_{f\alpha} T_{f\beta}\frac{\partial^2}{\partial\xi^\alpha\partial\xi^\beta}. \qquad /106/$$

Нетрудно оценить предел квадратичной формы $\sum_f \omega_f \overset{*}{T}_{f\alpha} T_{f\beta}$ при асимптотически больших относительных расстояниях. В силу выбора матриц $M^{(i)}_{\alpha f}$ в виде /39/ матрицы $E_{\alpha f}$ и $F_{\alpha f}$ равны

$$E_{\alpha f} = 2f_\alpha u_f \cos\vec{f}\vec{\lambda}, \quad F_{\alpha f} = -2if_\alpha u_f \sin\vec{f}\vec{\lambda}, \qquad /107/$$

поэтому матрицы $S_{f\alpha}$ и $T_{f\alpha}$, связанные с $E_{\alpha f}$ и $F_{\alpha f}$ условиями ортонормировки /25/, можно взять в виде:

$$S_{f\alpha} = f_\alpha \overset{*}{v}{}^{(1)}_f \cos\vec{f}\vec{\lambda}, \quad T_{f\alpha} = if_\alpha \overset{*}{v}{}^{(2)}_f \sin\vec{f}\vec{\lambda}, \qquad /108/$$

где $v^{(i)}_f$ - функции $\vec{\lambda}$, удовлетворяющие условию $\overset{*}{v}{}^{(i)}_f = v^{(i)}_{-f}$. Условие /25/ тогда сведется к соотношениям:

$$\frac{2}{3}\sum_f \vec{f}^2 \overset{*}{v}{}^{(1)}_f u_f \cos^2\vec{f}\vec{\lambda} = 1, \quad \frac{2}{3}\sum_f \vec{f}^2 \overset{*}{v}{}^{(2)}_f u_f \sin^2\vec{f}\vec{\lambda} = 1. \qquad /109/$$

Если числа u_f достаточно быстро убывают с ростом f, то функции $v^{(i)}_f$ можно выбрать следующим образом:

$$v^{(i)}_f = u_f F^{(i)}(\vec{\lambda}), \qquad /110/$$

причем при $|\vec{\lambda}| \to \infty$ предельные значения действительных функций $F^{(i)}(\vec{\lambda})$ совпадают. Условия /109/ при асимптотически больших $|\vec{\lambda}|$ сводятся к соотношению

$$\frac{1}{3}F\Sigma\vec{f}^2|u_f|^2 = 1. \qquad /111/$$

Эффективная масса каждой из частиц определяется выражением

$$\mu_{\text{эфф.}} = \frac{1}{\epsilon^4}\cdot\frac{1}{3}\Sigma\frac{\vec{f}^2}{\omega_f}|u_f|^2, \qquad /112/$$

а квадратичная форма при производных по $\vec{\xi}$ в операторе /105/ сводится к

$$\frac{1}{2}\sum_f \omega_f T_{f\alpha} T_{f\beta} = \frac{1}{6}\delta_{\alpha\beta}F^2\sum_f \vec{f}^2\omega_f|u_f|^2. \qquad /113/$$

Частоту ω_f в суммах /122/ и /113/ можно считать слабо меняющейся функцией f и вынести за суммы, заменив ω_f на некоторую эффективную частоту ω. После этого выражение /113/ сведется к следующему:

$$\frac{1}{2}\sum_f \omega_f \overset{*}{T}_{f\alpha} T_{f\beta} = \frac{1}{4\epsilon^4}\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{\mu_{\text{эфф.}}}. \qquad /114/$$

Принимая во внимание, что величина $\epsilon\vec{\xi}$ - это половина относительного расстояния, найдем, что при асимптотически больших расстояниях приведенная масса частиц равна, как и следовало ожидать, $1/2\mu_{\text{эфф.}}$. Выражение для оператора $\langle H_2\rangle$ указывает на неприятную особенность задачи об относительном движении: даже в случае нулевой средней скорости переменные $\vec{\xi}$ и Q_f не разделяются. Физическая причина этого очевидна, поскольку эффективная масса частиц пропорциональна ϵ^{-4}, кинетическая энергия относительного движения автоматически становится величиной того же порядка, что и кинетическая энергия фононов. Поэтому задачи описания относительного движения и свойств фононного поля приходится решать совместно. С этой точки зрения понятно и усложнение гамильтониана второго порядка по ϵ при ненулевом полном импульсе системы. Выделение координат центра инерции и относительных координат было сделано так, чтобы точно учесть закон сохранения полного импульса. Явный вид операторов поля поэтому должен зависеть от состояния движения потенциальных ям, внутри которых колеблются частицы. Что это действительно так, следует из выражения коэффициентов для u_f /88/, определяющих проекционную матрицу, выделяющую независимые переменные поля с учетом движения частиц. Поскольку движение потенциальных ям не равномерно, а происходит в согласии с законом сохранения полного импульса, операторы импульса фононов испытывают преобразование /72/, зависящее от вектора средней скорости. По этой же причине преобразуются и операторы относительного импульса, и поскольку средняя скорость в двухчастичной задаче зависит от относительного расстояния, то в определение операторов L_a /75/ входит градиент средней скорости.

6. Заключение

Не представляет труда применить изложенный здесь метод к задаче двух тел, сильно взаимодействующих с полем, подобно тому как это было сделано в работе /2/ для одночастичной задачи. Изменения коснутся лишь задачи об определении одночастичных потенциальных ям, общая картина относительного движения частиц будет такой же, как в случае адиабатического взаимодействия. Это обстоятельство подчеркивает важность строгого учета точных законов сохранения в многочастичных задачах. Если в одночастичной задаче еще можно хотя бы в первом приближении пользоваться наивным преобразованием типа /7/, считая, что движение частицы в поле сводится в этом приближении к равномерному /2/, то для самого грубого описания основных свойств относительного движения прямое использование этого метода затруднительно. Причина заключается в простом и уже неоднократно подчеркнутом физическом факте - в случае неслабого взаимодействия эффективная масса частицы при неслабом взаимодействии частицы с полем такова, что кинетическая энергия относительного движения должна быть величиной того же порядка, что и кинетическая энергия осцилляторов поля. В этом случае приходится думать о смысле относительного состояния между частицамн. Преобразование координат частиц /18/, /19/, призванное сохранять явную кинематическую независимость частиц при включении взаимодействия автоматически определяет координаты центра инерции системы и вектор относительного расстояния как функцию координат поля. Требование сохранения кинематической независимости частиц необходимо для точного учета закона сохранения полного импульса и, казалось бы, явно не

связано с динамическими свойствами системы. Однако это преобразование немедленно приводит к выводу об адиабатичности относительного движения. Фактически именно эти соображения позволили построить простую итерационную схему вычисления операторов импульса фононов. Упрощения в структуре уравнений /35/, определяющих производные векторов $\vec{q}$ и $\vec{\xi}$ по переменным поля, были получены после выбора коэффициентов $M^{(i)}_{af}$ в виде /39/. Легко понять смысл этой процедуры. Преобразование операторов поля /22/ приводит к тому, что любые смещения вектора $\vec{q}$ приводят лишь к изменению фазы координат поля. Выбор $M^{(i)}_{af}$ в виде /39/ означает, что оси подпространства, на которые проектируются операторы поля, поворачиваются при изменении относительного расстояния, причем это вращение можно считать адиабатическим.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность Н.Н.Боголюбову за многочисленные и плодотворные обсуждения проблемы двух тел в теории сильной связи. Весьма полезными были дискуссии с В.Д.Кукиным, А.А.Логуновым и О.А.Хрусталевым. Пользуемся случаем выразить им свою признательность.

Литература

1. *Н.Н.Боголюбов. Укр. матем. ж., 2, 3, 1950, см. также Избранные труды, т. 2, "Наукова думка", Киев, 1970.*
2. *Е.П.Солодовникова, А.Н.Тавхелидзе, О.А.Хрусталев. ТМФ, 10, 162, 1972.*

Рукопись поступила в издательский отдел 15 января 1974 года.