

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Трансляционная инвариантность и проблема биполярона

В.Д. Лахно

В работе подробно анализируются различия между трансляционно-инвариантными теориями биполярона и теориями с нарушенной симметрией. Показано, что каноническое преобразование Боголюбова–Тябликова дает регулярный способ введения коллективных координат для двух частиц в квантовом поле и в случае биполярона приводит к взаимодействию между электронами в фононном поле, зависящему только от разности координат электронов. Приводятся результаты уточненного решения нелинейных дифференциальных уравнений для биполярона. Показано, что численное решение биполяронных уравнений дает более низкие значения полной энергии биполярона, чем известные вариационные расчеты.

PACS number: 71.38.+i

Содержание

1. Введение (465).
 2. Физические основания для введения коллективных координат в проблеме биполярона (466).
 3. Введение коллективных координат в теории биполярона (467).
 4. Численные расчеты (468).
 5. Различные варианты трансляционно-инвариантных теорий (468).
- Список литературы (469).

1. Введение

Одним из основных положений квантовой теории поля является утверждение, что взаимодействие между частицами обусловлено обменом квантами поля. Для двух частиц в однородной и изотропной среде это взаимодействие может зависеть только от разности координат этих частиц. Вопрос о природе взаимодействия между частицами, находящимися на расстоянии друг от друга, всегда привлекал внимание исследователей. Достаточно вспомнить долгие споры о дальнедействующем или близкодействующем характере воздействия тел друг на друга. В механике Ньютона взаимное действие тел друг на друга характеризуется силой. Согласно третьему закону Ньютона, силы, действующие на обе частицы, равны и противоположны, т.е.

$$\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_1} = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_2}, \quad (1)$$

где $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — векторы координат обеих частиц, $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — потенциальная энергия взаимодействия частиц. Соотношение (1) можно получить исходя из фундаментального свойства — трансляционной инвариантности рассматриваемой системы. Действительно, энергия взаимодействия $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в однородной и изотропной среде не меняется, если мы одновременно сместим обе частицы на расстояние $\mathbf{a}$:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \mathbf{r}_2 + \mathbf{a}). \quad (2)$$

Поскольку соотношение (1) выполняется для любого смещения $\mathbf{a}$, равенство (2) выполняется только, если

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (3)$$

Таким образом, третий закон Ньютона является следствием однородности и изотропности пространства. В классической механике, однако, такая формулировка третьего закона обычно не используется, поскольку Ньютон, постулируя третий закон, имел в виду контактное взаимодействие тел, а не взаимодействие через поле.

Утверждение, что взаимодействие двух частиц зависит только от разности координат является общим и лежит в основе современной теории взаимодействующих частиц. В частности, в работе [1] было получено, что взаимодействие между электронами в фононном поле зависит только от разности координат двух электронов. Причем этот результат справедлив для любой величины константы электрон-фононной связи. Это, однако, находится в противоречии с известными результатами теории биполярона в пределе сильной связи.

Напомним, что биполярон представляет собой два электрона, связанных друг с другом благодаря сильному взаимодействию со средой. В полярных кристаллах электрон взаимодействует с фононным полем. Таким образом, биполярон в полярных кристаллах можно рассматривать как два связанных полярона. В модели

В.Д. Лахно. Институт математических проблем биологии РАН,
142292 Пущино, Московская обл., Россия
Тел. (095) 923-35-58
Факс (095) 938-19-14
E-mail: com@imb.serpukhov.su

Статья поступила 30 июля 1997 г.,
после доработки 27 января 1998 г.

биполярона, впервые предложенной Пекаром, считалось, что поляризация решетки является статической, она создает потенциал, связывающий электроны с противоположными спинами, а электроны своим электрическим полем поддерживают поляризацию, т.е. возникающее состояние является самосогласованным, а симметрия всей системы оказывается спонтанно нарушенной. Впоследствии термин "биполарон" приобрел более широкий смысл и применяется к электронам, взаимодействующим с любыми фононами, магнонами и другими квазичастицами.

Основной целью данной работы является более подробное обсуждение физической картины, возникающей при описании двух частиц в квантовом поле и математического подхода, используемого для описания взаимодействия частиц в случае их сильного взаимодействия с полем. Поскольку рассматриваемый ниже подход не зависит от особенностей взаимодействия двух частиц, его можно использовать для различных случаев взаимодействия частиц с квантовым полем.

Обсуждаемые вопросы не являются новыми. Впервые они возникли при попытке построить трансляционно-инвариантную теорию для одной частицы, сильно взаимодействующей с квантовым полем. Как будет показано ниже, даже в этом простейшем случае в настоящее время отсутствует единая точка зрения. Можно надеяться, что проводимый ниже анализ поможет лучше понять принципиальные отличия трансляционно-инвариантных теорий от теорий, в которых такая симметрия нарушена.

2. Физические основания для введения коллективных координат в проблеме биполярона

В случае полярона электрон взаимодействует с поляризацией среды, индуцируемой самим электроном. Таким образом, электрон находится в потенциальном поле $\varphi(r - r_0)$, где r_0 определяет положение потенциальной ямы, созданной поляризацией. В изотропной и однородной системе r_0 можно выбрать произвольным образом. Если бы поле φ было классическим, то величина r_0 (в системе отсчета, в которой полярон покоится), будучи однажды выбранной, оставалась бы фиксированной. В квантовой теории возможны два подхода. В первом можно считать, что положение ямы фиксировано в пространстве $r_0 = \text{const}$. Этот случай соответствует нарушенной симметрии. Во втором подходе положение ямы не фиксировано в пространстве, а совершает флуктуационные движения так, что вероятность ее нахождения в любой точке пространства одинакова. Этот случай соответствует сохранению трансляционной симметрии исходной задачи.

Исторически в теории полярона вначале был реализован первый подход, в основе которого лежала полуклассическая теория Пекара [2]. Потенциальная яма считалась фиксированной в пространстве. Последующее квантово-полевое описание полярона, основы которого были заложены в работе Фрелиха [3], фактически оставалось в рамках этой же парадигмы. Наиболее ярко эту ситуацию отражает цитата из [4]: "Самозахват электрона или дырки представляет собой интересный пример ситуации, в которой соображения симметрии и теории групп могут привести к неправильным результатам".

В основе второго подхода лежат работы Боголюбова и Тябликова [5, 6], в которых потенциальная яма не фиксирована в пространстве. При этом, хотя исходный гамильтониан записан в форме, когда положение потенциальной ямы фиксировано, с самого начала учитывается вырождение гамильтониана по отношению к r_0 . Это достигается с помощью введения коллективной координаты (математически более строго — групповой координаты). При этом радиус-вектор электрона $\mathbf{r}$ представляется в виде $\mathbf{r} = \mathbf{q} + \lambda$, где $\mathbf{q}$ — трансляционно-инвариантная часть координат электрона, λ — их флуктуирующая часть. Все результаты [5, 6] выражены в этих математических координатах $\mathbf{q}$ и λ , не имеющих прямого физического смысла. В случае одной частицы такая ситуация естественна, так как в физических координатах потенциальная яма, обладающая трансляционной инвариантностью, вообще не должна зависеть от координат. Это соответствовало бы существованию решений только в виде плоских волн.

В силу того, что теория с нарушенной симметрией не вводит не имеющих прямого физического смысла переменных, она получила широкое распространение, в то время как трансляционно-инвариантному подходу были посвящены единичные работы. При этом существенно, что оба подхода, т.е. с нарушенной симметрией и трансляционно-инвариантный, в случае одного полярона дают в нулевом приближении один и тот же результат.

Ситуация меняется, если рассмотреть две частицы в поле. Гамильтониан взаимодействия H_{int} частиц с полем в этом случае имеет вид:

$$H_{\text{int}} = e\varphi(r_1 - r_0) + e\varphi(r_2 - r_0), \quad (4)$$

где r_1 и r_2 — координаты первой и второй частицы, соответственно. Тот факт, что взаимодействие между частицами в изотропной и однородной системе зависит только от расстояния между частицами никогда не вызывал сомнения. В квантовой теории поля этот результат получается сразу в случае, когда взаимодействие мало и его можно учитывать по теории возмущений. Пусть, например, (4) описывает взаимодействие двух нерелятивистских частиц со скалярным полем. Для линейного по операторам поля взаимодействия (4) H_{int} можно представить в виде

$$H_{\text{int}} = \sum_k g C_k \left\{ b_k^+ \exp[-i(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)\mathbf{k}] + b_k \exp[-i(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_0)\mathbf{k}] + \text{э.с.} \right\}, \quad (5)$$

где g — константа взаимодействия частицы с полем, C_k — некоторые постоянные, характеризующие взаимодействие частицы с полем, b_k^+ , b_k — операторы рождения и уничтожения квантов поля с энергией $\omega(k)$. Во втором порядке теории возмущений взаимодействие (5) имеет вид

$$U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -2 \sum_k g^2 \frac{|C_k|^2}{\omega_k} \cos \mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Из (6) следует, что взаимодействие, обусловленное обменом квантами поля, зависит только от разности координат частиц. Подчеркнем, что вывод о зависимости взаимодействия между частицами только от разности

сти координат справедлив в любом порядке теории возмущений. Второй порядок рассмотрен здесь только для того, чтобы написать выражение для взаимодействия (6) в явном виде. Взаимодействие вида (6), полученное с использованием теории возмущений, лежит в основе многих теорий, в частности, теории нуклон-нуклонного взаимодействия, обусловленного обменом квантами мезонного поля [7].

Основную трудность вызывает другой предельный случай, когда $g \gg 1$, т.е. случай сильного взаимодействия частицы с полем. В теориях с нарушенной симметрией (полуклассические теории) поле φ в (4) в нулевом приближении рассматривают как классическое, что соответствует интуитивному представлению о движении частицы в фиксированной потенциальной яме. Таким образом, в этом случае взаимодействие зависит от координат каждой из частиц по отдельности и не является трансляционно-инвариантным. Частицы в этом случае движутся в потенциальной яме, положение которой фиксировано в пространстве. Ситуация совершенно аналогична и в случае, когда поле является квантовым, если r_0 фиксировано. Теория биполярона в этом случае приводит к взаимодействию, которое зависит только от r_1 и r_2 по отдельности, т.е. в физических переменных не обладает трансляционной инвариантностью.

В трансляционно-инвариантных теориях такое интуитивное представление оказывается неверным. Фактически даже в пределе $g \rightarrow \infty$ представление о существовании классической компоненты решения трансляционно-инвариантной квантовой задачи ошибочно. Так, например, в случае полярона сильной связи, представляющего собой простейший пример частицы, взаимодействующей с квантовым полем, после преобразования Боголюбова, классическое статическое решение превращается в оператор, где на преобразование трансляций реагирует лишь групповая переменная q , являющаяся функционалом операторов поля.

Теория биполярона, в которой потенциальная яма не фиксирована в пространстве, т.е. r_0 считается коллективной переменной, была построена в [1]. Принципиальным отличием случая двух частиц от одной частицы является то, что трансляционно-инвариантная теория для двух частиц может быть построена в координатах, имеющих физический смысл. Это связано с тем, что в этом случае существует трансляционно-инвариантное и отличное от постоянной выражение, к которому приводит взаимодействие двух частиц с полем, зависящее только от разности координат двух частиц.

3. Введение коллективных координат в теории биполярона

Для введения коллективных координат, следуя [1], перейдем в гамильтониане (5) от координат частиц $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ к координатам их центра масс $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ и относительным координатам $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Далее величину r_0 в (5) будем считать не фиксированным положением потенциальной ямы, а коллективной координатой. Еще раз подчеркнем, что гамильтониан системы, в котором коллективные координаты не вводятся, и гамильтониан, в котором коллективные координаты включены непосредственно в гамильтониан, описывают одну и ту же физическую систему. Целью введения коллективных

координат является построение трансляционно-инвариантной теории. С использованием комплексных координат поля q_k , связанных с операторами рождения и уничтожения квантов поля b_k^+ , b_k соотношениями

$$q_k = \frac{\epsilon(b_k + b_{-k}^+)}{\sqrt{2}}, \quad -i \frac{\partial}{\partial q_k} = \frac{i(b_k^+ - b_{-k})}{\epsilon\sqrt{2}}, \quad (7)$$

где ϵ — безразмерный малый параметр, введенный с целью проиллюстрировать в явном виде малость частот осцилляторов поля $\omega_k = \epsilon^2 v_k$, получим для гамильтониана (5) выражение

$$H_{\text{int}} = \sum_k 2A_k \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_0)] q_k, \\ A_k = \frac{\sqrt{2}gC_k}{\epsilon}. \quad (8)$$

В трансляционно-инвариантной теории биполярона гамильтониан (8) инвариантен относительно группы трансляций $R \rightarrow R + a$, $q_k \rightarrow q_k \exp(-ika)$. Эти преобразования определяют выбор коллективных координат в гамильтониане биполярона в виде

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{q}, \quad (9)$$

где r_0 играет роль флуктуирующей части координат, а все трансляции производятся над координатой q . Согласно (9), центр масс электронов флуктуирует вместе с положением потенциальной ямы. При этом прямолинейное и равномерное движение электронов описывается коллективной координатой q . Вместо координат q_k введем новые комплексные координаты поля Q_k :

$$q_k = (U_k + \epsilon Q_k) \exp[-i(kq)]. \quad (10)$$

Вследствие того, что полное число динамических переменных для системы двух электронов плюс поле должно оставаться неизменным, на новые координаты (10) накладываются дополнительные условия:

$$\sum_k \mathbf{k} v_k^* Q_k = 0, \quad (11)$$

где v_k — комплексные числа, удовлетворяющие условиям вещественности $v_{-k} = v_k^*$ и условиям ортогональности

$$\sum_k k^\alpha k^\beta v_k^* U_k = \delta_{\alpha\beta}. \quad (12)$$

Соотношения (9)–(12) представляют собой каноническое преобразование, впервые использованное Боголюбовым и Тябликовым в теории полярона.

Подставляя в (8) вместо $\mathbf{R}$, q_k новые переменные $\mathbf{r}_0$, $\mathbf{q}$, Q_k , при условии (11), (12) для гамильтониана всей системы в [1], получаем разложение $H = H_0 + \epsilon H_1 + \epsilon^2 H_2 + \dots$. При этом гамильтониан нулевого приближения H_0 содержит взаимодействие, которое зависит только от относительных координат двух частиц $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$:

$$U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 4 \sum_k \frac{|A_k|^2}{v_k} \int \cos \frac{\mathbf{k}\mathbf{r}}{2} |\psi(r)|^2 d^3r \cos \frac{\mathbf{k}}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (13)$$

где $\psi(r)$ — волновая функция.

Подчеркнем, что вывод о зависимости взаимодействия между частицами только от разности координат частиц не зависит от величины константы связи. Малость параметра ϵ (сильная связь) необходима только для того, чтобы получить выражение для взаимодействия (13) в явном виде.

Результаты статьи [1], основные моменты которой изложены выше, можно применить к случаю одной частицы. Для энергии взаимодействия частицы с полем получим следующее выражение:

$$U = \sum_k 2g^2 \frac{|C_k|^2}{\omega_k}, \quad (14)$$

которое расходится, если в него подставить C_k , отвечающее взаимодействию электрона с продольными поляризационными фонами. В связи с этим результатом, прежде всего отметим, что как было указано выше, в случае одной частицы трансляционно-инвариантный подход, основанный на описании частицы в координатах, имеющих физический смысл, приводит к энергии взаимодействия (14), которая не зависит от координат частицы. Поэтому выражение (14) не приводит к каким-либо противоречиям. Более того, оно в точности соответствует выражению для энергии полярона малого радиуса $U = e^2/(\epsilon r_p)$, где r_p^{-1} определяет верхний предел, на котором обрезается сумма (14). Физическая причина такого соответствия очевидна. Согласно [1], электрон в этом случае флуктуирует вместе с поляризационной потенциальной ямой, которая мгновенно отслеживает его движение.

4. Численные расчеты

Потенциальную энергию (13), входящую в уравнение Шрёдингера для двух частиц в поле, в предельном случае сильного взаимодействия можно рассматривать как точный результат трансляционно-инвариантной теории. Именно в этом смысле употребляется в [1] выражение "точное" решение двухчастичной задачи в квантовом поле. В действительности, полученные в [1] нелинейные дифференциальные уравнения для биполарона не имеют аналитического решения и были приближенно проинтегрированы.

Авторы [8, 9] применили для решения этих уравнений пробные волновые функции и получили для этих волновых функций значения полной энергии биполарона более низкие, чем в [1]. Отсюда следует, что численные решения, найденные в [1], не были достаточно точными. Расхождение составляет 7–14 %. В таблице приводятся результаты расчета полной энергии биполарона: E_{L1} , полученные с помощью пробных функций (9) в [8]; E_{L2} , полученные с помощью пробных функций (11) [8]; E_L — уточненные результаты численного интегрирования системы (43) в [1], полученные в [10]. Видно, что E_L лежит по энергии ниже, чем результаты вариационных

расчетов E_{L1} и E_{L2} . При этом отклонения данных, приведенных в таблицах 1–3 работы [1], от полученных с помощью уточненных решений, составляют примерно 5 % [10]. Результаты уточненных расчетов других физических величин, играющих важную роль в теории биполарона, приведены в работах [10, 11].

5. Различные варианты трансляционно-инвариантных теорий

Исторически теория Боголюбова–Тябликова была одной из первых трансляционно-инвариантных теорий, в которых рассматривался вопрос о восстановлении свойств симметрии гамильтониана системы, утрачиваемых после выделения из бозонного поля классической составляющей. Методологическое значение этой теории состоит в том, что в ней на примере полярона было впервые проведено квантование системы со связями. В отличие от классической механики, в которой исследование систем со связями сводится к решению задачи условного экстремума, в квантовой теории какой-либо универсальный подход решения таких проблем отсутствует. Рассмотрение систем со связями в квантовой теории поля стало актуальной проблемой лишь спустя четверть века после появления работ Боголюбова–Тябликова при решении проблемы квантования в искривленном пространстве и проблемы квантования непертурбативных решений теории поля, таких как кинки, инстантоны, солитоны и пр. В настоящее время в квантовой теории поля разработаны различные подходы, в которых коллективные координаты вводятся непосредственно в исходном гамильтониане подобно введению r_0 в (4), (5). При этом возможны различные способы наложения дополнительных условий, сохраняющих полное число переменных в системе. Например, в методе [12, 13] вместо условия Боголюбова–Тябликова при разложении поля в ряд Фурье с самого начала уменьшают число компонент Фурье на величину, равную числу вводимых коллективных переменных.

В теории биполарона метод Боголюбова–Тябликова использовался в работах [14, 15]. В этих работах преобразование Боголюбова–Тябликова применялось к гамильтониану (5), но коллективные координаты не вводились. Нулевое приближение в таком подходе приводит к тем же результатам, что и в теориях с нарушенной симметрией. Как и в случае полярона, эти теории оперируют только с расщепленными координатами, которые не имеют прямого физического смысла. Таким образом, в этих работах не была построена физическая теория, которая использует только переменные, имеющие физический смысл, такие как относительные координаты $r = r_1 - r_2$ и потенциальная энергия $U(r_1 - r_2)$.

Выше мы подробно обсудили проблему взаимодействия частиц в нерелятивистской квантовой теории поля. В релятивистской теории анализ проблемы должен включать в себя учет запаздывания взаимодействия,

Таблица

η	0	0,053	0,094	0,132	0,166	0,199	0,228	0,256	0,282	0,305	0,317
E_{L1}	–1,36	–1,28	–1,22	–1,15	–1,09	–1,03	–0,97	–0,92	–0,86	–0,81	–0,78
E_{L2}	–1,41	–1,33	–1,25	–1,19	–1,12	–1,05	–0,99	–0,93	–0,87	–0,82	–0,79
E_L	–1,44	–1,35	–1,28	–1,21	–1,15	–1,08	–1,02	–0,96	–0,90	–0,85	–0,82

обусловленного конечностью распространения сигнала. Поскольку соответствующие уравнения поля в релятивистской теории формулируются в терминах переменных, безразличных к преобразованиям симметрии, в частности, к преобразованиям пространства–времени, вывод о зависимости взаимодействия только от разности координат частиц справедлив и в этом случае.

В заключение отметим, что рассмотренный здесь метод введения коллективных координат и преобразования Боголюбова–Тябликова в двухчастичной задаче был использован применительно к проблеме дейтрона [16]. Этот метод дает физически корректный результат для ядерных сил, которые зависят только от разности координат нуклонов.

Автор выражает благодарность В.К. Федяину, Н.М. Плакиде, И.В. Пузынину, Г.Н. Чуеву, В.А. Осипову и Е.А. Кочетову за многочисленные обсуждения и ценные замечания.

Список литературы

1. Lakhno V D *Phys. Rev. B* **51** 3512 (1995)
2. Пекар С И *Исследования по электронной теории кристаллов* (М.: Гостехиздат, 1951)
3. Fröhlich H, Pelzer H, Zienau S *Phil. Mag.* **41** 221 (1950)
4. Харрисон У *Теория твердого тела* (М.: Мир, 1972) с. 181
5. Боголюбов Н Н *УМЖ* **2** 3 (1950)
6. Тябликов С В *ЖЭТФ* **21** 377 (1951)
7. Браун Дж Е, Джексон А Д *Нуклон-нуклонные взаимодействия* (М.: Атомиздат, 1979)
8. Smondyrev M A, Devreese J T *Phys. Rev. B* **53** 11878 (1996)
9. Смондырев М А, Девриз Д Т, Препринт ОИЯИ, Е 17-95-364 (Дубна, 1995)
10. Лахно В Д, Препринт ОНТИ НЦБИ РАН (Пушино: ОНТИ НЦБИ РАН, 1996)
11. Chuev G N, Lakhno V D, in *Perspectives of polarons* (EdB G N Chuev, V D Lakhno) (Singapore: World Scientific, 1996)
12. Christ N H, Lee T D *Phys. Rev. D* **12** 1606 (1975)
13. Раджараман Р *Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля* (М.: Мир 1985)
14. Москаленко В А *Ученые записки Кишиневского государственного университета* Т. XVII (Кишинев: Гос. изд. Молдавии, 1955) с. 103
15. Солодовникова Е П, Тавхелидзе А Н *ТМФ* **21** 13 (1974)
16. Лахно В Д *ТМФ* **100** 219 (1994)

Translation invariance and the problem of the bipolaron

V.D. Lakhno

*Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences,
142292 Pushchino, Moscow region, Russia
Tel. (095) 923-35-58
Fax (095) 938-19-14
E-mail: com@imb.serpukhov.su*

Differences between translation-invariant and broken-symmetry bipolaron theories are analyzed in detail. It is shown that Bogolyubov–Tyablikov’s canonical transformation allows collective coordinates to be introduced in a regular way for two particles in a quantum field and that for the case of the polaron the resulting electron-electron interaction in a phonon field depends on the electron coordinate difference alone. Predictions using a revised solution of nonlinear differential equations for a polaron are given. It is shown that solving bipolaron equations numerically reduces total polaron energies compared to known variational results.

PACS number: **71.38.+i**

Bibliography — 16 references

Received 30 July 1997, revised 27 January 1998