УДК 539.12

УСТРАНЕНИЕ РАСХОДИМОСТИ В ЗАДАЧЕ О ЧАСТИЦЕ В СКАЛЯРНОМ КВАНТОВОМ ПОЛЕ

И. Д. ФЕРАНЧУК[1]***, О. Д. СКОРОМНИК***[2]***, НГУЕН КУАНГ ШАН***[1]

[1]*Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь*
[2]*Независимый исследователь, г. Гейдельберг, Германия*

Рассмотрена задача о взаимодействии частицы со скалярным квантовым полем. Применение теории возмущений в этой задаче приводит к ультрафиолетовой расходимости при вычислении энергии основного состояния, для перенормировки которой необходимо использовать неопределенный параметр – импульс обрезания. Описана итерационная схема для расчета наблюдаемых характеристик системы, позволяющая выйти за рамки теории возмущений. Найдена зависимость энергии основного состояния от константы связи и показано, что она не содержит расходимости, однако обладает логарифмической сингулярностью в пределе, когда константа связи частицы

Образец цитирования:
Феранчук ИД, Скоромник ОД, Нгуен Куанг Шан. Устранение расходимости в задаче о частице в скалярном квантовом поле. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2023;1:4–13.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-4-13

For citation:
Feranchuk ID, Skoromnik OD, Nguyen Quang San. Elimination of divergence for the problem of a particle in a scalar quantum field. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2023;1:4–13. Russian.
https://doi.org/10.33581/2520-2243-2023-1-4-13

Авторы:
Илья Давыдович Феранчук – доктор физико-математических наук, профессор; профессор кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.
Олег Дмитриевич Скоромник – кандидат физико-математических наук; независимый исследователь.
Нгуен Куанг Шан – кандидат физико-математических наук; научный сотрудник кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета.

Authors:
Ilya D. Feranchuk, doctor of science (physics and mathematics), full professor; professor at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
feranchuk@bsu.by
https://orcid.org/0000-0003-0476-8634
Oleg D. Skoromnik, PhD (physics and mathematics); independent researcher.
olegskor@gmail.com
Nguyen Quang San, PhD (physics and mathematics); researcher at the department of theoretical physics and astrophysics, faculty of physics.
quangsanbsu@gmail.com
https://orcid.org/0000-0003-2919-5414

с полем стремится к нулю. Такая функция не может быть представлена степенным рядом по константе связи, что объясняет неприменимость стандартной теории возмущений. Полученный результат имеет принципиальное значение для квантовой теории поля, поскольку показывает, что импульс обрезания, который используется для перенормировки при вычислении физических величин, определяется параметрами системы, а расходимости обусловлены наличием сингулярности в зависимости этих величин от константы связи.

Ключевые слова: регуляризация; теория возмущений; ультрафиолетовая расходимость; квантовая теория поля; квантовая электродинамика; операторный метод.

ELIMINATION OF DIVERGENCE FOR THE PROBLEM OF A PARTICLE IN A SCALAR QUANTUM FIELD

I. D. FERANCHUK[a]***, O. D. SKOROMNIK***[b]***, NGUYEN QUANG SAN***[a]

[a]*Belarusian State University, 4 Niezaliežnasci Avenue, Minsk 220030, Belarus*
[b]*Independent researcher, Heidelberg, Germany*
Corresponding author: I. D. Feranchuk (feranchuk@bsu.by)

The problem of the interaction of a particle with a scalar quantum field is considered. The use of perturbation theory in this problem leads to ultraviolet divergence in the calculation of the ground state energy, for the renormalisation of which it is necessary to use an indefinite parameter – momentum cutoff. The work describes an iteration scheme for calculating the observed characteristics of the system, which allows to go beyond the perturbation theory. The dependence of the ground state energy on the coupling constant was found and it is shown that it does not contain divergence, but it has a logarithmic singularity in the limit, when the coupling constant of the particle with the field tends to zero. Such a function cannot be represented as a power series over the coupling constant, which explains the inapplicability of the standard perturbation theory. The result obtained is of fundamental importance for quantum field theory, since it shows that the momentum cutoff, which is used for renormalisation when calculating physical quantities, is determined by the parameters of the system, and the divergences are due to the presence of a singularity in the dependence of these quantities on the coupling constant.

Keywords: regularisation; perturbation theory; ultraviolet divergence; quantum field theory; quantum electrodynamics; operator method.

Введение

Основным методом вычисления наблюдаемых величин в квантовой теории поля является теория возмущений по константе связи между взаимодействующими полями. Для большинства реальных систем при данном вычислении возникают расходящиеся интегралы из-за так называемых инфракрасных и ультрафиолетовых расходимостей. Эти расходимости устраняются с помощью процедуры перенормировки, которая сначала была детально разработана для квантовой электродинамики [1; 2], а затем обобщена для других моделей квантовой теории поля [3; 4]. В результате перенормировки наблюдаемые величины принимают конечные значения, однако такие параметры, как заряд или масса частиц, зависят от неопределенного импульса обрезания и принимают бесконечные значения. Один из создателей квантовой электродинамики, Р. Фейнман, сравнил такую процедуру с заметанием мусора под ковер [5].

Для того чтобы сделать расчеты строгими с математической точки зрения, необходимо ответить на вопрос: «Являются ли данные бесконечные величины неотъемлемым свойством исходного гамильтониана системы, или этот результат обусловлен некорректным использованием теории возмущений?» Так, например, в теории сверхпроводимости неприменимость теории возмущений обусловлена существенной особенностью в зависимости энергии системы от константы электрон-фононной связи [6]. Ответить на вышеуказанный вопрос в общем виде достаточно сложно, поэтому в настоящей работе рассматривается простая модель, а именно взаимодействие одной частицы со скалярным квантовым полем, и показывается, что ультрафиолетовая расходимость в данной системе обусловлена логарифмической особенностью в зависимости энергии от константы связи. С этой целью в работе построена итерационная схема решения уравнения Шрёдингера, которая позволяет выделить указанную особенность в аналитической форме.

Гамильтониан системы и результаты теории возмущений

Гамильтониан нерелятивистской частицы с массой $m = 1$, взаимодействующей со скалярным квантовым полем, в натуральной системе единиц ($\hbar = c = 1$) имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \tag{1}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} \hat{a}_{\vec{k}}, \tag{2}$$

$$\hat{H}_1 = \frac{f}{\sqrt{2V}} \sum_{\vec{k}} Q_{\vec{k}} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} \right).$$

Здесь $\hat{p} = -i\nabla$ – оператор импульса; f – безразмерная константа связи; V – нормировочный объем; $\hat{a}_{\vec{k}}^{+}$ и $\hat{a}_{\vec{k}}$ – операторы рождения и уничтожения квантов полевой моды с частотой $\omega_{\vec{k}}$. Если выбрать вершинную функцию $Q_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{\omega_{\vec{k}}}}$, $\omega_{\vec{k}} = k$, то оператор (1) описывает взаимодействие электрона с акустическими фононами кристалла. При $\omega_{\vec{k}} = 1$, $Q_{\vec{k}} = \frac{1}{k}$ и $f = 2^{\frac{5}{4}}\sqrt{\pi\alpha}$ оператор (1) соответствует гамильтониану Фрёлиха для задачи о поляроне, т. е. взаимодействию электрона с оптическими фононами [7–11].

Система, описываемая гамильтонианом (1), имеет дополнительный интеграл движения – оператор полного импульса

$$\hat{P} = -i\nabla + \sum_{\vec{k}} \vec{k} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} \hat{a}_{\vec{k}},$$

так что собственные векторы и собственные значения системы удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\hat{H} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle = E_{\vec{P}} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle,$$

$$\hat{P} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle = \vec{P} \left| \Psi_{\vec{P}} \right\rangle.$$

В нулевом приближении стандартной теории возмущений собственные функции и собственные значения оператора (2) имеют вид

$$\left| \Psi_{\vec{p}, n_{\vec{k}}}^{(0)} \right\rangle = \frac{e^{i\vec{p}\vec{r}}}{\sqrt{V}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle, \ \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} \hat{a}_{\vec{k}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \left| n_{\vec{k}} \right\rangle, \tag{3}$$

$$E_{\vec{P}, n_{\vec{k}}}^{(0)} = \frac{1}{2} \left(\vec{P} - \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}} \right)^2 + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} n_{\vec{k}}, \ \vec{P} = \vec{p} + \sum_{\vec{k}} \vec{k} n_{\vec{k}}.$$

Здесь $\vec{p}$ – импульс свободной частицы, а $\left| n_{\vec{k}} \right\rangle$ – фоковские состояния фононного поля.

Для основного состояния системы находим

$$\left| \Psi_{\vec{P}, 0}^{(0)} \right\rangle = \frac{e^{i\vec{P}\vec{r}}}{\sqrt{V}} |0\rangle, \ E_{\vec{P}, 0}^{(0)} = \frac{P^2}{2}, \ \vec{P} = \vec{p}.$$

Поправка первого порядка теории возмущений равна нулю, а во втором порядке теории возмущений получаем

$$\Delta E_{\vec{P}, 0}^{(2)} = -\frac{f^2}{2V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\omega_{\vec{k}}} \frac{1}{\frac{k^2}{2} - \vec{P}\vec{k} + \omega_{\vec{k}}} = -\frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} - \vec{P}\vec{k} + k \right)}.$$

Энергия связи E_{bs} и эффективная масса m_{eff} определяются при разложении по $\vec{P}$:

$$E_{\vec{P}, 0}^{(0)} + \Delta E_{\vec{P}, 0}^{(2)} \approx E_{bs} + \frac{P^2}{2m_{\text{eff}}} \equiv -\frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} + k \right)} + \frac{P^2}{2} - \frac{f^2}{16\pi^3} \int \frac{d\vec{k}}{k \left(\frac{k^2}{2} + k \right)^3} \left(\vec{P}\vec{k} \right)^2.$$

Таким образом, энергия связи частицы определяется логарифмически расходящимся на верхнем пределе интегралом (ультрафиолетовая расходимость):

$$E_{bs} = -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{L}{2}+1\right),\ L \to \infty, \tag{4}$$

где L – неопределенный параметр (импульс обрезания). Следовательно, энергия связи частицы стремится к бесконечности, а эффективная масса остается конечной:

$$m_{\text{eff}} \simeq 1 + \frac{f^2}{6\pi^2}.$$

Можно сравнить эти результаты с задачей о поляроне, в которой энергия связи частицы в основном состоянии и эффективная масса хорошо определены [7–11]:

$$E_{bs} \simeq -\alpha,\ m_{\text{eff}} \simeq 1 + \frac{\alpha}{6}.$$

Таким образом, для физически близких проблем применение теории возмущений приводит к качественно разным результатам. Это дает основание считать, что модификация теории возмущений может устранить ультрафиолетовую расходимость.

Базис неасимптотических состояний и итерационная схема

Как следует из формулы (3), при решении уравнения Шрёдингера в рамках теории возмущений используется базис асимптотически свободных состояний частицы и поля. Однако хорошо известно, что в задаче о поляроне в области сильной связи возникают состояния, в которых электрон описывается локализованными в пространстве волновыми функциями, качественно отличными от формулы (3). Как было показано в работе [12], использование асимптотически свободных состояний может быть причиной расходимости ряда теории возмущений. В связи с этим на основе операторного метода [13] была построена итерационная схема для численного расчета собственных значений E_s и собственных векторов $\left|\Psi_s\right\rangle$ с набором квантовых чисел s с использованием произвольного базисного набора векторов состояний для решения уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}\left|\Psi_s\right\rangle = E_s\left|\Psi_s\right\rangle.$$

В рамках операторного метода векторы состояний представляются следующим образом:

$$\left|\Psi_s\right\rangle = \left|\psi_s(\omega_s)\right\rangle + \sum_{l \neq s} C_{sl}\left|\psi_l(\omega_s)\right\rangle.$$

Здесь $\left|\psi_s(\omega_s)\right\rangle$ – базисный набор векторов состояний, зависящих от набора вариационных параметров ω_s.

Итерационные уравнения для собственных значений и коэффициентов разложения собственного волнового вектора имеют следующий вид [13]:

$$E_s^{(j)} = \left[1 + \sum_{l \neq s} C_{sl}^{(j-1)} I_{sl}\right]^{-1}\left[H_{ss} + \sum_{l \neq s} C_{sl}^{(j-1)} H_{sl}\right],$$

$$C_{sl}^{(i)} = \left[E_s^{(j-1)} - H_{gg}\right]^{-1}\left[H_{gs} - E_s^{(j-1)} I_{gs} + \sum_{l \neq s \neq g} C_{sl}^{(j-1)}\left(H_{gl} - E_s^{(j-1)} I_{gl}\right)\right],$$

$$C_{sl}^{(-1)} = C_{sl}^{(0)} = 0,\ E_s^{(0)} = H_{ss},$$

где j – индекс итерации.

Точное значение E_s определяется пределом последовательности:

$$E_s = \lim_{j \to \infty} E_s^{(j)},\ \ j = 0, 1, \ldots.$$

Приведем выражение для энергии, полученное после двух итераций:

$$E_s^{(1)} = E_s^{(0)} = H_{ss}, \tag{5}$$

$$E_s^{(2)} = \left[1 + \sum_{l \neq s} \frac{\left(H_{ls} - E_s^{(0)} I_{ls}\right) I_{sl}}{E_s^{(0)} - H_{ll}}\right]^{-1} \left[H_{ss} + \sum_{l \neq s} \frac{\left(H_{ls} - E_s^{(0)} I_{ls}\right) H_{sl}}{E_s^{(0)} - H_{ll}}\right]. \tag{6}$$

Подчеркнем, что в это выражение входят матричные элементы полного гамильтониана, в отличие от теории возмущений, где отдельно используются матричные элементы гамильтониана невозмущенной системы и оператора возмущения.

Как известно, собственные значения E_s не зависят от выбора базиса и его параметров, так что выполняются условия

$$\frac{\partial E_s}{\partial \omega_s^n} \equiv 0,\ n = \{1,\ 2,\ \ldots\}.$$

Начальные элементы последовательностей определяются формулами

$$E_s^{(0)}(\omega_s) = H_{ss}(\omega_s),\ C_{sl}^{(0)} = 0,\ \left|\Psi_s^{(0)}\right\rangle = \left|\psi_s^{(\omega_s)}\right\rangle,\ \frac{\partial E_s^{(0)}}{\partial \omega_s^n} = 0. \tag{7}$$

Приведенная итерационная схема оказалась эффективной для многих задач о взаимодействии квантовых систем с внешними полями (см., например, [14; 15]).

Согласно операторному методу [12] скорость сходимости итерационной схемы зависит от выбора базиса, который должен учитывать качественные особенности системы. В рассматриваемой задаче такой особенностью, которая не описывается базисом (3), является существование локализованного в пространстве состояния частицы. Взаимодействие частицы с полем приводит к смещению положения равновесия осцилляторов поля, что описывается каноническим преобразованием, соответствующим когерентному состоянию, с выделением классической компоненты $u_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}}$ с произвольной фазой:

$$\hat{a}_{\vec{k}}^{+} \to \hat{a}_{\vec{k}}^{+} + u_{\vec{k}}^{*} e^{i\vec{k}\vec{R}},\quad \hat{a}_{\vec{k}} \to \hat{a}_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{R}}.$$

В результате в гамильтониане выделяется потенциальное поле $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r} - \vec{R})}$, которое и приводит к локализованному состоянию частицы. С учетом этого базисный набор может быть выбран в виде

$$\left|\Psi(\vec{r},\ \vec{R})\right\rangle = \varphi(\vec{r} - \vec{R}) \exp\left(\sum_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}}^{*} e^{-i\vec{k}\vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}^{+} - u_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \hat{a}_{\vec{k}}\right)\right) |0\rangle. \tag{8}$$

Величины $u_{\vec{k}}$ и волновая функция $\varphi(\vec{r} - \vec{R})$ являются вариационными параметрами искомого базиса (играют роль параметров ω_s). Из условия (7) получаем уравнения для определения $u_{\vec{k}}$ и $\varphi(\vec{r} - \vec{R})$:

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{\delta u_{\vec{k}}} \left[\left\langle \Psi(\vec{r},\ \vec{R}) \right| \hat{H} \left| \Psi(\vec{r},\ \vec{R}) \right\rangle\right] = 0, \\ &\frac{\delta}{\delta \varphi(\vec{r} - \vec{R})} \left[\left\langle \Psi(\vec{r},\ \vec{R}) \right| \hat{H} \left| \Psi(\vec{r},\ \vec{R}) \right\rangle\right] = 0. \end{aligned} \tag{9}$$

Принимая во внимание гамильтониан (1), из первого условия в формуле (9) получаем

$$u_{\vec{k}} = -\frac{f}{\sqrt{2V\omega_{\vec{k}}^3}} \int d\vec{r} \left|\varphi(\vec{r})\right|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}}.$$

Второе условие в формуле (9) приводит к дифференциальному уравнению для функции $\varphi(\vec{r})$, однако с учетом свободы выбора вариационных функций для исследования задачи в аналитической форме используем нормированную пробную волновую функцию в виде

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{\gamma^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{3}{4}}} e^{-\frac{\gamma^2 r^2}{2}}, \tag{10}$$

где γ – вариационный параметр.

В результате классическая компонента поля $u_{\vec{k}}$ и фурье-образ волновой функции (10) имеют следующий вид:

$$u_{\vec{k}} = -\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{1}{\sqrt{k^3}}\int d\vec{r}\left|\varphi\left(\vec{r}\right)\right|^2 e^{-i\vec{k}\vec{r}} = -\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{e^{-\frac{k^2}{4\gamma^2}}}{\sqrt{k^3}}, \tag{11}$$

$$\varphi_{\vec{k}} = \int d\vec{r}\varphi\left(\vec{r}\right)e^{-i\vec{k}\vec{r}} = 2\sqrt{2}\frac{\pi^{\frac{3}{4}}}{\gamma^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{k^2}{2\gamma^2}} = \varphi_0 e^{-\frac{k^2}{2\gamma^2}}. \tag{12}$$

Состояния (8) вырождены по координате $\vec{R}$, но из них можно составить такую линейную комбинацию, которая будет собственной для оператора полного импульса $\hat{P}$:

$$\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle = \frac{1}{N_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\sqrt{V}}\int d\vec{R}\varphi_{\vec{P}_1}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\exp\left[\left(\vec{P}_1 - \vec{k}n_{\vec{k}}\right)\vec{R}\right]\times$$

$$\times\exp\left[\sum_{\vec{k}_1}\left(u_{\vec{k}_1}e^{-i\vec{k}_1\vec{R}}\hat{a}^{+}_{\vec{k}_1} - u^{*}_{\vec{k}_1}e^{i\vec{k}_1\vec{R}}\hat{a}_{\vec{k}_1}\right)\right]\left|n_k\right\rangle,$$

$$\hat{P}\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle = \vec{P}_1\left|\Psi^{(0)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle.$$

Здесь $N_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}$ – константа нормировки.

В частности, в нулевом приближении вектор основного состояния имеет вид

$$\left|\Psi^{gr}_{\vec{P}}\right\rangle = \frac{1}{N_{\vec{P}}\sqrt{V}}\int d\vec{R}\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\exp\left(i\vec{P}\vec{R} + \sum_{\vec{k}}\left(u^{*}_{\vec{k}}e^{-i\vec{k}\vec{R}}\hat{a}^{+}_{\vec{k}} - u_{\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{R}}\hat{a}_{\vec{k}}\right)\right)\left|0\right\rangle,$$

а соответствующая энергия $E^{(0)}_{gr}$ определяется формулой

$$E^{(0)}_{gr}\left(\vec{P},\, f\right) = \frac{P^2}{2} - \vec{P}\vec{L} + F + T_f\left(\vec{P}\right) + T_{\text{int}}\left(\vec{P}\right),$$

где

$$\vec{L} = \frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\vec{k}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^{*}_{\vec{P}}\left(\vec{r}\right)\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}-\vec{k}\right)\vec{R}},$$

$$F = \frac{1}{2}\frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k},\,\vec{q}}\vec{k}\vec{q}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\left|u_{\vec{q}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^{*}\left(\vec{r}\right)\varphi\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{i\vec{P}\vec{R}+\Theta\left(\vec{R}\right)-i\left(\vec{k}+\vec{q}\right)\vec{R}},$$

$$T_f\left(\vec{P}\right) = \frac{1}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\left(k + \frac{k^2}{2}\right)\left|u_{\vec{k}}\right|^2\int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^{*}_{\vec{P}}\left(\vec{r}\right)\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}-\vec{k}\right)\vec{R}},$$

$$T_{\text{int}}\left(\vec{P}\right) = \frac{f}{\left|N_{\vec{P}}\right|^2}\sum_{\vec{k}}\frac{u_{\vec{k}}}{\sqrt{2kV}}\int d\vec{R}d\vec{r}\left(\varphi^{*}_{\vec{P}}\left(\vec{r}+\vec{R}\right)\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}\right) + \varphi^{*}_{\vec{P}}\left(\vec{r}\right)\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\left(\vec{P}\vec{R}+\vec{k}\vec{r}\right)},$$

$$\Theta\left(\vec{R}\right) = \sum_{\vec{k}}\left|u_{\vec{k}}\right|^2\left(e^{-i\vec{k}\vec{R}} - 1\right),$$

$$\left|N_{\vec{P}}\right|^2 = \int d\vec{R}d\vec{r}\varphi^{*}_{\vec{P}}\left(\vec{r}\right)\varphi_{\vec{P}}\left(\vec{r}-\vec{R}\right)e^{\Theta\left(\vec{R}\right)+i\vec{P}\vec{R}}.$$

Уравнения (5) и (6) для поправки второго порядка принимают вид

$$E^{(2)} = \frac{E^{(0)}_{gr} + \sum\limits_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}\neq 0}C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\left\langle\Psi^{gr}_{\vec{P}}\right|\hat{H}\left|\Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle}{1 + \sum\limits_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}\neq 0}C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\left\langle\Psi^{gr}_{\vec{P}}\middle|\Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}}\right\rangle},$$

$$C^{(1)}_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} = \frac{E^{(0)}_{gr}\left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle - \left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle}{H_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}};\, \vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} - E^{(0)}_{gr}},$$

$$H_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}};\, \vec{P}_2,\, n_{1\vec{k}}} = \left\langle \Psi_{\vec{P}_1,\, n_{\vec{k}}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi_{\vec{P}_2,\, n_{1\vec{k}}} \right\rangle,\; E^{(0)}_{gr} = \left\langle \Psi^{gr}_{\vec{P}} \middle| \hat{H} \middle| \Psi^{gr}_{\vec{P}} \right\rangle.$$

Подчеркнем, что все матричные элементы вычисляются с полным гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\vec{P}^2 - 2\sum_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \vec{k}\vec{P} + \left(\sum_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} \vec{k} \right)^2 \right) + \sum_{\vec{k}} \omega_{\vec{k}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} +$$

$$+ \frac{f}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}} \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}_{\vec{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{r}} \hat{a}^+_{\vec{k}} \right).$$

В настоящей работе исследуется характер особенности энергии основного состояния $E^{(0)}_{gr}$ при малой константе связи. Для покоящейся частицы ($\vec{P} = 0$) получаем

$$E^{(0)}_{gr}(0,\, f) = -f^2 \frac{\left(-4 + \sqrt{2}\right)^2}{32\pi},\; \gamma = \frac{\sqrt{3\pi}}{2}\left(4 - \sqrt{2}\right).$$

Вычисляя энергию системы при малом $\vec{P} \neq 0$, находим эффективную массу системы:

$$E^{(0)}_{gr}\left(\vec{P},\, f\right) \approx E^{(0)}_{gr}\left(0,\, f\right) + \frac{P^2}{2}\left[1 - \frac{f^2}{9\pi^2}\frac{17 - \sqrt{2}}{21}\right],$$

$$m^{(0)}_{\text{eff}} = 1 + \frac{f^2}{9\pi^2}\frac{17 - \sqrt{2}}{21}.$$

Таким образом, при использовании неасимптотического базиса масса и энергия системы в нулевом приближении не содержат ультрафиолетовых расходимостей.

Энергия и эффективная масса во второй итерации

Вычисление энергии для покоящейся частицы ($\vec{P} = 0$) во второй итерации связано с учетом промежуточных однофононных состояний, что приводит к следующему выражению:

$$E^{(2)}(0,\, f) = \frac{U}{D},$$

где

$$U = E^{(0)}_{gr} + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varphi^2_{\vec{k}}\varphi^2_0}\left[-u_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(\frac{k^2}{2} + k\right) - \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}} - v_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr}\right)\right] \times$$

$$\times \left[u_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(\frac{k^2}{2} + k\right) + \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}} + u_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}}\right) - E^{(0)}_{gr} u_{\vec{k}}\varphi^2_0 \right] \times$$

$$\times \left[\frac{k^2}{2} + k + f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr} \right]^{(-1)},$$

$$D = 1 + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\varphi^2_{\vec{k}}\varphi^2_0} \frac{\left[-u_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(\frac{k^2}{2} + k\right) - \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}} - u_{\vec{k}}\varphi^2_{\vec{k}}\left(f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr}\right)\right] u_{\vec{k}}\left(\varphi^2_{\vec{k}} - \varphi^2_0\right)}{\frac{k^2}{2} + k + f^2 T_{\vec{k}} + f^4 S_{\vec{k}} - E^{(0)}_{gr}},$$

$$T_{\vec{k}} = \vec{k}\vec{T}_{\vec{k}}^{(1)} + T_{\vec{k}}^{(2)} + T_{\vec{k}}^{(3)},$$

$$\vec{T}_{\vec{k}}^{(1)} = \frac{\vec{k}}{k^2}\frac{\gamma^2}{32\pi^2}\frac{4k - e^{\frac{2k^2}{3\gamma^2}}\sqrt{6\pi}\gamma\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right)}{k},$$

$$T_{\vec{k}}^{(2)} = \frac{\gamma^2}{96\pi^2}\frac{\sqrt{6\pi}\gamma e^{\frac{2k^2}{3\gamma^2}}\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right) + 6\pi\,\mathrm{erfi}\left(\frac{\sqrt{2/3}k}{\gamma}\right)}{k},$$

$$T_{\vec{k}}^{(3)} = -\frac{\gamma^2}{4\pi}\frac{\mathrm{erfi}\left(\frac{k}{\sqrt{3}\gamma}\right)}{k},$$

$$S_{\vec{k}} \approx \frac{5^{\frac{1}{2}}\gamma^2}{4(2\pi)^3 3^5}e^{\frac{4k^2}{5\gamma^2}}\frac{\frac{2k^2}{15\gamma^2} - 1}{\left(1 + \frac{4k^2}{45\gamma^2}\right)^3}.$$

Здесь $\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-\tau^2}d\tau$ – функция ошибок; $\mathrm{erfi}(x) = -i\,\mathrm{erf}(ix)$ – функция ошибок от мнимого аргумента.

В пределе слабой связи величина U определяется двумя сходящимися суммами:

$$U \approx E_{gr}^{(0)} + \sum_{\vec{k}<\vec{k}_0}\frac{-\left(u_{\vec{k}}\frac{\varphi_{\vec{k}}}{\varphi_0}\left(\frac{k^2}{2} + k\right) + \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{1}{\sqrt{k}}\right)^2}{\frac{k^2}{2} + k} + \sum_{\vec{k}>\vec{k}_0}\frac{\left(-\frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}}\right)\left(-E_{gr}^{(0)}u_{\vec{k}}\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2 f^2 T_{\vec{k}}}. \qquad (13)$$

Точка k_0 является решением следующего уравнения:

$$\frac{k^2}{2} + kf^2T_{\vec{k}} - E_{gr}^{(0)} = 0 \Rightarrow k_0 \sim \gamma\sqrt{3|\ln f|}.$$

Хорошо определенное и сходящееся выражение получается и для величины D:

$$D \approx 1 + \sum_{\vec{k}<\vec{k}_0}\frac{-\left(u_{\vec{k}}\frac{\varphi_{\vec{k}}^2}{\varphi_0^2}\left(\frac{k^2}{2} + k\right) + \frac{f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}}{\varphi_0\sqrt{k}}\right)u_{\vec{k}}\left(\varphi_{\vec{k}}^2 - \varphi_0^2\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2\left(\frac{k^2}{2} + k\right)} +$$

$$+ \sum_{\vec{k}>\vec{k}_0}\frac{\left(\frac{-f}{\sqrt{2V}}\frac{\varphi_{\vec{k}}\varphi_0}{\sqrt{k}}\right)u_{\vec{k}}\left(\frac{\varphi_{\vec{k}}^2}{\varphi_0^2} - 1\right)}{\varphi_{\vec{k}}^2 f^2 T_{\vec{k}}}. \qquad (14)$$

Детали вычислений более подробно описаны в работе [16].

Подставляя значения $\varphi_{\vec{k}}$ и $u_{\vec{k}}$ из формул (11) и (12) в уравнения (13) и (14), находим следующие приближенные аналитические формулы для U и D:

$$U \approx E_{gr}^{(0)} - \left[\frac{f^2\gamma}{24\pi^2}\left(\sqrt{6\pi}\,\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{3/2}k_0}{\gamma}\right) + \gamma - \gamma e^{-\frac{3k_0^2}{2\gamma^2}}\right) - \frac{f^2\gamma}{2\sqrt{3}\pi^{\frac{3}{2}}}\mathrm{erf}\left(\frac{\sqrt{3}k_0}{2\gamma}\right)\right] -$$

$$-\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{k_0}{2} + 1\right) + E_{gr}^{(0)}\frac{12\sqrt{6\pi}}{5\gamma\pi}e^{-\frac{5k_0^2}{12\gamma^2}},$$

$$D \approx 1 + \frac{f^2}{12\pi^2}\left(1 - e^{-\frac{3k_0^2}{2\gamma^2}}\right) - f^2 h\left(\frac{k_0}{\gamma}\right) - \frac{144\sqrt{6\pi}}{25\gamma\pi}\left(1 + \frac{5}{12}\frac{k_0^2}{\gamma^2}\right)e^{-\frac{5k_0^2}{12\gamma^2}},$$

$$h(x) = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^x \frac{\tau d\tau}{1 + \frac{\tau}{2}} e^{-\frac{3\tau^2}{4}}.$$

При малой константе связи $D \approx 1$, и вторая итерация для энергии основного состояния дает следующий результат:

$$E^{(2)}(0,\ f) \approx U \approx -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{k_0}{2} + 1\right) = -\frac{f^2}{2\pi^2}\ln\left(\frac{\gamma\sqrt{3|\ln f|}}{2} + 1\right),\ f \ll 1, \tag{15}$$

который показывает, что энергия имеет логарифмическую особенность в пределе малой константы связи и, как следствие, ее нельзя разложить в степенной ряд по f.

Выражение (15) по форме совпадает с результатом, полученным по теории возмущений (4). Существенное отличие между ними состоит в том, что импульс обрезания является параметром, связанным с внутренним свойством системы. Таким образом, энергия основного состояния не является аналитической функцией при $f = 0$, по этой причине применение теории возмущений к рассматриваемой модели приводит к расходящимся интегралам.

Чтобы получить перенормированную массу в итерации второго порядка, мы должны вычислить вторую итерацию для энергии движущейся частицы ($\vec{P} \neq 0$). В случае малых f имеем

$$E^{(2)}(\vec{P},\ f) = E^{(2)}(0,\ f) + \frac{P^2}{2} - \frac{f^2}{2V}\sum_{\vec{k} < \vec{k}_0} \frac{\left(\vec{P}\vec{k}\right)^2}{k\left(\frac{k^2}{2} + k\right)^3}.$$

Тогда перенормированная масса соответствует выражению

$$m_{\text{eff}}^{(2)} \approx 1 + \frac{f^2}{6\pi^2}.$$

Как и следовало ожидать, этот результат совпадает с выражением, полученным в рамках стандартной теории возмущений, в которой эффективная масса не содержит расходящихся интегралов.

Заключение

В настоящей работе построена итерационная схема для описания системы, которая включает частицу, взаимодействующую со скалярным квантовым полем. Показано, что ультрафиолетовая расходимость, возникающая при вычислении энергии данной системы в рамках теории возмущений, устраняется при использовании базисного набора неасимптотических волновых функций. При этом эффективный импульс обрезания, который определяет сходимость интегралов, зависит от параметров самой системы. Причиной расходимости при использовании теории возмущений является логарифмическая особенность энергии системы при малой константе связи.

Библиографические ссылки

1. Dyson FJ. The *S* matrix in quantum electrodynamics. *Physical Review.* 1949;75(11):1736–1755. DOI: 10.1103/PhysRev.75.1736.
2. Gell-Mann M, Low FE. Quantum electrodynamics at small distances. *Physical Review.* 1954;95(5):1300–1312. DOI: 10.1103/PhysRev.95.1300.
3. 't Hooft G. Renormalization of massless Yang – Mills fields. *Nuclear Physics B.* 1971;33(1):173–199. DOI: 10.1016/0550-3213(71)90395-6.
4. 't Hooft G, Veltman M. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nuclear Physics B.* 1972;44(1):189–213. DOI: 10.1016/0550-3213(72)90279-9.
5. Feynman RP. The development of the space-time view of quantum electrodynamics. *Science.* 1966;153(3737):699–708. DOI: 10.1126/science.153.3737.699.
6. Kibble TWB. Coherent soft-photon states and infrared divergences. II. Mass-shell singularities of Green's functions. *Physical Review.* 1968;173(5):1527–1535. DOI: 10.1103/PhysRev.173.1527.

7. Fröhlich H. Electrons in lattice fields. *Advances in Physics.* 1954;3(11):325–361. DOI: 10.1080/00018735400101213.

8. Gerlach B, Löwen H. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not? *Reviews of Modern Physics.* 1991;63(1):63–90. DOI: 10.1103/RevModPhys.63.63.

9. Mitra TK, Chatterjee A, Mukhopadhyay S. Polarons. *Physics Reports.* 1987;153(2–3):91–207. DOI: 10.1016/0370-1573(87)90087-1.

10. Feynman RP. Slow electrons in a polar crystal. *Physical Review.* 1955;97(3):660–665. DOI: 10.1103/PhysRev.97.660.

11. Spohn H. Effective mass of the polaron: a functional integral approach. *Annals of Physics.* 1987;175(2):278–318. DOI: 10.1016/0003-4916(87)90211-9.

12. Feranchuk ID, Fisher SI, Komarov LI. Analysis of the polaron problem on the basis of the operator method. *Journal of Physics C: Solid State Physics.* 1984;17(24):4309–4318. DOI: 10.1088/0022-3719/17/24/012.

13. Feranchuk ID, Komarov LI. The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A.* 1982;88(2):211–214. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90229-8.

14. Леонов АВ. О сходимости итерационной схемы операторного метода для описания собственных состояний квантовой модели Раби. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2018;3:74–80.

15. Леонов АВ, Феранчук ИД. Аналитическая диагонализация гамильтониана квантовой модели Раби в кулоновской калибровке. *Журнал Белорусского государственного университета. Физика.* 2022;1:44–51. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-1-44-51.

16. Skoromnik OD, Feranchuk ID, Lu DV, Keitel CH. Regularization of ultraviolet divergence for a particle interacting with a scalar quantum field. *Physical Review D.* 2015;92(12):125019. DOI: 10.1103/PhysRevD.92.125019.

References

1. Dyson FJ. The *S* matrix in quantum electrodynamics. *Physical Review.* 1949;75(11):1736–1755. DOI: 10.1103/PhysRev.75.1736.

2. Gell-Mann M, Low FE. Quantum electrodynamics at small distances. *Physical Review.* 1954;95(5):1300–1312. DOI: 10.1103/PhysRev.95.1300.

3. ’t Hooft G. Renormalization of massless Yang – Mills fields. *Nuclear Physics B.* 1971;33(1):173–199. DOI: 10.1016/0550-3213(71)90395-6.

4. ’t Hooft G, Veltman M. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nuclear Physics B.* 1972;44(1):189–213. DOI: 10.1016/0550-3213(72)90279-9.

5. Feynman RP. The development of the space-time view of quantum electrodynamics. *Science.* 1966;153(3737):699–708. DOI: 10.1126/science.153.3737.699.

6. Kibble TWB. Coherent soft-photon states and infrared divergences. II. Mass-shell singularities of Green’s functions. *Physical Review.* 1968;173(5):1527–1535. DOI: 10.1103/PhysRev.173.1527.

7. Fröhlich H. Electrons in lattice fields. *Advances in Physics.* 1954;3(11):325–361. DOI: 10.1080/00018735400101213.

8. Gerlach B, Löwen H. Analytical properties of polaron systems or: Do polaronic phase transitions exist or not? *Reviews of Modern Physics.* 1991;63(1):63–90. DOI: 10.1103/RevModPhys.63.63.

9. Mitra TK, Chatterjee A, Mukhopadhyay S. Polarons. *Physics Reports.* 1987;153(2–3):91–207. DOI: 10.1016/0370-1573(87)90087-1.

10. Feynman RP. Slow electrons in a polar crystal. *Physical Review.* 1955;97(3):660–665. DOI: 10.1103/PhysRev.97.660.

11. Spohn H. Effective mass of the polaron: a functional integral approach. *Annals of Physics.* 1987;175(2):278–318. DOI: 10.1016/0003-4916(87)90211-9.

12. Feranchuk ID, Fisher SI, Komarov LI. Analysis of the polaron problem on the basis of the operator method. *Journal of Physics C: Solid State Physics.* 1984;17(24):4309–4318. DOI: 10.1088/0022-3719/17/24/012.

13. Feranchuk ID, Komarov LI. The operator method of the approximate solution of the Schrödinger equation. *Physics Letters A.* 1982;88(2):211–214. DOI: 10.1016/0375-9601(82)90229-8.

14. Leonau AU. Investigating the convergence of the iteration scheme of operator method for description of eigenstates of the quantum Rabi model. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2018;3:74–80. Russian.

15. Leonau AU, Feranchuk ID. Analytical diagonalisation of the Hamiltonian of the quantum Rabi model in the Coulomb gauge. *Journal of the Belarusian State University. Physics.* 2022;1:44–51. Russian. DOI: 10.33581/2520-2243-2022-1-44-51.

16. Skoromnik OD, Feranchuk ID, Lu DV, Keitel CH. Regularization of ultraviolet divergence for a particle interacting with a scalar quantum field. *Physical Review D.* 2015;92(12):125019. DOI: 10.1103/PhysRevD.92.125019.

Получена 26.09.2022 / исправлена 11.10.2022 / принята 20.10.2022.
Received 26.09.2022 / revised 11.10.2022 / accepted 20.10.2022.