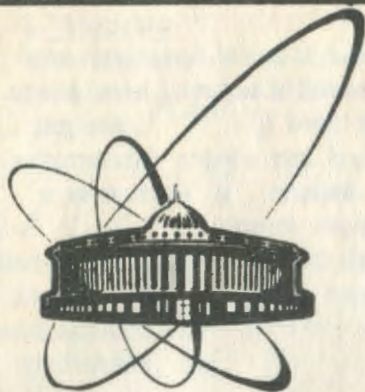


90-404



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-90-404

М. И. Широков

РАСХОДЯЩИЕСЯ ПОТЕНЦИАЛЫ
В МУЛЬТИПОЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ
ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

Направлено в "Journal of Physics A"

1990

1. Введение

Мультипольная форма квантовой электродинамики связанных зарядов предложена Пауэром и Зиенау ^{/1/} и развита в последующих работах, см., например, ^{/2-10/}. В этой форме электрические и магнитные моменты (мультиполи) атомов или молекул взаимодействуют с электрическим \vec{E} и магнитным \vec{H} полями. Главный член взаимодействия равен $e\vec{q}\cdot\vec{E}$ (\vec{q} - координата заряда). Здесь используется усовершенствованная версия формы, данная Вулли ^{/3/}. Важным свойством формы является специфическая калибровочная инвариантность атомной части полного мультипольного гамильтониана ^{/6,8/}. Это свойство здесь используется как требование, определяющее форму, см. раздел 2.

Мультипольная форма имеет вычислительные достоинства и широко используется в квантовой оптике. Но в этой работе обсуждается ее недостаток: мультипольный гамильтониан содержит расходящийся член, который обычно записывается в виде $\int d^3x |\vec{p}^{\perp}(x)|^2$, а здесь обозначается как P_{\perp} . Пауэр и Зиенау ^{/1/} заметили, что этот член (рассматриваемый как часть взаимодействия) компенсирует наиболее расходящуюся часть радиационной поправки к энергии уровня, которая возникает из-за взаимодействия $e\vec{q}\cdot\vec{E}$. Позже P_{\perp} толковалось как член "внутримолекулярной потенциальной энергии" ^{/4,10/}. Поскольку P_{\perp} бесконечно, то требуется регуляризация, чтобы придать смысл этому толкованию. Здесь это осуществлено заменой точечного электрона на протяженный.

Для обсуждения P_{\perp} достаточно рассматривать простейший случай одного связанного нерелятивистского бесспинового электрона, поскольку не возникает дополнительных трудностей в возможных обобщениях (например, на случай дираковского спинорного поля, взаимодействующего с фотонами ^{/6/}). В разделе 2 выписан гамильтониан неточечного электрона, взаимодействующего с фотонами, и дана соответствующая модификация преобразования Пауэра - Зиенау-Вулли (ПЗВ). Регуляризованный P_{\perp} имеет вид сильного потенциала конфайнмента. В разделе 3 предложено обобщение преобразования ПЗВ, ведущее к уменьшению расходимости P_{\perp} . Показано, что обобщенный мультипольный гамильтониан имеет взаимодействие, сводящееся в дипольном приближении по-прежнему к члену $e\vec{q}\cdot\vec{E}$. В разделе 4 это обобщение расширяется на случай нескольких атомов и устанавливается отсутствие междоатомных кулоновских взаимодействий, что было ранее показано в рамках обычной мультипольной формы.

2. Регуляризованный мультипольный гамильтониан

2.1. Рассмотрим сначала точечный электрон во внешнем потенциале $V(q)$, взаимодействующий с квантованным электромагнитным полем. В кулоновской калибровке он описывается гамильтонианом

$$H = (\vec{p} - e\vec{A}(\vec{q}))^2/2m + V(q) + H_{ph} + \frac{1}{8\pi} \iint d^3x d^3y \rho(\vec{x})\rho(\vec{y})/|\vec{x}-\vec{y}| \quad (1)$$

$$H_{ph} = \frac{1}{2} \int d^3x [\vec{E}_1^2(\vec{x}) + \vec{H}^2(\vec{x})] \quad \text{div } \vec{A}(\vec{x}) = 0. \quad (2)$$

Последний член в (1) описывает кулоновское самодействие, и он бесконечен для точечного электрона, когда $\rho(\vec{x}) = e\delta(\vec{x}-\vec{q})$. Для регуляризации этой и других расходимостей теории введем протяженный электрон, описываемый следующими гейзенберговскими операторами плотностей заряда и тока:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\vec{x}, t) &= e F(\vec{x}-\vec{q}(t)) \quad ; \quad \tilde{j}_j = e v_j(t) F(\vec{x}-\vec{q}(t)) \\ \text{div } \tilde{j} + \partial\tilde{\rho}/\partial t &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь \vec{q} и \vec{v} — операторы координаты и скорости электрона. Функция $F(\vec{x}) = F(|\vec{x}|)$ локализована вблизи малых x и нормирована так, что $\int d^3x \tilde{\rho}(\vec{x}, t) = e$:

$$\int d^3x F(\vec{x}) = 1. \quad (4)$$

Подстановка $\rho \rightarrow \tilde{\rho}$ превращает последний член (1) в

$$\frac{e^2}{8\pi} \iint d^3x d^3y F(\vec{q}-\vec{x}) F(\vec{y}-\vec{q})/|\vec{x}-\vec{y}| \equiv \tilde{C}. \quad (5)$$

Покажем, что гамильтониан протяженного электрона должен иметь вид

$$\tilde{H} = [\vec{p} - e\vec{A}(\vec{q})]^2/2m + V(\vec{q}) + H_{ph} + \tilde{C}. \quad (6)$$

$$\vec{A}(\vec{q}) = \int d^3z F(\vec{q}-\vec{z}) \vec{A}(\vec{z}), \quad (7)$$

т.е. в дополнение к $\rho \rightarrow \tilde{\rho}$ надо еще заменить $\vec{A}(q)$ в (1) на $\vec{A}(\vec{q})$.

Для доказательства надо вычислить $\partial\vec{A}/\partial t = i[\tilde{H}, \vec{A}] = -\vec{E}_1$ и $\partial^2\vec{A}/\partial t^2 = i[\tilde{H}, -\vec{E}_1]$, чтобы убедиться, что правая часть полученного уравнения для гейзенберговского оператора $\vec{A}(x, t)$ со-

держит ток \tilde{j} из (3):

$$\partial^2 A_j(\vec{x}, t) / \partial t^2 - \Delta A_j(\vec{x}, t) = j_j^{\perp}(\vec{x}, t), \quad j = 1, 2, 3$$

$$j_j^{\perp}(x, t) = \int d^3 y \sum_{\kappa} S_{j\kappa}^{\perp}(\vec{x} - \vec{y}) \tilde{j}_{\kappa}(y), \quad S_{j\kappa}^{\perp}(\vec{x}) \equiv S_{j\kappa}^{\perp}(\vec{x}) + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_{\kappa}} |\vec{x}|^{-1}. \quad (8)$$

Заметим, что \tilde{C} , см. (5), не зависит от q (сделай замену переменных интегрирования $\vec{x}' = \vec{q} - \vec{x}$, $\vec{y}' = \vec{q} - \vec{y}$). Поэтому \tilde{C} есть c - число и его можно опустить в (6). Но интеграл \tilde{C} нам понадобится позже.

2.2. Можно проверить, что (6) инвариантно относительно следующего калибровочного преобразования:

$$\vec{A}(\vec{x}) \rightarrow \vec{A}(\vec{x}) + \vec{\nabla} \chi(\vec{x}); \quad \vec{p} \rightarrow \vec{p} + e \vec{\nabla} \chi(\vec{q}); \quad \tilde{\chi}(\vec{q}) \equiv \int d^3 x F(\vec{q} - \vec{x}) \chi(\vec{x}).$$

Это преобразование требует следующих комментариев. (9)

а) Это есть преобразование операторов (электрона и полей), как это принято в релятивистской спинорной электродинамике. Иногда вместо $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e \vec{\nabla} \chi$ используется преобразование волновой функции $\psi(\vec{q}, \dots) \rightarrow \psi(\vec{q}, \dots) \exp(i e \tilde{\chi}(\vec{q}))$.

б) Значения \vec{x} и \vec{q} в (9) должны принадлежать некоторой ограниченной области пространства W , но не всему пространству. Дело в том, что при $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \chi$ должна сохраняться поперечность \vec{A} и поэтому мы должны иметь $\Delta \chi(\vec{x}) = 0$. Если это уравнение справедливо всюду и если гармоническая функция χ исчезает на бесконечности, то $\chi \equiv 0$. Предполагается, что W содержит область, где локализован электрон (рассматривается только локализованный электрон). Из-за этой особенности преобразование было названо квазиградиентным в [6, 8]. Пример такого преобразования обсуждался в [6], раздел 4.3.

2.3. Гамильтониан (6) имеет тот недостаток, что его атомная часть $H_A = \vec{p}^2 / 2m + V(\vec{q})$ не инвариантна относительно (9) и поэтому является нефизическим оператором. Для исправления этого недостатка вместо канонических переменных $\vec{q}, \vec{p}, \vec{A}(\vec{x}), \vec{E}_L(\vec{x})$ введем другие операторы \vec{q}', \vec{p}' , ... так, чтобы новый атомный гамильтониан $H_A'(\vec{p}', \vec{q}')$ был бы (квази) калибровочно-инвариантным. Если старые операторы \mathcal{O} и новые \mathcal{O}' связаны преобразованием $\mathcal{O}' = S^{-1} \mathcal{O} S$, то новые операторы будут иметь канонические коммутационные соотношения. Поэтому можно считать, что \vec{p}' может описывать наблюдаемый импульс электрона. Покажем, что S можно взять в виде

$$S = S(\vec{q}, \vec{A}; \vec{r}) = \exp \left[-i e \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} d\vec{e} \cdot \vec{A}(\vec{e}) \right], \quad (10)$$

где \vec{A} определено в (7). Интеграл в (10) берется по прямой линии, соединяющей точки \vec{r} и \vec{q} , см. (A.3) в Приложении. В этом разделе \vec{r} есть центр потенциала $V(\vec{q})$, (10) модифицирует преобразование ПЗВ на случай протяженного электрона, ср. /3/.

Поскольку S зависит от \vec{q} и \vec{A} , то $\vec{q}' = \vec{q}$ и $\vec{A}' = \vec{A}$. С помощью

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2} [A, [A, B]] + \dots \quad (11)$$

получаем

$$\vec{p}' = S^{-1} \vec{p} S = \vec{p} - e \vec{\nabla}_{\vec{q}} \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} d\vec{\ell} \cdot \vec{A}, \quad (12)$$

$$E'_{1m}(\vec{x}) = E_{1m}(\vec{x}) + e \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} \sum_n d\ell_n \int d\vec{z} F(\vec{\ell} - \vec{z}) S_{nm}^{\perp}(\vec{x} - \vec{x}), \quad m, n = 1, 2, 3. \quad (13)$$

Для вычисления (13) использовано соотношение

$$[A_n(\vec{z}), E_{1m}(\vec{x})] = -i S_{nm}^{\perp}(\vec{z} - \vec{x}).$$

Теперь проверим, что \vec{p}' инвариантно относительно преобразования (9):

$$\begin{aligned} p'_m &\rightarrow p_m + e \partial \tilde{x}^1 \partial q_m - e \frac{\partial}{\partial q_m} \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} \sum_n d\ell_n \int d\vec{z} F(\vec{\ell} - \vec{z}) [A_n(\vec{z}) - \partial x(\vec{z}) / \partial z_n] = \\ &= p_m - e \frac{\partial}{\partial q_m} \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} \vec{A}(\vec{\ell}) \cdot d\vec{\ell} = p'_m. \end{aligned} \quad (14)$$

Применено интегрирование по частям и соотношение

$$\int_{\vec{r}}^{\vec{q}} d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} \vec{x} = \vec{x}(\vec{q}) - \vec{x}(\vec{r}). \quad (15)$$

Используя (12), (13), можно выразить гамильтониан \tilde{H} , см. (6), через новые операторы /17/:

$$\tilde{H} = [\vec{p}' - e \vec{A}(\vec{q})]^2 / 2m + V(\vec{q}') + H'_{p\perp} + \tilde{C} - e \int_{\vec{r}}^{\vec{q}} \sum_n d\ell_n \tilde{E}'_{1n}(\vec{\ell}) + P_{\perp}. \quad (16)$$

Здесь $H'_{p\perp}$ так же зависит от \vec{E}'_{\perp} и $\vec{H}' = \vec{H}$, как $H_{p\perp}$ от \vec{E}_{\perp} и \vec{H} , см. (2);

$$\vec{A}(\vec{q}) = - \int_0^1 \alpha d\lambda (\vec{q} - \vec{r}) \times \text{rot } \vec{A}(\vec{r} + \alpha(\vec{q} - \vec{r})) \quad (17)$$

(вывод см. в /3,6/). Последний член в (16) происходит от $\frac{1}{2} \int d^3x \vec{E}_\perp^2(\vec{x})$, когда туда подставлено выражение E_\perp через E'_\perp , см. (13).

$$P_\perp = \frac{e^2}{2} \int_{\vec{r}}^{\vec{r}'} \int_{\vec{r}''}^{\vec{r}'''} \sum d\vec{\ell}_m d\vec{\ell}'_m \{ |d^3z d^3z' F(\vec{\ell}-\vec{z}) F(\vec{\ell}'-\vec{z}') S_{mn}^\perp(\vec{z}-\vec{z}') \equiv P + P_{II}. \quad (18)$$

P_{II} обозначает вклад в P_\perp от слагаемого $(-\frac{1}{4\pi}) \partial^2 |\vec{z}-\vec{z}'|^2 / \partial z_m \partial z'_m$ в выражении (8) для S^\perp .

Атомная часть (16) теперь равна $\vec{p}'^2 / 2m + V(\vec{q})$ и (квази) калибровочно-инвариантна, поскольку \vec{p}' инвариантно, см. (14).

2.4. Вычислим P_\perp . Слагаемое P_{II} легко вычисляется с помощью соотношений вида (15):

$$P_{II} = -\frac{e^2}{2\pi} \{ \int d^3z d^3z' \{ F(\vec{q}-\vec{z}) F(\vec{z}'-\vec{q}) / |\vec{z}-\vec{z}'| - F(\vec{q}-\vec{z}) F(\vec{z}'-\vec{r}) / |\vec{z}-\vec{z}'| - \\ - F(\vec{r}-\vec{z}) F(\vec{z}'-\vec{q}) / |\vec{z}-\vec{z}'| + F(\vec{r}-\vec{z}) F(\vec{z}'-\vec{r}) / |\vec{z}-\vec{z}'| \}. \quad (19)$$

Первый член в P_{II} , а также последний равны $-\tilde{C}$, см. (5). Второй равен третьему и их сумма дает в P_{II} вклад $e^2 / 4\pi |\vec{q}-\vec{r}|$, когда $F(\vec{x}) = \zeta(\vec{x})$.

Интеграл P , см. (18), определяется интегралом (18), в который вместо S^\perp подставлено $S^{(1)}(\vec{z}-\vec{z}')$. P расходится, если $F(\vec{x}) = \zeta(\vec{x})$. Выберем $F(\vec{x})$ в виде

$$F(\vec{x}) = (2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i\vec{k}\vec{x}} \mu^2 / (k^2 + \mu^2) = \mu^2 e^{-\mu |\vec{x}|} / 4\pi |\vec{x}|. \quad (20)$$

Вычисления дают

$$\tilde{C} = e^2 \mu / 8\pi; \quad \int d^3z F(\vec{\ell}-\vec{z}) F(\vec{z}-\vec{z}') = \mu^2 e^{-\mu |\vec{\ell}-\vec{z}'|} / 8\pi \quad (21)$$

$$P = \frac{e^2}{2} |\vec{q}-\vec{r}|^2 \int_0^1 dx \int_0^1 dx' \frac{\mu^3}{8\pi} e^{-\mu |q-r| |x-x'|} = \\ = \frac{e^2 \mu}{8\pi} [e^{-\mu |\vec{q}-\vec{r}|} - 1 + \mu |\vec{q}-\vec{r}|]. \quad (22)$$

Использовано (A.3) из Приложения. При $\mu |\vec{q}-\vec{r}| \gg 1$ имеем $P \approx e^2 \mu^2 |\vec{q}-\vec{r}| / 8\pi$. Таким образом, P_\perp есть некий потенциал того же характера, что и $V(q)$, см. (16).

Рассмотрим случай водородного атома, когда $V(\vec{q}) = -e^2 / 4\pi |\vec{q}-\vec{r}|$. Тогда сумма $P_\perp + V(\vec{q})$ не содержит $V(\vec{q})$, поскольку $P_{II} + V = 0$ с точностью до $\mathcal{O}(1)$ -членов (предполагается, что $|\vec{q}-\vec{r}| > \mu^{-1}$). Вместо V мы имеем в (16) новый потенциал для электрона: $P_\perp + V = P \approx \mu^2 e^2 |\vec{q}-\vec{r}| / 8\pi$. "Атом" с таким потенциалом не имеет ничего общего с водородным. Потенциал $e^2 \mu^2 |\vec{q}-\vec{r}|$ известен как

один из потенциалов конфинмента, употребляющийся для связывания кварка и антикварка в мезон, см., например, /1/. Размер такого атома пропорционален $[m\mu^2]^{-1/3}$, а расстояния между его уровнями $\sim [M^2/m]^{1/3}$. В пределе $\mu \rightarrow \infty$ имеем точечный атом с бесконечной разностью энергий между основным и возбужденными состояниями.

2.5. Заметим, что (10) не является единственной возможной модификацией преобразования ПЗВ. Вместо (10) можно рассмотреть

$$S = \exp[-i\int d^4x F(\vec{q}-\vec{x}) \int_{\vec{r}} d\vec{r} \vec{A}(\vec{r})]. \quad (23)$$

Тогда новый импульс $\vec{p}' = S^{-1} \vec{p} S$ тоже (квази) калибровочно-инвариантен. Существует много других выражений для S с таким свойством.

Подчеркнем, что в случае (23) P_{\perp} оказывается расходящимся даже при конечных μ , см. Приложение. Поэтому обсуждаемая регуляризация сама по себе недостаточна для придания смысла расходимости P_{\perp} . Преобразование ПЗВ вносит в теорию дополнительную расходимость по сравнению с кулоновской калибровкой.

2.6. Пауэр и Зиенау /1/ поступили с трудностью расходящегося P_{\perp} следующим образом. Несмотря на то, что P_{\perp} имеет тот же характер, что и V , и сильнее, чем V , они включали P_{\perp} в H'_{in} , оставив V в H'_A : $H'_A = \vec{p}'^2/2m + V$, $H = H'_A + H'_{pA} + H'_{in}$. Они рассмотрели наиболее расходящуюся часть радиационной поправки ΔE_n к энергии E_n уровня in , происходящую от $e\vec{q} \cdot \vec{E}$ во втором порядке теории возмущений. Оказалось, что эта часть компенсируется вкладом в E_n от P_{\perp} в первом порядке. Вулли (/5/, раздел VI B) заметил, что Пауэр и Зиенау произвели вычисления в дипольном приближении, которое здесь необоснованно. Он использовал $e \int_0^q d\vec{r} \vec{E}'_1(\vec{r})$ вместо $e\vec{q} \cdot \vec{E}'_1(0)$ и выдвинул из ΔE_n часть (назовем ее ΔW_n), равную $(-1) \langle m | P_{\perp} | m \rangle$. Она компенсируется вкладом от P_{\perp} .

Заметим, что вывод Вулли формально применим и в случае "атома", описываемого гамильтонианом $H'_A = \vec{p}'^2/2m + V + P_{\perp}$ с регуляризованным P_{\perp} (используется только свойство замкнутости $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ собственных функций $|n\rangle$ атомного гамильтониана).

Можно заключить, что в мультипольной форме имеются расходящиеся радиационные поправки к исходному связывающему потенциалу, компенсирующиеся членом P_{\perp} . Радикальным решением проблемы было бы ее уничтожение путем нахождения такого преобразования S' , которое дало бы конечное и даже малое P_{\perp} вместе с калибровочно-

-инвариантной атомной частью H'_A . Следующий раздел можно рассматривать как шаг в этом направлении.

3. Обобщенное преобразование Пауэра - Зигнау- Вулли

3.1. Рассмотрим преобразование, генерируемое оператором

$$S = \exp[-ie \int d^3r M(\vec{r}) \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \int_{\vec{r}}^{\vec{x}} d\vec{\ell} \cdot \vec{A}(\vec{\ell})] \quad (24)$$

$$\int d^3r M(\vec{r}) = 1, \quad \vec{r} \in R. \quad (25)$$

Функция M осуществляет усреднение по некоторой области R значений \vec{r} и регуляризует преобразование (23). Следует предположить, что функция χ из (9) определена для всех точек R (например, $R \in W$, см. замечание (б) к (9)). Тогда можно показать, что новый электронный импульс \vec{p}'

$$\vec{p}' = S^{-1} \vec{p} S = \vec{p} - e \int d^3r M(\vec{r}) \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \vec{\nabla}_x \int_{\vec{r}}^{\vec{x}} d\vec{\ell} \cdot \vec{A}(\vec{\ell}) \quad (26)$$

является калибровочно-инвариантным. Доказательство аналогично (14) и использует следующие соотношения:

$$\begin{aligned} & \int d^3r M(\vec{r}) \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \vec{\nabla}_x \int_{\vec{r}}^{\vec{x}} \vec{\nabla}_{\ell} \chi(\vec{\ell}) d\vec{\ell} = \\ & = \int d^3r M(\vec{r}) \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \vec{\nabla}_x [\chi(\vec{x}) - \chi(\vec{r})] = \\ & = \vec{\nabla}_q \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \chi(\vec{x}). \end{aligned}$$

Так же, как в разделе 2.3, получаем

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & [\vec{p}' - e \vec{A}(\vec{q})]^2 / 2m + V(q) + H'_A - \\ & - e \int d^3r M(\vec{r}) \int d^3x F(\vec{q}-\vec{x}) \int_{\vec{r}}^{\vec{x}} d\vec{\ell} \cdot \vec{E}'_1(\vec{\ell}) + P_1 \quad (27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_1 = & \frac{e^2}{2} \iint d^3r d^3r' M(\vec{r}) M(\vec{r}') \iint d^3x d^3x' F(\vec{q}-\vec{x}) F(\vec{q}-\vec{x}') \cdot \\ & \cdot \int_{\vec{r}}^{\vec{x}} \int_{\vec{r}'}^{\vec{x}'} \sum_{m,n} dt_m dt'_n \delta_{mn}^{\perp}(\vec{\ell}-\vec{\ell}') \\ & \vec{A}(\vec{q}) \text{ из (27) определяется соответствующим обобщением (17)}. \quad (28) \end{aligned}$$

3.2. Для вычисления P_1 положим

$$M(\vec{r}) = M(r) = \delta(r-R) / 4\pi R^2. \quad (29)$$

Такое M усредняет по поверхности сферы радиуса R . Её центр совпадает с центром $V(q)$ и принимается в качестве начала координат. Предполагается, что электрон эффективно локализован внутри сферы. Верхний предел радиуса R обсуждается далее в разделе 3.3.

Интеграл (28) может быть представлен суммой $P + P_{II}$, аналогично (I.8). Для вычисления P_{II} используем

$$\begin{aligned} & \sum_{m,n} \int_{\bar{r}}^{\bar{r}'} d\bar{\ell}_m \int_{\bar{r}'}^{\bar{r}} d\bar{\ell}_n' \partial^2 |\bar{r} - \bar{\ell}'|^{-1} / \partial \bar{\ell}_m \partial \bar{\ell}_n' = \\ & = (|\bar{r} - \bar{r}'|)^{-1} - |\bar{x} - \bar{r}'|^{-1} - |\bar{r} - \bar{x}'|^{-1} + |\bar{x} - \bar{x}'|^{-1}. \end{aligned}$$

Далее с помощью (4), (5), (25), (29) получаем

$$\begin{aligned} P_{II} = & -\frac{e^2}{2\pi} \iint d^3r d^3r' M(r) M(r') / |\bar{r} - r'| + \\ & + \frac{e^2}{4\pi} \left[d^3x F(\bar{q} - \bar{x}) [R+x] - |R-x| \right] / 2Rx - \tilde{C}. \end{aligned} \quad (30)$$

Второй член в правой части (30) происходит от интеграла

$$\begin{aligned} (4\pi)^{-1} \int d\Omega_r |\bar{x} - \bar{r}|^{-1} &= (4\pi)^{-1} \int d\alpha \int d\beta_r [x^2 + R^2 - 2Rx \cos \beta_r]^{-1/2} = \\ &= [|R+x] - |R-x|] / 2Rx. \end{aligned} \quad (31)$$

Этот интеграл равен R^{-1} при $x < R$ и x^{-1} при $x > R$. Пусть размер протяженного электрона мал. Тогда можно считать, что $x < R$, если $q < R$. Поэтому при $q < R$ второй член в (30) равен c -числу $e^2/4\pi R$. При $q > R$ он пропорционален q^{-1} . Первый член в (30) есть c -число, как и последний, $-\tilde{C}$. Итак, P_{II} равно c -числу при $q < R$ и не аннулирует кулоновский потенциал $V(q) = -e^2/4\pi q$, см. раздел 2.4.

Вычисление интеграла P гораздо трудней и было произведено только для $q \ll R$ и только с точностью до членов порядка q^2/R^2 , см. Приложение. Приводим конечный результат для $P_{\perp} = P + P_{II}$:

$$P_{\perp} \approx \tilde{C} \frac{\pi^2}{12} \cdot \frac{q^2}{R^2} + c\text{-число}. \quad (32)$$

Значение \tilde{C} выписано в (21). Сумма $P_{\perp} + V'$ всех потенциалоподобных членов в гамильтониане (27) теперь равна

$V(\vec{q}) + \pi^2 \tilde{C} q^2 / 12 R^2$ при $q \ll R$. Поскольку $\tilde{C} \sim \mu$, то это выражение раскоидится только линейно при $\mu \rightarrow \infty$ по сравнению с квадратичной раскоидимостью $P_{\perp} + V$ в разделе 2.4. Первоначальный связывающий потенциал V остается в (27), но "атом", описываемый гамильтонианом

$$(\vec{p}')^2 / 2m + V(\vec{q}) + \pi e^2 \mu q^2 / 96 R^2,$$

имеет те же неприемлемые качественные свойства, что и "атом", описанный в конце раздела 2.4.

3.3. Покажем, что предпоследний член в гамильтониане (27) равен $e \vec{q} \cdot \vec{E}'_{\perp}(0)$ в дипольном приближении. Положим, что длины волн фотонов, испускаемых атомом, много больше радиуса R . Это условие накладывает ограничение на верхнее значение R : R не должно существенно превосходить размер области локализации электрона. Если

$q < R$, то и $|\vec{r}'| < R$ и в подынтегральном выражении предпоследнего члена можно заменить $\vec{E}'_{\perp}(\vec{r}')$ на $\vec{E}'_{\perp}(0)$ и тогда

$$e \int d^3 r M(r) \int d^3 x F(\vec{q} - \vec{x}) \int_{\vec{r}'} \vec{d} \vec{E}'_{\perp}(\vec{r}') \cong \\ \cong e \int d^3 r M(r) (\vec{q} - \vec{r}) \cdot \vec{E}'_{\perp}(0) = e \vec{q} \cdot \vec{E}'_{\perp}(0). \quad (33)$$

Размер электрона μ^{-1} предположен малым, так что $\vec{q} \cong \vec{x}$ и $\int d^3 r M(r) \vec{r} = 0$ из-за сферической симметрии M .

Таким образом, обобщенный мультипольный гамильтониан ведет к тем же результатам, что и обычный ПЗВ гамильтониан для процессов, которые можно рассматривать в дипольном приближении.

4. Обобщенное преобразование ПЗВ для нескольких атомов

В случае нескольких атомов мультипольный гамильтониан не содержит кулоновских взаимодействий между электронами разных атомов, а также между электроном i -го атома и ядром j -го, $i \neq j$, см. /3,9,10/. Покажем, что таким же свойством обладает в этом случае обобщенный мультипольный гамильтониан предыдущего раздела.

Чтобы избежать громоздких выражений, положим, что каждый атом имеет только один электрон. Тогда в кулоновской калибровке

$$\tilde{H} = \sum_{j=1}^N [\vec{p}_j - e \vec{A}(\vec{q}_j)]^2 / 2m + \sum_{i,j} V_{ij}(\vec{q}_i - \vec{q}_j) + H_{PA} + \\ + \frac{e^2}{8\pi} \sum_{i,j} \int \int d^3 x d^3 y F(\vec{q}_i - \vec{x}) F(\vec{q}_j - \vec{y}) / |\vec{x} - \vec{y}|. \quad (34)$$

Здесь \vec{q}_j есть координата центра j -го атома. Пусть

$$S = \exp[-ie \sum_{j=1}^N \int d^3 r_j M(\vec{r}_j - \vec{a}_j)] \int d^3 x_j F(\vec{q}_j - \vec{x}_j) \int_{\vec{r}_j}^{\vec{y}_j} d\vec{\epsilon} \vec{A}(\vec{\epsilon}). \quad (35)$$

Для каждого атома введена своя сфера радиуса R . Выражая \vec{H} через новые канонические операторы $\vec{q}_j = S^{-1} \vec{q}_j S$ и т.д., получаем

$$\begin{aligned} \vec{H} = & \sum_j [P_{\perp j}^2 - e \vec{A}(\vec{q}_j)]^2 / 2m - e \sum_j \int d^3 r_j M(\vec{r}_j - \vec{a}_j) \int d^3 x_j F(\vec{q}_j - \vec{x}_j) \\ & \int_{\vec{r}_j}^{\vec{y}_j} d\vec{\epsilon} \vec{E}_\perp(\vec{\epsilon}) + H_{ph} + \sum_{i,j} (P_{\perp i})_{ij} + \sum_j v_{ji}(\vec{q}_j - \vec{a}_j) + \\ & + \sum_{i,j} v_{ij}(\vec{q}_i - \vec{a}_i) + \sum_j \vec{C}_j + \frac{e^2}{8\pi} \sum_{i,j} \iint d^3 x_i d^3 y_j \frac{F(\vec{q}_i - \vec{x}_i) F(\vec{q}_j - \vec{y}_j)}{|\vec{x}_i - \vec{y}_j|}, \end{aligned} \quad (36)$$

$$(P_{\perp i})_{ij} = \frac{e^2}{2} \iint d^3 r_i d^3 r_j M(\vec{r}_i - \vec{a}_i) M(\vec{r}_j - \vec{a}_j) \iint d^3 x_i d^3 x_j F(\vec{q}_i - \vec{x}_i) F(\vec{q}_j - \vec{x}_j) \int_{\vec{x}_i}^{\vec{r}_i} \int_{\vec{x}_j}^{\vec{r}_j} \sum_{m,n} d\vec{\epsilon}_{im} d\vec{\epsilon}_{jn} S_{mn}^{\perp}(\vec{\epsilon}_i - \vec{\epsilon}_j). \quad (37)$$

Члены $(P_{\perp i})_{ij}$ были вычислены в разделе 3. Рассмотрим член $(P_{\perp i})_{ij}$ при $i \neq j$. Представим его в виде суммы $P_{ij} + (P_{ii})_{ij}$; как прежде, P_{ij} дается выражением (37), где вместо S_{mn}^{\perp} подставлено $S_{mn}^{\perp}(\vec{\epsilon}_i - \vec{\epsilon}_j)$, при этом $\vec{\epsilon}_i$ принадлежит i -й сфере, а $\vec{\epsilon}_j$ - j -й сфере. Пусть атомы i и j удалены друг от друга, так что i -я и j -я сферы не пересекаются. Пренебрегая вероятностью нахождения i -го электрона в j -й сфере, мы получаем $P_{ij} = 0$, поскольку аргумент $S(\vec{\epsilon}_i - \vec{\epsilon}_j)$ не может обратиться в нуль. Интегралы $(P_{ii})_{ij}$ вычисляются так же, как в разделе 3.2. Однако интеграл во втором члене (30), происходящий от

$$\int d^3 r_i M(\vec{r}_i - \vec{a}_i) / |\vec{x}_j - \vec{r}_i| = \int d^3 r_i^* M(\vec{r}_i^*) / |\vec{x}_j - \vec{a}_i - \vec{r}_i^*|,$$

теперь равняется $|\vec{x}_j - \vec{a}_i|^{-1}$, поскольку $|\vec{x}_j - \vec{a}_i| > R$, см. (31). Поэтому

$$\begin{aligned} (P_{ii})_{ij} = & \frac{-e^2}{8\pi} \iint d^3 r_i d^3 r_j M(\vec{r}_i - \vec{a}_i) M(\vec{r}_j - \vec{a}_j) / |\vec{r}_i - \vec{r}_j| + \\ & + \frac{e^2}{4\pi} \int d^3 x_j F(\vec{q}_j - \vec{x}_j) / |\vec{x}_j - \vec{a}_i| - \end{aligned} \quad (38)$$

$$-\frac{e^2}{2i} \left| \left| d^3x' d^3y' F(\vec{q}, -x') F(\vec{q}, -y') / (x'-y') \right| \right.$$

Второй член в (38) аннулирует кулоновский потенциал $V_{ij}(\vec{q}, -\vec{r}_i) = -e^2/4\pi |\vec{q}, -\vec{r}_i|$, если электроны точечные, а заряды ядер равны единичному (другими словами, если наши одноэлектронные атомы нейтральные). Третий член в (38) аннулирует кулоновское взаимодействие i -го и j -го электронов, см. последний член (36). Таким образом, в полученном формализме атом может изменить состояние другого атома только посредством обмена фотоном.

5. Заключение

Регуляризация теории, введенная в разделе I.1, требует соответствующей модификации обычного преобразования ПЗВ. Возможны разные модификации, все сводящиеся к обычному преобразованию при снятии регуляризации. Модификация, рассмотренная в разделе 2.3, приводит к исчезновению из мультипольного гамильтониана первоначального кулоновского связывающего потенциала. Вместо него появляется сильный потенциал конфайнмента. Он квадратично расходится при снятии регуляризации. В случае другой модификации, см. раздел 2.5, расходимость P_1 не устраняется выбранной регуляризацией.

Такая изменчивость расходимости P_1 подсказывает, что заслуживает внимания поиск измененного преобразования ПЗВ, ведущего к уменьшению члена P_1 . Как шаг в этом направлении, в разделе 3 предложена обобщенная мультипольная форма. В ней расходимость P_1 уменьшается до линейной, при этом взаимодействии с фотонами в дипольном приближении представляется тем же членом $e \vec{y} \vec{E}$.

Приложение А

Изложим вычисление интеграла P , определенного соотношением (28), где \int^+ заменено на \int . Запишем (28) в виде

$$P = \frac{e^2}{2} \left\{ \int d^3x d^3x' F(\vec{q}-\vec{x}) F(\vec{q}-\vec{x}') I(\vec{x}, \vec{x}') \right\} \quad (\text{A.1})$$

$$I(\vec{x}, \vec{x}') = \iint d^3r d^3r' M(\vec{r}) M(\vec{r}') \int_{\vec{r}}^{\vec{r}'} \int_{\vec{r}'}^{\vec{r}} d\vec{e} d\vec{e}' S^{-1}(\vec{e}-\vec{e}') \quad (\text{A.2})$$

$$\vec{e} = \vec{x} + \alpha(\vec{r}-\vec{x}), \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (\text{A.3})$$

Пусть $\alpha = r'/r$, $0 \leq r' \leq r$, так что

$$\vec{\bar{e}} = \bar{x} + (\bar{r} - \bar{x})\rho/r = \bar{x} + \bar{x}'\gamma/r; \quad d\vec{\bar{e}} = (\bar{r} - \bar{x})d\alpha = (\bar{r} - \bar{x})\gamma/r d\psi \quad (A.4)$$

Здесь введены новые переменные интегрирования $\bar{\rho} = \rho, \bar{\psi} = \psi$, где $\bar{\psi}_r$ и ψ_r - сферические углы \bar{r} . В случае $M(\bar{r}) = M(r)$ имеем

$$I(\bar{x}, \bar{x}') = \int r^2 dr \int r'^2 dr' M(r) M(r') I(\bar{x}, \bar{x}'; r, r'), \quad (A.5)$$

$$I(\bar{x}, \bar{x}'; r, r') = \int_r \frac{d^3 \bar{\rho}}{\rho^3} \int_{r'} \frac{d^3 \bar{\rho}'}{(\rho')^3} (\bar{r} - \bar{x})_{\bar{\rho}} (\bar{r}' - \bar{x}')_{\bar{\rho}'} S^{11}(\bar{e}(\bar{\rho}) - \bar{e}'(\bar{\rho}')), \quad (A.6)$$

где $\bar{e}(\bar{\rho})$ дается соотношением (A.4) и интегрирование по $d^3 \bar{\rho}$ производится по шару радиуса r . Чтобы "проинтегрировать" $S^{11}(\bar{e} - \bar{e}')$ -функцию, введем вместо $\bar{\rho}, \bar{\rho}'$ переменные интегрирования \bar{e}, \bar{e}' , которые связаны с $\bar{\rho}, \bar{\rho}'$ соотношением (A.4). Подчеркнем, что теперь интегрирование по \bar{e}, \bar{e}' производится по трехмерным областям, а не по линиям, как в (A.2). Областью интегрирования по \bar{e} является тот же шар, что и для $\bar{\rho}$, если $x < r$.

$$I(\bar{x}, \bar{x}'; r, r') = \int d^3 \bar{e} [\rho(\bar{e})]^{-3} \mathcal{D}(\bar{\psi})/\mathcal{D}(\bar{e}) \int d^3 \bar{e}' [\rho'(\bar{e}')]^{-3} \mathcal{D}(\bar{\psi}')/\mathcal{D}(\bar{e}') \cdot (\bar{e} - \bar{x})(\bar{e}' - \bar{x}') S^3(\bar{e} - \bar{e}'). \quad (A.7)$$

Якобиан $\mathcal{D}(\bar{\psi})/\mathcal{D}(\bar{e})$ вычисляется с помощью соотношения $\bar{\rho} = \bar{e} - \bar{x} + \bar{x}\gamma(\bar{e})/r$, см. (A.4), где $\gamma(\bar{e})$ равно при $x < r$

$$\rho(\bar{e}) = (1 - \frac{x^2}{r^2})^{-1/2} \{ (\bar{e} - \bar{x}) \cdot \bar{x}/r + \sqrt{(\bar{e} - \bar{x})^2 (1 - \frac{x^2}{r^2}) + [(\bar{e} - \bar{x}) \cdot \bar{x}]^2 / r^2} \}. \quad (A.8)$$

Обозначая через $v^{-1}(\bar{e})$ корень в (A.8), имеем

$$\mathcal{D}(\bar{\rho})/\mathcal{D}(\bar{e}) = \rho \left[\rho (1 - \frac{x^2}{r^2}) - (\bar{e} - \bar{x}) \cdot \bar{x}/r \right]^{-1} = \rho / v^{-1}(\bar{e}), \quad (A.9)$$

$$I(\bar{x}, \bar{x}'; r, r') = \int d^3 \bar{e} (\bar{e} - \bar{x}) \cdot (\bar{e}' - \bar{x}') / \rho^2(\bar{e}) v^{-1}(\bar{e}) \rho'^2(\bar{e}') v^{-1}(\bar{e}'). \quad (A.10)$$

Интегрирование по \bar{e} ведется по шару радиуса $\min(r, r')$. Функции $\rho(\bar{e})$ и $v^{-1}(\bar{e})$ даются соотношением (A.8), где \bar{x} и \bar{r} заменены на \bar{x}', \bar{r}' .

Заметим, что функции $\rho(\bar{\ell})$, $v^{-1}(\bar{\ell})$ и $v'(\bar{\ell})$, $v^{-1}(\bar{\ell})$ в (A.10) исчезают в точках $\bar{\ell} = \bar{x}$ и $\bar{\ell} = \bar{x}'$ соответственно. При $\bar{x} = \bar{x}'$ интеграл (A.10) расходится как $\int d\xi/\xi^2$ при малых ξ . Эта расходимость имеет место при произвольных значениях r и r' и поэтому последующее интегрирование $I(\bar{x}, \bar{x}', r, r')$ по r и r' в (A.5) не устраняет эту расходимость: $I(\bar{x}, \bar{x}')$ тоже расходится при $\bar{x} = \bar{x}'$. Интеграл P в разделе 2.5 может быть представлен соотношением (A.2), если в (A.2) сделать замены $\bar{x} \rightarrow \bar{r}$, $\bar{x}' \rightarrow \bar{r}'$, $\bar{r} \rightarrow \bar{x}$, $\bar{r}' \rightarrow \bar{x}'$, $M \rightarrow F$. Полученное выражение $I(\bar{r}, \bar{r}')$ имеет только что описанную расходимость типа $\int d\xi/\xi^2$, которую $I(\bar{x}, \bar{x}')$ имеет при $\bar{x} = \bar{x}'$.

Далее $I(\bar{x}, \bar{x}')$, см. (A.2), вычисляется при $M(\bar{r}) = \delta(r-R)/4\pi R^2$. В этом случае $I(\bar{x}, \bar{x}')$ равно $(4\pi)^{-2} I(\bar{x}, \bar{x}', R, R)$, см. (A.10). Рассмотрим только случай $x, x' \ll R$, когда можно разложить все подынтегральные функции в (A.10) по степеням x/R , x'/R . Например,

$$\begin{aligned} v^{-1}(\bar{\ell}) &= |\bar{\ell} - \bar{x}| \left\{ 1 - \frac{x^2}{R^2} + [(\bar{\ell} - \bar{x}) \cdot \bar{x}]^2 / R^2 + |\bar{\ell} - \bar{x}|^2 \right\}^{-1/2} = \\ &= |\bar{\ell} - \bar{x}| \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{x^2}{R^2} + \frac{1}{2} [(\bar{\ell} - \bar{x}) \cdot \bar{x}]^2 / R^2 + |\bar{\ell} - \bar{x}|^2 + \dots \right\}. \end{aligned}$$

В нулевом приближении $I(\bar{x}, \bar{x}') = I_0(\bar{x}, \bar{x}')$, где

$$I_0(\bar{x}, \bar{x}') = (4\pi)^{-2} \int_{\mathcal{R}} d^3\ell (\bar{\ell} - \bar{x}) \cdot (\bar{\ell} - \bar{x}') / |\bar{\ell} - \bar{x}|^3 |\bar{\ell} - \bar{x}'|^2. \quad (\text{A.11})$$

Далее описывается способ вычисления (A.11), пригодный для нахождения высших приближений. Представим I_0 как разность: интеграл по всему бесконечному объему минус интеграл по внешности шара R . В первом интеграле вводим переменные интегрирования $\bar{\eta} = \bar{\ell} - \bar{x}$ и затем используем табличные интегралы. Получаем

$$(4\pi)^{-2} \int d^3\eta \bar{\eta} \cdot (\bar{\eta} + \bar{x} - \bar{x}') / \eta^3 \cdot |\bar{\eta} + \bar{x} - \bar{x}'|^3 = 1/4\pi |\bar{x} - \bar{x}'|. \quad (\text{A.12})$$

Во втором интеграле имеем $\ell \geq R$ и поэтому в подынтегральном выражении нет сингулярностей и его можно разложить по степеням x/ℓ , x'/ℓ . Главный член разложения дает

$$(4\pi)^{-2} \int_{\mathcal{R}} d^3\ell \int d\Omega_{\ell} \ell^2 / \ell^6 = (4\pi R)^{-1}.$$

Привожу результат громоздких вычислений, учитывающих члены вплоть до x^2/R^2 , x'^2/R^2 :

$$I(\bar{x}, \bar{x}') \approx \frac{1}{4\pi|\bar{x}-\bar{x}'|} - \frac{1}{4\pi R} + \frac{\pi}{16R^2} \frac{[(\bar{x}-\bar{x}') \cdot \bar{x}][(\bar{x}-\bar{x}') \cdot \bar{x}']}{|\bar{x}-\bar{x}'|^3}. \quad (\text{A.13})$$

Далее надо вычислить \tilde{P} , см. (A.I). Первый член в (A.13) дает в P вклад, равный \tilde{C} , см. (5), второй дает $-c^2/4\pi R$ (используется (4)). Покажем, что вклад в P от третьего члена может быть выражен через интеграл \tilde{C} . После замены $\vec{q}-\bar{x}=\vec{y}$, $\vec{q}-\bar{x}'=\vec{y}'$ этот вклад представляется интегралом

$$\frac{\pi c^2}{32R^2} \iint d^3y d^3y' F(\vec{y}) \frac{[(\vec{y}-\vec{y}')(\vec{q}-\vec{y})][(\vec{y}-\vec{y}')(\vec{q}-\vec{y}')] }{|\vec{y}-\vec{y}'|^3} F(\vec{y}'). \quad (\text{A.14})$$

Далее используется свойство $F(\vec{y}) = F(\vec{y})$. Оно означает, что $F(\vec{y})$ не изменится, когда изменяется знак \vec{y} (или знак любой компоненты \vec{y}) или \vec{y} вращается, например, $y_2 \rightarrow -y_2$, $y_2 \rightarrow y_1$, $y_3 \rightarrow y_1$. В результате (A.14) оказывается равным плюс c - число. Окончательно имеем

$$P = q^2 \pi^2 \tilde{C} / 12R^2 + c \text{-число}. \quad (\text{A.15})$$

Литература

1. Power E.A., Zienau S. Phil. Trans Roy.Soc. London, 1959, A 251, 427.
2. Power E.A. Introductory Quantum Electrodynamics, Longmans, London, 1964.
3. Woolley R.G. Proc. Roy. Soc. London 1971 A321, 557.
4. Babiker M. et al. Proc. Roy Soc. London. 1974 A338, 235
5. Woolley R.G. Adv. Chem. Phys. 1975 33, 153.
6. Shirokov M.I. J.Phys. A. Math. Gen 1980, 13, 2067.
7. Healy W.P. Phys. Rev. 1980 A22, 2891.
8. Широков М.И. ЖЭТФ 1981 81, 1210.
9. Healy W.P. Non-relativistic Quantum Electrodynamics, Academic Press, London 1982, ch.7.
10. Power E.A., Thirunamachandran T. Phys. Rev. 1983, A28, 2649
11. Gunion J.E., Willey R.S. Phys. Rev., 1975 D12, 174.

Рукопись поступила в издательский отдел

11 июня 1990 года.