

1. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М., 1976.
2. Спектральные проявления образования ионных пар индотрикарбодцианиновых красителей / Е. С. Воропай [и др.] // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2003. № 1. С. 9–15.
3. Концентрационное усиление генерации синглетного кислорода индотрикарбодцианиновым красителем / М. П. Самцов [и др.] // ЖПС. 2014. Т. 81, № 2. С. 219–227.
4. Паркер С. Фотолюминесценция растворов. М., 1972.
5. Uptake and phototoxicity of tricarbo-cyanine indolenine dye covalently bound with glucose (TICS) under acidification of tumor cells environment / Y. P. Istomin [et al.] // Experimental Oncology. 2004. Vol. 26, № 3. P. 226–231.
6. The effect of hypoxia on photocytotoxicity of TICS tricarbo-cyanine dye In vitro / Y. P. Istomin [et al.] // Experimental Oncology. 2006. Vol. 28, № 1. P. 80–82.
7. Influence of photon energy on the efficiency of photochemotherapy / M. P. Samtsov [et al.] // J. of Applied Spectroscopy. 2009. Vol. 76, № 4. P. 547–553.
8. Химическое строение и ассоциация катионных полиметиновых красителей в малополярных растворителях / А. А. Ищенко [и др.] // Докл. АН УССР. Сер. Б. 1988. Т. 44, № 2. С. 46–49.
9. Чибисов А. К. Фотоника димеров цианиновых красителей // Химия высоких энергий. 2007. Т. 41. С. 239–248.

Поступила в редакцию 27.12.2014.

*Дмитрий Сергеевич Тарасов* – младший научный сотрудник научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ».

*Кирилл Николаевич Каплевский* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ.

*Михаил Петрович Самцов* – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией спектроскопии научно-исследовательского учреждения «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко БГУ».

*Евгений Семенович Воропай* – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ.

УДК 53.01

ЛЫ ЗУНГ ВАН (ВЬЕТНАМ), И. Д. ФЕРАНЧУК

## О ВЫБОРЕ НУЛЕВОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦЫ С КВАНТОВЫМ ПОЛЕМ

Исследуется модель взаимодействия частицы со скалярным квантовым полем. В рамках этой модели стандартная теория возмущений приводит к расходящимся выражениям при расчете энергии основного состояния системы. Показано, что эта расходимость обусловлена выбором начального приближения в форме асимптотически свободных состояний частицы поля в предположении адиабатического выключения взаимодействия. Однако в рамках этой же модели системы можно выбрать начальное приближение в виде волнового пакета, описывающего локализованное состояние частицы в поле. Параметры локализованного состояния определяются из минимума энергии системы. При этом как энергия основного состояния, так и физическая масса частицы остаются конечными во всем диапазоне изменения константы связи.

**Ключевые слова:** полярон; нулевое приближение; квантовое поле; адиабатическое приближение; теория возмущений.

Model for the interaction between particle and scalar quantum field is investigated in the present paper. In the framework of this model the conventional perturbation theory leads to the divergent expression when calculating the ground state energy of the system. It is shown in the paper that this divergence is conditioned by the choice of the initial approximation in the form of asymptotically free states for the particle and field. It is possible if the adiabatic switch-off interaction is considered. However, in the case of the same model it is natural to choose the initial approximation in the form of the wave packet that describes the localized state of the particle in the field. Parameters of this localized state are defined by the condition of the energy minimum. In this case both the ground state energy and the physical mass of the particle are finite in the entire range of the coupling constant. The obtained results could be important for analysis of the renormalization procedure in quantum field theories.

**Key words:** polaron; zeroth approximation; quantum field; adiabatic approximation; perturbation theory.

Задачи о взаимодействии частицы с квантовым полем возникают при описании электрон-фононного взаимодействия в твердом теле [1], рассмотрении движения частиц в поле лазерной волны [2], в нерелятивистской модели квантовой электродинамики [3] и в других случаях. При использовании стандартной схемы теории возмущений (ТВ) в таких задачах важную роль играет предположение об «адиабатическом выключении взаимодействия» [4], которое позволяет выбирать асимптотические состояния, соответствующие свободной частице и полю, в качестве нулевого приближения ТВ. При этом в большинстве моделей, используемых в квантовой теории, диаграммы стандартной ТВ приводят к бесконечным величинам из-за расходимости интегралов. В то же время существует уникальная физическая модель – «проблема полярона», в которой сходятся интегралы, соответствующие всем диаграммам ТВ, и не возникает необходимости вводить импульсы обрезания и выполнять перенормировку массы с использованием бесконечных величин [5]. Поэтому принципиальный интерес представляет исследование вопроса о том, являются ли расходимости, возникающие в других моделях, реальными

особенностями этих систем или следствием некорректного применения ТВ. Цель настоящей работы – детальный анализ этого вопроса.

Рассмотрим гамильтониан системы, состоящей из нерелятивистской частицы, взаимодействующей с квантовым скалярным полем:

$$\widehat{H} = -\frac{\Delta}{2} + \sum_{\vec{k}} \omega_k a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \frac{g}{\sqrt{2\Omega\omega_k}} \left( e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}} + e^{i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}}^+ \right), \quad \omega_k = k = |\mathbf{k}|. \quad (1)$$

Здесь выбрана система единиц, в которой масса свободной частицы  $m = 1$ ,  $\hbar = c = 1$ ;  $g$  – безразмерная константа связи частицы с полем;  $\Omega$  – нормировочный объем;  $a_{\vec{k}}^+$  ( $a_{\vec{k}}$ ) – операторы рождения (уничтожения) квантов поля с импульсом  $\vec{k}$  и энергией  $\omega_k$ . В качестве физической системы, которой соответствует этот модельный гамильтониан, может рассматриваться электрон в поле акустических фононов в рамках непрерывной модели кристалла [1].

Оператор (1) коммутирует с оператором полного импульса:

$$\widehat{P} = -i\vec{\nabla} + \sum_{\vec{k}} \vec{k} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}.$$

Таким образом, стационарные состояния рассматриваемой системы определяются собственными векторами  $|\Psi_{\vec{P}}\rangle$  и собственными значениями  $E(\vec{P})$ , удовлетворяющими следующим уравнениям:

$$\widehat{H}|\Psi_{\vec{P}}\rangle = E(\vec{P})|\Psi_{\vec{P}}\rangle, \quad \widehat{P}|\Psi_{\vec{P}}\rangle = \vec{P}|\Psi_{\vec{P}}\rangle. \quad (2)$$

При использовании канонической ТВ и предположения об *адиабатическом выключении взаимодействия* в нулевом приближении по константе связи искомые решения образуют полный набор и имеют простой вид, соответствующий свободной частице с импульсом  $\vec{p}$  и фоковским состояниям фононного поля с набором чисел заполнения  $\{n_{\vec{k}}\}$ :

$$\begin{aligned} |\Psi_{\vec{P}, \{n_{\vec{k}}\}}^{(0)}\rangle &= e^{i\vec{P}\vec{r}} |\{n_{\vec{k}}\}\rangle; \quad \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} |\{n_{\vec{k}}\}\rangle = \sum_{\vec{k}} |\{n_{\vec{k}}\}\rangle; \\ E^{(0)}(\vec{P}, \{n_{\vec{k}}\}) &= \frac{1}{2} \left( \vec{P} - \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}} \right)^2 + \sum_{\vec{k}} \omega_k n_{\vec{k}}; \quad \vec{P} = \vec{p} + \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Дальнейшие вычисления рассмотрим для основного состояния системы, соответствующего вакуумному состоянию поля  $\{n_{\vec{k}}\} = 0$ :

$$|\Psi_{\vec{P}, 0}^{(0)}\rangle = e^{i\vec{P}\vec{r}} |0\rangle; \quad E^{(0)}(\vec{P}, 0) = \frac{P^2}{2}; \quad \vec{P} = \vec{p}.$$

Очевидно, что поправка первого порядка к энергии системы равна нулю, а поправка второго порядка связана с однофононными промежуточными состояниями и соответствует собственно энергетической диаграмме, определяющей массовый оператор  $\sum(\vec{P})$  [4], который во втором порядке определяется следующим интегралом:

$$\sum(\vec{P}) = E^{(2)}(\vec{P}, 0) = -\frac{g^2}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega_k} \frac{1}{\frac{k^2}{2} - \vec{P}\vec{k} + \omega_k} = -\frac{g^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left[ \frac{k^2}{2} - (\vec{P}\vec{k}) + k \right]}.$$

Для любого значения полного импульса этот интеграл логарифмически расходится при больших  $k$  (ультрафиолетовая расходимость). Напомним, что в проблеме полярона он сходится, поскольку в знаменатель входит дополнительная степень  $k$ . В то же время рассматриваемая модель является перенормируемой. Перенормированное значение массового оператора возникает при вычитании из массового оператора бесконечной энергии системы с нулевым импульсом

$$\sum_R(\vec{P}) = \sum(\vec{P}) - \sum(0)$$

и является конечным.

Это позволяет перенормировать массу электрона и вычислить его «физическую» массу  $m^*$ , рассматривая разложение энергии по импульсу:

$$E^{(0)}(\vec{P}, 0) + \sum_R(\vec{P}) \approx \frac{P^2}{2m^*}.$$

Во втором порядке теории возмущений находим

$$\frac{1}{m^*} \approx 1 - \frac{g^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{P^2 k \left[ \frac{k^2}{2} + k \right]^3} (\vec{P}\vec{k})^2 = 1 - \frac{g^2}{12\pi^2}; \quad m^* \approx 1 + \frac{g^2}{12\pi^2}; \quad g \ll 1.$$

Таким образом, в рамках данной модели использование ТВ приводит к бесконечной энергии основного состояния системы, если в качестве нулевого приближения рассматривать состояния, соответствующие асимптотически свободной частице и квантовому полю.

Покажем, однако, что этот результат не связан с реальными физическими характеристиками системы, а обусловлен неадекватным выбором начального приближения. Действительно, как известно из решения задачи о поляроне, взаимодействие частицы и поля может приводить к возникновению локализованного состояния, обусловленного выделением эффективного классического потенциала, возникающего за счет взаимодействия частицы и поля. Несмотря на то что энергия основного состояния полярона является непрерывной функцией константы связи [6], такое локализованное состояние не удается найти при использовании канонической ТВ. Однако его можно построить либо вариационным методом [7], либо с помощью адиабатической теории возмущений [8], в которой нулевое приближение не сводится к асимптотически свободной частице и полю.

Можно предположить, что расходимость ТВ и в рассматриваемой модели обусловлена образованием локализованного состояния частицы, связанного с выделенной классической компонентой квантового поля. Тогда в нулевом приближении для решения уравнений (2) необходимо использовать вместо (3) вектор состояния, представляющий собой произведение квадратично интегрируемой волновой функции частицы и когерентного состояния поля, аналогичный тому, который используется в теории полярона [5]:

$$|\Psi(\vec{r}, \vec{R})\rangle = \mathcal{O}(\vec{r} - \vec{R}) \exp\left(\sum_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}}^+ - \frac{1}{2} u_{\vec{k}}^2\right)\right) |0\rangle. \quad (4)$$

Классические фурье-компоненты поля  $u_{\vec{k}}$  и нормированная волновая функция  $\mathcal{O}(\vec{r} - \vec{R})$  находятся при минимизации функционала, вычисленного с полным гамильтонианом системы:

$$\frac{\delta}{\delta u_{\vec{k}}} \left[ \langle \Psi(\vec{r}, \vec{R}) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}, \vec{R}) \rangle \right] = \frac{\delta}{\delta \mathcal{O}(\vec{r} - \vec{R})} \left[ \langle \Psi(\vec{r}, \vec{R}) | \hat{H} | \Psi(\vec{r}, \vec{R}) \rangle \right] = 0, \quad (5)$$

где  $\vec{R}$  – пока произвольная точка, относительно которой локализовано рассматриваемое состояние в пространстве. Вычисляя функционал и соответствующие производные (5), находим

$$u_{\vec{k}} = -\frac{g}{\sqrt{2\Omega\omega_k^3}} \int d\vec{r} |\mathcal{O}(\vec{r})|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}};$$

$$\langle \mathcal{O}(\vec{r}) | \hat{H} | \mathcal{O}(\vec{r}) \rangle = \int d\vec{r} \mathcal{O}(\vec{r}) \left( -\frac{1}{2} \Delta \right) \mathcal{O}(\vec{r}) - \frac{g^2}{2\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\left| \int d\vec{r} |\mathcal{O}(\vec{r})|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right|^2}{\omega_k^2}; \quad (6)$$

$$\left\{ -\frac{1}{2} \Delta - \frac{g^2}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{|\mathcal{O}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right\} \mathcal{O}(\vec{r}) = E_L^{(0)}(0) \mathcal{O}(\vec{r}); \quad \int d\vec{r} |\mathcal{O}(\vec{r})|^2 = 1.$$

При этом энергия основного состояния системы определяется выражением

$$E_L^{(0)}(0) = \int d\vec{r} \mathcal{O}(\vec{r}) \left( -\frac{1}{2} \Delta \right) \mathcal{O}(\vec{r}) - \sum_{\vec{k}} \omega_k u_{\vec{k}}^2. \quad (7)$$

Следует отметить, что аналогичный выбор квадратично-интегрируемой волновой функции частицы, принципиально отличной от волновой функции свободного движения, необходимо делать уже в нулевом приближении и при решении уравнения Шрёдингера для состояний дискретного спектра частицы в потенциальном поле.

При таком выборе пробной функции все выражения в формулах (6), (7) уже не содержат ультрафиолетовой расходимости при любых значениях константы связи. Однако волновая функция, определяющая когерентное состояние поля в (4), содержит инфракрасную расходимость (при малых  $k$ ) в выражении  $\sim \sum_k u_k^2$ , определяющем среднее число квантов поля, хотя в целом вектор состояния остается нормируемым. Кроме того, вектор состояния (4) не удовлетворяет второму из уравнений (2), т. е. не является трансляционно-инвариантным. В то же время это состояние вырожденное, поскольку энергия системы не зависит от координаты  $\vec{R}$ , где локализована волновая функция частицы. Выбор правильной линейной комбинации таких вырожденных состояний позволяет построить вектор состояния, являющийся собственным и для оператора полного импульса:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r})\rangle &= \frac{1}{N_{\vec{P}}\sqrt{\Omega}} \int d\vec{R} \mathcal{O}(\vec{r} - \vec{R}) \exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_k \left(u_k a_k^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}} - \frac{1}{2}u_k^2\right)\right) |0\rangle; \\ \left(-i\vec{\nabla}_{\vec{r}} + \sum_k \vec{k} a_k^+ a_k\right) |\Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r})\rangle &= \vec{P} |\Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r})\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Нормировочная константа  $N_{\vec{P}}$  определяется выражением

$$|N_{\vec{P}}|^2 = \int d\vec{R} \int d\vec{r} \mathcal{O}_{\vec{P}}^*(\vec{r}) \mathcal{O}_{\vec{P}}(\vec{r} + \vec{R}) \exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_k |u_k|^2 (e^{-i\vec{k}\vec{R}} - 1)\right). \quad (9)$$

Все величины в формулах (8), (9) содержат только сходящиеся интегралы, а энергия «детой» частицы, как функция полного импульса и константы связи, в нулевом приближении определяется средним значением полного гамильтониана (1) по этому вектору состояния:

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \int d\vec{r} \langle \Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r}) | \hat{H} | \Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r}) \rangle. \quad (10)$$

Существенно, что векторы состояния (5) образуют полный ортонормированный набор

$$\int d\vec{r} \langle \Psi_{\vec{P}}^{(L)}(\vec{r}) | \Psi_{\vec{P}_1}^{(L)}(\vec{r}) \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{P} - \vec{P}_1)$$

и могут быть использованы для расчета последующих приближений.

Сначала вычислим характеристики связанного состояния частицы и поля, определяемого уравнениями (6) без учета трансляционной симметрии. Для этого используем масштабные преобразования:

$$\vec{r} = \frac{\vec{\rho}}{g^2}; \quad \vec{k} = g^2 \vec{q}; \quad \mathcal{O}(\vec{r}) = g^3 \chi(\vec{\rho}), \quad (11)$$

которые позволяют определить с точностью до множителя аналитическую зависимость энергии основного состояния от константы связи

$$E_L^{(0)}(0) = g^4 \epsilon; \quad \epsilon = \int d\vec{\rho} \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_{\rho} \chi(\vec{\rho}))^2 - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{\rho} \int d\vec{\rho}' \frac{|\chi(\vec{\rho}')|^2 |\chi(\vec{\rho})|^2}{|\vec{\rho} - \vec{\rho}'|}. \quad (12)$$

Отсюда следует, что это состояние не может быть найдено на основе стандартной ТВ, в рамках которой разложение энергии по константе связи начинается со слагаемого  $\sim g^2$ . Для определения коэффициента  $\epsilon$  необходимо минимизировать функционал (12), что приводит к необходимости численного решения не зависящего от  $g$  нелинейного интегро-дифференциального уравнения для  $\chi(\vec{\rho})$ . Это уравнение аналогично тому, которое возникает в теории «полярона» [9], и решение его было найдено численно. Поскольку в рамках настоящей работы нас интересуют только качественные особенности решения в зависимости от константы связи, то можно вычислить этот коэффициент приближенно, как и в случае «полярона», минимизируя функционал (12) с помощью простой пробной функции, зависящей только от одного вариационного параметра  $\lambda$ :

$$\chi_0(\vec{\rho}) = \sqrt{\frac{\lambda^3}{8\pi}} e^{-\lambda\rho/2},$$

что позволит выполнить основную часть расчетов аналитически.

Тогда для кинетической  $T$  и потенциальной  $\Pi$  энергии находим

$$T = \int d\vec{r} \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_r \mathcal{O}(\vec{r}))^2 = g^4 \int d\vec{\rho} \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_\rho \chi(\vec{\rho}))^2 = g^4 \frac{\lambda^2}{8};$$

$$u_{\vec{q}} = -\frac{g}{\sqrt{2\Omega'q^3}} \int d\vec{\rho} |\chi(\vec{\rho})|^2 e^{-i\vec{q}\vec{\rho}} = -\frac{g}{\sqrt{2\Omega'q^3}} \frac{\lambda^4}{(q^2 + \lambda^2)^2}; \quad \Omega = \frac{\Omega'}{g^6}; \quad (13)$$

$$\Pi = -\sum_{\vec{k}} \omega_k u_k^2 = -g^2 \sum_{\vec{q}} \omega_q u_q^2 = -g^4 \frac{5\lambda}{128\pi}.$$

Минимизация энергии приводит к следующему результату:

$$\lambda = \frac{5}{32\pi}; \quad \epsilon = -\frac{25}{2^{13}\pi^2}; \quad E_L^{(0)}(0) = -g^4 \frac{25}{2^{13}\pi^2}. \quad (14)$$

Рассмотрим теперь энергию (10) основного состояния системы с учетом трансляционной симметрии. Используя соотношение (8) при вычислении среднего, получаем

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \frac{P^2}{2} - (\vec{P}\vec{Q}) + \frac{Q^2}{2} + E_f(\vec{P}) + E_{\text{int}}(\vec{P}); \quad \Phi(R) = \sum_{\vec{k}} |u_{\vec{k}}|^2 (e^{-i\vec{k}\vec{R}} - 1);$$

$$\vec{Q} = \frac{1}{|N_{\vec{P}}|^2} \sum_{\vec{k}} \vec{k} |u_{\vec{k}}|^2 \int d\vec{R} \int d\vec{r} \mathcal{O}_{\vec{P}}^*(\vec{r}) \mathcal{O}_{\vec{P}}(\vec{r} + \vec{R}) \exp(\Phi(R) + i(\vec{P} + \vec{k})\vec{R});$$

$$E_f(\vec{P}) = \frac{1}{|N_{\vec{P}}|^2} \sum_{\vec{k}} \left(k + \frac{k^2}{2}\right) |u_{\vec{k}}|^2 \int d\vec{R} \int d\vec{r} \mathcal{O}_{\vec{P}}^*(\vec{r}) \mathcal{O}(\vec{r} + \vec{R}) \exp(\Phi(R) + i(\vec{P} + \vec{k})\vec{R});$$

$$E_{\text{int}}(\vec{P}) = \frac{2g}{|N_{\vec{P}}|^2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2k\Omega}} \int d\vec{R} \int d\vec{r} \mathcal{O}_{\vec{P}}^*(\vec{r}) \mathcal{O}_{\vec{P}}(\vec{r} + \vec{R}) u_{\vec{k}} \exp(\Phi(R) + i(\vec{P}\vec{R} + \vec{k}\vec{r})).$$

Прежде всего заметим, что если выбрать волновую функцию локализованного состояния в виде

$$\mathcal{O}_{\vec{P}}(\vec{r}) = e^{-i\vec{P}\vec{r}} \mathcal{O}_0(\vec{r}),$$

то вектор  $\vec{Q} = 0$ , а энергия поля  $E_f$  и энергия взаимодействия  $E_{\text{int}}$  не зависят от полного импульса. Это означает, что в рассматриваемом приближении «поступательное» и «внутреннее» движение «физической» частицы разделяется и полная энергия системы принимает следующий вид:

$$E_L^{(0)}(\vec{P}, g) = \frac{P^2}{2} + E_f + E_{\text{int}} = \frac{P^2}{2} + E_L^{(0)}(0, g).$$

Используем в этих выражениях волновую функцию (5) и фурье-компоненты поля (7). При вычислении функции  $\Phi(R)$  введем масштабное преобразование  $\vec{R} = \frac{\vec{X}}{g^2}$ . Во всех интегралах переменная  $X$  находится в виде комбинации  $u = \lambda X$ , поэтому после замены переменной получаем

$$\Phi(R) = \sum_{\vec{k}} |u_{\vec{k}}|^2 (e^{-i\vec{k}\vec{R}} - 1) \equiv g^2 \tilde{\Phi}(u) = \frac{g^2}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{dt}{t(t^2 + 1)^4} \left[ \frac{\sin(ut)}{ut} - 1 \right].$$

Рассмотрим теперь вычисление интеграла, входящего в нормировочную константу

$$\int d\vec{r} \mathcal{O}_0(\vec{r}) \mathcal{O}_0(\vec{r} + \vec{R}) = \frac{\lambda^3}{8\pi} \int d\rho e^{-\lambda\rho/2} e^{-\lambda|\vec{\rho} + \vec{R}|/2} \equiv I(u) = \frac{u^2 + 6u + 12}{12} e^{-u/2}.$$

Формулы (9) перепишем в виде

$$|N_0|^2 = \frac{4\pi}{g^6 \lambda^3} \tilde{N}^2; \quad \tilde{N}^2 = \int_0^\infty u^2 du I(u) e^{g^2 \tilde{\Phi}(u)}.$$

В новых переменных энергия поля запишется

$$E_f = g^4 [\lambda E_{f1} + \lambda^2 g^2 E_{f2}];$$

$$E_{f1} = \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{11}(u) \exp(g^2 \tilde{\Phi}(u)); \quad \Phi_{11}(u) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{dt}{(t^2+1)^4} \frac{\sin(ut)}{ut};$$

$$E_{f2} = \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{12}(u) \exp(g^2 \tilde{\Phi}(u)); \quad \Phi_{12}(u) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \frac{dt}{(t^2+1)^4} \frac{\sin(ut)}{ut}.$$

С учетом замен энергия взаимодействия представляется в виде

$$E_{\text{int}} = \lambda g^4 E_i; \quad E_i = \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 du I_1(u) \exp(g^2 \tilde{\Phi}(u));$$

$$\sum_{\vec{k}} \frac{2gu_{\vec{k}}}{\sqrt{2k\Omega}} \int d\vec{r} \varnothing_0(\vec{r}) \varnothing_0(\vec{r} + \vec{R}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \equiv \lambda I_1(u) = \lambda \frac{e^{-u/2} [-5 - u + e^u (5 + u + 4u^2)]}{64\pi u}.$$

Теперь суммарную энергию можно минимизировать по  $\lambda$ , что приводит к следующему выражению для энергии, которая уже не зависит от  $\lambda$ :

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}}. \quad (15)$$

Рассмотрим предельные случаи, соответствующие слабой и сильной связи.

1. При  $g \ll 1$  (слабая связь):

$$\exp(g^2 \tilde{\Phi}(u)) \approx 1; \quad \tilde{N}^2 \approx \int_0^\infty \frac{u^2}{12} (u^2 + 6u + 12) e^{-u/2} du = 2^7;$$

компоненты энергии поля

$$E_{f1} \approx \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{11}(u) = \frac{4711}{279\,936\pi};$$

$$E_{f2} \approx \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{12}(u) = \frac{45,84}{12\,288\pi^2};$$

энергия взаимодействия

$$E_i \approx \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 du I_1(u) = -\frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 du \frac{e^{-3u/2} [-5 - u + e^u (5 + u + 4u^2)]}{64\pi u} = -\frac{11}{216\pi}.$$

Суммарная энергия связи в этом пределе, в отличие от ТВ, имеет конечное значение

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}} = -0,077\,9g^2. \quad (16)$$

2. При  $g \gg 1$  (сильная связь):

$$\exp(g^2 \tilde{\Phi}(u)) \approx \exp\left(g^2 \frac{u^2}{2} \tilde{\Phi}''(0)\right) = \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right);$$

$$\tilde{N}^2 = \int_0^\infty \frac{u^2(u^2 + 6u + 12)}{12} \exp\left(-\frac{u}{2} - \frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) du \approx \int_0^\infty u^2 \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) du;$$

компоненты энергии поля

$$E_{f1} \approx \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{11}(u) \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) = \frac{1}{384\pi \tilde{N}^2} \int_0^\infty 15u^2 \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) du = \frac{15}{384\pi};$$

$$E_{f2} \approx \frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty I(u) u^2 du \Phi_{12}(u) \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) = \frac{1}{48\pi^2 \tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) du = \frac{1}{48\pi^2};$$

энергия взаимодействия

$$E_i \approx -\frac{1}{\tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 du I_1(u) \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) \approx -\frac{5}{64\pi \tilde{N}^2} \int_0^\infty u^2 \exp\left(-\frac{g^2 u^2}{144\pi^2}\right) du = -\frac{5}{64\pi}.$$

Суммарная энергия

$$E_L^{(0)}(0, g) = -\frac{g^2 (E_{f1} + E_i)^2}{4E_{f2}} = -0,0183105g^2. \quad (17)$$

Результаты вычислений по формулам (16), (17) представлены на рис. 1, 2. Они показывают, что энергия «физической» частицы в поле остается конечной во всем диапазоне изменения константы связи. Следующий этап исследования поставленной проблемы требует вычисления поправок, обусловленных взаимодействием «физической» частицы с квантовым полем. Как было показано нами ранее [10], при построении ТВ, равномерно пригодной во всем диапазоне константы связи, при расчете последовательных приближений для каждого состояния квантовой системы необходимо использовать различный ортонормированный базис, что приводит к достаточно громоздким вычислениям. Они будут рассмотрены в отдельной работе.

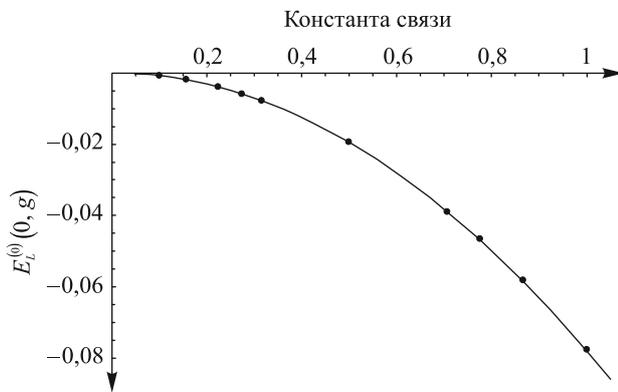


Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния от  $g$  в случае слабой связи: сплошная линия соответствует аналитической формуле (16); точки – результатам численного расчета интегралов в (15)

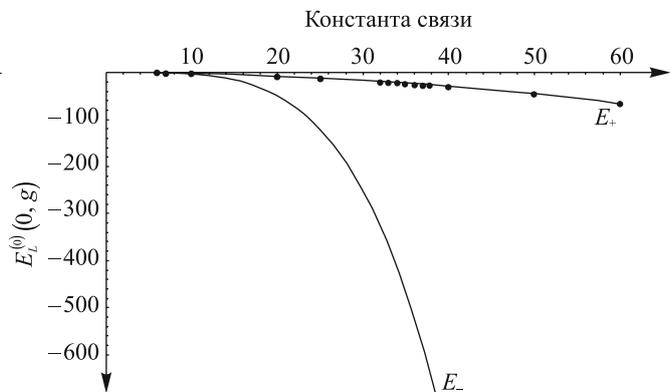


Рис. 2. Энергия связи системы в области сильной связи:  $E_-$  – расчет по формуле (14) без учета трансляционной симметрии;  $E_+$  – расчет по формулам (17) (сплошная линия) и (15) (точки)

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Давыдов А. С. Теория твердого тела. М., 1976.
2. Extremely high-intensity laser interactions with fundamental quantum systems / A. Di Piazza [et al.] // Rev. Mod. Phys. 2012. Vol. 84. P. 1177–1228.
3. Healy W. P. Non-relativistic Quantum Electrodynamics. London, 1982.
4. Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Введение в теорию квантованных полей. М., 1973.
5. Mitra T. K., Chatterjee A., Mikhopadhyay S. Polarons // Phys. Reports. 1987. Vol. 153. P. 91–178.
6. Feranchuk I. D., Komarov L. I. The regular perturbation theory in the polaron problem // J. Phys. C: Solid State Phys. 1982. Vol. 15. P. 1965–1971.

7. Gerlach B., Lowen H. Analytical properties of polaron systems // Rev. Mod. Phys. 1991. Vol. 63. P. 63–90.

8. Feynman R. P., Hibbs A. R. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York, 1965.

9. Боголюбов Н. Н. Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем // Укр. матем. журн. 1950. № 2. С. 3–24.

10. Иванов А. А., Феранчук И. Д. Квантовая механика физических систем без малого параметра. Минск, 2008.

Поступила в редакцию 09.01.2015.

**Лы Зунг Ван** – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета БГУ. Научный руководитель – И. Д. Феранчук.

**Илья Давыдович Феранчук** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и астрофизики физического факультета БГУ.

УДК 535.37+577.342

И. И. ХЛУДЕЕВ, В. П. ЗОРИН

## УЛЬТРАФИЛЬТРАЦИОННЫЙ МЕТОД ОЦЕНКИ ПАРАМЕТРОВ СВЯЗЫВАНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ХЛОРИНА $e_6$ С СЫВОРОТОЧНЫМ АЛЬБУМИНОМ

Проведено исследование параметров связывания тетрапиррольных фотосенсибилизаторов (ФС) – хлорина (Хл) $e_6$  и его производных – с сывороточным альбумином человека (САЧ). С использованием модифицированного ультрафильтрационного метода выполнена количественная оценка констант связывания группы этерифицированных производных Хл $e_6$  с САЧ. Показано влияние числа отрицательно заряженных боковых карбоксильных групп в молекулах хлоринов на родство к альбумину. Установлено, что при снижении pH водной среды величина константы связывания Хл $e_6$  с сывороточным альбумином существенно уменьшается, а pH-зависимое снижение родства хлоринов к САЧ при закислении среды выражено сильнее для соединений, имеющих два и более боковых анионных заместителя. Предполагается, что снижение константы связывания может быть обусловлено уменьшением электростатических взаимодействий анионных заместителей в молекулах хлоринов и катионных зарядов вблизи центра связывания на молекуле САЧ из-за снижения заряда хлоринов при этерификации или вследствие протонирования боковых карбоксильных групп при закислении среды.

Обсуждается возможная роль наблюдаемых изменений в родстве хлоринов к САЧ для объяснения процессов избирательной локализации тетрапиррольных ФС в солидных опухолях, характеризующихся пониженной величиной pH интерстициальной жидкости.

**Ключевые слова:** производные хлорина  $e_6$ ; сывороточный альбумин человека; комплексообразование; ультрафильтрация; pH среды; накопление в опухоли.

The parameters of the tetrapyrrole photosensitizers (PS) – chlorine  $e_6$  and its derivatives binding with human serum albumin (HSA) were studied. Using the modified ultrafiltration method binding constants of group esterified derivatives of chlorine  $e_6$  with HSA were quantified. The effect of negatively charged side carboxyl groups in the molecules of chlorins for affinity to albumin was shown. It was found that by lowering the pH value of the aqueous medium binding constant of chlorine  $e_6$  to serum albumin is considerably reduced, and the pH-dependent decrease in chlorins affinity to HSA under medium acidification is more pronounced for compounds with two or more lateral anionic substituent. It is assumed that the decrease in the binding constants can be due to a decrease in electrostatic interactions anionic substituents in the molecules of chlorins and cationic charges near the binding site on human serum albumin molecule as a result of reducing the chlorins charge due to esterification or protonation of the side carboxyl groups on the medium acidification.

**Key words:** chlorine  $e_6$  derivatives; human serum albumin; ultrafiltration; medium pH; tumor accumulation.

При введении в кровь большинство лекарственных соединений образуют комплексы с белками плазмы крови и их дальнейшая транспортировка по кровеносной системе происходит в составе таких комплексов. Сывороточный альбумин человека является основным транспортным белком плазмы крови [1], поэтому параметры связывания с САЧ лекарственных соединений, в том числе ФС, в значительной степени влияют на характеристики их распределения в организме человека. Для анализа взаимодействия соединений (лигандов) с молекулой САЧ в условиях *in vitro* разработаны различные методы. В их основе согласно определению Клотца [2] лежат два главных экспериментальных подхода. Во-первых, разделение (сепарация) свободных и белоксвязанных лигандов, т. е. определение концентраций свободного и связанного лигандов, и, во-вторых, обнаружение изменений в физико-химических свойствах лиганда или белка после их связывания. В последнем случае наибольшее распространение получили методы анализа изменений оптических характеристик белка и лиганда при образовании комплекса.

Исследование процессов связывания САЧ с тетрапиррольными ФС часто базируется на анализе изменений спектрально-флуоресцентных характеристик белка или ФС при формировании комплекса «ФС – САЧ». Например, метод тушения флуоресценции триптофановых остатков в молекуле САЧ применяется для оценки параметров связывания с альбумином водорастворимых (полярных) ФС [3]. В случае гидрофобных (неполярных) соединений применимость подобных методов существенно ограничена, поскольку агрегация неполярных ФС может сильно влиять как на их спектрально-флуоресцентные характеристики, так и на параметры связывания с молекулами САЧ [4]. Кроме того, процесс