сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-81-65

Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.)

АСПЕКТЫ ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА

1981

P17-81-65

Н.Н.Боголюбов, Н.Н.Боголюбов (мл.)

АСПЕКТЫ ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА

С О Д Е Р Ж А Н И Е

В настоящем подходе к исследованию теории полярной модели показывается эффективность использования T -произведений, которые оказываются удобным аппаратом для вычисления термодинамических средних. Большое внимание уделяется исследованию "линейного поляронного гамильтониана", подробно вычисляются корреляционные функции, спектральная функция, функции Грина и свободная энергия для такой системы. Показано, что линейный поляронный гамильтониан является точно решаемой модельной системой, и поэтому решения, получаемые с его помощью, справедливы для любых значений константы связи.

Далее, на основе вариационной техники рассмотрена возможность сведения обычного поляронного гамильтониана к аппроксимирующему "линейному модельному гамильтониану". При этом анонсируется строгое вычисление свободной энергии с помощью специального метода, позволяющего свести задачу к расчетам средних от T-произведений, что, по нашему мнению, оказывается гораздо проще и удобнее, чем сходное вычисление, например, с помощью континуальных интегралов или интегралов Фейнмана /1,2/. Здесь мы можем также отметить нашу работу /4/, в которой показано, что результаты статей /7,8/, касающиеся вычисления импеданса в модели полярона, могут быть получены непосредственно, без использования метода континуального интегрирования.

Нами в рамках функционального метода проводится также изучение термодинамики поляронной системы. Предлагается вычисление свободной энергии и функции распределения по импульсам.

Заметим еще, что поляронные системы с сильной связью /9/ оказались полезными в различных квантовополевых моделях в связи с попытками построения динамических моделей составных частиц. Строгое решение специальной поляронной проблемы с сильной связью, описывающей взаимодействие нерелятивистской частицы с квантовым полем, было проведено Н.Н.Боголюбовым /3/. Дальнейшему развитию и обобщению метода Н.Н.Боголюбова посвящены работы А.Н.Тавхелидзе, В.К.Федянина, О.А.Хрусталева и др. /10-13/.

Отметим также, что эффекты электрон-фононного взаимодействия играют важную роль в многочисленных вопросах современной теории твердого тела, см., например, /7,14/.

Настоящая работа представляет собой серию лекций, прочитанных на физическом факультете Московского государственного университета в качестве спецкурса.

§I. ЛИНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛЯРОНА. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ, ФУНКЦИЙ ГРИНА И СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

I. Введение линейной модели

Рассмотрим линейную модель полярона, характеризуемую гамильтонианом, состоящим из гамильтонианов осциллятора H_S, фононного поля H_Σ и взаимодействия $H_{S\Sigma}$, т.е.

$$H_{S+\Sigma} = H_S + H_\Sigma + H_{S\Sigma}, \tag{I.I}$$

где
$$H_S = \frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{K^2\bar{r}^2}{2},$$

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{(f)}\left(p_f \cdot p_f^* + \nu^2(f) q_f q_f^*\right),$$
$$H_{S\Sigma} = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} S(f)(\bar{f}\cdot\bar{r})\, q_f .$$

Здесь $\bar{r}$, $\bar{p}$ – положение и импульс электрона;
$S(f) = S(|f|)$ – вещественная радиально-симметричная функция:

$$\nu(f) = \nu(|f|) > 0,$$

$$q_{-f} = q_f^*, \quad p_{-f} = p_f^* .$$

Суммирование по f производится по множеству квазидискретных значений:

$$f = \left(\frac{2\pi n_1}{L}, \frac{2\pi n_2}{L}, \frac{2\pi n_3}{L}\right); \quad L^3 = V$$ – объем системы,

где n_1, n_2, n_3 – целые числа.

Общее число N осцилляторов предполагается конечным для конечного объема V (далее, как обычно, $N \to \infty$, $V \to \infty$ при $N/V = const$).

Отметим тождество

$$\frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu^2(f)\left(q_f - \frac{i(\bar{f}\cdot\bar{r})}{\nu^2(f)}\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}}\right)\left(q_f^* + \frac{i(\bar{f}\cdot\bar{r})}{\nu^2(f)}\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}}\right) =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu^2(f) q_f\cdot q_f^* + \frac{1}{2}\sum_{(f)}\frac{1}{\nu^2(f)}\,\frac{S^2(f)}{V}(\bar{f}\cdot\bar{r})^2 +$$
$$+ \frac{1}{2} i \sum_{(f)}\left\{(\bar{f}\cdot\bar{r}) q_f - (\bar{f}\cdot\bar{r}) q_f^*\right\}\frac{S(f)}{\sqrt{V}} .$$

Ясно, что

$$-i\sum_{(f)}(\bar{f}\cdot\bar{r}) q_f^*\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}} = -\frac{1}{\sqrt{V}}\, i\sum_{(f)}(\bar{f}\cdot\bar{r}) q_{-f}\, S(-f) =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{V}}\, i\sum_{(f)}(\bar{f}\cdot\bar{r}) q_f\cdot S(f),$$

где учтено свойство $q_{-f} = q_f^*$.

Благодаря свойству радиальной симметрии

$$\sum_{(f)} F(|f|) f_\alpha f_\beta = \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{3}\sum_{(f)} F(|f|) f^2 ,$$
$$|f| = +\sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2},$$
$$f^2 = \text{скаляр}$$

$$\frac{1}{2V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}(\bar{f}\cdot\bar{r})^2 = \frac{\bar{r}^2}{6V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f) f^2}{\nu^2(f)} .$$

Отсюда видим, что потенциальную энергию можем записать в виде

$$U = \frac{K^2\bar{r}^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu^2(f) q_f q_f^* + \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} S(f)(\bar{f}\cdot\bar{r}) q_f = \tag{I.2}$$
$$= \frac{(K^2 - K_0^2)\bar{r}^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{(f)}\nu^2(f)\left(q_f - \frac{i(\bar{f}\cdot\bar{r})}{\nu^2(f)}\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}}\right)\left(q_f^* + \frac{i(\bar{f}\cdot\bar{r})}{\nu^2(f)}\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}}\right),$$

где
$$K_0^2 = \frac{1}{3V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f) f^2}{\nu^2(f)} .$$

Рассмотрим случай $K^2 = K_0^2$.

Если $K = K_0$,

тогда $U \geq 0$,

и $U = 0$, когда $q_f = \frac{i(\bar{f}\cdot\bar{r})}{\nu^2(f)}\,\frac{S(f)}{\sqrt{V}}$.

Запишем кинетическую энергию, которая, очевидно, положительна:

$$\frac{\bar{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{(f)}|p_f|^2 .$$

Введем нормальные координаты Q_λ. Тогда $\bar{r}$, q_f будут линейными комбинациями Q_λ.

Заметим, что при $K=K_0$ наша система (I.I) описывается гамильтонианом $H=T+U$, где обе квадратичные формы положительно определены. Линейным преобразованием координат, как показывается в линейной алгебре, можно привести обе эти формы одновременно к диагональному виду, и в новых нормальных координатах Q_λ гамильтониан будет

$$H=\sum_\lambda\left(\dot Q_\lambda^2+\Omega_\lambda^2 Q_\lambda^2\right).$$

При этом Q_λ удовлетворяют уравнению

$$\ddot Q_\lambda+\Omega_\lambda^2 Q_\lambda=0.$$

При $K=K_0$ соотношение (I.2) показывает, что U становится равным нулю только, если q_f принадлежат 3-мерному множеству:

$$q_f=\frac{i(f\cdot r)\,S(f)}{\nu^2(f)\cdot\sqrt V}.$$

Другими словами, при $K=K_0$ гамильтониан H будет инвариантен по отношению к трехмерной группе трансляций:

$$\vec r\to\vec r+\vec R,\qquad q_f\to q_f+\frac{i(\vec f\cdot\vec R)}{\nu^2(f)}\cdot\frac{S(f)}{\sqrt V}.$$

Поэтому точно три компоненты из Ω_λ^2 будут нулями, все другие Ω_λ^2 будут положительны. Мы, таким образом, имеем три моды

$$\ddot Q_\alpha=0,$$

соответствующие инерциальному движению.

Таким образом, при $K=K_0$ $\vec r(t)$ содержит равномерное инерциальное движение, на которое наложены гармонические колебания.

Отметим также, что, когда

$$K<K_0,$$

форма U не положительна, так что некоторые Ω_λ^2 должны быть отрицательны, и движение будет неустойчивым и будет характеризоваться экспоненциально возрастающей функцией времени t.

Далее нас будет интересовать случай

$$K=K_0.$$

Но с точки зрения вычислительных упрощений будет удобнее взять

$$K^2=K_0^2+\gamma^2, \tag{I.3}$$

а затем совершить предельный переход $\gamma\to 0$ (перед обычным предельным переходом $V\to\infty$).

Заметим, что, поскольку $\gamma^2>0$, форма U положительно определена, и поэтому все Ω_λ^2 будут положительны. Таким образом, в этом случае все $\vec r$, $\vec p$, q_f, p_f будут представлены суммами гармонических колебаний.

2. Уравнения движения

Введем бозе-амплитуды b_f, b_f^+:

$$q_f=\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}(b_f+b_{-f}^+),\qquad (b_f b_f^+-b_f^+ b_f=1)$$

$$p_f=i\left(\frac{\hbar\nu(f)}{2}\right)^{1/2}(b_f^+-b_{-f}).$$

Отсюда видим, что

$$q_{-f}=q_f^*;\quad p_{-f}=p_f^*,$$

а также

$$[q_f,p_f]=\frac{q_f p_f-p_f q_f}{i\hbar}=1.$$

Наш гамильтониан примет вид

$$H=\frac{\vec p^2}{2m}+\frac12(K_0^2+\gamma^2)\vec r^2+i\sum_{(f)}\frac{1}{\sqrt V}S(f)\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}(\vec f\cdot\vec r)(b_f+b_{-f}^+)+$$
$$+\sum_{(f)}\hbar\nu(f)b_f^+b_f+\frac12\sum_{(f)}\hbar\nu(f). \tag{I.4}$$

Запишем уравнения движения для этого гамильтониана:

1) $\dfrac{d\vec r}{dt}=\dfrac{\partial H}{\partial\vec p}$,

2) $\dfrac{d\vec p}{dt}=-\dfrac{\partial H}{\partial\vec r}$,

3) $i\hbar\dfrac{db_f}{dt}=b_fH-Hb_f$,

4) $i\hbar\dfrac{db_{-f}^+}{dt}=b_{-f}^+H-Hb_{-f}^+$.

Раскрывая правые части этих уравнений, найдем:

$$1)\ m\frac{d\vec{r}}{dt}=\vec{p},$$

$$2)\ \frac{d\vec{p}}{dt}=-(k_0^2+\gamma^2)\vec{r}-\frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)}S(f)\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}\vec{f}(b_f+b^+_{-f}),$$
(I.5)

$$3)\ i\hbar\frac{db_f}{dt}=\hbar\,\nu(f)b_f-\frac{i}{\sqrt{V}}\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}S(f)(\vec{f}\cdot\vec{r}),$$

$$4)\ i\hbar\frac{db^+_{-f}}{dt}=-\hbar\,\nu(f)b^+_{-f}+\frac{i}{\sqrt{V}}\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}S(f)(\vec{f}\cdot\vec{r}).$$

В дальнейшем эту систему уравнений (I.5) мы хотим переконструировать в систему уравнений для функций Грина, что даст нам возможность явно вычислить такие функции, как $\langle\langle r_\alpha, r_\beta\rangle\rangle$, $\langle\langle p_\alpha, p_\beta\rangle\rangle$, спектральную функцию $J_{p_\alpha p_\beta}$, а поэтому и равновесные корреляционные функции $\langle p_\alpha(t)\ p_\beta(\tau)\rangle$, взятые по гамильтониану (I.4).

Напомним поэтому определения двухвременных корреляционных и гриновских функций [5,6]. Для двух операторов в представлении Гейзенберга $A(t)$ и $B(\tau)$ составим корреляционные функции:

$$\langle A(t)\cdot B(\tau)\rangle_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}J_{A,B}(\omega)e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega,$$

$$\langle B(\tau)\cdot A(t)\rangle_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}J_{A,B}(\omega)e^{-\beta\omega\hbar}\cdot e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega,\qquad(I.6)$$

$$\beta=\frac{1}{\theta}=\frac{1}{K_BT}.$$

K_B – постоянная Больцмана,

T – температура.

Запаздывающие и опережающие функции Грина определим как обычно [6]:

$$\langle\langle A(t),B(\tau)\rangle\rangle_{ret}=\theta(t-\tau)\langle[A(t),\ B(\tau)]\rangle_{eq}=$$

$$=\theta(t-\tau)\ \frac{\langle A(t)\ B(\tau)-B(\tau)\cdot A(t)\rangle_{eq}}{i\hbar},\qquad(I.7)$$

$$\langle\langle A(t)\cdot B(\tau)\rangle\rangle_{adv}=-\theta(\tau-t)\langle[A(t),B(\tau)]\rangle_{eq}.$$

Здесь под $\langle\ldots\rangle_{eq}$ понимается усреднение по гамильтониану (I.4):

$$\langle\ldots\rangle_{eq}=\frac{Sp\,e^{-\frac{H}{\theta}}(\ldots)}{Sp\,e^{-\frac{H}{\theta}}}.$$

Введем функцию комплексной переменной Ω, $Im\,\Omega\neq 0$,

$$\langle\langle A,B\rangle\rangle_\Omega=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}J_{A,B}(\nu)\ \frac{1-e^{-\beta\nu\hbar}}{\Omega-\nu}d\nu.\qquad(I.8)$$

Тогда спектральные представления для опережающей и запаздывающей функций Грина записываются в виде

$$\langle\langle A(t),B(\tau)\rangle\rangle_{ret}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}\,e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega,$$
(I.9)
$$\langle\langle A(\tau),B(\tau)\rangle\rangle_{adv}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}\,e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega.$$

Учитывая формулу

$$\frac{1}{\omega-\nu\pm i\varepsilon}=\mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega-\nu}\right)\mp i\pi\delta(\omega-\nu),\qquad(I.10)$$

имеем важное соотношение

$$\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega+i\varepsilon}-\langle\langle A,B\rangle\rangle_{\omega-i\varepsilon}=-\frac{2\pi i}{\hbar}J_{A,B}(\omega)\cdot(1-e^{-\beta\hbar\omega}).\qquad(I.11)$$

Построим теперь систему уравнений для гриновских функций (I.7).

Учитывая, что

$$\frac{d}{dt}\theta(t)=\delta(t),\qquad\frac{d}{dt}\theta(-t)=-\delta(t),$$

имеем

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t),B(\tau)\rangle\rangle_{\substack{ret\\adv}}=\delta(t-\tau)\langle AB-BA\rangle\frac{1}{\hbar}+$$

$$+\langle\langle i\frac{dA(t)}{dt},B(\tau)\rangle\rangle_{\substack{ret\\adv}}. \qquad (I.12)$$

Откуда в " Ω -представлении" получим

$$\Omega\langle\langle A,B\rangle\rangle_\Omega=\frac{1}{\hbar}\langle AB-BA\rangle+\langle\langle i\frac{dA}{dt},B\rangle\rangle_\Omega \qquad (I.13)$$

или

$$-i\Omega\langle\langle A,B\rangle\rangle_\Omega=\frac{1}{i\hbar}\langle AB-BA\rangle+\langle\langle\frac{dA}{dt},B\rangle\rangle_\Omega.$$

Отметим еще одно полезное тождество*:

$$\langle B(\tau)A(t)\rangle_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(\omega)e^{-i\omega(\tau-t)}d\omega=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(-\omega)e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega,$$

где $\mathcal{J}_{B,A}(-\omega)=\mathcal{J}_{A,B}(\omega)e^{-\beta\omega\hbar}$ (см.(I.6)).

Из (I.8) имеем $\begin{pmatrix}A\to B\\B\to A\end{pmatrix}$,

$$\langle\langle B,A\rangle\rangle_\Omega=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(\nu)\frac{1-e^{-\beta\nu\hbar}}{\Omega-\nu}d\nu=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(-\nu)\frac{1-e^{\beta\nu\hbar}}{\Omega+\nu}d\nu=$$

$$=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{A,B}(\nu)e^{-\beta\nu\hbar}\left(\frac{1-e^{\beta\nu\hbar}}{\Omega+\nu}\right)=\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{A,B}(\nu)\frac{1-e^{-\beta\nu\hbar}}{-\Omega-\nu}d\nu.$$

Таким образом, имеем свойство

$$\langle\langle B,A\rangle\rangle_\Omega=\langle\langle A,B\rangle\rangle_{-\Omega}\quad,\ \mathcal{J}m\,\Omega\neq 0. \qquad (I.14)$$

3. Двухвременные корреляционные и гриновские функции для рассматриваемой линейной модели

Исходя из (I.5) и (I.13), построим систему уравнений для функций Грина в линейной модели*:

$$-im\Omega\langle\langle \tau_\alpha,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega=\langle\langle p_\alpha,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega, \qquad (I.15)$$

$$-i\Omega\langle\langle p_\alpha,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega=-\delta_{\alpha,\beta}-(k_0^2-\eta^2)\langle\langle\tau_\alpha,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega-$$

$$-\frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)}S(f)\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}f_\alpha\langle\langle b_f+b^+_{-f},\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega, \qquad (I.16)$$

$$\begin{cases}\hbar\Omega\langle\langle b_f,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega=\hbar\nu(f)\langle\langle b_f,\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega-\frac{i}{\sqrt{V}}\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}S(f)\langle\langle\bar{f}\cdot\bar{\tau},\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega,\\ \hbar\Omega\langle\langle b_{-f},\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega=-\hbar\nu(f)\langle\langle b^+_{-f},\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega+\frac{i}{\sqrt{V}}\left(\frac{\hbar}{2\nu(f)}\right)^{1/2}S(f)\langle\langle\bar{f}\cdot\bar{\tau},\tau_\beta\rangle\rangle_\Omega.\end{cases} \qquad (I.17)$$

---

* Пояснение: запишем равенство

$$\langle A(t)B(\tau)\rangle_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{A,B}(\omega)e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega.$$

Делая здесь замены $A\to B,\ t\to\tau,$
$B\to A,\ \tau\to t,$

имеем

$$\langle B(\tau)A(t)\rangle_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(\omega)e^{-i\omega(\tau-t)}d\omega=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}_{B,A}(-\omega)e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega.$$

* $\bar{\tau}=(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$; $\bar{p}=(p_1,p_2,p_3)$; $p_\alpha\tau_\beta-\tau_\beta p_\alpha=-i\hbar\delta_{\alpha\beta}$.

Из (I.I7) имеем

$$\ll b_f, z_\beta \gg = -\frac{i}{\sqrt{V}}\frac{1}{(\Omega-\nu(f))}\left(\frac{1}{2\nu(f)\hbar}\right)^{1/2} S(f) \ll \vec{f}\,\vec{z}, z_\beta \gg_\Omega ,$$

$$\ll b^{+}_{-f}, z_\beta \gg_\Omega = \frac{i}{\sqrt{V}}\frac{1}{(\Omega+\nu(f))}\cdot\left(\frac{1}{2\nu(f)\hbar}\right)^{1/2} S(f) \ll \vec{f}\cdot\vec{z}, z_\beta \gg_\Omega .$$

Итак,

$$\ll b_f + b^{+}_{-f}, z_\beta \gg_\Omega = \frac{i}{\sqrt{V}}\left\{\frac{1}{\Omega+\nu(f)} - \frac{1}{\Omega-\nu(f)}\right\}\left(\frac{1}{2\nu(f)\hbar}\right)^{1/2} S(f) \ll \vec{f}\,\vec{z}, z_\beta \gg_\Omega .$$

Подставляя эту формулу в (I.I5), (I.I6), найдем

$$-m\Omega^2 \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega = -(K_0^2+\gamma^2) \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega - \delta_{\alpha,\beta} +$$

$$+\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{2\nu(f)}\, f_\alpha \left\{\frac{1}{\Omega+\nu(f)} + \frac{1}{\nu(f)-\Omega}\right\} \ll \vec{f}\cdot\vec{z}, z_\beta \gg_\Omega .$$

Поскольку

$$\sum F(|f|) f_\alpha \cdot f_\beta = \delta_{\alpha\beta}\frac{1}{3}\sum F(|f|) f^2$$

и $$K_0^2 = \frac{1}{3V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f) f^2}{\nu^2(f)} ,$$

отсюда получаем

$$-m\Omega^2 \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega = -\gamma^2 \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega - \frac{1}{3V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f) f^2}{\nu^2(f)} \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega +$$

$$+\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu(f)} f^2\left\{\frac{1}{\Omega+\nu(f)} + \frac{1}{\nu(f)-\Omega}\right\} \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega - \delta_{\alpha\beta} . \qquad (I.I8)$$

Но

$$\frac{1}{\Omega+\nu(f)} - \frac{1}{\nu(f)} + \frac{1}{\nu(f)-\Omega} - \frac{1}{\nu(f)} =$$

$$= \frac{-\Omega}{\nu(f)(\Omega+\nu(f))} + \frac{\Omega}{(\nu(f)-\Omega)\nu(f)} = -\Omega\left\{\frac{1}{\nu(f)(\nu(f)+\Omega)} + \frac{1}{(\Omega-\nu(f))\nu(f)}\right\} .$$

С учетом этого преобразования уравнение (I.I8) принимает вид

$$\left[m\Omega^2 - \gamma^2 - \Omega\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)} f^2\left\{\frac{1}{\nu(f)+\Omega} + \frac{1}{\Omega-\nu(f)}\right\}\right] \ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega = \delta_{\alpha\beta} \qquad (I.I9)$$

Обозначим

$$\Delta(\Omega) = -\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)} f^2\left\{\frac{1}{\nu(f)+\Omega} + \frac{1}{\Omega-\nu(f)}\right\} \qquad (I.20)$$

и отметим, что

$$\Delta(-\Omega) = -\Delta(\Omega) . \qquad (I.2I)$$

Тогда уравнение (I.I9) может быть записано в виде

$$\ll z_\alpha, z_\beta \gg_\Omega = \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{m\Omega^2 - \gamma^2 + \Omega\Delta(\Omega)} . \qquad (I.22)$$

Учитывая уравнение (I.I5), имеем также

$$\ll p_\alpha, z_\beta \gg_\Omega = \frac{-im\Omega\cdot\delta_{\alpha,\beta}}{m\Omega^2 - \gamma^2 + \Omega\Delta(\Omega)} . \qquad (I.23)$$

Вспоминая соотношение (I.I4), получаем

$$\ll z_\beta, p_\alpha \gg_\Omega = \frac{im\Omega\cdot\delta_{\alpha,\beta}}{m\Omega^2 - \gamma^2 + \Omega\Delta(\Omega)} . \qquad (I.24)$$

Используя далее (I.5) и (I.13), имеем

$$-i\Omega m \langle\langle x_\beta, p_\alpha \rangle\rangle_\Omega = \frac{m}{i\hbar}\langle \overbrace{x_\beta p_\alpha - p_\alpha x_\beta}^{i\hbar\delta_{\alpha\beta}} \rangle + \langle\langle p_\beta, p_\alpha \rangle\rangle_\Omega$$

и

$$\langle\langle p_\beta, p_\alpha \rangle\rangle_\Omega = -m\delta_{\alpha\beta} + \frac{(m\Omega)^2\,\delta_{\alpha\beta}}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)} =$$

$$= -\delta_{\alpha\beta}\, m\, \frac{\Omega\Delta(\Omega)-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,. \qquad \text{(I.25)}$$

Для $|\mathrm{Im}\,\Omega|>0$ мы можем совершить в (I.22)-(I.25) предельный переход $\gamma\to 0$, тогда получаем

$$\langle\langle x_\alpha, x_\beta \rangle\rangle_\Omega = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{m\Omega^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,,$$

$$\langle\langle p_\alpha, x_\beta \rangle\rangle_\Omega = -\langle\langle x_\beta, p_\alpha \rangle\rangle_\Omega = -\frac{im\Omega\delta_{\alpha\beta}}{m\Omega^2+\Omega\Delta(\Omega)} = \frac{-im\delta_{\alpha\beta}}{m\Omega+\Delta(\Omega)}\,, \qquad \text{(I.26)}$$

$$\langle\langle p_\alpha, p_\beta \rangle\rangle_\Omega = -\delta_{\alpha\beta}\,\frac{m\,\Delta(\Omega)}{m\Omega+\Delta(\Omega)}\,.$$

Следует подчеркнуть, что при вычислении спектральной интенсивности $J_{A,B}(\omega)$, например,

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega)\,,$$

мы должны воспользоваться формулой (I.25), содержащей $\gamma>0$, а уже после этого можем полагать $\gamma\to 0$.

Используя формулу (I.11), имеем

$$J_{p_\alpha, p_\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta}\frac{i\hbar}{2\pi}(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\frac{(m\Omega)^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = \qquad \text{(I.27)}$$

$$= -\delta_{\alpha\beta}\, m\, \frac{i\hbar}{(1-e^{-\beta\hbar\omega})2\pi}\left\{\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\right\}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}\,.$$

Здесь мы начинаем применять краткое обозначение:

$$F(\Omega)\Big|_a^b = F(b)-F(a)\,.$$

Заметим, что деление на фактор $(1-e^{-\beta\hbar\omega})$ в формуле (I.27) может ввести дельта-функцию $K\delta(\omega)$ с некоторым неизвестным коэффициентом K.

Но когда $\gamma^2>0$, выражение

$$\ldots\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}$$

в формуле (I.27) равно нулю в окрестности точки $\omega=0$. С другой стороны, мы знаем, что в этом случае при $\gamma^2>0$ $p_\alpha(t)$ представляется суммой гармонических колебаний с частотами, не равными нулю. Поэтому соответствующая спектральная интенсивность

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega)=0$$

в окрестности точки $\omega=0$ (которая не содержит частот упоминавшихся гармонических колебаний). Итак, мы должны сначала вычислить (I.27) при $\gamma^2>0$, и только после этого мы можем переходить к пределу $\gamma\to 0$.

Рассмотрим детально простейший пример, когда

$$\nu(t)=\nu=Const>0\,. \qquad \text{(I.28)}$$

Тогда формула (I.20)

с учетом $\quad K_0^2=\frac{1}{3V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)f^2}{\nu^2(f)}$

может быть переписана в виде

$$\Delta(\Omega)=\frac{-K_0^2}{2}\left\{\frac{1}{\Omega+\nu}+\frac{1}{\Omega-\nu}\right\}=\frac{-K_0^2\Omega}{\Omega^2-\nu^2}\,. \qquad \text{(I.29)}$$

Из формулы (I.27) имеем

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega)=\delta_{\alpha\beta}\frac{i\hbar}{2\pi}(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\frac{m^2\Omega^2}{m\Omega^2-\gamma^2-\frac{K_0^2\Omega^2}{\Omega^2-\nu^2}}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = \qquad \text{(I.30)}$$

$$=\delta_{\alpha\beta}\frac{i\hbar}{2\pi}(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\frac{m^2\Omega^2(\Omega^2-\nu^2)}{m\Omega^4-\Omega^2(K_0^2+\gamma^2 m\nu^2)+\nu^2\gamma^2}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}\,.$$

Здесь знаменатель имеет два корня относительно Ω^2:

$$\omega_1^2 = \frac{\nu^2 \gamma^2}{K_0^2 + \nu^2 m} + O(\gamma^4), \qquad \omega_2^2 = \frac{K_0^2 + \nu^2 m}{m} + O(\gamma^2), \tag{I.31}$$

таким образом,

$$m\Omega^4 - \Omega^2(K_0^2 + \gamma^2 + \nu^2 m) + \nu^2\gamma^2 = m(\Omega^2 - \omega_1^2)(\Omega^2 - \omega_2^2).$$

Поэтому

$$\frac{m^2\Omega^2(\Omega^2-\nu^2)}{m\Omega^4 - \Omega^2(K_0^2+\nu^2 m + \gamma^2) + \nu^2\gamma^2} = \frac{m\omega_1^2(\omega_1^2-\nu^2)}{\omega_1^2-\omega_2^2}\,\frac{1}{\Omega^2-\omega_1^2} + \frac{m\,\omega_2^2(\omega_2^2-\nu^2)}{\omega_2^2-\omega_1^2}\cdot\frac{1}{\Omega^2-\omega_2^2} + \mathcal{E},$$

где выражение $\mathcal{E}$ регулярно и не содержит сингулярностей на действительной оси. С другой стороны,

$$\frac{1}{\Omega^2-\omega_j^2} = \frac{1}{2\omega_j}\left\{\frac{1}{\Omega-\omega_j} - \frac{1}{\Omega+\omega_j}\right\}; \qquad j = 1,2$$

и

$$\frac{1}{\Omega^2-\omega_j^2}\bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = -\frac{2\pi i}{2\omega_j}\left\{\delta(\omega-\omega_j) - \delta(\omega+\omega_j)\right\}.$$

Таким образом, из формулы (I.30) найдем

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega) = \frac{1}{2}\delta_{\alpha,\beta}\left\{\frac{\hbar\omega_1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_1}}\delta(\omega-\omega_1) + \frac{\hbar\omega_1}{e^{\beta\hbar\omega_1}-1}\delta(\omega+\omega_1)\right\}\frac{m(\nu^2-\omega_1^2)}{\omega_2^2-\omega_1^2} + \frac{1}{2}\delta_{\alpha,\beta}\left\{\frac{\hbar}{1-e^{-\beta\hbar\omega_2}}\delta(\omega-\omega_2) + \frac{\hbar}{e^{\beta\hbar\omega_2}-1}\delta(\omega+\omega_2)\right\}\frac{m\omega_2(\omega_2^2-\nu^2)}{\omega_2^2-\omega_1^2}. \tag{I.32}$$

С учетом (I.31) имеем

$\omega_1 \to 0$, когда $\gamma \to 0$,

$$\frac{\hbar\omega_1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_1}} \to \frac{1}{\beta} = \theta, \qquad \frac{\hbar\omega_1}{e^{\beta\hbar\omega_1}-1} \to \frac{1}{\beta} = \theta,$$

$$\omega_2 \to \mu = \sqrt{\frac{K_0^2}{m} + \nu^2}.$$

Совершая в (I.32) предельный переход $\gamma \to 0$, найдем

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega) = \delta_{\alpha,\beta}\frac{m^2\theta}{\left(\frac{K_0^2}{\nu}\right)+m}\delta(\omega) + \frac{K_0^2\delta_{\alpha\beta}}{2\mu}\left\{\frac{\hbar}{1-e^{-\beta\hbar\mu}}\delta(\omega-\mu) + \frac{\hbar}{e^{\beta\hbar\mu}-1}\delta(\omega+\mu)\right\}. \tag{I.33}$$

Зная спектральную интенсивность, нетрудно вычислить двухвременные корреляционные функции:

$$\langle p_\alpha(t)\,p_\beta(\tau)\rangle_{eq} = 0, \qquad \alpha \neq \beta, \tag{I.34}$$

$$\langle p_\alpha(t)\,p_\alpha(\tau)\rangle_{eq} = \frac{m^2\theta}{m+\left(\frac{K_0}{\nu}\right)^2} + \frac{K_0^2}{2\mu}\left\{\frac{\hbar}{1-e^{-\beta\hbar\mu}}e^{-i\mu(t-\tau)} + \frac{\hbar}{e^{\beta\hbar\mu}-1}e^{i\mu(t-\tau)}\right\}.$$

Рассмотрим теперь более общий случай, когда $\nu(f)$ обладает непрерывным спектром в пределе $V \to \infty$.

Возвратимся к формуле (I.27). Имеем

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega) = \delta_{\alpha,\beta}\, m\frac{i\hbar\omega}{2\pi(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\cdot\frac{1}{\omega}\, f_\gamma(\Omega)\bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}, \tag{I.35}$$

где

$$-f_\gamma(\Omega) = \frac{\Omega\Delta(\Omega) - \gamma^2}{m\Omega^2 - \gamma^2 + \Omega\Delta(\Omega)}.$$

Видим, что $f_\gamma(0) = -1$;

$$f_\gamma(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = 0$$

для достаточно малых ω.

Поэтому для достаточно малых ω

$$\frac{1}{\Omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = f_\eta(\omega)\left(\frac{1}{\omega+i\varepsilon} - \frac{1}{\omega-i\varepsilon}\right) = -2\pi i f_\eta(\omega)\delta(\omega) =$$

$$= 2\pi i\,\delta(\omega).$$

Заметим, что $\frac{1}{\Omega}$ имеет только одну сингулярную точку $\Omega = 0$. Поэтому для произвольных действительных ω

$$\frac{1}{\Omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = 2\pi i\delta(\omega) + \frac{1}{\omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}$$

или

$$\frac{1}{\omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = -2\pi i\,\delta(\omega) + \frac{1}{\Omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}.$$

Таким образом, из (I.35) имеем

$$J_{p_\alpha p_\beta}(\omega) = \delta_{\alpha,\beta}\frac{i\hbar\omega m}{2\pi(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\left\{-2\pi i\,\delta(\omega) + \frac{1}{\Omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}\right\}.$$

Но функция

$$\frac{\hbar\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}$$

регулярна вблизи действительной оси, и по этой причине

$$\frac{\hbar\omega}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\,\frac{1}{\Omega} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = \frac{\hbar}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}} f_\eta(\Omega)\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}.$$

Поэтому

$$J_{p_\alpha, p_{\alpha'}}(\omega) = 0, \quad \alpha \neq \alpha',$$

$$J_{p_\alpha, p_\alpha}(\omega) = m\theta\,\delta(\omega) - m\frac{i\hbar}{2\pi(1-e^{-\hbar\beta\Omega})}\,\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\eta^2}{m\Omega^2-\eta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0}.$$

Мы, таким образом, имеем

$$\langle p_\alpha(t)\,p_{\alpha'}(\tau)\rangle_{eq} = 0, \quad \alpha \neq \alpha',$$

$$\langle p_\alpha(t)\,p_\alpha(\tau)\rangle_{eq} = m\theta - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\hbar m e^{-i\Omega(t-\tau)}}{2\pi(1-e^{-\hbar\beta\Omega})}\,\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\eta^2}{m\Omega^2-\eta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Big|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega. \tag{I.36}$$

Рассмотрим функцию

$$f_\eta(\Omega) = -\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\eta^2}{m\Omega^2-\eta^2+\Omega\Delta(\Omega)} =$$

$$= -1 + \frac{m\Omega^2}{m\Omega^2-\eta^2+\Omega\Delta(\Omega)} = -1 + \frac{m\Omega}{m\Omega+\Delta(\Omega)-\frac{\eta^2}{\Omega}}$$

для $\Omega = i\varepsilon + \omega$ и $\Omega = -i\varepsilon + \omega$; $\varepsilon > 0$.
С учетом (I.20) имеем

$$-\mathrm{Im}\,\Delta(\omega+i\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)}f^2\left\{\frac{1}{(\nu(f)+\omega)^2+\varepsilon^2} + \frac{1}{(\nu(f)-\omega)^2+\varepsilon^2}\right\} > 0.$$

Далее,

$$\mathrm{Im}\,\frac{-\eta^2}{\Omega} = +\frac{\eta^2\varepsilon}{\omega^2+\varepsilon^2} > 0, \quad \Omega = \omega + i\varepsilon.$$

Поэтому

$$\mathrm{Im}\left(m\Omega + \Delta(\Omega) - \frac{\eta^2}{\Omega}\right) > \varepsilon m, \quad \Omega = \omega + i\varepsilon$$

и

$$\left| m\Omega + \Delta(\Omega) - \frac{\eta^2}{\Omega}\right| > \varepsilon m. \tag{I.37}$$

Аналогичным образом и при $\varepsilon = -\mathrm{Im}\,\Omega > 0$

$$\left| m\Omega + \Delta(\Omega) - \frac{\eta^2}{\Omega}\right| > \varepsilon.$$

Мы, таким образом, видим, что функция $f_\zeta(\Omega)$ комплексной переменной Ω регулярна в двух полуплоскостях:

$$\begin{aligned} &\mathcal{J}m\,\Omega > 0\,, \\ &\mathcal{J}m\,\Omega < 0\,. \end{aligned} \tag{I.38}$$

Далее замечаем, что полюса функции

$$\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}$$

в области (I.38) вблизи действительной оси будут соответственно

$$\Omega = \frac{2\pi i}{\hbar\beta}\,, \qquad \Omega = \frac{-2\pi i}{\hbar\beta}\,.$$

Отсюда, если мы имеем обычный замкнутый контур C в области

$$0 < \mathcal{J}m\,\Omega < \frac{2\pi}{\hbar\beta}$$

или в области

$$0 > \mathcal{J}m\,\Omega > -\frac{2\pi}{\hbar\beta}\,,$$

то

$$\int_C \frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\, f_\zeta(\Omega)\, d\Omega = 0\,.$$

Напомним формулу (I.20):

$$\Delta(\Omega) = -\frac{1}{V}\sum \frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)}\, f^2 \left\{ \frac{1}{\nu(f)+\Omega} + \frac{1}{\Omega-\nu(f)} \right\}, \tag{I.39}$$

которая содержит только конечное число членов (f), когда объем V фиксирован.

Поэтому для достаточно больших $|\Omega|$

$$|\Omega\;\Delta(\Omega)| = Const\,, \quad |\mathcal{J}m\,\Omega| \geqslant \mathcal{E} > 0 \tag{I.40}$$

и

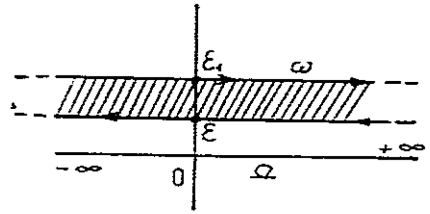
$$|\Delta(\Omega)| \leq \frac{Const}{|\Omega|}\,.$$

Мы, таким образом, можем выбрать в качестве C бесконечный контур:

$$i\mathcal{E}_1 - \infty < \bar{\omega} < i\mathcal{E}_1 + \infty\,,$$

$$i\mathcal{E} - \infty < \bar{\omega} < i\mathcal{E} + \infty\,,$$

$$0 < \mathcal{E} < \mathcal{E}_1 < \frac{2\pi}{\hbar\beta}\,,$$



и получить выражение

$$-\frac{mi\hbar}{2\pi}\int_{i\mathcal{E}_1-\infty}^{i\mathcal{E}_1+\infty} \frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\;\frac{\Omega\cdot\Delta(\Omega)-\zeta^2}{m\Omega^2-\zeta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,d\Omega\;+$$

$$+\frac{mi\hbar}{2\pi}\int_{i\mathcal{E}-\infty}^{i\mathcal{E}+\infty} \frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\;\frac{\Omega\,\Delta(\Omega)-\zeta^2}{m\,\Omega^2-\zeta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,d\Omega = 0\,,$$

из которого следует, что интеграл

$$-\frac{mi\hbar}{2\pi}\int_{i\mathcal{E}-\infty}^{i\mathcal{E}+\infty} \frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\;\frac{\Omega\cdot\Delta(\Omega)-\zeta^2}{m\,\Omega^2-\zeta^2\Omega\Delta(\Omega)}\,d\Omega$$

не зависит от величины $\mathcal{E}$, когда $\mathcal{E}$ принадлежит области

$$0 < \mathcal{E} < \frac{2\pi}{\hbar\beta}\,. \tag{I.4I}$$

Аналогичным способом убеждаемся, что тот же интеграл, взятый по контуру $(-i\mathcal{E}-\infty,\,-i\mathcal{E}+\infty)$, лежащему в нижней полуплоскости, не зависит от величины $\mathcal{E}$, когда $\mathcal{E}$ принадлежит области (I.4I).

Мы можем теперь переписать выражение (I.36) в форме

$$\langle p_x(t)\,p_x(\tau)\rangle_{eq} = m\theta - \frac{i\hbar m}{2\pi}\int_{i\mathcal{E}-\infty}^{i\mathcal{E}+\infty} \frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\cdot\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\zeta^2}{m\Omega^2-\zeta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,d\Omega\;+$$

$$+\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{-i\varepsilon-\infty}^{-i\varepsilon+\infty}\frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\cdot\frac{\Omega\Delta(\Omega)-\eta^2}{m\Omega^2-\eta^2+\Omega\Delta(\Omega)}\,d\Omega\,.$$

Здесь, благодаря (I.37), (I.40), мы можем перейти к пределу $\eta\to 0$ и записать

$$\langle p_\alpha(t)\,p_\alpha(\tau)\rangle_{eq}=m\theta-\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{i\varepsilon-\infty}^{i\varepsilon+\infty}\frac{e^{i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\;\frac{\Delta(\Omega)}{m\Omega+\Delta(\Omega)}+$$

$$+\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{-i\varepsilon-\infty}^{-i\varepsilon+\infty}\frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\cdot\frac{\Delta(\Omega)}{m\Omega+\Delta(\Omega)}\,d\Omega\,. \qquad (I.42)$$

Рассмотрим теперь стандартный предельный переход $V\to\infty$. Из формулы (I.20) имеем

$$\Delta(\Omega)=-\int\limits_{-\infty}^{+\infty}E_V(\nu)\,\frac{d\nu}{\Omega-\nu}\,,$$

где

$$E_V(\omega)=\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)}f^2\left\{\delta(\nu(f)+\omega)+\delta(\nu(f)-\omega)\right\},$$

$$E_V(\omega)\geqslant 0\quad,\qquad E_V(-\omega)=E_V(\omega)\,.$$

Предположим, что эта обобщенная функция

$$E_V(\omega)$$

стремится к предельному выражению

$$E_V(\omega)\underset{V\to\infty}{\longrightarrow}E(\omega)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)}f^2\left\{\delta(\nu(f)+\omega)+\delta(\nu(f)-\omega)\right\}d\bar f$$

таким образом, что

I^0) равномерно на любом конечном интервале

$$+i\varepsilon-\infty<\omega<i\varepsilon+\infty\;,\qquad\varepsilon>0 \qquad (I.43)$$

(в верхней полуплоскости)

и

$$-i\varepsilon-\infty<\omega<-i\varepsilon+\infty\quad,\qquad\varepsilon>0 \qquad (I.44)$$

(в нижней полуплоскости):

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty}E_V(\nu)\,\frac{d\nu}{\Omega-\nu}\longrightarrow-\Delta_\infty(\Omega)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{E(\nu)\,d\nu}{\Omega-\nu}\;;$$

2^0) для $|\mathcal{I}m\,\Omega|\geq\varepsilon$

$$|\Omega\cdot\Delta(\Omega)|\leq K_\varepsilon\;,$$

где K_ε – есть постоянная, не зависящая от объема V.

В этом случае мы можем перейти в формуле (I.42) к пределу $V\to\infty$ и записать:

$$\langle p_\alpha(t)\cdot p_\alpha(\tau)\rangle_{eq}=m\theta-\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{i\varepsilon-\infty}^{i\varepsilon+\infty}\frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\;\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\,d\Omega\;+$$

$$+\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{-i\varepsilon-\infty}^{-i\varepsilon+\infty}\frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\;\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\,d\Omega= \qquad (I.45)$$

$$=m\theta-\frac{i\hbar m}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\Omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\;\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i\varepsilon}^{\omega+i\varepsilon}d\omega\;,$$

где

$$\Delta_\infty(\Omega)=-\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{E(\nu)}{\Omega-\nu}\,d\nu\;,$$

$$E(\nu)=E(-\nu)\geq 0, \qquad (I.46)$$

и в связи с (2^0)

$$|\Omega\cdot\Delta_\infty(\Omega)|\leq K_\varepsilon\quad\text{для}\quad|\mathcal{I}m\,\Omega|\geq\varepsilon. \qquad (I.47)$$

Правая часть выражения (I.45) не зависит от величины $\mathcal{E}$, если $\mathcal{E}$ положительно и достаточно мало. Мы, таким образом, можем совершить в (I.45) предельный переход $\mathcal{E}>0$, $\mathcal{E}\to 0$ и получить*

$$<p_\alpha(t)\,p_\alpha(\tau)>_{eq}=m\theta-\frac{i\hbar m}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\omega}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}e^{-i\omega(t-\tau)}\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}d\omega\ .$$

Поскольку

$$-\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}=-1+\frac{m\Omega}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}$$

и

$$-\frac{i\hbar m}{2\pi}\;\frac{\omega}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{1}{\Omega}\Bigg|_{\omega-i\varepsilon}^{\omega+i\varepsilon}=-\frac{m}{\beta}\delta(\omega)=-m\theta\,\delta(\omega),$$

мы, наконец, получаем

$$<p_\alpha(t)\cdot p_\alpha(\tau)>_{eq}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{J}(\omega)\cdot e^{-i\omega(t-\tau)}d\omega\ , \tag{I.48}$$

$$\mathcal{J}(\omega)=\frac{i\hbar m^2}{2\pi}\cdot\frac{\omega}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\cdot\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}\ .$$

Из формулы (I.46) имеем

* Отметим, что здесь мы предполагаем, что разрывы выражения

$$\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}$$

первого порядка, так что если $F(\Omega)$ – аналитическая функция вблизи действительной оси, как, например,

$$F(\Omega)=\frac{\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\ ,$$

то

$$(F(\Omega)-F(\omega))\frac{1}{\Omega}\;\frac{\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}=0,$$

$$\Delta_\infty(\omega\pm i0)=-\int E(\nu)\mathcal{P}\left(\frac{1}{\omega-\nu}\right)d\nu\pm i\pi E(\omega)\ .$$

Из этого следует

$$i\,\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}\geqslant 0.$$

Поскольку еще

$$\frac{\omega}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\geqslant 0\ ,$$

легко видеть, что

$$\mathcal{J}(\omega)\geqslant 0\ . \tag{I.49}$$

Заметим, что, если в качестве $E(\omega)$ выберем

$$E(\omega)=\frac{K_0^2}{2}\left\{\delta(\omega-\nu_0)+\delta(\omega+\nu_0)\right\}\ ,$$

мы получим из формулы (I.48) нашу прежнюю формулу (I.34).

4. Вычисление свободной энергии для линейной модели

Перейдем теперь к вычислению свободной энергии рассматриваемой динамической системы:

$$F=-\theta\ln Sp\,e^{-\beta H}\qquad (H=H_{Linear}).$$

Свободная энергия одной частицы с массой m, не взаимодействующей с фононами, есть

$$F_S=-\theta\ln Sp\,e^{-\frac{\bar p^2\beta}{2m}}=-\theta\lim_{\gamma\to 0}\ln Sp\,e^{-\left(\frac{\bar p^2}{2m}+\frac{\gamma^2}{2}\bar q^2\right)\beta}\ .$$

Свободная энергия фононного поля Σ:

$$F_\Sigma=-\theta\ln Sp\,e^{-H_\Sigma\beta}\ ,$$

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{(f)}(P_f P_f^* + \nu^2(f) q_f q_f^*) .$$

Поскольку эти энергии хорошо известны, нам нужно вычислить ту часть общей энергии, которая соответствует взаимодействию частицы с фононным полем:

$$F_{int} = F - F_S - F_\Sigma \quad .$$

Для удобства вычислений введем параметр $\lambda\ (0 \le \lambda \le 1)$ в общий гамильтониан $H \quad (H \equiv H_L)$:

$$H(\lambda) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\gamma^2 \vec{r}^2}{2} + \frac{1}{6}\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{\lambda^2 S_f^2 f^2}{\nu^2(f)}\cdot \vec{r}^2 + i\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{(f)}\lambda\cdot S_f\, q_f(\vec{f}\cdot\vec{r}) + H_\Sigma .$$

Видим, что

$$H(0) = H_S + H_\Sigma ,$$
$$H(1) = H .$$

Таким образом,

$$F_{int} = \int_0^1 \frac{\partial F(\lambda)}{\partial\lambda} d\lambda = -\theta\int_0^1 \frac{\partial}{\partial\lambda}\ln Sp\, e^{-\beta H(\lambda)} d\lambda =$$

$$= \int_0^1 \frac{Sp\,\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}e^{-\beta H(\lambda)}}{Sp\,e^{-\beta H(\lambda)}} = \int_0^1 \left\langle \frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} d\lambda ,$$

т.е.

$$F_{int} = \int_0^1 \left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} d\lambda . \qquad (I.50)$$

В этой формуле индекс λ указывает, что усреднение совершается с помощью статистического оператора Гиббса, соответствующего гамильтониану $H(\lambda)$.

Но

$$\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda} = \frac{1}{3}\,\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{\lambda\cdot S_f^2\cdot f^2}{\nu^2(f)}\vec{r}^2 + i\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} S_f\, q_f(\vec{f}\cdot\vec{r}) .$$

С другой стороны, мы можем записать уравнения движения (I.5) для гамильтониана $H(\lambda)$:

$$-m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} - \gamma^2\vec{r} = \frac{1}{3}\sum_{(f)}\frac{\lambda^2 S_f^2 f^2}{\nu^2(f)}\cdot\vec{r} + \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)}\lambda\, S_f\, q_f\, \vec{f} .$$

Поэтому

$$\lambda\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = -\left\langle\left(m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + \gamma^2\vec{r}\right)\vec{r}\right\rangle_{\lambda,eq} . \qquad (I.51)$$

Учитывая формулы (I.6), (I.11), (I.22), имеем

$$\langle r_\alpha(t)\, r_{\alpha'}(\tau)\rangle_{\lambda,eq} = 0 \qquad \alpha\ne\alpha'$$

$$\langle r_\alpha(t)\, r_\alpha(\tau)\rangle_{\lambda,eq} = \frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\cdot\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega . \qquad (I.52)$$

Мы учли, что, заменяя гамильтониан H на $H(\lambda)$, мы вводим фактор λ в S_f, и тогда $\Delta(\Omega)$ заменяется на $\lambda^2\Delta(\Omega)$.

Поэтому

$$\left\langle\left(-m\frac{d^2 r_\alpha(t)}{dt^2} - \gamma^2 r_\alpha(t)\right)\cdot r_\alpha(\tau)\right\rangle =$$

$$= \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{m\omega^2-\gamma^2}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}e^{-i\omega(t-\tau)}\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega = \qquad (\Omega\to\omega)$$

$$= \frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\quad\frac{m\Omega^2-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega ,$$

и с учетом (I.51) имеем

$$\lambda\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = 3\frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{m\Omega^2-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega .$$

Заметим, что

$$\frac{m\Omega^2-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)} = 1 - \frac{\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)} ,$$

$$\frac{m\Omega^2-\gamma^2}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = -\frac{\Omega\cdot\lambda^2\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\lambda^2\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} .$$

Поэтому (I.5I) дает

$$\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = -3\frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\,\frac{\Omega\lambda\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\lambda^2\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega =$$

$$= -3\frac{i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Omega}{1-e^{-\beta\Omega t}}\,\frac{\lambda\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\lambda^2\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega .$$

Используя аналогичные соображения для вычисления корреляционной функции

$$\langle p_\alpha(t)\cdot p_\alpha(\tau)\rangle_{eq} ,$$

найдем в пределе $\gamma \to 0$, $V \to \infty$:

$$\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = -\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\,\frac{1}{\Omega}\,\frac{\lambda\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\lambda^2\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i\varepsilon}^{\omega+i\varepsilon} d\omega , \quad \text{(I.53)}$$

правая часть здесь не зависит от ε , когда $0<\varepsilon<\frac{2\pi}{\hbar\beta}$. Таким образом, полагая $\varepsilon>0$, $\varepsilon \to 0$, получим из (I.50)

$$F_{int} = -\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_0^1 d\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\cdot\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{\lambda\cdot\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\lambda^2\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega . \quad \text{(I.54)}$$

Рассмотрим специальный "одночастотный" случай:

$$E(\omega) = \frac{K_0^2}{2}\left\{\delta(\omega-\nu_0)+\delta(\omega+\nu_0)\right\} . \quad \text{(I.55)}$$

Тогда

$$\Im_\infty(\Omega) = -\frac{K_0^2\Omega}{\Omega^2-\nu_0^2}$$

и

$$-\frac{1}{\Omega}\cdot\frac{\lambda\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\lambda^2\Delta_\infty(\Omega)} = \frac{1}{\Omega}\cdot\frac{\lambda K_0^2}{m\Omega^2-(m\nu_0^2+\lambda^2K_0^2)} .$$

Это выражение имеет три полюса:

$$\Omega=0, \quad \Omega=\mu(\lambda), \quad \Omega=-\mu(\lambda); \quad \mu(\lambda)=\sqrt{\nu_0^2+\lambda^2\frac{K_0^2}{m}} .$$

Отметим, что

$$\frac{1}{\Omega^2-\mu^2(\lambda)} = \frac{1}{2\mu(\lambda)}\left\{\frac{1}{\Omega-\mu(\lambda)}-\frac{1}{\Omega+\mu(\lambda)}\right\} .$$

Видим, таким образом, что

$$-\frac{1}{\Omega}\,\frac{\lambda\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\lambda^2\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} = \frac{2\pi i\delta(\omega)\lambda K_0^2}{m\nu_0^2+\lambda^2K_0^2} - \frac{2\pi i\lambda K_0^2}{2\mu^2(\lambda)m}\left\{\delta(\omega-\mu(\lambda))+\delta(\omega+\mu(\lambda))\right\}$$

и

$$-\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\cdot\frac{1}{\Omega}\,\frac{\lambda\Delta_\infty(\Omega)}{m\Omega+\lambda^2\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega =$$

$$= -3\theta\frac{\lambda K_0^2}{m\nu_0^2+\lambda^2K_0^2} + \frac{3\lambda K_0^2\hbar}{2m\mu(\lambda)}\left\{\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\mu(\lambda)}}+\frac{e^{-\beta\hbar\mu(\lambda)}}{1-e^{-\beta\hbar\mu(\lambda)}}\right\} =$$

$$= \frac{d}{d\lambda}\left\{-\frac{3\theta}{2}\ln(m\nu_0^2-\lambda^2K_0^2)+\frac{3}{2}\theta\ln(1-e^{-\beta\hbar\mu(\lambda)})+\frac{3}{2}\theta\ln(e^{\beta\hbar\mu(\lambda)}-1)\right\} .$$

Поэтому*

$$F_{int} = -3\theta \ln \sqrt{\frac{m + \frac{K_0^2}{\nu_0^2}}{m}} + \frac{3\hbar}{2}(\mu - \nu_0) - 3\theta \ln \frac{1 - e^{-\beta\hbar\nu_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\mu}}, \qquad (I.56)$$

здесь $\mu = \sqrt{\nu_0^2 + \frac{K_0^2}{m}} \equiv \mu(\lambda = 1)$.

Как мы видели, все рассмотренные функции Грина и корреляционные функции, относящиеся к частице S, так же, как и F_{int}, определяются функцией $E(\nu)$. Влияние фононного поля на эти величины зависит лишь от спектральной интенсивности $E(\nu)$.

Так, если мы имеем две различные системы осцилляторов, взаимодействующих с нашей частицей S (рассматриваемым образом), для которых функция $E(\nu)$ будет одной и той же, то все упомянутые величины останутся неизменными.

Рассмотрим, например, задачу двух тел:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{K_0^2}{2}(\vec{r} - \vec{R})^2 + \frac{\vec{P}^2}{2M} = \sum_{\alpha=1}^{3} H_\alpha, \qquad (I.57)$$

$$H_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{K_0^2}{2}(r_\alpha - R_\alpha)^2 + \frac{P_\alpha^2}{2M},$$

---

* При этом мы учли, что

$$\frac{3}{2}\theta \int_0^1 \frac{d}{d\lambda}\left\{\ln(1 - e^{-\beta\hbar\mu(\lambda)}) + \ln(e^{\beta\hbar\mu(\lambda)} - 1)\right\} d\lambda =$$

$$= \frac{3}{2}\theta\left\{\ln\frac{1 - e^{-\beta\hbar\mu}}{1 - e^{-\beta\hbar\nu_0}} + \ln\frac{(e^{\beta\hbar\mu} - 1)}{e^{\beta\hbar\nu_0} - 1}\right\} =$$

$$= \frac{3}{2}\theta\left\{\ln\frac{1 - e^{-\beta\hbar\mu}}{1 - e^{-\beta\hbar\nu_0}} + \ln\frac{e^{\beta\hbar\mu} \cdot e^{-\beta\hbar\nu_0}(1 - e^{-\beta\hbar\mu})}{(1 - e^{-\beta\hbar\nu_0})}\right\} =$$

$$= -3\theta \ln\frac{1 - e^{-\beta\hbar\nu_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\mu}} + \frac{3\hbar}{2}(\mu - \nu_0).$$

и соответствующие гамильтонианы одного тела:

$$H_S = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m}\sum_{(\alpha)}^{3} p_\alpha^2,$$

$$H_\Sigma = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{K_0^2}{2}\vec{R}^2 = \sum_{\alpha=1}^{3}\left(\frac{P_\alpha^2}{2M} + \frac{K_0^2}{2}R_\alpha^2\right).$$

Вычислим выражение для свободной энергии:

$$F_{int} = -\theta \ln \frac{Sp\, e^{-H\beta}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-H_S\beta}\, \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-H_\Sigma\beta}} = -3\theta \ln \frac{Sp\, e^{-\mathcal{H}\beta}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\mathcal{H}_S\beta}\, \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\mathcal{H}_\Sigma\beta}},$$

где одномерные гамильтонианы $\mathcal{H}$, $\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_\Sigma$ соответственно будут

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{K_0^2}{2}(x - X)^2 + \frac{1}{2M}P^2,$$

$$\mathcal{H}_S = \frac{p^2}{2m}; \quad \mathcal{H}_\Sigma = \frac{P^2}{2M} + \frac{K_0^2}{2}X^2.$$

Диагонализуем одномерный гамильтониан $\mathcal{H}$, вводя нормальные координаты q, Q и соответствующие импульсы y, $\mathcal{Y}$:

$$\frac{mx + MX}{m + M} = q, \qquad x - X = Q. \qquad (I.58a)$$

Замечая, что

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{m}{m+M}\frac{\partial}{\partial q} + \frac{\partial}{\partial Q},$$

$$\frac{\partial}{\partial X} = \frac{M}{m+M}\frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial Q}, \qquad (I.58б)$$

положим

$$p = \frac{m}{m+M}y + \mathcal{Y},$$

$$P = \frac{M}{m+M}y - \mathcal{Y}. \qquad (I.58в)$$

имеем

$$H=\frac{1}{2(m+M)}y^2+\frac{1}{2}\frac{M+m}{Mm}\mathcal{Y}^2+\frac{K_c^2}{2}Q^2=H_{in}+H_{osc}\,, \tag{I.59}$$

$$H_{in}=\frac{y^2}{2(m+M)};\quad H_{osc}=\frac{1}{2}\frac{M+m}{Mm}\mathcal{Y}^2+\frac{K_o^2}{2}Q^2.$$

итак,

$$F_{int}=-3\theta\ln\frac{Sp\,e^{-H_{in}\beta}}{Sp\,e^{-H_s\beta}}-3\theta\ln\frac{Sp\,e^{-H_{osc}\beta}}{Sp\,e^{-H_\Sigma\beta}}\,.$$

Как хорошо известно, свободная энергия осциллятора H_Σ с частотой $\nu_o=\sqrt{\frac{K_o^2}{M}}$ в одномерном случае будет*

$$F_\Sigma=\frac{\hbar\nu_o}{2}-\theta\ln\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\nu_o}}\,,$$

а поскольку осциллятор H_{osc} имеет частоту

$$\mu=\sqrt{\frac{K_o^2(M+m)}{Mm}}=\nu_o\sqrt{1+\frac{M}{m}}\,,$$

F_{osc} будет

$$F_{osc}=\frac{\hbar\mu}{2}-\theta\ln\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\mu}}\,.$$

---

* Примечание. Для гамильтониана

$$H=\frac{P^2}{2m}+\frac{m\omega^2X^2}{2}$$

свободная энергия будет

$$F=\frac{\hbar\omega}{2}-\theta\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}\right),\quad \theta=KT.$$

Итак,

$$F_{int}=-3\theta\ln\frac{Sp\,e^{-H_{in}\beta}}{Sp\,e^{-H_s\beta}}-3\theta\ln\frac{1-e^{-\beta\hbar\nu_o}}{1-e^{-\beta\hbar\mu}}+\frac{3}{2}\hbar(\mu-\nu_o),$$

поскольку x – координата в интервале $-\frac{L}{2}<x<\frac{L}{2}$, значение соответствующего импульса будет

$$\frac{2\pi}{L}n\hbar$$

и

$$\frac{Sp\,e^{-H_{in}\beta}}{Sp\,e^{-H_s\beta}}=\frac{\sum\limits_{(n)}e^{-\left(\frac{2\pi}{L}n\hbar\right)^2\frac{\beta}{2(M+m)}}}{\sum\limits_{(n)}e^{-\left(\frac{2\pi}{L}n\hbar\right)^2\frac{\beta}{2m}}}\;\xrightarrow[L\to\infty]{}$$

$$\longrightarrow\frac{\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta p^2}{2(M+m)}}dp}{\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int\limits_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{\beta p^2}{2m}}dp}=\sqrt{\frac{m+M}{m}}\,.$$

Теперь имеем

$$F_{int}=-3\theta\ln\sqrt{\frac{m+M}{m}}+\frac{3}{2}\hbar(\mu-\nu_o)-3\theta\ln\frac{1-e^{-\beta\hbar\nu_o}}{1-e^{-\beta\hbar\mu}}\,.$$

Это выражение совпадает с формулой (I.56), если положить $\frac{K_o^2}{\nu_o^2}=M$.

<u>Замечание</u>. Нетрудно также получить формулу (I.34) для корреляционного среднего, исходя из гамильтониана задачи двух тел (I.57).

Положим

$$\mathcal{Y}=i(a^+-a)\left(\frac{\hbar\mathfrak{M}\mu}{2}\right)^{1/2},$$

$$Q=(a^++a)\left(\frac{\hbar}{2\mathfrak{M}\mu}\right)^{1/2}, \tag{I.60}$$

где a, a^+ – бозе-амплитуды,

$$\mathfrak{M}=\frac{Mm}{M+m}\,,$$

μ определяется формулой (I.59)

$$\mu^2 = \frac{K_0^2}{\mathfrak{M}} .$$

Далее имеем

$$H_{osc} = \frac{\hbar\mu}{2} + \hbar\mu\overset{+}{a}a$$

и

$$i\hbar\frac{da}{dt} = \hbar\mu a, \qquad a(t) = e^{-i\mu t}a,$$
$$\overset{+}{a}(t) = e^{i\mu t}\overset{+}{a},$$

так как

$$\frac{dy}{dt} = 0, \qquad y = const .$$

из (I.58) имеем

$$p_d(t) = \frac{m}{m+M}y + i(\overset{+}{a}e^{i\mu t} - ae^{-i\mu t})\left(\frac{\hbar\mathfrak{M}\mu}{2}\right)^{1/2}. \tag{I.61}$$

Отсюда

$$\langle p_d(t)\,p_d(\tau)\rangle_{eq} = \left(\frac{m}{m+M}\right)^2\langle y^2\rangle_{eq} + \frac{\hbar\mathfrak{M}\mu}{2}\left(\langle a\overset{+}{a}\rangle e^{-i\mu(t-\tau)} + \langle\overset{+}{a}a\rangle e^{i\mu(t-\tau)}\right). \tag{I.62}$$

Поскольку

$$\langle y^2\rangle_{eq} = (m+M)\theta,$$

$$\langle a\overset{+}{a}\rangle = \frac{1}{1-e^{-\hbar\beta\mu}} ; \qquad \langle\overset{+}{a}a\rangle = \frac{1}{e^{\hbar\beta\mu}-1} ,$$

$$\mathfrak{M}\mu = \frac{\mathfrak{M}\mu^2}{\mu} = \frac{K_0^2}{\mu} ,$$

в результате опять получаем формулу (I.34).

Таким образом, видим, что двухвременные равновесные корреляционные средние, соответствующие частице S для гамильтониана (I.I) в "одночастотном" случае, т.е. когда $\nu(t) \equiv \nu_0$ или

$$E(\omega) = \frac{K^2}{2}\left[\delta(\omega-\nu_0)+\delta(\omega+\nu_0)\right],$$

те же самые, что и в случае рассмотрения гамильтониана проблемы двух тел (I.57).

Возвратимся теперь к выражению для свободной энергии F_{int} в этом случае и рассмотрим переход к классической механике. Полагая в формуле (I.56) $\hbar \to 0$, найдем классическое значение

$$F_{int} = 0.$$

Легко видеть, что нулевое значение для свободной энергии, ответственной за взаимодействие, всегда реализуется в классической механике для динамических систем, характеризуемых гамильтонианом (I.I) со значением $K^2 = K_0^2 + \gamma^2$ (I.3). Этот факт можно установить, исходя из формулы (I.53), которую мы перепишем в виде

$$\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = -\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\Omega}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}}\,\frac{\lambda\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\lambda^2\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i\varepsilon}^{\omega+i\varepsilon}d\omega , \tag{I.63}$$

$$0<\varepsilon<\frac{2\pi}{\hbar\beta} .$$

В классическом пределе

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{\hbar\Omega}{1-e^{-\hbar\beta\Omega}} = \frac{1}{\beta} = \theta .$$

Следовательно, для классической механики мы можем записать:

$$\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle_{\lambda,eq} = -\frac{3i\theta}{2\pi}\left\{\int_{i\varepsilon-\infty}^{i\varepsilon+\infty}F(\Omega)d\Omega - \int_{-i\varepsilon-\infty}^{-i\varepsilon+\infty}F(\Omega)d\Omega\right\}, \tag{I.64}$$

где

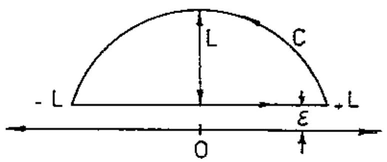
$$F(\Omega) = \frac{\lambda\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\lambda^2\Omega\Delta(\Omega)} . \tag{I.65}$$

Мы видим, что $F(\Omega)$ – регулярная аналитическая функция в полуплоскости $\mathcal{J}m\,\Omega \geqslant \varepsilon > 0$.

Поэтому

$$\int\limits_{C} F(\Omega)\,d\Omega = 0 \qquad (I.66)$$

для любого замкнутого контура, лежащего в этой полуплоскости. Возьмем в качестве C контур,



составленный из интервала $(i\varepsilon - L,\ i\varepsilon + L)$ и полукруга C с центром в $i\varepsilon$ и радиусом L.

На контуре

$$F(\Omega) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L^2}\right)$$

мы видим, что

$$\int\limits_{C} F(\Omega)\,d\Omega = \mathcal{O}\left(\frac{1}{L}\right) \to 0.$$

Поэтому

$$\int\limits_{i\varepsilon-\infty}^{i\varepsilon+\infty} F(\Omega)\,d\Omega = 0.$$

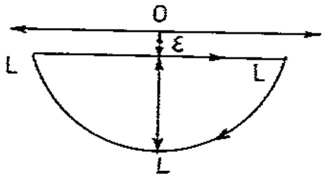
Вполне аналогичные рассуждения могут быть применены к доказательству

$$\int\limits_{-i\varepsilon-\infty}^{-i\varepsilon+\infty} F(\Omega)\,d\Omega = 0.$$

Действительно, $F(\Omega)$ – регулярная аналитическая функция в нижней полуплоскости

$$\mathcal{J}m \leqslant -\varepsilon < 0.$$

Поэтому достаточно выбрать контур



и повторить сходные рассуждения.

Таким образом, учитывая формулы (I.50), (I.64), имеем

$$F_{int} = 0.$$

Подчеркнем, что этот результат полностью обусловлен рассмотрением системы в рамках классической механики.

В квантовомеханическом подходе формула (I.63) показывает, что функция

$$F(\Omega) = \frac{\hbar\Omega}{1-e^{-\beta\hbar\Omega}}\;\frac{\lambda\Delta(\Omega)}{m\Omega^2-\gamma^2+\lambda^2\Delta(\Omega)\,\Omega}$$

имеет полюса на мнимой оси:

$$\Omega = \frac{2\pi i n}{\beta\hbar}, \qquad n - \text{целое}, \qquad (I.67)$$

и по этой причине интегралы вида (I.66) не будут равны нулю (они будут равны сумме вычетов в полюсах (I.67)).

5. Средние от T-произведений

Рассмотрим теперь равновесные средние от форм

$$\langle T\{(q_\alpha(t)-q_\alpha(\tau))(q_{\alpha'}(t)-q_{\alpha'}(\tau)\}\rangle_{eq},$$

где T обозначает "T -произведение" (упорядоченное по времени произведение операторов). По определению,

$$T\{A(t_1)B(t_2)\} = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) & \text{при} \quad t_1 > t_2, \\ B(t_2)A(t_1) & \text{при} \quad t_2 > t_1. \end{cases} \qquad (I.68)$$

Поскольку

$$(q_\alpha(t)-q_\alpha(\tau))(q_{\alpha'}(t)-q_{\alpha'}(\tau)) = q_\alpha(t)\,q_{\alpha'}(t) - q_\alpha(\tau)\,q_{\alpha'}(t) - q_\alpha(t)\,q_{\alpha'}(\tau) + q_\alpha(\tau)\,q_{\alpha'}(\tau),$$

имеем

$$T\left\{(z_\alpha(t)-z_\alpha(\tau))(z_{\alpha'}(t)-z_{\alpha'}(\tau))\right\}=$$

$$=\begin{cases} z_\alpha(t)z_{\alpha'}(t)-z_{\alpha'}(t)z_\alpha(\tau)-z_\alpha(t)z_{\alpha'}(\tau)+z_\alpha(\tau)z_{\alpha'}(\tau), & \text{если} \quad t>\tau, \\ z_\alpha(t)z_{\alpha'}(t)-z_\alpha(\tau)z_{\alpha'}(t)-z_{\alpha'}(\tau)z_\alpha(t)+z_\alpha(\tau)\cdot z_{\alpha'}(\tau), & \text{если} \quad t<\tau. \end{cases}$$

Поэтому из (I.52), полагая $\lambda=1$, получаем

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(t)-z_\alpha(\tau))(z_{\alpha'}(t)-z_{\alpha'}(\tau))\right\}\right\rangle_{eq}=0\,, \quad \text{если} \quad \alpha\neq\alpha',$$

и

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(t)-z_\alpha(\tau))^2\right\}\right\rangle=$$

$$=\frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2(1-e^{-i\omega(t-\tau)})}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\;\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}d\omega \qquad t>\tau\,,$$

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(t)-z_\alpha(\tau))^2\right\}\right\rangle=$$

$$=\frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2(1-e^{-i\omega(\tau-t)})}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}d\omega \qquad t<\tau\,.$$

Таким образом,

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(t)-z_\alpha(\tau))^2\right\}\right\rangle=\frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2(1-e^{-i\omega|t-\tau|})}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}d\omega\,. \tag{I.69}$$

Для некоторых приложений полезно уметь вычислять упорядоченные произведения операторов, зависящих от "мнимого времени". Положив $t=-is$ и выбрав действительное s как упорядочивающий параметр, определим T – произведение как

$$T\left\{z_\alpha(-is)\,z_{\alpha'}(-i\sigma)\right\}=\begin{cases} z_\alpha(-is)\cdot z_{\alpha'}(-i\sigma)\,, & s>\sigma\,, \\ z_{\alpha'}(-i\sigma)\cdot z_\alpha(-is)\,, & \sigma>s\,. \end{cases}$$

Учитывая формулу (I.52) при $\lambda=1$, мы получим

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(-is)-z_\alpha(-i\sigma))(z_{\alpha'}(-is)-z_{\alpha'}(-i\sigma))\right\}\right\rangle_{eq}=0\,, \tag{I.70}$$

$$\text{если} \quad \alpha\neq\alpha'\,,$$

и

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(-is)-z_\alpha(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{eq}=$$

$$=\frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2(1-e^{-\omega|s-\sigma|})}{1-e^{-\hbar\omega\beta}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0}d\omega\,. \tag{I.71}$$

Рассмотрим одночастотный случай:

$$E(\omega)=\frac{K_0^2}{2}\left\{\delta(\omega-\nu_0)+\delta(\omega+\nu_0)\right\}.$$

В этом случае мы можем не использовать прямо формулы (I.69), (I.71), а заметить, что результат будет тот же, что и в случае модели двух тел (I.57).

Мы имеем

$$\langle z_\alpha(t)\cdot z_\alpha(\tau)\rangle_{eq}=\langle x(t)\,x(\tau)\rangle_{eq}\,.$$

Из (I.58)

$$x=q+\frac{M}{m+M}\,Q\,.$$

Поскольку эволюция $q(t)$ и $Q(t)$ описывается независимыми гамильтонианами H_{in} и H_{osc} соответственно, см. (I.59), мы тождественно имеем

$$\langle x(t)\,x(\tau)\rangle_{eq}=\langle q(t)\,q(\tau)\rangle_{eq}+\frac{M^2}{(m+M)^2}\langle Q(t)\cdot Q(\tau)\rangle_{eq}\,.$$

Отсюда

$$\left\langle T\left\{(z_\alpha(-is)-z_\alpha(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{eq}=\left\langle T\left\{(q(-is)-q(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{eq}+$$

$$+\frac{M^2}{(m+M)^2}\left\langle T\left\{(Q(-is)-Q(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{eq}\,. \tag{I.72}$$

Заметим, что благодаря (I.59)

$$q(t)-q(\tau)=\frac{(t-\tau)}{(M+m)}\,y\,, \qquad y=const\,,$$

$$\langle y^2\rangle_{eq}=(M+m)\,\theta\,.$$

Таким образом,

$$\langle (q(t)-q(\tau))^2\rangle = \frac{(t-\tau)^2\theta}{M+m}\,. \qquad (I.73)$$

Имеем также

$$q(t)q(\tau)-q(\tau)q(t)=\int_\tau^t\{q'(t)q(\tau)-q(\tau)q'(t)\}\,dt =$$

$$=\frac{1}{M+m}\int_\tau^t (y\,q(\tau)-q(\tau)\,y)\,dt = \frac{t-\tau}{M+m}(yq-qy) = -i\hbar\,\frac{t-\tau}{M+m}\,. \qquad (I.74)$$

Так что

$$\langle T\{(q(-is)-q(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq} = \langle q^2(-is)-2q(-is)q(-i\sigma)+q^2(-i\sigma)\rangle_{eq} =$$

$$=\langle (q(-is)-q(-i\sigma))^2\rangle_{eq}+\langle -q(-is)q(-i\sigma)+q(-i\sigma)q(-is)\rangle_{eq}\,,$$

если $s>\sigma$,

и благодаря (I.73), (I.74)

$$\langle T\{(q(-is)-q(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq} = -\frac{(s-\sigma)^2}{M+m}\,\theta+\frac{\hbar}{M+m}\,(s-\sigma)\,,$$

если $s>\sigma$.

Заменяя $s \rightleftarrows \sigma$, легко находим

$$\langle T\{(q(-is)-q(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq} = -\frac{(s-\sigma)^2}{M+m}\,\theta+\frac{\hbar}{M+m}\,|s-\sigma|\,. \qquad (I.75)$$

Теперь, чтобы вычислить левую часть (I.72), нам требуется найти выражение для

$$\langle T\{(Q(-is)-Q(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq}\,.$$

Заметим, что

$$Q(t)=(e^{i\mu t}a^+ + e^{-i\mu t}a)\left(\frac{\hbar}{2\mathfrak{M}\mu}\right)^{1/2}.$$

Откуда следует

$$T\{(Q(-is)-Q(-i\sigma))^2\} =$$

$$=\frac{\hbar}{2\mathfrak{M}\mu}\Big\{(e^{\mu s}a^+ + e^{-\mu s}a)(e^{\mu s}a^+ + e^{-\mu s}a) +$$

$$+(e^{\mu\sigma}a^+ + e^{-\mu\sigma}a)(e^{\mu\sigma}a^+ + e^{-\mu\sigma}a) -$$

$$-2T((e^{\mu s}a^+ + e^{-\mu s}a)(e^{\mu\sigma}a^+ + e^{-\mu\sigma}a))\Big\}.$$

Поэтому

$$\langle T\{(Q(-is)-Q(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq} =$$

$$=\frac{\hbar}{2\mathfrak{M}\mu}\Big\{2\langle a^+a\rangle + 2\langle aa^+\rangle - 2e^{\mu|s-\sigma|}\langle a^+a\rangle - 2e^{-\mu|s-\sigma|}\langle aa^+\rangle\Big\}. \qquad (I.76)$$

Здесь

$$\langle a^+a\rangle = \frac{1}{e^{\hbar\beta\mu}-1}\,; \qquad \langle aa^+\rangle = 1+\frac{1}{e^{\hbar\beta\mu}-1}\,.$$

Замечая, что

$$\frac{1}{m+M}=\frac{1}{Mm}\,\mathfrak{M}=\frac{K_0^2}{\mu^2 Mm}=\left(\frac{\gamma_c}{\mu}\right)^2\frac{1}{m}$$ (напомним, что $\mathfrak{M}=\frac{mM}{m+M}$),

$$\frac{M^2}{(m+M)^2}\,\frac{1}{\mathfrak{M}\mu}=\frac{\mathfrak{M}^2}{m^2}\,\frac{1}{\mathfrak{M}\mu}=\frac{\mathfrak{M}}{m^2\mu}=\frac{K_c^2}{m^2\mu^3}=\frac{\mu^2-\gamma_0^2}{m\mu^3}\,,$$

найдем из (I.72), (I.75), (I.76)

$$
\langle T\{(\tau_\alpha(-is)-\tau_\alpha(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq} = -\left(\frac{\nu_c}{\mu}\right)^2\frac{\theta}{m}(s-\sigma)^2+\frac{\hbar}{m}\left(\frac{\nu_0}{m}\right)^2\cdot|s-\sigma|+
$$

$$
+\frac{\mu^2-\nu_0^2}{m\cdot\mu^3}\hbar\left\{\frac{1}{1-e^{-\hbar\beta\mu}}\cdot\left(1-e^{-\mu|s-\sigma|}\right)-\frac{1}{e^{\hbar\beta\mu}-1}\cdot\left(e^{\mu|s-\sigma|}-1\right)\right\}. \qquad (I.77)
$$

Интересно отметить, что

$$
\langle T\{(\tau_\alpha(-is)-\tau_\alpha(-i\sigma))^2\}\rangle_{eq}\geqslant 0 \qquad ,\text{когда } |s-\sigma|\leqslant\beta\hbar=\frac{\hbar}{\theta}, \quad (I.78)
$$

$$
\beta=\frac{1}{\theta}\ ; \quad \theta=KT.
$$

§2. ВЫЧИСЛЕНИЕ СРЕДНИХ ОТ T -ПРОИЗВЕДЕНИЙ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО ВИДА

Пусть гамильтониан Γ является квадратичной, положительно определенной формой из бозе-операторов b_α , b_α^+ .

Обозначим статистическую сумму через

$$
Z = Sp\, e^{-\beta\Gamma}
$$

и рассмотрим линейные формы, построенные на основе бозе-операторов b_α, b_α^+:

$$
A_1, A_2, \ldots A_s,
$$

и статистические средние, состоящие из произведения таких форм:

$$
\langle A_1\cdot A_2\ldots A_s\rangle_\Gamma = Z^{-1}\cdot Sp\, e^{-\beta\Gamma}(A_1\cdot A_2\ldots A_s). \qquad (2.1)
$$

Применим к (2.I) известную теорему Блоха и Де Доминициса, обобщающую теорему Вика.

Вводя спаривания

$$
\overline{A_j A_\ell} = \langle A_j A_\ell\rangle_\Gamma \ ,
$$

видим, что выражение (2.I) равно сумме произведений всех возможных спариваний. Например,

$$
\langle A_1A_2A_3A_4\rangle_\Gamma = \langle A_1A_2A_3A_4\rangle_\Gamma + \langle A_1A_2\,A_3A_4\rangle_\Gamma +
$$

$$
+\langle A_1A_2A_3A_4\rangle_\Gamma = \langle A_1A_3\rangle_\Gamma\langle A_2A_4\rangle_\Gamma + \langle A_1A_2\rangle_\Gamma\langle A_3A_4\rangle_\Gamma +
$$

$$
+\langle A_1A_4\rangle_\Gamma\langle A_2A_3\rangle_\Gamma .
$$

Конечно, выражение (2.I) равно нулю, если S нечетно, поскольку в такой ситуации один из операторов $A_1,\ldots A_S$ остается неспаренным и при этом

$$
\langle A_j\rangle_\Gamma = 0,
$$

поскольку A_j – линейная форма из b_α , b_α^+ , а Γ – квадратичная форма.

Применим теперь эту хорошо известную технику к вычислению выражения $\langle e^A\rangle_\Gamma$ (A – линейная форма в рассматриваемых бозе-операторах).

Имеем

$$
\langle e^A\rangle_\Gamma = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\langle A^n\rangle_\Gamma = \sum_{K=0}^{\infty}\frac{1}{(2K)!}\langle A^{2K}\rangle_\Gamma =
$$

$$
= 1+\sum_{K=1}^{\infty}\frac{1}{(2K)!}\langle A^{2K}\rangle_\Gamma . \qquad (2.2)
$$

Благодаря теореме Блоха и Де-Доминициса

$$
\langle A^{2K}\rangle_\Gamma = G(K)\cdot\langle A^2\rangle_\Gamma^K \ ,
$$

где $G(k)$ – число всех возможных спариваний в выражении

$$\langle \underbrace{A_1, \ldots A_s}_{2k} \rangle_\Gamma .$$

Видим, что

$$G(1) = 1,$$

$$G(2) = 3,$$

$$\cdot \; \cdot \; \cdot \; \cdot \; \cdot$$

$$G(k+1) = (2k+1)G(k).$$

Итак,

$$G(k) = 1\;3 \cdots (2k-1),$$

$$\frac{G(k)}{(2k)!} = \frac{1\cdot 3 \ldots (2k-1)}{1\cdot 2\cdot 3\cdot 4 \ldots (2k)} = \frac{1}{2^k\cdot k!} .$$

Отсюда

$$\langle e^A \rangle_\Gamma = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \langle \frac{1}{2} A^2 \rangle_\Gamma^k = e^{1/2 \langle A^2 \rangle_\Gamma} . \tag{2.3}$$

Рассмотрим упорядоченные по параметру s T -произведения операторов, определив

$$T\{A(S_1)\cdot A(S_2)\} = \begin{cases} A(S_1)\cdot A(S_2), & \text{если} \quad S_1 > S_2, \\ A(S_2)\cdot A(S_1), & \text{если} \quad S_2 > S_1, \end{cases}$$

и, соответственно,

$$T\{A(S_1)A(S_2)\ldots A(S_n)\} = A(S_1')\cdots A(S_n'),$$

где $S_1' \ldots S_n'$ есть тот же набор $S_1 \ldots S_n$, только упорядоченный по времени следующим образом:

$$S_1' \geqslant S_2' > \ldots \geqslant S_n' .$$

Интересно заметить, что благодаря самому определению T -произведения операторы $A(S_j)$ коммутируют под знаком T -произведения. Например,

$$T\{A(S_1)\cdot A(S_2)\} = T\{A(S_2)\cdot A(S_1)\}.$$

Теперь постараемся упростить выражение вида

$$\langle T\{e^{\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds}\}\rangle_\Gamma , \qquad S_0 < S_1 ,$$

где усреднение происходит по квадратичному по операторам Бозе гамильтониану Γ, тому же, что и в (2.I), а $A(S)$ – линейные формы из этих бозе-операторов с коэффициентами, зависящими от параметра упорядочения S.

Имеем

$$\langle T\{e^{\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds}\}\rangle_\Gamma = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle T\{(\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds)^n\}\rangle_\Gamma .$$

Замечая, что теорему К.Блоха можно применять не только к упорядоченным произведениям, но также к T -произведениям, мы буквально повторим наши прежние соображения и запишем

$$\langle T\{e^{\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds}\}\rangle_\Gamma = exp\left(\frac{1}{2}\langle T\{(\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds)^2\}\rangle_\Gamma\right).$$

С другой стороны,

$$T\{(\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds)^2\} = T\{\int_{S_0}^{S_1} ds \int_{S_0}^{S_1} d\sigma A(s)A(\sigma)\} =$$

$$= \int_{S_0}^{S_1} ds \int_{S_0}^{S_1} d\sigma\, T\{A(s)\cdot A(\sigma)\} .$$

Поэтому

$$\langle T\{e^{\int_{S_0}^{S_1} A(s)ds}\}\rangle_\Gamma = exp\left(\frac{1}{2}\int_{S_0}^{S_1} ds \int_{S_0}^{S_1} d\sigma \langle T\{A(s)A(\sigma)\}\rangle_\Gamma\right) . \tag{2.4}$$

Рассмотрим применение полученных результатов в случае осциллярторного гамильтониана

$$\Gamma = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2. \tag{2.5}$$

Положим

$$Q(s) = e^{\frac{s}{\hbar}\Gamma} q\, e^{-\frac{s}{\hbar}\Gamma}, \tag{2.6}$$

и пусть $\lambda(s)$ будет c -числовой функцией, зависящей от s.

Мы хотим вычислить выражение

$$\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s) Q(s) ds} \} \rangle_\Gamma . \tag{2.7}$$

Заметим, что уравнение Гейзенберга для временной эволюции $q(t)$ будет

$$i\hbar \frac{dq(t)}{dt} = q(t)\cdot\Gamma - \Gamma\cdot q(t), \quad q(0) = q,$$

из чего следует, что

$$q(t) = e^{\frac{it}{\hbar}\Gamma} q\, e^{-\frac{it}{\hbar}\Gamma}.$$

С помощью (2.6) заметим, что

$$Q(s) = q(-is), \tag{2.8}$$

так что s можно рассматривать как "мнимое время".

Вводя бозе-амплитуды, имеем

$$q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(b + b^+),$$
$$p = i\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)^{1/2}(b^+ - b) \tag{2.9}$$

и

$$\Gamma = \hbar\omega b^+ b + \frac{\hbar\omega}{2},$$

Γ представляется квадратичной формой $\hbar\omega b^+ b$ плюс постоянный член $\frac{\hbar\omega}{2}$.

Ясно, что постоянный член не влияет на вычисление средних:

$$\langle \dots \rangle_\Gamma = \frac{Sp(\dots e^{-\beta\Gamma})}{Sp\, e^{-\beta\Gamma}} = \langle \dots \rangle_{\hbar\omega b^+ b}.$$

Поэтому мы можем применить для вычисления выражения (2.7) нашу полученную выше формулу (2.4) и записать

$$\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s) Q(s) ds} \} \rangle_\Gamma =$$
$$= exp\left(\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \lambda(s)\cdot\lambda(\sigma) \langle T\{Q(s)\cdot Q(\sigma)\}\rangle_\Gamma\right). \tag{2.10}$$

Замечая, что

$$b(t) = e^{-i\omega t} b, \qquad b^+(t) = e^{i\omega t} b^+,$$

из формул (2.8), (2.9) имеем

$$Q(s) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(e^{-\omega s} b + e^{\omega s} b^+)$$

и

$$\langle T\{Q(s)\, Q(\sigma)\}\rangle_\Gamma = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{ e^{-\omega|s-\sigma|}\langle b b^+\rangle_\Gamma + e^{\omega|s-\sigma|}\langle b^+ b\rangle_\Gamma \right\} =$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}(1 - e^{-\beta\omega\hbar})^{-1}\left\{ e^{-\omega|s-\sigma|} + e^{-\omega\beta\hbar + \omega|s-\sigma|}\right\}. \tag{2.10a}$$

Отсюда и из (2.10) следует, что

$$\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s) Q(s) ds} \} \rangle_\Gamma =$$
$$= exp\left\{\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \lambda(s)\lambda(\sigma) \frac{\hbar}{2m\omega}(1 - e^{-\beta\omega\hbar})^{-1}(e^{-\omega|s-\sigma|} + e^{-\omega\beta\hbar + \omega|s-\sigma|})\right\}. \tag{2.11}$$

Рассмотрим выражение

$$K(s,\sigma)=e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|} \qquad (2.12)$$

для $\quad 0<s<\beta\hbar\,,\quad 0<\sigma<\beta\hbar$ (2.13)

как функцию от s.

Имеем

$$K(0,\sigma)=e^{-\omega\sigma}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega\sigma},$$

$$K(\beta\hbar,\sigma)=e^{-\omega(\beta\hbar-\sigma)}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega\beta\hbar-\omega\sigma},$$

отсюда

$$K(0,\sigma)=K(\beta\hbar,\sigma). \qquad (2.14)$$

Поскольку

$$\frac{d}{ds}(s-\sigma)=1;\quad \frac{d}{ds}(\sigma-s)=-1,$$

видим, что

$$\frac{d}{ds}|s-\sigma|=\epsilon(s-\sigma),$$

где

$$\epsilon(s-\sigma)=\begin{cases}1, & s>\sigma,\\ -1, & s<\sigma.\end{cases}$$

Поэтому дифференцирование выражения (2.12) дает

$$\frac{d}{ds}K(s,\sigma)=\epsilon(s-\sigma)\left\{-\omega e^{-\omega|s-\sigma|}+\omega e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|}\right\}.$$

Замечая, что

$$\epsilon^2(s-\sigma)=1$$

$$\frac{d\epsilon(s-\sigma)}{ds}=2\cdot\delta(s-\sigma),$$

где $\delta(s-\sigma)$ – обычная δ-функция Дирака, получаем, принимая во внимание (2.12):

$$\frac{d^2K(s,\sigma)}{ds^2}-\omega^2K(s,\sigma)=-2\omega\left(1-e^{-\omega\beta\hbar}\right)\delta(s-\sigma). \qquad (2.15)$$

Отсюда, для σ, принадлежащего интервалу $(0,\beta\hbar)$, $K(s,\sigma)$ как функция s удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2y(s)}{ds^2}-\omega^2y(s)=-2\omega\left(1-e^{-\omega\beta\hbar}\right)\delta(s-\sigma) \qquad (2.16)$$

с граничными условиями

$$y(0)=y(\beta\hbar),$$
$$y'_s(0)=y'_s(\beta\hbar). \qquad (2.17)$$

Первое условие следует из (2.14). Второе условие следует из тождества

$$K'_s(0,\sigma)=\omega e^{-\omega\sigma}-\omega e^{-\omega\beta\hbar-\omega\sigma},$$

$$K'_s(\beta\hbar,\sigma)=-\omega e^{-\omega(\beta\hbar-\sigma)}+\omega e^{-\omega\beta\hbar+\omega(\beta\hbar-\sigma)}=K'_s(0,\sigma), \qquad (2.18)$$

$$0<\sigma<\beta\hbar.$$

Легко видеть, что уравнение (2.16) с граничными условиями (2.17) не может иметь двух различных решений.

Действительно, если это утверждение неверно, мы можем найти два различных решения $y_1(s)$, $y_2(s)$, и, полагая

$$y_1(s)-y_2(s)=Z(s),$$

мы получаем нетривиальное решение $Z(s)$ уравнения

$$\frac{d^2Z(s)}{ds^2}-\omega^2Z(s)=0, \qquad (2.19)$$

$$Z(0)=Z(\beta\hbar),$$
$$Z'_s(0)=Z'_s(\beta\hbar). \qquad (2.19a)$$

Но тогда из (2.I9) следует

$$Z(s) = Ae^{-\omega s} - Be^{\omega s},$$

и из (2.I9a) мы должны иметь

$$\begin{aligned} &A(1-e^{-\omega\beta\hbar}) + B(e^{\omega\beta\hbar}-1) = 0, \\ &-\omega A(1-e^{-\omega\beta\hbar}) + \omega B(e^{\omega\beta\hbar}-1) = 0. \end{aligned} \tag{2.20}$$

Детерминант этих двух линейных однородных уравнений

$$2\omega(1-e^{-\omega\beta\hbar})(e^{\omega\beta\hbar}-1)$$

отличен от нуля.

Отсюда (2.20) может иметь только тривиальное решение:

$$A = 0, \qquad B = 0.$$

Итак,

$$Z(s) = 0.$$

Таким образом, мы доказали, что дифференциальное уравнение (2.I6) с граничными условиями (2.I7) не может иметь двух различных решений.

Принимая во внимание, что $0 < \sigma < \beta\hbar$, мы можем написать (2.I6) в виде

$$\frac{d^2 y(s)}{ds^2} - \omega^2 y(s) = -2\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{(n)} e^{in\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}2\pi}. \tag{2.2I}$$

$$0 \le s \le \beta\hbar$$

Для того, чтобы удовлетворить граничным условиям, положим

$$y(s) = \sum_{(n)} C_n e^{in\frac{s}{\beta\hbar}2\pi}$$

и, подставляя это в (2.2I), найдем

$$\left\{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2 + \omega^2\right\} C_n = 2\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})\frac{1}{\beta\hbar}\, e^{-\frac{in\sigma}{\beta\hbar}2\pi}.$$

Поскольку нет других решений уравнения (2.I6) с условиями (2.I7), мы видим, что

$$K(s,\sigma) = 2\omega\,\frac{1-e^{-\beta\hbar\omega}}{\beta\hbar}\sum_{n}\frac{e^{in\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}2\pi}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\omega^2}. \tag{2.22}$$

Итак, благодаря формуле (2.II) имеем

$$\begin{aligned} &\left\langle T\left\{e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)Q(s)ds}\right\}\right\rangle_r = \\ &= \exp\left\{\frac{1}{m\beta}\int_0^{\beta\hbar}ds\int_0^{\beta\hbar}d\sigma\sum_{(n)}\frac{e^{in\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}2\pi}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\omega^2}\,\lambda(s)\cdot\lambda(\sigma)\right\} = \\ &= \exp\left\{\frac{1}{m\beta}\sum_{(n)}\frac{\int_0^{\beta\hbar}e^{2\pi\frac{ins}{\beta\hbar}}\lambda(s)ds\int_0^{\beta\hbar}e^{-\frac{ins}{\beta\hbar}\cdot 2\pi}\lambda(s)ds}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\omega^2}\right\}. \end{aligned} \tag{2.23}$$

Заметим, что (2.22) было установлено только для

$$0 \le s \le \beta\hbar, \quad 0 < \sigma < \beta\hbar.$$

Но, поскольку ядро $K(s,\sigma)$ непрерывно и ряд Фурье правой части (2.22) равномерно и абсолютно сходится, мы видим, что выражение (2.22) справедливо, когда

$$0 \le s \le \beta\hbar, \quad 0 \le \sigma \le \beta\hbar.$$

После этого замечания рассмотрим случай, когда вместо интеграла

$$\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)Q(s)ds$$

мы рассматриваем конечную сумму

$$\sum_{1\le j\le N+1} i\,\nu_j\,Q(s_j),$$

где ν_j – действительны и

$$\begin{aligned} &s_1 = 0, \quad s_{N+1} = \beta\hbar, \\ &0 < s_2 < s_3 < \dots < s_N < \beta\hbar. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Повторяя буквально уже проделанные выше рассуждения, получим

$$\begin{aligned} &\left\langle T\left\{\exp\left(i\sum_{1\le j\le N+1}\nu_j\,Q(s_j)\right)\right\}\right\rangle_r = \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{m\beta}\sum_{(n)}\frac{\left|\sum_{1\le j\le N+1}e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}}\cdot\nu_j\right|^2}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\omega^2}\right\}. \end{aligned} \tag{2.25}$$

Рассмотрим квадратичную форму в переменных ... ν_j ... :

$$\Omega(\dots \nu_j \dots) = \frac{1}{m\beta} \sum_{(n)} \frac{\left| \sum\limits_{1 \le j \le N+1} \nu_j e^{\frac{2\pi n i s_j}{\beta\hbar}} \right|^2}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2 + \omega^2} . \tag{2.26}$$

С учетом (2.24)

$$\sum_{1 \le j \le N+1} \nu_j e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}} = (\nu_1 + \nu_{N+1}) + \sum_{2 \le j \le N} \nu_j e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}} . \tag{2.27}$$

Поэтому

$$\Omega(\dots \nu_j \dots) = \frac{1}{m\beta} \sum_{(n)} \frac{\left| (\nu_1 + \nu_{N+1}) + \sum\limits_{2 \le j \le N} \nu_j e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}} \right|^2}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2 + \omega^2} \tag{2.28}$$

и отсюда

$$\Omega(\dots \nu_j \dots) \geqslant 0 .$$

Мы теперь покажем, что

$$\Omega(\dots \nu_j \dots) = 0 \tag{2.29}$$

только, если все переменные $\nu_1 + \nu_{N+1}$, $\nu_2, \dots \nu_N$ равны нулю:

$$\nu_1 + \nu_{N+1} = 0 \quad , \ \nu_2 = 0 , \ \dots \ \nu_N = 0 . \tag{2.30}$$

Действительно, как вытекает непосредственно из (2.28), соотношение (2.29) справедливо только, если для любого целого n (положительного, нуля или отрицательного)

$$\nu_1 + \nu_{N+1} + \sum_{(2 \le j \le N)} \nu_j e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}} = 0. \tag{2.31}$$

Просуммируем эти соотношения для $n = 0, 1, \dots \Lambda$ и разделим результат на $\Lambda + 1$. Имеем

$$\nu_1 + \nu_{N+1} + \sum_{2 \le j \le N} \frac{1}{\Lambda+1} \nu_j \frac{e^{\frac{2\pi i (\Lambda+1) s_j}{\beta\hbar}} - 1}{e^{\frac{2\pi i s_j}{\beta\hbar}} - 1} = 0.$$

Заметим, что благодаря (2.24)

$$e^{\frac{2\pi i s_j}{\beta\hbar}} - 1 \neq 0.$$

Отсюда, используя предельный переход $\Lambda \to \infty$, получим

$$\nu_1 + \nu_{N+1} = 0.$$

Далее, умножая (2.31) на фактор $e^{-\frac{2\pi i S_K n}{\beta\hbar}}$ (где $K = 2, \dots N$), выполняя суммирование по $n = 1, \dots \Lambda + 1$ и деля полученный результат на $\Lambda + 1$, имеем

$$\frac{1}{\Lambda+1} (\nu_1 + \nu_{N+1}) \frac{e^{\frac{-2\pi i (\Lambda+1) S_K}{\beta\hbar}} - 1}{e^{-\frac{2\pi i S_K}{\beta\hbar}} - 1} + \nu_K + \frac{1}{\Lambda+1} \sum_{\binom{2 \le j \le N}{j \ne K}} \frac{e^{\frac{2\pi i (\Lambda+1)(S_j - S_K)}{\beta\hbar}} - 1}{e^{\frac{2\pi i (S_j - S_K)}{\beta\hbar}} - 1} = 0.$$

В нашей сумме

$$e^{2\pi i \frac{(S_j - S_K)}{\beta\hbar}} - 1 \neq 0, \qquad \text{если} \quad j \neq K.$$

Переходя здесь к пределу $\Lambda \to \infty$, мы получим

$$\nu_K = 0 \quad ; \quad K = 2, \dots N.$$

Мы теперь видим, что $\Omega(\dots \nu_j \dots)$ есть положительно определенная квадратичная форма по переменным $\nu_1 + \nu_{N+1}, \nu_2, \nu_3, \dots \nu_N$. Вводя обозначения

$$\nu_1 + \nu_{N+1} , \ \nu_2 , \ \nu_5 , \dots \nu_N .$$
$$\nu_1' = \nu_1 + \nu_{N+1}, \ \nu_2' = \nu_2 , \ \nu_3' = \nu_3 , \dots \nu_N' = \nu_N , \tag{2.32}$$

мы можем записать (2.25) в виде

$$\begin{aligned} &\langle T \{ \exp (i \sum_{1 \le j \le N+1} \nu_j Q(s_j)) \} \rangle_\Gamma = \\ &= \exp \Big\{ - \sum_{j_1=1}^{N} \sum_{j_2=1}^{N} A_{j_1, j_2} \nu_{j_1}' \nu_{j_2}' \Big\} , \end{aligned} \tag{2.33}$$

где

$$\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N} A_{j_1,j_2}\, \nu'_{j_1}\cdot \nu'_{j_2} = \frac{1}{m\beta}\sum_{(n)} \frac{\left|\sum\limits_{1\le j\le N} \nu'_j\, e^{\frac{2\pi i n s_j}{\beta\hbar}}\right|^2}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\omega^2} \tag{2.34}$$

есть положительно определенная квадратичная форма из $\nu'_1, \nu'_2, \dots \nu'_N$. Заметим, что эти формулы могут быть использованы для того, чтобы установить связь между средними от T -произведений $\langle\cdots\rangle_\Gamma$ и интегрированием в функциональном пространстве.

Имея в виду ситуацию, которую будем далее изучать, рассмотрим теперь трехмерный гамильтониан:

$$\Gamma = \frac{\vec p^{\,2}}{2m} + \frac{\gamma^2}{2}\,\vec r^{\,2} = \sum_{\alpha=1}^{3}\Gamma_\alpha ,$$

$$\Gamma_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\, r_\alpha^2 \quad , \qquad \omega = \frac{\gamma}{\sqrt{m}} . \tag{2.35}$$

Положим

$$\vec R(s) = e^{\frac{\Gamma s}{\hbar}}\, \vec r\, e^{-\frac{\Gamma s}{\hbar}} \tag{2.36}$$

и заметим, что

$$R_\alpha(s) = e^{\frac{\Gamma_\alpha s}{\hbar}}\, r_\alpha\, e^{-\frac{\Gamma_\alpha s}{\hbar}} = e^{\frac{\Gamma s}{\hbar}}\, r_\alpha\, e^{-\frac{\Gamma s}{\hbar}} .$$

Поскольку Γ_α -операторы, действующие на функции различных переменных, Γ_α и $\Gamma_{\alpha'}$ коммутируют, а также $R_\alpha(s)$ коммутирует с $R_{\alpha'}(s')$ при $\alpha\ne\alpha'$. Отметим, что

$$\langle T\{R_\alpha(s)\cdot R_{\alpha'}(s')\}\rangle_\Gamma = 0 \qquad \text{при} \quad \alpha\ne\alpha' .$$

Поэтому легко видеть, что средние

$$\langle T\{exp\,(i\sum_{1\le j\le N+1}\vec\nu_j\cdot\vec R(s_j))\}\rangle_\Gamma \quad ,$$

где S_j, как и ранее, подчиняются (2.24), равны

$$\prod_{\alpha=1}^{3}\langle T\{exp\,(i\sum_{1\le j\le N+1}\nu_{j,\alpha}R_\alpha(s_j))\}\rangle_{\Gamma_\alpha} .$$

Учитывая (2.33), мы, таким образом, можем записать

$$\langle T\{exp\,(i\sum_{1\le j\le N+1}\vec\nu_j\cdot\vec R(s_j))\}\rangle_\Gamma = \\ = exp\Big\{-\sum_{\alpha=1}^{3}\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N} A_{j_1,j_2}\,\nu'_{j_1,\alpha}\,\nu'_{j_2,\alpha}\Big\}, \tag{2.37}$$

где

$$\nu'_{1,\alpha} = \nu_{1,\alpha} - \nu_{N+1,\alpha};\quad \nu'_{2,\alpha} = \nu_{2,\alpha};\ \dots\ \nu'_{N,\alpha} = \nu_{N,\alpha} . \tag{2.38}$$

Рассмотрим выражение

$$\int\langle T\{exp\,(i\sum_{1\le j\le N+1}\vec\nu_j\cdot\vec R(s_j))\}\rangle_\Gamma\, e^{-i\sum\limits_{1\le j\le N+1}\vec\nu_j\vec R'_j}\, d\vec\nu_1\cdots d\vec\nu_N\, d\vec\nu_{N+1} , \tag{2.39}$$

где $\vec R'_j$ – действительные векторы и где интеграция по каждой переменной $\nu_{j,\alpha}$ совершается по всей действительной оси.

Обозначим

$$\frac{\vec\nu_1 - \vec\nu_{N+1}}{2} = \vec\nu'_{N+1} \quad , \qquad \vec\nu_1 + \vec\nu_{N+1} = \vec\nu'_1$$

и заметим, что

$$\sum_{(1\le j\le N+1)}\vec\nu_j\,\vec R'_j = \vec\nu'_1\,\frac{\vec R'_1+\vec R'_{N+1}}{2} + \sum_{2\le j\le N}\vec\nu_j\cdot\vec R'_j + \vec\nu'_{N+1}\cdot(\vec R'_1-\vec R'_{N+1})$$

$$\int(\cdots)\,d\vec\nu_1\cdots d\vec\nu_{N+1} = \int(\cdots)\,d\vec\nu'_1\cdots d\vec\nu'_{N+1} .$$

С другой стороны, (2.37) показывает, что величина $\langle\cdots\rangle_\Gamma$, входящая в левую часть (2.39), не зависит от $\vec\nu'_{N+1}$, так что интеграция по переменной $\vec\nu_{N+1}$ может быть выполнена независимо:

$$\int e^{-i\vec{\nu}'_{N+1}(\vec{R}'_1-\vec{R}'_{N+1})}\, d\vec{\nu}'_{N+1} = (2\pi)^3\,\delta(\vec{R}'_1-\vec{R}'_{N+1})\,.$$

Поэтому

$$\frac{1}{(2\pi)^{3(N+1)}}\int \langle T\{exp(i\sum_{1\le j\le N+1}\vec{\nu}_j\cdot\vec{R}(s))^2\rangle_\Gamma\, e^{-i\sum_{1\le j\le N+1}\vec{\nu}_j\vec{R}'_j}\, d\vec{\nu}_1\dots d\vec{\nu}_{N+1} =$$

$$= \frac{\delta(\vec{R}_1-\vec{R}_{N+1})}{(2\pi)^{3N}}\int\prod_{\alpha=1}^{3}\Big\{exp\Big(-\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}A_{j_1,j_2}\nu'_{j_1,\alpha}\cdot\nu'_{j_2,\alpha}-i\sum_{j=1}^{N}\nu'_{j,\alpha}\cdot R'_{j,\alpha}\Big)d\nu'_{1,\alpha}\,d\nu'_{2,\alpha}\dots d\vec{\nu}'_{N,\alpha}$$

$$= \frac{\delta(\vec{R}_1-\vec{R}_{N+1})}{(2\pi)^{3N}}\prod_{\alpha=1}^{3}\int exp\Big\{-\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}A_{j_1,j_2}x_{j_1}x_{j_2}-i\sum_{j=1}^{N}x_j\,R'_{j,\alpha}\Big\}\,dx_1\,dx_2\dots dx_N.$$

Обычное вычисление интеграла Гаусса дает

$$\int exp\Big\{-\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}A_{j_1,j_2}\,x_{j_1,j_2}-i\sum_{j=1}^{N}x_j\,R'_{j,\alpha}\Big\}\,dx_1\dots dx_N =$$

$$= \frac{(\pi)^{N/2}}{(Det A)^{1/2}}\,exp\Big\{-\frac{1}{4}\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}(A^{-1})_{j_1,j_2}R'_{j_1,\alpha}R'_{j_2,\alpha}\Big\}.$$

Заметим, что, поскольку матрица A положительно определена:

$$Det\,A > 0\,,$$

обратная матрица A^{-1} также положительна определена.

Мы теперь имеем

$$\frac{1}{(2\pi)^{3(N+1)}}\int\langle T\{exp(i\sum_{1\le j\le N+1}\vec{\nu}_j\cdot\vec{R}(s_j))\}\rangle_\Gamma\, exp\Big\{-i\sum_{1\le j\le N+1}\vec{\nu}_j\vec{R}'_j\Big\}d\vec{\nu}_1\dots d\vec{\nu}_{N+1} = \quad (2.40)$$

$$= \rho(\vec{R}'_1,\vec{R}'_2,\dots\vec{R}'_{N+1}),$$

где

$$\rho(\vec{R}'_1,\vec{R}'_2,\dots\vec{R}'_{N+1}) = \quad (2.41)$$

$$= \frac{1}{2^{3N}\pi^{\frac{3N}{2}}}\,\frac{\delta(\vec{R}_1-\vec{R}_{N+1})}{(Det\,A)^{3/2}}\,exp\Big\{-\frac{1}{4}\sum_{j_1=1}^{N}\sum_{j_2=1}^{N}(A^{-1})_{j_1,j_2}(\vec{R}'_{j_1}\cdot\vec{R}'_{j_2})\Big\}.$$

Легко видеть, что

$$\rho(\vec{R}_1,\vec{R}_2,\dots\vec{R}_{N+1}) \ge 0,$$
$$\int\rho(\vec{R}_1\,\vec{R}_2,\dots\vec{R}_{N+1})\,d\vec{R}_1\dots d\vec{R}_{N+1} = 1. \quad (2.42)$$

Заметим, что эти формулы могут быть использованы для того, чтобы "распутать" выражение типа

$$\langle T\{f(\vec{R}(s_1),\dots\vec{R}(s_{N+1}))\}\rangle_\Gamma.$$

Итак, рассмотрим функцию

$$f(\vec{R}_1,\dots\vec{R}_{N+1}),$$

зависящую от $N+1$ действительных векторов, и ее фурье-представление:

$$f(\dots\vec{R}_j\dots) = \frac{1}{(2\pi)^{3(N+1)}}\int e^{i(\sum_{(j)}\vec{\nu}_j\vec{R}_j-\sum_{(j)}\nu_j R'_j)}f(\dots\vec{R}'_j\dots)\,d\vec{R}'_1\dots d\vec{R}'_{N+1}\,d\vec{\nu}_1\dots d\vec{\nu}_{N+1}.$$

$j = 1,\dots N+1$

Поскольку операторы $\vec{R}(s_j)$ коммутируют под знаком T -произведения, мы можем записать:

$$T\{f(\vec{R}(s_1)\dots\vec{R}(s_{N+1}))\} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3(N+1)}}\int T\{exp(i\sum_{(j)}\vec{R}(s_j)\vec{\nu}_j)\}e^{-\sum_{(j)}i\vec{\nu}_j R'_j}f(\dots\vec{R}'_j\dots)\,d\vec{R}'_1\dots\vec{R}'_{N+1}\,d\vec{\nu}_1\dots d\nu_{N+1}.$$

Поэтому благодаря (2.40)

$$\langle T\{f(\vec{R}(s_1)\cdots\vec{R}(s_{N+1}))\}\rangle_\Gamma = \quad (2.43)$$

$$= \int f(\cdots\vec{R}'_j\cdots)\,\rho(\cdots\vec{R}'_j\cdots)\,d\vec{R}'_1\dots d\vec{R}'_{N+1}\,,$$

и, принимая во внимание (2.42), видим, что

$$M \geqslant \langle T\{f(\cdots\vec{R}(s_j)\cdots)\}\rangle_\Gamma \geqslant 0,$$

если

$$M \geqslant f(\cdots\vec{R}_j\cdots) \geqslant 0. \quad (2.44)$$

Рассмотрим теперь функционалы

$$F(\vec{R})$$

от вещественных функций $\vec{R}(s)$, определенных на интервале

$$0 \le s \le \beta\hbar,$$

и используем обозначение континуального интеграла

$$\int F(\vec{R})\, d\mu .$$

Для подмножества "специальных функционалов" вида

$$F(\vec{R}) = \Phi(\cdots \vec{R}(s_j)\cdots),$$

зависящих от конечного числа N векторов $\vec{R}(s_j)$, определим этот интеграл следующим образом:

$$\int \vec{F}(\vec{R})\, d\mu = \int \Phi(\cdots \vec{R}_j \cdots)\, p(\cdots \vec{R}_j \cdots)\prod_{(j)} d\vec{R}_j .$$

Тогда благодаря формулам (2.43), (2.44)

$$\langle T\{F(\vec{R})\}\rangle_\Gamma = \int F(\vec{R})\, d\mu \quad , \qquad (2.45)$$

$$\langle T\{F(\vec{R})\}\rangle_\Gamma \geqslant 0 \qquad \text{при} \quad F(\vec{R}) \geqslant 0$$

для произвольных действительных векторов $\vec{R}(s)$.

Эти соотношения могут быть расширены на общие функционалы $F(\vec{R})$ подходящим приближением $F(\vec{R})$ "специальными функционалами" с применением предельного перехода $N \to \infty$.

Например, мы можем рассмотреть последовательность функций

$$\vec{R}_N(s) = \vec{R}(s_j) \;, \qquad s_j \le s \le s_{j+1}, \quad j = 1, \ldots N,$$

$$s_1 = 0 \;; \qquad s_{N+1} = \beta\hbar , \qquad (2.46)$$

$$|s_{j+1} - s_j| \le \Delta s \to 0 , \qquad N \to \infty ,$$

и аппроксимировать $F(\vec{R})$ формой

$$F(\vec{R}_N),$$

которая, очевидно, принадлежит к классу "специальных функционалов".

Мы хотим здесь отметить, что техника континуальных интегралов для квантовой механики была впервые развита Р.Фейнманом. Его метод

("path integration method") был также применен им к проблемам квантовой статистической механики /1,2/.

В нашем подходе мы предпочтем непосредственно работать со средними от T –произведений:

$$\langle T\{F(\vec{R})\}\rangle_\Gamma ,$$

при этом единственное свойство из рассмотренных здесь, которое нам требуется, это то, что такие средние положительны, когда функционалы $F(\vec{R})$ положительны:

$$\langle T\{F(\vec{R})\}\rangle_\Gamma \geqslant 0 , \qquad \text{когда } F(\vec{R}) \geqslant 0 \text{ для произвольных действительных векторов } \vec{R}(s). \qquad (2.47)$$

Выберем теперь вместо гамильтониана Γ (2.5)

$$H_\Sigma = \frac{1}{2}\sum_{(f)} (p_f\, p_f^* + \omega^2(f)\, q_f\, q_f^*), \qquad (2.48)$$
$$p_f^* = p_{-f} \;, \quad q_f^* = q_{-f} .$$

Как уже упоминалось, мы можем ввести бозе-амплитуды следующим образом:

$$q_f = \left(\frac{\hbar}{2\omega(f)}\right)^{1/2} (b_f + b_{-f}^+), \qquad (2.49)$$
$$p_f = i\left(\frac{\hbar\omega(f)}{2}\right)^{1/2} (b_f^+ - b_f).$$

Это приведет H_Σ к виду

$$H_\Sigma = \sum_{(f)} \hbar\omega(f)\, b_f^+ b_f + \frac{1}{2}\sum_{(f)} \hbar\, \omega(f) . \qquad (2.50)$$

Рассмотрим

$$\langle T\{e^{\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} A_f(s) Q_f(s)}\}\rangle_{H_\Sigma} = \frac{Sp\, e^{-\beta H_\Sigma}\, T\{e^{\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} A_f(s)\cdot Q(s)}\}}{Sp\, e^{-\beta H_\Sigma}} , \qquad (2.51)$$

где

$$Q_f(S) = e^{\frac{SH_\Sigma}{\hbar}}\, q_f\, e^{-\frac{SH_\Sigma}{\hbar}} . \qquad (2.52)$$

Мы здесь хотим рассмотреть ситуацию, когда все ... $\Lambda_f(S)$ коммутируют как между собой, так и со всеми $\cdots Q_f(S)\ldots$, H_Σ , так что при вычислении выражения (2.51) можем рассматривать $\Lambda_f(S)$ как обычные C -функции.

Поэтому, используя формулу (2.4), получим

$$\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} \Lambda_f(s) Q(s)} \}\rangle_{H_\Sigma} =$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \langle T\{ \sum_{(f)} \Lambda_f(s) Q_f(s) \sum_{f'} \Lambda_{f'}(\sigma) Q_{f'}(\sigma) \}\rangle_{H_\Sigma}\right).$$

С другой стороны, исходя из формул (2.10а),(2.49),(2.50),будем иметь

$$\langle T\{ \sum_{(f)} \Lambda_f(S) Q_f(S) \sum_{f'} \Lambda_{f'}(\sigma) Q_{f'}(\sigma) \}\rangle_{H_\Sigma} =$$

$$= \sum_{(f)} \Lambda_f(S)\Lambda_{-f}(\sigma) \langle T\{ Q_f(S)\cdot Q_{-f}(\sigma)\}\rangle_{H_\Sigma} =$$

$$= \sum_{(f)} \Lambda_f(S)\Lambda_{-f}(\sigma) \frac{\hbar}{2\omega_f}(1-e^{-\beta\omega_f\hbar})^{-1}\{ e^{-\omega_f|S-\sigma|} + e^{-\omega_f\beta\hbar+\omega_f|S-\sigma|}\}.$$

Итак,

$$\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} \Lambda_f(s) Q_f(s)} \}\rangle_{H_\Sigma} = \qquad (2.53)$$

$$= \exp\left(\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \sum_{(f)} \Lambda_f(s)\Lambda_{-f}(\sigma) \frac{\hbar}{2\omega_f}(1-e^{-\beta\omega_f\hbar})^{-1}\{ e^{-\omega_f|s-\sigma|} + e^{-\omega_f\beta\hbar+\omega_f|s-\sigma|}\}\right).$$

Предположим теперь, что $\cdots\Lambda_f\cdots$ – операторы, коммутирующие с каждым $\cdots Q_f\cdots$ и H_Σ , но не сами с собой.

Тогда, конечно, формула (2.53) вообще неверна. Рассмотрим, однако, случай, когда левая часть формулы (2.53) стоит под действием другого символа T -произведения, который не действует на Q_f , H_Σ , а упорядочивает только операторы, содержащиеся в $\cdots \Lambda_f \cdots$.

Конкретно займемся рассмотрением выражения

$$T'\{\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} ds [A(s) + \sum_{(f)} \Lambda_f(s) Q_f(s)]} \}\rangle_{H_\Sigma}\}, \qquad (2.54)$$

где A , $\cdots$ Λ_f – операторы только тех переменных волновой функции, на которые операторы $H_\Sigma,\ldots Q_f$ не действуют, и наоборот.

Здесь символ T' включает только упорядочение операторов

$$A, \ \ldots \ \Lambda_f .$$

Тогда формулу (2.54) можем записать с помощью прямого использования формулы (2.53), как если бы $A,\ldots \Lambda_f$ были обычными C -функциями.

Следовательно,

$$T'\{\langle T\{ e^{\int_0^{\beta\hbar} ds [A(s) + \sum_{(f)} \Lambda_f(s)\cdot Q_f(s)]} \}\rangle_{H_\Sigma}\} =$$

$$= T'\{\exp\left(\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \sum_{(f)} \Lambda_f(s)\Lambda_{-f}(\sigma) \frac{\hbar}{2\omega_f}(1-e^{-\beta\hbar\omega_f})^{-1} \times \right. \qquad (2.55)$$

$$\left. \times (e^{-\omega_f|s-\sigma|} + e^{-\omega_f\beta\hbar+\omega_f|s-\sigma|}) + \int_0^{\beta\hbar} ds\, A(s)\right)\}.$$

Вспомогательные операторные равенства

Рассмотрим операторное уравнение:

$$\hbar\frac{dU(s)}{ds} = -(H_0 + H_1(s))U(s), \qquad (2.56)$$

$$U(0) = \hat{1} \qquad \text{(единичный оператор)},$$

где $H_1(S)$ – оператор, который может явно зависеть от S .

Легко видеть, что:

$$U(S) = T\{ e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^S (H_0 + H_1(\sigma))d\sigma}\}.$$

Далее, положим в (2.56)

$$U(S) = e^{-\frac{H_0\cdot S}{\hbar}}\cdot C(s).$$

Тогда

$$\hbar\,\frac{dC(s)}{ds} = -e^{\frac{H_0 s}{\hbar}} H_1(s)\, e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}} \cdot C(s)$$

и

$$C(0) = 1,$$

откуда следует

$$C(s) = T\left\{ e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^s d\sigma\, e^{\frac{H_0\sigma}{\hbar}} H_1(\sigma) e^{-\frac{H_0\sigma}{\hbar}}} \right\}.$$

Поэтому

$$U(\beta\hbar) = T\left\{ e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar}(H_0 + H_1(s))ds} \right\} =$$

$$= e^{-H_0\beta}\, T\left\{ e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} ds\, e^{\frac{H_0 s}{\hbar}} H_1(s) e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}}} \right\}. \qquad (2.57)$$

В частном случае, когда $H_1(s) = H_1$ не зависит явно от S, формула (2.56) дает

$$U(s) = e^{-(H_0 + H_1)\frac{S}{\hbar}},$$

и из формулы (2.57) видим, что

$$e^{-\beta(H_0 + H_1)} = e^{-\beta H_0}\, T\left\{ e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} ds\, e^{\frac{H_0 s}{\hbar}} H_1 e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}}} \right\}. \qquad (2.58)$$

§3. СТАТИСТИЧЕСКОЕ РАВНОВЕСИЕ В ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА

Рассмотрим стандартный гамильтониан полярона:

$$H_p = H(S) + H(\Sigma) + H_{int}(S, \Sigma), \qquad (3.1)$$

где

$$H(S) = \frac{\vec{p}^2}{2m},$$

$$H(\Sigma) = \frac{1}{2}\sum_{(f)}\left\{ p_f p_f^+ + \omega^2(f) q_f q_f^+ \right\}, \quad q_{-f} = q_f^+, \quad p_{-f} = p_f^+, \qquad (3.2)$$

$$H_{int}(S, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{(f)} L(f) q_f e^{i(f\cdot r)}; \quad L(f) = L(-f) = L^+(f).$$

Здесь, как и в §I,

$$f = \left(\frac{2\pi n_1}{L}, \frac{2\pi n_2}{L}, \frac{2\pi n_3}{L}\right),$$

где (n_1, n_2, n_3) – произвольные целые числа, а $L^3 = V$.

Видим, что $H(S)$ представляет гамильтониан свободной частицы с массой m (электрон в теории полярона); $H(\Sigma)$ – гамильтониан фононного поля и $H_{int}(S,\Sigma)$ – гамильтониан взаимодействия между системами S и Σ.

В случае обычной модели Фрёлиха

$$L(f) = \frac{g}{|f|}, \quad g = const; \qquad (3.3)$$

$$\omega(f) = \omega = const.$$

Для того, чтобы (до формального предельного перехода $V \to \infty$) выражение $H_{int}(S, \Sigma)$ содержало только конечное число членов, положим:

$$L(f) = \frac{g}{|f|}, \quad |f| \le f_{max},$$

$$L(f) = 0, \quad |f| > f_{max}. \qquad (3.4)$$

Оставаясь в рамках обычной модели Фрёлиха, мы должны принять, что

$$f_{max} \to \infty, \quad \text{когда} \quad V \to \infty. \qquad (3.4')$$

Мы можем, однако, рассмотреть случай, когда f_{max} остается фиксированным в процессе предельного перехода статистической механики. Физическая мотивировка состоит в том, что модель Фрёлиха не учитывает структуры решетки и вклад в гамильтониан взаимодействия H_{int} от волнового вектора f, большего, чем

$$\frac{2\pi}{a}, \quad a \text{ – постоянная решетки,}$$

не точно представлен в формуле (3.2) и может быть опущен.

Обратим теперь наше внимание на свободную энергию, которая для рассматриваемого гамильтониана H_p будет

$$-\theta \ln \underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H_p}.$$

Вычитая из этого выражения свободные энергии частицы S и фононного поля Σ, получим выражение для свободной энергии, соответствующей гамильтониану взаимодействия H_{int}:

$$-\theta \ln \underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H_p} - \left\{-\theta \ln \underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta H(S)} - \theta \ln \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H(\Sigma)}\right\} = \tag{3.5}$$

$$= -\theta \ln \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H_p}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta H(S)} \cdot \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H(\Sigma)}}.$$

Именно это выражение мы собираемся изучать ниже.

Заметим, что в обычной трактовке таких проблем предполагается, что положение $\vec{\tau}$ частицы S удерживается внутри объема V.

С технической точки зрения для нас будет более удобно принять, что $\vec{\tau}$ может занимать любое положение во всем пространстве, но ввести в гамильтониан свободной частицы дополнительный член $\frac{\gamma^2 \vec{\tau}^2}{2}$,

$$H(S) = \Gamma = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\gamma^2 \vec{\tau}^2}{2} \tag{3.6}$$

Эффект этого дополнительного члена как раз состоит в обеспечении практического ограничения величин $\vec{\tau}$ в конечном объеме V, который будет тем больше, чем меньше будет величина γ.

Конечно, при переходе к пределу статистической механики мы положим

$$\gamma \to 0, \qquad V \to \infty. \tag{3.7}$$

Поступая таким путем, видим, что свободная энергия взаимодействия полярона задается следующим выражением:

$$F_{int}^{(P)} = \lim_{\substack{\gamma\to 0\\ V\to\infty}} F_{int}^{(P)}(V,\gamma),$$

$$F_{int}^{(P)}(V,\gamma) = -\theta \ln \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H_p}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta H(S)} \cdot \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H(\Sigma)}}. \tag{3.8}$$

Воспользуемся теперь формулой (2.38) из §2, в которой выберем

$$H_0 = H(S) + H(\Sigma) = \Gamma + H(\Sigma),$$

$$H_1 = H_{int}(S,\Sigma). \tag{3.9}$$

Обозначим

$$\vec{R}(s) = e^{\frac{H_0 s}{\hbar}}\, \vec{\tau}\, e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}},$$

$$Q_f(s) = e^{\frac{H_0 s}{\hbar}}\, q_f\, e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}}.$$

Тогда формула (3.2) дает

$$e^{\frac{H_0 s}{\hbar}} H_{int}(S,\Sigma)\, e^{-\frac{H_0 s}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{(f)} L(f)\, Q_f(s)\, e^{i(\vec{f}\cdot\vec{R}(s))},$$

а из формулы (2.38) найдем

$$e^{-\beta H_p} = e^{-\beta H(S)} e^{-\beta H(\Sigma)}\, T\left\{\exp\left(-\frac{1}{\hbar\sqrt{V}} \int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} L(f)\, Q_f(s)\, e^{i(\vec{f}\cdot\vec{R}(s))}\right)\right\}. \tag{3.10}$$

Заметим, что $H(S)=\Gamma$ и $H(\Sigma)$ действуют на полностью различные переменные, соответствующие системам S и Σ.

Поэтому легко видеть, что

$$\bar{R}(s) = e^{\frac{s\Gamma}{\hbar}}\, \bar{\tau}\, e^{-\frac{s\Gamma}{\hbar}},$$

$$Q_f(s) = e^{\frac{sH(\Sigma)}{\hbar}}\, q_f\, e^{-\frac{sH(\Sigma)}{\hbar}}. \qquad (3.11)$$

Поскольку $\bar{R}(s)$ действует только на переменные S, а $Q_f(s)$ – только на переменные Σ, операция T-упорядочения в формуле (3.10) может быть произведена в два приема – сначала мы упорядочиваем операторы $Q_f(s)$, а затем операторы $\bar{R}(s)$. Из формулы (3.10) получаем

$$e^{-\beta H_p} = e^{-\beta H(\Sigma)} \cdot e^{-\beta\Gamma} \cdot T_{\bar{R}}\left\{T_{\bar{Q}}\left\{\exp\left(-\frac{1}{\hbar\sqrt{V}}\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} L(f)\, Q_f(s)\, e^{i(\bar{f}\,\bar{R}(s))}\right)\right\}\right\}. \qquad (3.12)$$

Заметим далее, что $e^{-\beta H(\Sigma)}$ можно поставить под знак операции $T_{\bar{R}}$, поскольку этот оператор не действует на $\bar{R}(s)$.

Отсюда и из формулы (3.8) имеем

$$F_{int}^{(P)}(V,\vartheta) = -\theta \ln \frac{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta\Gamma}\, T_{\bar{R}}\left\{\left< T_{\bar{Q}}\left\{\exp\left(-\frac{1}{\hbar\sqrt{V}}\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} L(f)\, Q_f(s)\, e^{i(\bar{f}\,\bar{R}(s))}\right)\right\}\right>_{H(\Sigma)}\right\}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta\Gamma}}. \qquad (3.13)$$

Чтобы раскрыть правую часть этого выражения, мы используем формулу (2.55), в которой заменим

$$T' \to T_{\bar{R}}; \qquad T \to T_Q$$

и положим

$$A(s) = 0; \quad \Lambda_f(s) = \frac{1}{\hbar\sqrt{V}} L(f)\, e^{i(\bar{f}\cdot\bar{R}(s))}; \quad \omega_f = \omega. \qquad (3.14)$$

Замечая, что

$$L(f)\, L(-f) = |L(f)|^2,$$

получим

$$T_{\bar{R}}\left\{\left< T_{\bar{Q}}\left\{\exp\left(-\frac{1}{\hbar\sqrt{V}}\int_0^{\beta\hbar} ds \sum_{(f)} L(f)\, Q_f(s)\, e^{i(\bar{f}\cdot\bar{R}(s))}\right)\right\}\right>_{H_\Sigma}\right\} = \qquad (3.15)$$

$$= T_{\bar{R}}\left\{ e^{\Phi} \right\},$$

где

$$\Phi = \frac{1}{2\hbar^2 V}\sum_{(f)} |L(f)|^2\, \frac{\hbar}{2\omega}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)^{-1} \int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \left(e^{-\omega|s-\sigma|} + e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|}\right) \otimes \qquad (3.16)$$

$$\otimes\, e^{i\bar{f}(\bar{R}(s)-\bar{R}(\sigma))}.$$

Поскольку e^{Φ} в правой части формулы (3.15) есть функционал только от $\bar{R}(s)$, в который все $Q_f(s)$ не входят, нет необходимости вводить специальное обозначение $T_{\bar{R}}$, и мы можем записывать правую часть просто как

$$T\{e^{\Phi}\}.$$

Таким образом, из формулы (3.13) имеем

$$F_{int}^{(P)}(V,\vartheta) = -\theta \ln \left< T\{e^{\Phi}\}\right>_{\Gamma}. \qquad (3.17)$$

Вернемся теперь к квадратичному гамильтониану §I и представим его в форме

$$H^{(L)} = H(s) + H^{(L)}(\Sigma) + H_{int}^{(L)}(S,\Sigma), \tag{3.18}$$

где

$$H(S) = \Gamma$$

задается, как и ранее, формулой (3.6) и где

$$H^{(L)}(\Sigma) = \frac{1}{2}\sum_{(f)}\left\{p_f \cdot p_f^* + \nu^2(f) q_f \cdot q_f^*\right\},$$

$$H_{int}^{(L)}(S,\Sigma) = \frac{K_0^2 \bar{\tau}^2}{2} + \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} S(f)\cdot q_f \cdot (\bar{f}\cdot\bar{\tau}) = \tag{3.19}$$

$$= \frac{1}{6V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f) f^2}{\nu^2(f)}\bar{\tau}^2 + \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} S(f)\cdot q_f \cdot(\bar{f}\cdot\bar{\tau}).$$

Повторим с гамильтонианом $H^{(L)}$ наши предыдущие рассуждения, развитые для гамильтониана $H^{(P)}$, и положим в формуле (2.55) из §2

$$A(s) = -\frac{K_c^2 \bar{R}^2(s)}{2\hbar},$$

$$\Lambda_f(s) = -\frac{i}{\hbar\sqrt{V}} S(f)\cdot(\bar{f}\cdot\bar{R}(s)).$$

Тогда вместо формулы (3.17) получим

$$F_{int}^{(L)}(V,\gamma) = -\theta \ln \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(L)}}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta\Gamma}\cdot \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(L)}(\Sigma)}} = -\theta \ln \left\langle T\left\{e^{\Phi_c}\right\}\right\rangle_\Gamma, \tag{3.20}$$

где

$$\Phi_c = \frac{-K_0^2}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar} \bar{R}^2(s)\,ds +$$

$$+\frac{1}{2\hbar^2 V}\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \sum_{(f)} S^2(f)\frac{\hbar}{2\nu(f)}\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1} K_{\nu(f)}(s,\sigma)(\bar{f}\bar{R}(s))(\bar{f}\bar{R}(\sigma)) =$$

$$= -\frac{K_c^2}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\bar{R}^2(s)\,ds + \tag{3.21}$$

$$+\frac{1}{2\hbar^2 V}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma \sum_{(f)}\frac{S^2(f)\cdot f^2}{6\nu(f)}\hbar\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1} K_{\nu(f)}(s,\sigma)(\bar{R}(s)\cdot\bar{R}(\sigma))$$

и где

$$K_{\nu(f)}(s,\sigma) = e^{-\nu(f)|s-\sigma|} + e^{-\omega\beta\hbar + \nu(f)|s-\sigma|}. \tag{3.22}$$

Заметим, что ввиду формул (2.12) и (2.22)

$$K_{\nu(f)}(s,\sigma) = 2\nu(f)\frac{1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}}{\beta\hbar}\cdot\sum_{(n)}\frac{e^{2\pi i n\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+\nu^2(f)}.$$

Поэтому

$$\int_0^{\beta\hbar}\frac{\hbar}{\nu(f)}\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}K_{\nu(f)}(s,\sigma)\,d\sigma = \int_0^{\beta\hbar}\frac{\hbar}{\nu(f)}\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}K_{\nu(f)}(s,\sigma)\,ds =$$

$$= \frac{2}{\beta}\cdot\frac{\beta\hbar}{\nu^2(f)} = \frac{2\hbar}{\nu^2(f)}.$$

Таким образом,

$$\frac{1}{4\hbar^2}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\,\frac{\hbar}{6\nu(f)}\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}K_{\nu(f)}(s,\sigma)(\bar{R}^2(s)+\bar{R}^2(\sigma)) =$$

$$= \frac{1}{4\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\frac{1}{3\nu^2(f)}\bar R^2(s)\,ds + \frac{1}{4\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\frac{1}{3\nu^2(f)}\bar R^2(\sigma)\,d\sigma = \frac{1}{2\hbar}\;\frac{1}{3\nu^2(f)}\int_0^{\beta\hbar}\bar R^2(s)\,ds .$$

Поскольку

$$K_c^2 = \frac{1}{V}\cdot\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}\;\frac{|f|^2}{3},$$

мы видим, что

$$\frac{K_c^2}{2\hbar}\int_0^{\beta\hbar}\bar R^2(s)\,ds = \frac{1}{4\hbar^2 V}\int_0^{\beta\hbar}ds\int_0^{\beta\hbar}d\sigma\sum_{(f)}\frac{S^2(f)f^2}{6\nu(f)}\hbar\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}K_{\nu(f)}(s,\sigma)\left\{\bar R^2(s)-\bar R^2(\sigma)\right\}.$$

Обозначим

$$L(|s-\sigma|) = \frac{1}{4\hbar^2 V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)f^2\hbar}{6\nu(f)}\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}\left\{e^{-\nu(f)|s-\sigma|}+e^{-\beta\hbar+\nu(f)|s-\sigma|}\right\}. \qquad (3.23)$$

Тогда из формулы (3.21) следует

$$\Phi_c = -\int_0^{\beta\hbar}ds\int_0^{\beta\hbar}d\sigma\, L(|s-\sigma|)\left(\bar R(s)-\bar R(\sigma)\right)^2. \qquad (3.24)$$

Попытаемся теперь рассматривать такой функционал как возможное приближение к функционалу Φ, который можно было бы использовать, чтобы получить приближенное выражение для свободной энергии взаимодействия полярона (3.17).

Заметим вообще, что если y есть величина первого порядка малости, то с точностью до членов второго порядка малости (которыми мы пренебрегаем) будет

$$\ln(x+y)-\ln x = \int_x^{x+y}\frac{d\xi}{\xi} \cong \frac{y}{x}.$$

Поэтому, формально рассматривая разность $\Phi - \Phi_c$ как выражение первого порядка малости, мы можем записать в "первом приближении"

$$\ln\langle T\{e^{\Phi}\}\rangle_\Gamma = \ln\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma + \frac{\langle T\{e^{\Phi_c}(\Phi-\Phi_c)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma}.$$

Интересно заметить, что соответствующее приближение

$$app\,F_{int}^{(P)}(V,\vartheta) = -\theta\ln\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma - \theta\frac{\langle T\{e^{\Phi_c}(\Phi-\Phi_c)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} \qquad (3.25)$$

дает верхнюю оценку для свободной энергии, построенной на основе гамильтониана взаимодействия полярона:

$$\boxed{app\,F_{int}^{(P)}(V,\vartheta) \geqslant F_{int}^{(P)}(V,\vartheta)}. \qquad (3.26)$$

Чтобы доказать это утверждение, рассмотрим функцию

$$f(\xi) = \ln\langle T\{e^{\Phi_c+\xi(\Phi-\Phi_c)}\}\rangle_\Gamma. \qquad (3.27)$$

Имеем

$$f'(\xi) = \frac{\langle T\{e^{\Phi_c+\xi(\Phi-\Phi_c)}(\Phi-\Phi_c)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c+\xi(\Phi-\Phi_c)}\}\rangle_\Gamma} \qquad (3.28)$$

и отсюда

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_c+\xi(\Phi-\Phi_c)}(\Phi-\Phi_c-f'(\xi))\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c+\xi(\Phi-\Phi_c)}\}\rangle_\Gamma} = 0. \qquad (3.29)$$

Далее, с помощью уравнения (3.28) получаем

$$f''(\xi) = \frac{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0)^2\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\}\rangle_\Gamma} -$$

$$- \frac{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0)\rangle_\Gamma \cdot \langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\}\rangle_\Gamma^2},$$

из которого следует

$$f''(\xi) = \frac{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0)^2\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\}\rangle_\Gamma} - (f'(\xi))^2 =$$

$$= \frac{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}[(\phi-\phi_0)^2-(f'(\xi))^2]\rangle_\Gamma}{\langle\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\}\rangle_\Gamma}.$$

С другой стороны, принимая во внимание формулу (3.29), можем написать

$$\langle T\{e^{\phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}[(\phi-\phi_0)^2-(f'(\xi))^2]\rangle_\Gamma =$$

$$= \langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}[(\phi-\phi_0)^2-(f'(\xi))^2-2f'(\xi)(\phi-\phi_0-f'(\xi))]\rangle_\Gamma =$$

$$= \langle T\{e^{\phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0-f'(\xi))^2\}\rangle_\Gamma ,$$

и поэтому

$$f''(\xi) = \frac{\langle T\{e^{\phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}(\phi-\phi_0-f'(\xi))^2\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\}\rangle_\Gamma}. \qquad (3.30)$$

Видим, что выражения

$$e^{\phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}, \quad e^{\Phi_0+\xi(\phi-\phi_0)}\cdot(\phi-\phi_0-f'(\xi))^2$$

как функционалы от $\vec{R}(s)(0\le s\le\beta\hbar)$ положительны для произвольных действительных $\vec{R}(s)$.

Итак, используя свойство рассмотренных Γ- средних от T-произведений (формула (2.47) §2), видим, что

$$f''(\xi) \geqslant 0. \qquad (3.31)$$

Из этого следует

$$f'(\xi) \geqslant f'(0), \quad \text{если} \quad \xi \geqslant 0,$$

и

$$f(1)-f(0) = \int_0^1 f'(\xi)d\xi \geqslant f'(0)$$

или

$$f(0)+f'(0) \le f(1).$$

Умножая это неравенство на $-\theta$, получим

$$-\theta f(0)-\theta f'(0) \geqslant -\theta f(1).$$

Учитывая формулы (3.17), (3.25), (3.27), (3.28), получаем

$$-\theta f(1) = F_{int}^{P}(V, \eta),$$

$$-\theta f(0)-\theta f'(0) = app\, F_{int}^{(P)}(V, \eta).$$

И, следовательно, наше основное неравенство (3.26) доказано.

Отметим теперь, что ввиду формул (3.20) и (3.25) можем написать:

$$\boxed{app\, F_{int}^{(P)}(V,\eta) = F_{int}^{(L)}(V,\eta) - \theta\, \frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\phi-\phi_0)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}} \qquad (3.32)$$

Следует заметить, что величина

$$F_{int}^{(L)}(V,\eta)$$

была уже вычислена в §I (см. формулы (I.50) – (I.54)), так же,как и предельное соотношение

$$F_{int}^{(L)} = \lim_{\substack{\eta\to 0\\ V\to\infty}} F_{int}^{(L)}(V,\eta)$$

(см. формулу (I.54), §I).

Для специального случая, когда $H^{(L)}(\Sigma)$ – одночастотный гамильтониан,

$$\nu(f) = \nu = const,$$

мы получим для $F_{int}^{(L)}$ простую замкнутую формулу (I.56) из §I.

Приступим теперь к раскрытию второго члена правой части формулы (3.32). Учитывая формулы (3.I6), (3.24), получаем

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\Phi-\Phi_0)\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} = \frac{1}{2\hbar^2 V}\sum_{(f)} L^2(f)\frac{\hbar}{2\omega}(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\int_0^{\beta\hbar}ds\int_0^{\beta\hbar}d\sigma\,(e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|})\otimes$$
$$\otimes\frac{\langle T\{e^{\Phi_0+i\vec f(\vec R(s)-\vec R(\sigma))}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} + \int_0^{\beta\hbar}ds\int_0^{\beta\hbar}d\sigma\, L(|s-\sigma|)\,\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\vec R(s)-\vec R(\sigma))^2\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}. \tag{3.33}$$

Таким образом, нам требуется только раскрыть выражения

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0+i\vec f(\vec R(s)-\vec R(\sigma))}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}, \qquad \frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\vec R(s)-\vec R(\sigma))^2\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}. \tag{3.34}$$

Чтобы выполнить эту программу, исследуем вспомогательную задачу вычисления выражения

$$\langle T\{e^{\Phi_0+\int_0^{\beta\hbar}ds\,\lambda(s)(\vec f\,\vec R(s))}\}\rangle_\Gamma, \tag{3.35}$$

где, например, можем положить

$$\lambda(s) = i\{\delta(s-s_1)-\delta(s-s_0)\}, \tag{3.36}$$
$$0<s_0<\beta\hbar, \quad 0<s_1<\beta\hbar.$$

Рассмотрим операторное уравнение:

$$\hbar\frac{dU(s)}{ds} = -(H^{(L)}-\hbar\lambda(s)(\vec f\cdot\vec r))\,U(s) =$$
$$= -(H(S)+H(\Sigma)+H_{int}^{(L)}(S,\Sigma)-\hbar\lambda(s)(\vec f\cdot\vec r))\,U(s), \tag{3.37}$$
$$U(0)=1.$$

Это уравнение соответствует формуле (2.56) §2, в которой положено

$$H_0 = H(S)+H^{(L)}(\Sigma),$$
$$H_1(S) = H_{int}^{(L)}(S,\Sigma)-\hbar\lambda(s)(\vec f\cdot\vec r).$$

Повторим наши предыдущие рассуждения для вычисления величины

$$\frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,U(\beta\hbar)}{\underset{(S)}{Sp}\,e^{-\beta H(S)}\cdot Sp\,e^{-\beta H^{(L)}(\Sigma)}}$$

и заметим, что в этом случае при использовании формулы (2.55) §2 следует выбрать

$$A(s) = \frac{K_0^2\vec R^2(s)}{2\hbar} + \lambda(s)(\vec f\cdot\vec R(s)).$$

Мы тогда найдем

$$\frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,U(\hbar\beta)}{\underset{(S)}{Sp}\,e^{-\beta H(S)}\cdot\underset{(\Sigma)}{Sp}\,e^{-\beta H^{(L)}(\Sigma)}} = \left\langle T\left\{ e^{\Phi_0 + \int_0^{\beta\hbar} ds\,\lambda(s)(\vec f\cdot\vec R(s))}\right\}\right\rangle_\Gamma .$$

Но вследствие (3.20)

$$\frac{\underset{S,\Sigma}{Sp}\,e^{-\beta H^{(L)}}}{\underset{(S)}{Sp}\,e^{-\beta H(S)}\,\underset{(\Sigma)}{Sp}\,e^{-\beta H^{(L)}(\Sigma)}} = \left\langle T\left\{ e^{\Phi_0}\right\}\right\rangle_\Gamma .$$

Поэтому

$$\frac{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_0 + \int_0^{\beta\hbar} ds\,\lambda(s)(\vec f\cdot\vec R(s))}\right\}\right\rangle_\Gamma}{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_0}\right\}\right\rangle_\Gamma} = \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,U(\beta\hbar)}{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,e^{-\beta H^{(L)}}} . \qquad (3.38)$$

Вернемся теперь к формулам (2,56) §2 и (3.37) и выберем

$$H_0 = H^{(L)};\quad H_1(s) = -\hbar\cdot\lambda(s)\,(\vec f\cdot\vec\tau).$$

Тогда ввиду (2.57) §2 найдем

$$U(\hbar\beta) = e^{-\beta H^{(L)}}\,T\left\{ e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\,e^{H^{(L)}\frac{s}{\hbar}}(\vec f\,\vec\tau)\,e^{-H^{(L)}\frac{s}{\hbar}}ds}\right\} . \qquad (3.39)$$

Заметим, что в представлении Гейзенберга оператор $\vec\tau(t)$, определяемый линейным уравнением движения, соответствующим гамильтониану $H^{(L)}$, будет

$$\vec\tau(t) = e^{i\frac{t}{\hbar}H^{(L)}}\,\vec\tau\,e^{-i\frac{t}{\hbar}H^{(L)}},$$

и поэтому

$$e^{\frac{s}{\hbar}H^{(L)}}\,\vec\tau\,e^{-\frac{s}{\hbar}H^{(L)}} = \vec\tau(-is) .$$

Из формулы (3.39) теперь вытекает

$$U(\hbar\beta) = e^{-\beta H^{(L)}}\,T\left\{ e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)(\vec f\cdot\vec\tau(-is))ds}\right\} .$$

Поэтому

$$\frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,U(\hbar\beta)}{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\,e^{-\beta H^{(L)}}} = \left\langle T\left\{ e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)(\vec f\,\vec\tau(-is))ds}\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} . \qquad (3.40)$$

Поскольку $H^{(L)}$ также положительно определенная форма, построенная из бозе-операторов, мы можем использовать формулу (2.4) §2 и написать:

$$\left\langle T\left\{ e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)(\vec f\cdot\vec\tau(-is))ds}\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} =$$

$$= exp\left\langle \frac{1}{2}\,T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\;\vec f\,\vec\tau(-is)ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} .$$

Но формула (I.52) §I дает тождественно

$$\langle \tau_\alpha(t)\,\tau_{\alpha'}(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = 0 \;,\quad \alpha\neq\alpha',$$

$$\langle \tau_\alpha(t)\cdot\tau_\alpha(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = \langle \tau_1(t)\cdot\tau_1(\tau)\rangle_{H^{(L)}},\ \alpha = 1,2,3,$$

откуда следует

$$\left\langle T\left\{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\cdot\tau_\alpha(-is)ds\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\cdot\tau_{\alpha'}(-is)ds\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} = 0 \;,\quad \alpha\neq\alpha',$$

$$\left\langle T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\cdot\tau_\alpha(-is)ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} = \left\langle T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)\cdot\tau_1(-is)ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}}$$

и

$$
\left\langle \frac{1}{2} T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s)\vec{f}\,\vec{\tau}(-is)\,ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} = f^2 \left\langle \frac{1}{2} T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s)\tau_1(-is)\,ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} =
$$

$$
= \frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{\sum_{\alpha=1}^{3}\left(\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s)\tau_\alpha(-is)\,ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} = \frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s)\vec{\tau}(-is)\,ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} .
$$

Из формул (3.38) и (3.40) получаем

$$
\frac{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c} e^{\int_0^{\beta\hbar}\lambda(s)(\vec{f}\,\vec{R}(s))} \right\}\right\rangle_\Gamma}{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c}\right\}\right\rangle_\Gamma} =
$$

$$
= \exp \frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{\left(\int_0^{\beta\hbar} \lambda(s)\vec{\tau}(-is)\,ds\right)^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} . \tag{3.41}
$$

В частности, для функции $\lambda(s)$, определенной формулой (3.36),

$$
\frac{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c + i\vec{f}(\vec{R}(s_1)-\vec{R}(s_2))}\right\}\right\rangle_\Gamma}{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c}\right\}\right\rangle_\Gamma} = e^{-\frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is_1)-\vec{\tau}(-is_2))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}}}
$$

или, заменяя переменные,

$$
\frac{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c + i\vec{f}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))}\right\}\right\rangle_\Gamma}{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c}\right\}\right\rangle_\Gamma} = e^{-\frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}}} . \tag{3.42}
$$

Приложим к обеим частям этого соотношения оператор

$$
-\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial f_\alpha^2}
$$

и затем положим $\vec{f}=0$. Получим

$$
\frac{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))^2\right\}\right\rangle_\Gamma}{\left\langle T\left\{ e^{\Phi_c}\right\}\right\rangle_\Gamma} = \left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} . \tag{3.43}
$$

Из формул (3.23), (3.42), (3.43) следует, что

$$
\begin{aligned}
\operatorname{app} F_{int}^{(P)}(V,\eta) = F_{int}^{(L)}(V,\eta) &- \\
-\theta\frac{1}{2\hbar^2 V}\sum_{(f)} L^2(f)\frac{\hbar}{2\omega}\left(1-e^{-\beta\omega\hbar}\right)^{-1}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\beta\omega\hbar+\omega|s-\sigma|}\right) &\otimes \\
\otimes\, e^{-\frac{f^2}{6}\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}}} &- \\
-\theta\frac{1}{4\hbar^2 V}\sum \frac{S^2(f) f^2\hbar}{6\nu(f)}\cdot\left(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)}\right)^{-1}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\nu(f)|s-\sigma|}+e^{-\beta\hbar\nu(f)+\nu(f)|s-\sigma|}\right) &\otimes \\
\otimes\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} &.
\end{aligned} \tag{3.44}
$$

Заметим, что

$$
\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}}
$$

уже рассматривалось в §I. С учетом формул (I.7I), (I.72) §I

$$
\left\langle T\left\{(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))^2\right\}\right\rangle_{H^{(L)}} =
$$

$$
= \frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2\left(1-e^{-\nu|s-\sigma|}\right)}{1-e^{-\hbar\nu\beta}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\eta\Omega+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\nu-i0}^{\nu+i0} d\nu , \tag{3.45}
$$

где (см. формулу (I.20) §I)

$$
\Delta(\Omega) = -\frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)} f^2\left\{\frac{1}{\nu(f)+\Omega}+\frac{1}{\Omega-\nu(f)}\right\} . \tag{3.46}
$$

Рассмотрим сейчас, во что перейдет выражение (3.44) в случае классической механики.

Для перехода к классической механике выполним предельный переход:

$$
\hbar \to 0 .
$$

Будет удобнее ввести в выражение (3.44) новые переменные интеграции:

$$S = \hbar S', \quad \sigma = \hbar \sigma'.$$

Тогда из формул (3.44), (3.45) имеем

$$app\, F_{int}^{(p)}(V,\eta) = F_{int}^{(L)}(V,\eta) - \tag{3.47}$$

$$- \frac{\theta}{2V}\sum_{(f)} L^2(f)\frac{\hbar}{2\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})}\int_0^\beta ds'\int_0^\beta d\sigma'\left(e^{-\omega\hbar|s'-\sigma'|} + e^{-\omega\hbar\beta+\omega\hbar|s'-\sigma'|}\right)e^{-\frac{f^2}{6}\langle T\{(\vec{\tau}(-i\hbar s')-\vec{\tau}(-i\hbar\sigma'))^2\}\rangle_{H^{(\omega)}}}$$

$$- \frac{\theta}{4V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)\cdot f^2}{6\nu(f)}\frac{\hbar}{(1-e^{-\beta\hbar\nu(f)})}\int_0^\beta ds'\int_0^\beta d\sigma'\left(e^{-\nu(f)\hbar|s'-\sigma'|} + e^{-\nu(f)\hbar\beta+\nu(f)\hbar|s'-\sigma'|}\right)\langle T\{(\vec{\tau}(-i\hbar s')-\vec{\tau}(-i\hbar\sigma'))^2\}\rangle_{H^{(\omega)}},$$

$$\langle T\{(\vec{\tau}(-i\hbar s')-\vec{\tau}(-i\hbar\sigma'))^2\}\rangle_{H^{(\omega)}} = \tag{3.48}$$

$$= \frac{3i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{2\hbar}{1-e^{-\hbar\nu\beta}}\left(1-e^{-\nu|s'-\sigma'|\hbar}\right)\frac{1}{m\Omega^2-\eta\Omega+\Omega\cdot\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\nu-i0}^{\nu+i0} d\nu .$$

Заметим, что при фиксированных V, η выражение $\Delta(\Omega)$ содержит только конечное число членов.

Таким образом, мы видим, что

$$\langle T\{(\vec{\tau}(-i\hbar s')-\vec{\tau}(-i\hbar\sigma'))^2\}\rangle_{H^{(\omega)}} \xrightarrow[\hbar\to 0]{} 0 .$$

Замечая, что суммы (3.47) также содержат только конечное число членов, мы получаем в классическом пределе

$$app\, F_{int}^{(p)}(V,\eta) = -\frac{1}{2V\omega^2}\sum_{(f)} L^2(f), \tag{3.49}$$

поскольку было уже показано, что для классической механики

$$F_{int}^{(L)}(V,\eta) = 0 .$$

Покажем, что формула (3.49) дает точное значение $F_{int}^{(p)}$ в классическом случае.

Действительно, гамильтониан $H^{(p)}$ есть сумма потенциальной и кинетической энергии. Поэтому в классической механике

$$F^{(p)} = kin\, F^{(p)} + pot\, F^{(p)},$$
$$kin\, F^{(p)} = kin\, F_S + kin\, F_\Sigma$$

и

$$F_{int}^{(p)} = F^{(p)} - F_S - F_\Sigma = pot\, F^{(p)} - pot\, F_S - pot\, F_\Sigma .$$

Итак, мы имеем

$$F_{int}^{(p)}(V,\eta) =$$

$$= -\theta \ln \frac{\int exp\left\{-\beta\frac{\eta^2\vec{\tau}^2}{2} - \frac{\omega^2}{2}\sum_{(f)} q_f q_f^+ \beta - \frac{\beta}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} L(f) q_f e^{i(\vec{f}\cdot\vec{\tau})}\right\} d\vec{\tau}\, Dq}{\int exp\left\{-\beta\frac{\eta^2\vec{\tau}^2}{2}\right\} d\vec{\tau}\int exp\left\{-\frac{\beta\omega^2}{2}\sum_{(f)} q_f q_f^+\right\} Dq} . \tag{3.50}$$

Здесь

$$q_f = x_f + i y_f, \quad q_{-f} = x_f - i y_f,$$

т.е.

$$x_{-f} = x_f, \quad y_{-f} = -y_f$$

и

$$Dq = \prod_{(f)}' dx_f \cdot dy_f .$$

Здесь символ $\prod'$ означает, что сюда входят только различные dx_f, dy_f так, что если $f \neq 0$ входит в произведение, то $(-f)$ не входит.

Совершаем в формуле (3.50) замену переменных q_f:

$$q_f \to q_f - \frac{L(f)}{\omega^2\sqrt{V}} e^{-i(\vec{f}\cdot\vec{\tau})},$$
$$q_f^+ \to q_f^+ - \frac{L(f)}{\omega^2\sqrt{V}} e^{-i(\vec{f}\cdot\vec{\tau})},$$

и заметим, что выражение

$$\frac{\omega^2}{2}\beta\sum_{(f)} q_f q_f^+ + \frac{\beta}{\sqrt{V}}\sum L(f) q_f e^{i(\vec f\cdot\vec\tau)}$$

переходит в следующее выражение:

$$\frac{\omega^2}{2}\beta\sum_{(f)} q_f q_f^+ - \frac{\omega^2}{2}\beta\sum_{(f)}\frac{L(f)}{\sqrt{V}}\;\frac{e^{-i\vec f\cdot\vec\tau} q_f^+ + e^{i\vec f\cdot\vec\tau} q_f}{\omega^2} +$$

$$+\frac{\omega^2\beta}{2}\sum_{(f)}\frac{L^2(f)}{\omega^4 V} + \frac{\beta}{\sqrt{V}}\sum_{(f)} L(f) q_f e^{i(\vec f\cdot\vec\tau)} - \frac{\beta}{V}\sum_{(f)}\frac{L^2(f)}{\omega^2} =$$

$$= \frac{\omega^2}{2}\sum_{(f)} q_f\cdot q_f^+ - \frac{\beta}{2\omega^2 V}\sum_{(f)} L^2(f)\ .$$

Поэтому формула (3.50) приводится к виду

$$F_{int}^{(P)}(V,\gamma) =$$

$$= -\frac{1}{\beta}\ln\frac{\int exp\left\{-\beta\frac{\gamma^2\vec\tau^2}{2} - \frac{\omega^2}{2}\beta\sum_{(f)} q_f\cdot q_f^+ + \frac{\beta}{2\omega^2 V}\sum_{(f)} L^2(f)\right\} d\vec\tau\, Dq}{\int exp\left\{-\beta\frac{\gamma^2\vec\tau^2}{2}\right\} d\vec\tau\ \int exp\left\{-\frac{\omega^2}{2}\beta\sum_{(f)} q_f\cdot q_f^+\right\} Dq} = \tag{3.51}$$

$$= -\frac{1}{2V\omega^2}\sum_{(f)} L^2(f)\ .$$

Мы, таким образом, видим, что в классической механике рассмотренная аппроксимация, даваемая формулой (3.49), точная.

Возвратимся теперь к изучению выражения (3.44) в квантовом случае. Будет удобно использовать функцию

$$E_V(w) = \frac{1}{V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{6\nu^2(f)}\, f^2\left\{\delta(\nu(f)+w) + \delta(\nu(f)-w)\right\}, \tag{3.52}$$

введенную в §I. Тогда (3.44) можно переписать следующим образом:

$$app\, F_{int}^{(P)}(V,\gamma) = F_{int}^{(L)}(V,\gamma) -$$

$$-\frac{\theta}{4V\hbar^2}\sum_{(f)} L^2(f)\frac{\hbar}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\omega|s-\sigma|} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega|s-\sigma|}\right) e^{-\frac{f^2}{6} D_V(s,\sigma)} -$$

$$-\frac{\theta}{4\hbar^2}\int_0^\infty dw\, E_V(w)\frac{\hbar w}{1-e^{-\hbar\beta w}}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-w|s-\sigma|} + e^{-\beta\hbar w + w|s-\sigma|}\right) D_V(s,\sigma), \tag{3.53}$$

где (см. (3.45), (3.46), (3.52))

$$D_V(s,\sigma) = \frac{3i\hbar}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1-e^{-w|s-\sigma|}}{1-e^{-\hbar w\beta}}\;\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0} dw\ , \tag{3.54}$$

$$\Delta(\Omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{E_V(w)}{\Omega - w}\, dw\ . \tag{3.55}$$

Заметим, что ввиду (3.52)

$$E_V(w) \geqslant 0\ ,\qquad E_V(-w) = E_V(w)\ . \tag{3.56}$$

Отсюда и из (3.55) следует

$$\Delta(-\Omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{E(w)}{-\Omega - w}\, dw = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{E(w)}{-\Omega + w}\, dw = -\Delta(\Omega)\ . \tag{3.57}$$

Введем для сокращения обозначения:

$$\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)} = \Phi(\Omega)\ ,$$

$$\frac{3i\hbar}{\pi}\left(\frac{1-e^{-w|s-\sigma|}}{1-e^{-\hbar w\beta}}\right) = \varphi(w)\ .$$

Тогда правая часть (3.54) может быть записана в форме

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(w)\left\{\Phi(w+i0)-\Phi(w-i0)\right\} dw.$$

Но из (3.57) видим, что

$$\Phi(-\Omega)=\Phi(\Omega)$$

и, в частности,

$$\Phi(w+i0)-\Phi(w-i0)=\Phi(-w-i0)-\Phi(-w+i0).$$

Отсюда

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(w)\left\{\Phi(w+i0)-\Phi(w-i0)\right\}dw=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(-w)\left\{\Phi(w-i0)-\Phi(w+i0)\right\}dw,$$

что дает

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(w)\left\{\Phi(w+i0)-\Phi(w-i0)\right\}dw=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\varphi(w)-\varphi(-w)\right\}\left\{\Phi(w+i0)-\Phi(w-i0)\right\}dw.$$

С другой стороны,

$$\frac{1-e^{-w|s-\sigma|}}{1-e^{-\beta\hbar w}}-\frac{1-e^{w|s-\sigma|}}{1-e^{\beta\hbar w}}=\frac{1+e^{-\beta\hbar w}-e^{-w|s-\sigma|}-e^{-\beta\hbar w+w|s-\sigma|}}{1-e^{-\beta\hbar w}}.$$

Поэтому из формулы (3.54) получаем

$$D_V(s,\sigma)=$$

$$=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1+e^{-\beta\hbar w}-e^{-w|s-\sigma|}-e^{-\beta\hbar w+w|s-\sigma|}}{(1-e^{-\beta\hbar w})w}\,w\,\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw. \qquad (3.58)$$

Заметим, что формулы §2 (2.12) и (2.22) дают

$$\hbar\frac{e^{-w|s-\sigma|}+e^{-w\beta\hbar+w|s-\sigma|}}{2w(1-e^{-\beta\hbar w})}=\frac{1}{\beta}\sum_{(n)}\frac{e^{in2\pi\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+w^2}=\frac{1}{\beta}\sum_{(n)}\frac{\cos 2\pi n\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+w^2}, \qquad (3.59)$$

и, таким образом,

$$\frac{\hbar(1+e^{-\beta\hbar w}-e^{-w|s-\sigma|}-e^{-\beta\hbar w+w|s-\sigma|})}{2w(1-e^{-\beta\hbar w})}=\frac{1}{\beta}\sum_{(n\neq0)}\frac{1-e^{i2\pi n\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+w^2}=\frac{1}{\beta}\sum_{(n\neq0)}\frac{1-\cos 2\pi n\frac{s-\sigma}{\beta\hbar}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+w^2}. \qquad (3.60)$$

Эти формулы действительны в интервале

$$0\le s\le\beta\hbar,\qquad 0\le\sigma\le\beta\hbar, \qquad (3.61)$$

но их правые части определены для всех действительных s, σ и будут периодическими функциями $(s-\sigma)$ с периодом $\beta\hbar$. Из (3.58) видим, что

$$D_V(s,\sigma)=D_V(s-\sigma), \qquad (3.62)$$

где

$$D_V(s)=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1+e^{-\beta\hbar w}-e^{-w|s|}-e^{-\beta\hbar w+w|s|}}{(1-e^{-\beta\hbar w})w}\,w\,\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw, \qquad (3.63)$$

$$0\le s\le\beta\hbar$$

и эта функция может быть расширена на всю действительную ось:

$$D_V(s)=\frac{3i}{\pi\beta}\sum_{n\neq0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1-\cos 2\pi n\frac{s}{\beta\hbar}}{\left(\frac{2\pi n}{\beta\hbar}\right)^2+w^2}\cdot w\,\frac{1}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw, \qquad (3.64)$$

так что она будет обладать свойством периодичности и симметрии:

$$D_V(s)=D_V(-s);\qquad D_V(s+\beta\hbar)=D_V(s). \qquad (3.65)$$

Рассмотрим функции

$$\mathcal{H}^{(P)}(s) = \left(e^{-\omega s} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega s}\right) e^{-\frac{f^2}{6} D_V(s)},$$

$$\mathcal{H}^{(L)}(s) = \left(e^{-\omega s} + e^{-\beta\hbar\vartheta+\vartheta s}\right) D_V(s) \qquad 0 \le s \le \beta\hbar .$$

Учитывая формулы (3.59), (3.64), мы видим, что эти функции могут быть расширены на всю действительную ось s так, что они будут обладать свойствами периодичности и симметрии вида (3.65).

Таким образом, мы можем записать равенства

$$\mathcal{H}^{(P,L)}(s) = \sum_{(n)} \mathcal{H}_n^{(P,L)} e^{2\pi i n \frac{s}{\beta\hbar}}$$

и

$$\mathcal{H}^{(P,L)}(s-\sigma) = \sum_{(n)} \mathcal{H}_n^{(P,L)} e^{2\pi i n \frac{s-\sigma}{\beta\hbar}} ,$$

из которых следуют

$$\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(s-\sigma) = \mathcal{H}_0^{(P,L)} \beta\hbar = \int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma)$$

и

$$\int_0^{\beta\hbar} ds \int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(s-\sigma) = \beta\hbar \int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) . \tag{3.66}$$

Благодаря соотношениям (3.65), которым удовлетворяет также $\mathcal{H}^{(P,L)}(s)$, мы имеем

$$\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) = \int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) + \int_{\beta\hbar/2}^{\beta\hbar} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) =$$
$$= \int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) + \int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\beta\hbar-\sigma) = 2\int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\, \mathcal{H}^{(P,L)}(\sigma) . \tag{3.67}$$

Поэтому формула (3.53) может быть переписана в форме

$$\mathrm{app}\, F_{int}^{(P)}(V,\zeta) = F_{int}^{(L)}(V,\zeta) -$$
$$-\frac{1}{4V}\sum_{(f)} L^2(f) \frac{1}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})} \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \left(e^{-\omega\sigma} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega\sigma}\right) e^{\frac{f^2}{6} D_V(\sigma)} - \tag{3.68}$$
$$-\frac{1}{4}\int_0^{\infty} d\vartheta\, E_V(\vartheta) \frac{\vartheta}{1-e^{-\beta\hbar\vartheta}} \int_0^{\beta\hbar} d\sigma \left(e^{-\vartheta\sigma} + e^{-\beta\hbar\vartheta-\vartheta\sigma}\right) D_V(\sigma)$$

или

$$\mathrm{app}\, F_{int}^{(P)}(V,\zeta) = F_{int}^{(L)}(V,\zeta) -$$
$$-\frac{1}{2V}\sum_{(f)} L^2(f) \frac{1}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})} \int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma \left(e^{-\omega\sigma} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega\sigma}\right) e^{-\frac{f^2}{6} D_V(\sigma)} - \tag{3.69}$$
$$-\frac{1}{2}\int_0^{\infty} d\vartheta\, E_V(\vartheta) \frac{\vartheta}{1-e^{-\beta\hbar\vartheta}} \int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma \left(e^{-\vartheta\sigma} + e^{-\beta\hbar\vartheta+\vartheta\sigma}\right) D_V(\sigma) .$$

Совершим теперь предельный переход:

$$V \to \infty, \qquad \zeta \to 0 . \tag{3.70}$$

Тогда, используя неравенство (3.26), мы должны иметь

$$\mathrm{app}\, F_{int}^{(P)} \geqslant F_{int}^{(P)} , \tag{3.71}$$

где

$$\mathrm{app}\, F_{int}^{(P)} = \lim_{\substack{\zeta\to 0 \\ V\to\infty}} \mathrm{app}\, F_{int}^{(P)}(V,\zeta) . \tag{3.72}$$

Заметим, что функции $S(f)$, $\nu(f)$, характеризующие вспомогательный гамильтониан $H^{(L)}$, могут быть выбраны произвольно.

Для вычисления (3.72) будет удобно выбрать в качестве $S(f)$, $\nu(f)$ некоторые непрерывные функции на действительной оси, такие, что

$$\nu(f) > 0,$$

$$\frac{1}{V}\sum_{|f|>R}\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}f^2 \leqq \delta\left(\frac{1}{R}\right) \to 0, \quad R\to\infty$$

где $\delta\left(\frac{1}{R}\right)$ не зависит от V.

Тогда, если $\varphi(w)$ – любая произвольная непрерывная и ограниченная функция на действительной оси, мы имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(w)E_V(w)dw = \frac{1}{6V}\sum_{(f)}\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}f^2\{\varphi(\nu(f))+\varphi(-\nu(f))\} \to$$

$$\to \frac{1}{(2\pi)^3 6}\int\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}f^2\{\varphi(\nu(f))+\varphi(-\nu(f))\}\,d\vec{f} = \tag{3.73}$$

$$= \frac{4\pi}{(2\pi)^3 6}\int_0^\infty df\,\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}f^4\{\varphi(\nu(f))+\varphi(-\nu(f))\}, \quad \text{когда } V\to\infty.$$

Таким образом, видим, что обобщенный предел

$$E(w) = \lim_{V\to\infty}E_V(w) \tag{3.74}$$

существует, и мы можем написать:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(w)E_V(w)dw \xrightarrow[V\to\infty]{} \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(w)E(w)dw. \tag{3.75}$$

Эта функция $E(w)$ имеет следующие очевидные свойства:

$$E(w) \geqslant 0; \quad E(-w) = E(w), \tag{3.76}$$

$\int_{-\infty}^{+\infty}E(w)dw$ сходится (равно $\frac{1}{6\pi^2}\int_0^\infty df\,\frac{S^2(f)}{\nu^2(f)}f^4$).

Из формулы (3.75), в частности, следует

$$\Delta(\Omega) \to \Delta_\infty(\Omega) = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dw}{\Omega - w}E(w), \quad \text{когда } \operatorname{Im}\Omega\neq 0, \tag{3.77}$$

$$\Delta_\infty(\Omega) = -\Delta_\infty(-\Omega).$$

Отсюда

$$E(w) = \frac{1}{2\pi i}\{\Delta_\infty(w+i0) - \Delta_\infty(w-i0)\} =$$

$$= \frac{1}{2\pi i}\{\Delta_\infty(w+i0) + \Delta_\infty(-w+i0)\}. \tag{3.78}$$

Для вычисления (3.72) удобно начать с адекватного выбора $\Delta_\infty(\Omega)$.

Выберем аналитическую функцию $\Delta_+(\Omega)$, регулярную в верхней полуплоскости со следующими свойствами:

I°) для достаточно большого R

$$|\Delta_+(\Omega)| \leq \frac{C}{|\Omega|}; \quad C = const; |\Omega| \geqslant R,$$

где

$$\operatorname{Im}\Omega \geqslant 0;$$

2°) обобщенная функция

$$\lim_{\substack{\varepsilon\to 0\\ \varepsilon>0}}\Delta_+(w+i\varepsilon) = \Delta_+(w+i0)$$

существует на действительной оси w, и выражение

$$\frac{1}{2\pi i}\{\Delta_+(w+i0) + \Delta_+(-w+i0)\} \geqslant 0.$$

Интеграл от этого выражения, взятый по всей действительной оси, сходится.

Выберем теперь

$$\Delta_\infty(\Omega) = \Delta_+(\Omega), \quad \operatorname{Im}\Omega > 0,$$

$$\Delta_\infty(\Omega) = -\Delta_+(-\Omega), \quad \operatorname{Im}\Omega < 0. \tag{3.79}$$

Учитывая условия (I°) и (2°), легко видеть, что такая функция (3.79) и соответствующая $E(w)$ удовлетворяют всем упомянутым условиям.

Полагая Δ_∞ фиксированной, выберем $S(f)$, $\nu(f)$ так, чтобы предельные свойства (3.74), (3.75), (3.76) удовлетворялись.

Для анализа выражения

$$\lim_{\substack{\eta\to 0\\ V\to\infty}} D_V(s)$$

начнем с определения (3.63) и заметим, что выражение

$$\mathcal{Z}(s,\Omega)=\frac{1+e^{-\hbar\beta\Omega}-e^{-\Omega s}-e^{-\beta\hbar\Omega-\Omega s}}{\Omega(1-e^{-\beta\hbar\Omega})},$$

$$0\le s\le\beta\hbar, \tag{3.80}$$

есть аналитическая функция Ω во всей комплексной плоскости с полюсами

$$\Omega=\frac{2\pi ni}{\beta\hbar} \qquad (n \text{ – целое})$$

и не имеет других сингулярностей.

Покажем, что $\Omega=0$ не является полюсом, так что функция от Ω (3.80) регулярна в окрестности этой точки.

Действительно, разложение по степеням Ω дает

$$1+e^{-\hbar\beta\Omega}-e^{-\Omega s}-e^{-\beta\hbar\Omega-\Omega s}=\Omega^2(\beta\hbar s-s^2)+\Omega^3\ \ldots,$$

$$\Omega(1-e^{-\beta\hbar\Omega})=\beta\hbar\Omega^2+\Omega^3\ \ldots,$$

что приводит к разложению

$$\mathcal{Z}(s,\Omega)=s\left(1-\frac{s}{\beta\hbar}\right)+\Omega\ldots \tag{3.81}$$

Поэтому единственными сингулярностями $\mathcal{Z}(s,\Omega)$ как функции от Ω будут простые полюса:

$$\Omega=\frac{2\pi ni}{\beta\hbar};\qquad n=\pm1,\pm2,\pm3,\ \ldots.$$

Это дает нам возможность переписать (3.63) с (3.80) в форме

$$D_V(s)=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{Z}(s,\Omega)\,\frac{\Omega}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw, \tag{3.82}$$

$$0\le s\le\beta\hbar.$$

Это выражение может быть рассмотрено по способу, развитому в §I.

Заметим, что выражение

$$\mathcal{Z}(s,\Omega)\frac{\Omega}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)},\qquad 0\le s\le\beta\hbar,$$

представляет собой аналитическую функцию переменной Ω, регулярную в полосах:

$$0<\mathrm{Im}\,\Omega<\frac{2\pi}{\beta\hbar},$$

$$0>\mathrm{Im}\,\Omega>-\frac{2\pi}{\beta\hbar}$$

и что она имеет порядок $\frac{Const}{|\Omega|^2}$ при $\Omega\to\infty$. Поэтому из (3.82) следует, что

$$D_V(s)=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{Z}(s,\Omega)\,\frac{\Omega}{m\Omega^2-\gamma^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{w-i\varepsilon}^{w+i\varepsilon}dw, \tag{3.83}$$

где ε – произвольная величина в интервале

$$0<\varepsilon<\frac{2\pi}{\beta\hbar}, \tag{3.84}$$

и (3.83) не зависит от величины ε в указанном выше интервале.

Зафиксировав ε, мы можем перейти к пределу

$$\gamma\to0,\quad V\to\infty$$

в формуле (3.83) и получить

$$\lim_{\substack{\gamma\to0\\ V\to\infty}}D_V(s)=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{Z}(s,\Omega)\,\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{w-i\varepsilon}^{w+i\varepsilon}dw.$$

Поскольку правая часть этого равенства не зависит от ε, пока ε принадлежит интервалу (3.84), мы также можем записать:

$$D(s)=\lim_{\substack{\gamma\to0\\ V\to\infty}}D_V(s)=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{Z}(s,\Omega)\,\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw=$$

$$=\frac{3i\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{Z}(s,w)\,\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{w-i0}^{w+i0}dw. \tag{3.85}$$

Чтобы получить

$$\mathrm{app}\,F_{int}^{(P)}=\lim_{\substack{\gamma\to0\\ V\to\infty}}\mathrm{app}\,F_{int}^{(P)}(V,\gamma),$$

рассмотрим случай истинной модели Фрёлиха с $L(f)$, задаваемой формулой (3.3).

Тогда

$$\lim_{\substack{\hbar\to 0\\ V\to\infty}} \frac{1}{V}\sum_{(f)} L^2(f)\, e^{-\frac{f^2}{6}D_V(s)} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{g^2}{|f|^2}\cdot e^{-\frac{f^2}{6}D(s)}\, d\vec{f} = \frac{4\pi g^2}{(2\pi)^3}\int_0^\infty e^{-\frac{f^2}{6}D(s)}\, df = \tag{3.86}$$

$$= \frac{4\pi g^2}{(2\pi)^3}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{6}{D(s)}\right)^{1/2}.$$

Поэтому из (3.68) и (3,69) получим

$$app\, F_{int}^{(P)} = F_{int}^{(L)} - \frac{g^2\pi}{(2\pi)^3}\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{1}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})}\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\omega\sigma}+e^{-\omega\hbar\beta+\omega\sigma}\right)\sqrt{\frac{6}{D(\sigma)}} -$$

$$- \frac{1}{4}\int_0^\infty d\nu\, E(\nu)\,\frac{\nu}{1-e^{-\beta\hbar\nu}}\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\nu\sigma}+e^{-\beta\hbar\nu+\nu\sigma}\right)D(\sigma) \tag{3.87}$$

или

$$app\, F_{int}^{(P)} = F_{int}^{(L)} - \frac{g^2\pi^{3/2}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})}\int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\left(e^{-\omega\sigma}+e^{-\omega\hbar\beta+\omega\sigma}\right)\sqrt{\frac{6}{D(\sigma)}} -$$

$$- \frac{1}{2}\int_0^\infty d\nu\, E(\nu)\,\frac{\nu}{1-e^{-\beta\hbar\nu}}\int_0^{\beta\hbar/2} d\sigma\left(e^{-\nu\sigma}+e^{-\beta\hbar\nu+\nu\sigma}\right)D(\sigma). \tag{3.88}$$

Эта формула дает выражение, удовлетворяющее неравенству

$$app\, F_{int}^{(P)} \geq F_{int}^{(P)},$$

так что мы можем попытаться построить эффективное приближение, рассматривая адекватные $\Delta_\infty(\Omega)$, содержащие некоторые параметры, которые должны определяться из условия минимизации $app\, F_{int}^{(P)}$.

Рассмотрим сначала простейший выбор:

$$\Delta_\infty(\Omega) = -\frac{K_0^2\,\Omega}{\Omega^2-\nu_0^2},$$

$$E(\nu) = \frac{K_0^2}{2}\left\{\delta(\nu-\nu_0)+\delta(\nu+\nu_0)\right\}. \tag{3.89}$$

Как было указано в §I, такой выбор эквивалентен модели Фейнмана, в которой $H^{(L)}$ есть гамильтониан двух тел, соответствующий частице S, которая эластично связана с другой частицей Σ *.

Из (3.89) имеем

$$\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)} = \frac{\nu_0^2-\Omega^2}{m\Omega(\mu_0^2-\Omega^2)} =$$

$$= \frac{\nu_0^2-\Omega^2}{m\Omega}\cdot\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{1}{\Omega+\mu_0}-\frac{1}{\Omega-\mu_0}\right), \tag{3.90}$$

где

$$\mu_0^2 = \frac{K_0^2}{m}+\nu_0^2\ ; \quad K_0^2 = m(\mu_0^2-\nu_0^2).$$

Поэтому

$$\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\nu-i0}^{\nu+i0} = -2\pi i\left\{\frac{1}{m}\left(\frac{\nu_0}{\mu_0}\right)^2\delta(\nu)+\frac{\mu_0^2-\nu_0^2}{2m\mu_0^2}\left[\delta(\nu-\mu_0)+\delta(\nu+\mu_0)\right]\right\}.$$

Воспользуемся теперь (3.85), заметив, что ввиду (3.80)

$$\mathcal{Z}(s,\nu) = \mathcal{Z}(s,-\nu).$$

* См. также §4 главы 8 в книге Р.Фейнмана /2/.

Отсюда

$$D(s)=\frac{3\hbar}{m}\left(\frac{\nu_c}{\mu_c}\right)^2\mathcal{Z}(s,0)+\frac{5\hbar}{m}\cdot\frac{\mu_c^2-\nu_c^2}{\mu_c^2}\,\mathcal{Z}(s,\mu_c),$$

из чего следует, благодаря формулам (3.80), (3.81):

$$D(s)=\frac{3\hbar}{m}\left(\frac{\nu_c}{\mu_c}\right)^2\cdot s\left(1-\frac{s}{\beta\hbar}\right)+$$

$$+\frac{3\hbar}{m}\cdot\frac{\mu_c^2-\nu_c^2}{\mu_c^3}\left(\frac{1+e^{-\beta\hbar\mu_c}-e^{-s\mu_c}-e^{-\beta\hbar\mu_c+s\mu_c}}{1-e^{-\beta\hbar\mu_c}}\right), \tag{3.91}$$

$$0\le s\le\beta\hbar.$$

Это выражение было уже получено в §I с помощью рассмотрения модели Фейнмана двух тел. Заметим, что для (3.89) выражение $F_{int}^{(L)}$ также было вычислено там:

$$F_{int}^{(L)}=-3\theta\,\ln\frac{\mu_c}{\nu_c}+\frac{3\hbar}{2}(\mu_c-\nu_c)-3\theta\,\ln\frac{1-e^{-\beta\hbar\nu_c}}{1-e^{-\beta\hbar\mu_c}}. \tag{3.92}$$

Мы теперь подставим (3.91), (3.92) в формулу (3.88). Будет полезно ввести безразмерные параметры:

$$\mu=\frac{\mu_c}{\omega},\qquad \nu=\frac{\nu_c}{\omega}, \tag{3.93}$$

и безразмерные константы:

$$\beta_d=\beta\hbar\omega,\qquad \alpha=\frac{g^2}{4\pi\hbar\omega^2}\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}}. \tag{3.94}$$

Тогда, полагая в интеграле

$$z=\omega s,\qquad ds=\frac{1}{\omega}\,dz,$$
$$0\le z\le\beta_d$$

получим

$$\mathrm{app}\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}=-\frac{3}{\beta_d}\ln\frac{\mu}{\nu}-\frac{3}{\beta_d}\ln\frac{1-e^{-\beta_d\nu}}{1-e^{-\beta_d\mu}}+\frac{3}{2}(\mu-\nu)-$$

$$-\frac{\alpha}{(1-e^{-\beta_d})\sqrt{\pi}}\int_0^{\beta_d/2}dz\left(e^{-z}+e^{-\beta_d+z}\right)\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z\left(1-\frac{z}{\beta_d}\right)+\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(\frac{1+e^{-\beta_d\mu}-e^{-\mu z}-e^{-\beta_d\mu+z\mu}}{1-e^{-\beta_d\mu}}\right)\right\}^{-1/2}-$$

$$-\frac{3}{4}\nu(\mu^2-\nu^2)(1-e^{-\beta_d\nu})^{-1}\int_0^{\beta_d/2}dz\left(e^{-\nu z}+e^{-\beta_d\nu+\nu z}\right)\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z\left(1-\frac{z}{\beta_d}\right)+\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(\frac{1+e^{-\beta_d\mu}-e^{-\mu z}-e^{-\beta_d\mu+z\mu}}{1-e^{-\beta_d\mu}}\right)\right\}. \tag{3.95}$$

Здесь μ, ν могут быть рассматриваемы как положительные параметры, выбираемые так, чтобы минимизировать выражение (3.95), таким образом обеспечивая по возможности наиболее точную аппроксимацию к истинному значению:

$$\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}. \tag{3.96}$$

Следует подчеркнуть, что с учетом формул (3.90), (3.93)

$$\mu^2-\nu^2=\frac{K_c^2}{m\omega^2}\geqslant 0. \tag{3.97}$$

Поэтому область возможных значений μ, ν задается неравенством

$$\mu\geqslant\nu>0. \tag{3.98}$$

Рассмотрим сначала простейший, но не лучший выбор:

$$\mu=\nu.$$

Тогда приближение, задаваемое формулой (3.95), будет

$$-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\beta_d/2}\frac{(e^{-z}+e^{-\beta_d+z})}{1-e^{-\beta_d}}\,\frac{dz}{\sqrt{z\left(1-\frac{z}{\beta_d}\right)}}. \tag{3.99}$$

Легко понять, что (3.99) представляет точно первый член в разложении величины F_{int}^{P} по степеням α (т.е. g^2).

Действительно, благодаря формуле (3.97) равенство $\mu=\nu$ соответствует отсутствию члена взаимодействия в гамильтониане $H^{(L)}$ и в этом случае Φ_0, определяемый формулами (3.23), (3.24) – тождественный нуль.

Мы также видим из формулы (3.16), что Φ пропорционально α. Поэтому приближение, определяемое формулой (3.26), содержит два члена разложения $F_{int}^{(P)}$ по степеням α – член нулевого порядка и член первого порядка.

Член нулевого порядка теперь равен нулю, член первого порядка выражается формулой (3.99). Конечно, такое приближение может быть применимо в случае достаточно малых значений α. Однако в такой ситуации легко сделать следующий шаг и перейти к вычислению члена, пропорционального α^2. Это может быть выполнено с помощью регулярного разложения:

$$F_{int}^{(P)} = -\theta \ln < T\{e^{\Phi}\} >_r = A_1 + A_2 + \cdots, \tag{3.100}$$
$$A_1 = -\theta < T\{\Phi\} >_r, \qquad A_2 = -\theta \frac{1}{2} < T\{\Phi^2\} - A_1^2 >_r, \ldots .$$

Здесь A_1 уже известно, а A_2 может быть легко построено с помощью ранее обсужденного метода.

После этих замечаний обратимся к формуле (3.95) и рассмотрим ее с помощью принципа минимума, позволяющего определить параметры μ, ν, удовлетворяющие неравенствам (3.98).

Для упрощения вычислений мы будем интересоваться здесь только случаем, когда

$$\frac{1}{\beta_d} = \frac{\theta}{\hbar\omega} \ll 1. \tag{3.101}$$

Полагая $\beta_d = \infty$ в (3.95), мы получим формулу при нулевой температуре:

$$app\, \frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega} = \frac{3}{2}(\mu-\nu) - \frac{3\nu}{4}(\mu^2-\nu^2)\int_0^\infty e^{-\nu z}\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z + \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(1-e^{-\mu z}\right)\right\} dz -$$
$$-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-z}\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z + \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(1-e^{-\mu z}\right)\right\}^{-1/2} dz. \tag{3.102}$$

Мы имеем

$$\int_0^\infty e^{-\nu z}\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z + \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(1-e^{-\mu z}\right)\right\} dz = \left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2\frac{1}{\nu^2} + \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(\frac{1}{\nu} - \frac{1}{\mu+\nu}\right) =$$
$$= \frac{1}{\mu^2} + \frac{\mu^2-\nu^2}{\nu\mu^3(\mu+\nu)}\mu = \frac{1}{\mu^2} + \frac{\mu-\nu}{\nu\mu^2} = \frac{1}{\nu\mu}.$$

Итак, первые два члена в правой части формулы (3.102) дают

$$\frac{3}{2}(\mu-\nu) - \frac{3\nu}{4}(\mu^2-\nu^2)\frac{1}{\mu\nu} = \frac{3}{4\mu}\left(2\mu^2-2\mu\nu-\mu^2+\nu^2\right) = \frac{3}{4\mu}(\mu-\nu)^2.$$

Поэтому (3.102) дает

$$\boxed{app\, \frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega} = \frac{3}{4\mu}(\mu-\nu)^2 - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-z}\left\{\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2 z + \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\left(1-e^{-\mu z}\right)\right\}^{-1/2} dz} \tag{3.103}$$

Эта формула была впервые получена Р.Фейнманом.

Исследуем применимость этой формулы для случая малых α и попытаемся найти параметры ν, μ из принципа минимума так, чтобы учесть члены, пропорциональные α^2.

Как мы видели (формула (3.99)), член F_{int}^{P}, пропорциональный α, в рассматриваемом случае $\beta=\infty$ будет

$$-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-z}\frac{dz}{\sqrt{z}} = -2\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty e^{-x^2}dx = -\alpha,$$

и, таким образом, он соответствует выбору

$$\nu = \mu.$$

Поэтому теперь мы положим

$$\mu = \nu\,(1+\xi\alpha) \tag{3.104}$$

и оценим правую часть формулы (3.103) до членов порядка α^2.

Имеем

$$\int_0^\infty e^{-z}\frac{dz}{\sqrt{z+\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu\nu^2}\left(1-e^{-\mu z}\right)}} = \int_0^\infty e^{-z}\frac{dz}{\sqrt{z}} -$$
$$-\frac{\mu^2-\nu^2}{2\mu\nu^2}\int_0^\infty \frac{e^{-z}\left(1-e^{-\mu z}\right)}{z^{3/2}}\,dz + \alpha^2 \ldots = \tag{3.105}$$
$$= 2\int_0^\infty e^{-x^2}dx - \frac{\mu^2-\nu^2}{\mu\nu^2}\int_0^\infty \frac{e^{-x^2}\left(1-e^{-\mu x^2}\right)}{x^2}\,dx + \alpha^2 \ldots,$$

Замечая, что

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\int_0^\infty \frac{e^{-x^2}(1-e^{-\mu x^2})}{x^2}\,dx=\int_0^\infty e^{-(1+\mu)x^2}\,dx=\frac{\sqrt{\pi}}{2}(1+\mu)^{-1/2},$$

получим

$$\int_0^\infty \frac{e^{-x^2}(1-e^{-\mu x^2})}{x^2}\,dx=\sqrt{\pi}\left\{\sqrt{1+\mu}-1\right\}.$$

Соотношение (3.I05) теперь приводит к формуле

$$\int_0^\infty e^{-z}\frac{dz}{\sqrt{z+\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu\nu^2}(1-e^{-\mu z})}}=\sqrt{\pi}-\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu\nu^2}\sqrt{\pi}\left\{(1+\mu)^{1/2}-1\right\}+\alpha^2\cdots.$$

Поэтому благодаря формуле (3.I04) правая часть этого выражения может быть записана в форме

$$\sqrt{\pi}\left\{1-\alpha\xi\cdot D\right\}+\alpha^2\cdots,$$

где

$$D=\frac{2}{\nu}\left(\sqrt{1+\nu}-1\right). \tag{3.I06}$$

Мы, таким образом, получаем из формул (3.I03), (3.I04)

$$app\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}=\frac{3\alpha^2}{4(1+\alpha\xi)}\nu\xi^2-\alpha(1+\alpha\xi)(1-\alpha\xi D)+\alpha^3\cdots.$$

Пренебрегая членами порядка α^3, имеем следующий приближенный результат:

$$app\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}=-\alpha+\alpha^2\left\{\frac{3}{4}\nu\xi^2-\xi+\xi D\right\}. \tag{3.I07}$$

Здесь

$$\xi>0,\quad \nu>0$$

есть величины, которые определяются посредством принципа минимума выражения

$$app\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}=min.$$

Сначала определим ξ. Имеем

$$0=\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{3}{4}\nu\xi^2-\xi+\xi D\right)=\frac{3}{2}\nu\cdot\xi-1+D,$$

так что

$$\xi=\frac{2}{3\nu}(1-D). \tag{3.I08}$$

Подставляя это значение в формулу (3.I07), получим

$$\begin{aligned}app\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}&=-\alpha-\frac{\alpha^2}{3\nu}(1-D)^2=\\&=-\alpha-\frac{\alpha^2}{3\nu}\left\{1-\frac{2}{\nu}\left(\sqrt{1+\nu}-1\right)\right\}^2.\end{aligned} \tag{3.I09}$$

Теперь ν должно быть определено так, чтобы обеспечить минимальность выражения (3.I09) или, что то же самое, обеспечить максимум выражения

$$+\frac{1}{\nu}\left\{1-\frac{2}{\nu}\left(\sqrt{1+\nu}-1\right)\right\}^2.$$

Видим, что требуемое значение будет

$$\nu=3. \tag{3.II0}$$

Подставляя его в формулу (3.I09), придем к приближению

$$\boxed{app\,\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}=-\alpha-\frac{\alpha^2}{9^2}=-\alpha-1{,}23\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2} \tag{3.III}$$

Заметим, что обычное разложение теории возмущений по степеням α, которое было проведено до членов второго порядка, дает вместо формулы (3.III) следующее разложение:

$$-\alpha-1{,}26\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2. \tag{3.II2}$$

Мы, таким образом, видим, что вариационное приближение с простейшим выбором $E(\nu)$, соответствующее модели Фейнмана двух тел, очень точное для малых значений α.

Обратимся теперь к изучению другого экстремального случая, когда $\alpha\gg1$.

Как хорошо известно, теория сильной связи приводит к главному члену:

$$-0,109\alpha^2. \tag{3.113}$$

Поэтому, чтобы раскрыть соотношение (3.103), мы применим следующую схему: μ предполагается величиной порядка α^2; ν – порядка I.

Из (3.103) имеем

$$\begin{aligned}app\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega} &= \frac{3}{4}\mu-\frac{3}{2}\nu+\frac{3}{4}\frac{\nu^2}{\mu} - \\ &- \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\mu^3}{\mu^2-\nu^2}\right)^{1/2}\int_0^\infty e^{-z}\left\{(1-e^{-\mu z})+\frac{\nu^2\mu}{\mu^2-\nu^2}z\right\}^{-1/2}dz .\end{aligned} \tag{3.114}$$

Замечая, что

$$\frac{\nu^2\mu}{\mu^2-\nu^2}\sim O\left(\frac{1}{\mu}\right)\sim O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right),$$

можем использовать разложение

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty e^{-z}\left\{(1-e^{-\mu z})+\frac{\nu^2\mu}{\mu^2-\nu^2}z\right\}^{-1/2}dz = \\ &=\int_0^\infty e^{-z}(1-e^{-\mu z})^{-1/2}dz-\frac{\nu^2\mu}{2(\mu^2-\nu^2)}\int_0^\infty e^{-z}z(1-e^{-\mu z})^{-3/2}dz+O\left(\frac{1}{\mu^2}\right)\end{aligned} \tag{3.115}$$

и оценить интегралы в правой части (3.115) посредством асимптотической формулы*:

$$\int_0^\infty e^{-z}(1-e^{-\mu z})^{-1/2}dz=\int_0^\infty e^{-z}dz+\int_0^\infty e^{-z}\left\{(1-e^{-\mu z})^{-1/2}-1\right\}dz=$$

---

* Первый интеграл можно легко выразить с помощью Γ-функции:

$$\int_0^\infty e^{-z}(1-e^{-\mu z})^{-1/2}dz=\frac{\Gamma(\frac{1}{2})\,\Gamma(1+\frac{1}{\mu})}{\Gamma(\frac{1}{2}+\frac{1}{\mu})}.$$

$$=1+\frac{1}{\mu}\int_0^\infty e^{-\frac{x}{\mu}}\left\{(1-e^{-x})^{-1/2}-1\right\}dx=$$

$$=1+\frac{1}{\mu}\int_0^\infty\left\{(1-e^{-x})^{-1/2}-1\right\}dx+O\left(\frac{1}{\mu^2}\right)=1+\frac{2\ln 2}{\mu}+O\left(\frac{1}{\mu^2}\right) \quad (*),$$

$$\int_0^\infty e^{-z}z(1-e^{-\mu z})^{-3/2}dz=\int_0^\infty e^{-z}z\,dz+\int_0^\infty e^{-z}z\left\{(1-e^{-\mu z})^{-3/2}-1\right\}dz=$$

$$=1+\frac{1}{\mu^2}\int_0^\infty e^{-\frac{x}{\mu}}x\left\{(1-e^{-x})^{-3/2}-1\right\}dx=1+O\left(\frac{1}{\mu^2}\right).$$

Выражение (3.115) теперь дает

$$\int_0^\infty e^{-z}\left\{(1-e^{-\mu z})+\frac{\nu^2\mu}{\mu^2-\nu^2}z\right\}^{-1/2}dz=1+\frac{2\ln 2-\frac{\nu^2}{2}}{\mu}+O\left(\frac{1}{\mu^2}\right),$$

и поэтому из формулы (3.114) следует

$$\begin{aligned}app\frac{F_{int}^{(P)}}{\hbar\omega}&=\frac{3}{4}\mu-\frac{3}{2}\nu+\frac{3}{4}\frac{\nu^2}{\mu}-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\mu^{1/2}\left(1+\frac{2\ln 2}{\mu}-\frac{\nu^2}{2\mu}\right)+O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right)= \\ &=\frac{3}{4}\mu-\frac{3}{2}\nu-\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\mu^{1/2}\left(1+\frac{2\ln 2}{\mu}-\frac{\nu^2}{2\mu}\right)+O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right).\end{aligned} \tag{3.116}$$

Чтобы минимизировать это выражение, рассмотрим уравнения

$$\frac{\partial}{\partial\nu}\mathcal{E}=0, \quad \frac{\partial}{\partial\mu}\mathcal{E}=0,$$

---

*) Вводя переменную $e^{-x}=U$,

получим

$$\int_0^\infty\left\{(1-e^{-x})^{-1/2}-1\right\}dx=\int_0^1\left\{(1-U)^{-1/2}-1\right\}\frac{dU}{U}=$$

$$=\int_0^1\frac{d}{dU}\left\{\ln\frac{1-\sqrt{1-U}}{1+\sqrt{1-U}}-\ln U\right\}dU=$$

$$=\ln\frac{1-\sqrt{1-U}}{U(1+\sqrt{1-U})}\Bigg|_0^1=-\ln\frac{1}{4}=2\ln 2.$$

где

$$\mathcal{E} = \frac{3}{4}\mu - \frac{3}{2}\nu - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\mu^{1/2} - \frac{\alpha\mu^{-1/2}}{\sqrt{\pi}}\, 2\ln 2 + \frac{\alpha\mu^{-1/2}}{2\sqrt{\pi}}\nu^2 . \qquad (3.117)$$

Эти уравнения дают

$$\nu = \frac{3}{2}\,\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\,\mu^{1/2},$$

$$\mu^{1/2} = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} - \frac{\alpha\mu^{-1}4\ln 2}{3\sqrt{\pi}} + \frac{\alpha\mu^{-1}\nu^2}{3\sqrt{\pi}} .$$

Откуда следует

$$\mu^{1/2} = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} + O\left(\frac{1}{\alpha}\right),$$

$$\nu = 1 + O\left(\frac{1}{\alpha^2}\right).$$

Итак,

$$\mu^{1/2} = \frac{2\alpha}{3\sqrt{\pi}} - \frac{3\sqrt{\pi}\ln 2}{\alpha} + \frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha} + O\left(\frac{1}{\alpha^3}\right).$$

Поэтому, пренебрегая членами порядка $\frac{1}{\alpha^2}$, мы получим $\nu = 1$

$$\mu = \frac{4\alpha^2}{9\pi} - 4\ln 2 + 1, \qquad (3.118)$$

и асимптотическое выражение для фейнмановского приближения будет

$$\mathcal{E} = -\frac{\alpha^2}{3\pi} - 3\ln 2 - \frac{3}{4} = -0{,}106\alpha^2 - 2{,}83 . \qquad (3.119)$$

$$\alpha \gg 1$$

Определение параметров ν, μ и соответствующей энергии исходя из минимизации выражения (3.103) для промежуточных значений α требует численных расчетов. Такие численные расчеты были проведены (см. Р.Фейнман /2/, стр. 273). Результаты аппроксимаций в рамках модели Фейнмана представляются вполне удовлетворительными при изучении статистического равновесия.

Но, как было указано Дж.Т.Дефризом и другими авторами, такая модель приводит к трудностям при исследовании кинетических процессов. Действительно, в рассматриваемой модели имеется два параметра ν и μ. Как следует из предыдущего рассмотрения, частота $\nu_0 = \nu\omega$ соответствует фононному полю,

а частота $\mu_0 = \mu\omega$ соответствует истинной поляронной частоте, которая обусловлена связью между электроном и фононным полем.

Мы, таким образом, видим, что, полагая $\nu \neq 1$, мы искажаем действительную частоту фононного поля, которая равна ω, а не $\nu\omega$, и ясно, что это искажение существенно, когда рассматривается столкновение между фононами и поляронами. Поэтому гамильтониан $H^{(\omega)}$ не может быть использован для изучения кинетических процессов, когда $\nu \neq 1$. Одна из возможностей состоит в том, чтобы удовлетвориться более грубым приближением, полагая $\nu = 1$ и минимизируя (3.103) только по отношению к параметру μ. Для малых значений α тогда найдем вместо формулы (3.111)

$$-\alpha - 1{,}23\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2$$

только слегка отличающийся результат:

$$-\alpha - 0{,}98\left(\frac{\alpha}{10}\right)^2 .$$

Мы полагаем, что рассмотрение одночастотной модели может быть существенно улучшено подходящим введением затухания.

§4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАВНОВЕСНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО ИМПУЛЬСАМ В ТЕОРИИ ПОЛЯРОНА

Рассмотрим функцию равновесного распределения по импульсам частицы S (электрона):

$$W(\vec{p}_c) = \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(P)}}\cdot\delta(\vec{p}-\vec{p}_c)}{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(P)}}}, \qquad (4.1)$$

удовлетворяющую обычному условию нормировки:

$$\int W(\vec{p}_0)\, d\vec{p}_c = 1 .$$

Используя представление Фурье для трехмерной δ-функции Дирака $\delta(\vec{p}-\vec{p}_c)$, получим

$$W(\vec{p}_c) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \widetilde{W}(\vec{\lambda})\, e^{-i\vec{\lambda}\vec{p}_c}\, d\vec{\lambda}, \qquad (4.2)$$

где

$$\widetilde{W}(\vec{\lambda}) = \frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(P)}} \cdot e^{i\vec{\lambda}\vec{P}}}{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(P)}}} .$$

Следует отметить, что мы опустили здесь знак

$$\lim_{\substack{\eta \to 0 \\ V \to \infty}} ,$$

поскольку в дальнейшем всегда будет ясно, на каком шаге наших преобразований производится этот предельный переход.

Обозначим

$$\frac{\underset{(S,\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H^{(P)}} e^{i\vec{\lambda}\vec{P}}}{\underset{(S)}{Sp}\, e^{-\beta\Gamma} \cdot \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-\beta H(\Sigma)}} = W(\vec{\lambda}). \tag{4.3}$$

Тогда

$$\widetilde{W}(\vec{\lambda}) = \frac{W(\vec{\lambda})}{W(0)} . \tag{4.4}$$

Применим теперь к выражению (4.3) процедуру, аналогичную той, которая была использована в предыдущем параграфе для преобразования (3.5) в (3.I7). Тогда получим

$$W(\vec{\lambda}) = \langle T\{e^{\Phi}\} e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}} \rangle_\Gamma .$$

Заметим, что под знаком T -произведения операторы упорядочены так, что параметр упорядочения, скажем s , возрастает справа налево; в правом конце $s = 0$ и в левом конце $s = \beta\hbar$.

Отметим также тождество

$$\vec{P} = \vec{P}(0).$$

Отсюда

$$T\{e^{\Phi}\} e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}} = T\{e^{\Phi}\} e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}(0)} = T\{e^{\Phi}\cdot e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}(0)}\} .$$

Таким образом,

$$W(\vec{\lambda}) = \langle T\{e^{\Phi} e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}(0)}\} \rangle_\Gamma .$$

Поэтому формула (4.4) дает

$$\widetilde{W}(\vec{\lambda}) = \frac{\langle T\{e^{\Phi}\cdot e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{P}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi}\}\rangle_\Gamma} . \tag{4.5}$$

Чтобы получить аппроксимацию для выражения (4.5), поступим так же, как и в §3 в случае $F^{(P)}_{int}$.

Другими словами, будем формально рассматривать разность $(\Phi - \Phi_c)$, появляющуюся в разложении

$$T\{e^{\Phi}\cdots\} = T\{e^{\Phi_c}\cdots\} + T\{e^{\Phi_c}(\Phi - \Phi_c)\cdots\} + \cdots$$

как величину "первого порядка малости". Тогда, пренебрегая в выражении (4.5) членами высшего порядка малости, получим аппроксимацию

$$\widetilde{W}_{app}(\lambda) = \frac{\langle T\{e^{\Phi_c} e^{i\vec{\lambda}\vec{P}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} + \frac{\langle T\{e^{\Phi_c}(\Phi - \Phi_c) e^{i\lambda P(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} - \tag{4.6}$$

$$- \frac{\langle T\{e^{\Phi_c} e^{i\lambda P(0)}\}\rangle}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma^2} \cdot \langle T\{e^{\Phi_c}(\Phi - \Phi_c)\}\rangle_\Gamma .$$

Используя вспомогательный гамильтониан $H^{(L)}$, легко видим, что

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_c} e^{i\vec{\lambda}\vec{P}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} = \langle e^{i\vec{\lambda}\vec{P}} \rangle_{H^{(L)}}.$$

Поскольку $H^{(L)}$ – положительная квадратичная форма по бозе-операторам, мы можем записать

$$\langle e^{i\vec{\lambda}\vec{P}} \rangle_{H^{(L)}} = e^{-\frac{1}{2}\sum\limits_{\alpha,\beta}\langle P_\alpha \cdot P_\beta\rangle_{H^{(L)}}\cdot\lambda_\alpha\cdot\lambda_\beta} = e^{-\frac{\lambda^2\langle \vec{P}^2\rangle_{H^{(L)}}}{6}}$$

$$(\alpha,\beta = 1,2,3)$$

и отсюда

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}\cdot e^{i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} = exp\left\{-\frac{\lambda^2}{6}\langle \vec{p}^2\rangle_{H^{(L)}}\right\}. \qquad (4.7)$$

Заметим, что из формулы (I.48) следует

$$\frac{1}{3}\langle \vec{p}^2\rangle_{H^{(L)}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{J}(\omega)\,d\omega = \frac{i\hbar m^2}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\omega}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\,\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega \qquad (4.8)$$

В частном случае одночастотной Σ -системы, когда в обозначениях (3.89)

$$\Delta_\infty(\Omega) = \frac{-K_0^2\,\Omega}{\Omega^2-\nu_0^2},$$

мы имеем

$$\frac{1}{3}\langle \vec{p}^2\rangle_{H^{(L)}} = \frac{m^2/\beta}{m+\left(\frac{K_0}{\nu_0}\right)^2} + \frac{K_0^2\hbar}{2\cdot\mu_0}\left\{\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\mu_0}} + \frac{1}{-1+e^{\beta\hbar\mu_0}}\right\}. \qquad (4.9)$$

Займемся теперь вычислением выражения

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\Phi-\Phi_0)e^{i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}.$$

Принимая во внимание определения для Φ , Φ_0 (см. формулы (3.16), (3.24), (3.23)) и формулу (3.52), получим в полной аналогии с (3.33)

$$I(\vec{\lambda}) \equiv \frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\Phi-\Phi_0)e^{i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} =$$

$$= \frac{1}{4\hbar^2 V}\sum_{(f)} L^2(f)\,\frac{\hbar}{\omega}\,(1-e^{-\beta\hbar\omega})^{-1}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left\{e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|}\right\}\otimes$$

$$\otimes\,\frac{\langle T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))+i\vec{\lambda}\cdot\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} + \qquad (4.10)$$

$$+\frac{1}{4\hbar^2}\int_0^{\infty} d\omega'\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, E_\nu(\omega')\,\frac{\hbar\omega'}{1-e^{-\beta\hbar\omega'}}\left\{e^{-\omega'|s-\sigma|}+e^{-\omega'\beta\hbar+\omega'|s-\sigma|}\right\}\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))^2 e^{i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}.$$

Заметим, что

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))^2 e^{i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} = \qquad (4.11)$$

$$= -\left\{\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial f_\alpha^2}\;\frac{\langle T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))+i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma}\right\}_{\vec{f}=0},$$

Обобщая процедуру, которая приводит к формулам (3.40), (3.42), можем получить

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s)-\vec{R}(\sigma))+i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_\Gamma} =$$

$$= \langle T\{e^{i\vec{f}(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))+i\vec{\lambda}\vec{p}(0)}\}\rangle_{H^{(L)}} = \qquad (4.12)$$

$$= exp\left(-\frac{1}{2}\langle T\{[\vec{f}\,(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))+\vec{\lambda}\cdot\vec{p}(0)]^2\}\rangle_{H^{(L)}}\right).$$

Далее имеем

$$\langle T\{[\vec{f}\cdot(\vec{\tau}(-is)-\vec{\tau}(-i\sigma))+\vec{\lambda}\vec{p}(0)]^2\}\rangle_{H^{(L)}} =$$

$$= \langle T\{[\bar{F}(\bar{\tau}(-is)-\bar{\tau}(-i\sigma))]^2\}\rangle_{H^{(L)}} + 2\langle[\bar{F}(\bar{\tau}(-is)-\bar{\tau}(-i\sigma))]\bar{\lambda}\,\bar{p}(t)\rangle_{H^{(L)}} + \tag{4.13}$$

$$+ \frac{\lambda^2}{3}\langle \bar{p}^2\rangle_{H^{(L)}} ,$$

здесь $0<s<\beta\hbar$, $0<\sigma<\beta\hbar$.

Как было показано в §3,

$$\langle T\{[\bar{F}(\bar{\tau}(-is)-\bar{\tau}(-i\sigma))]^2\}\rangle = \frac{f^2}{3}\mathcal{D}(s-\sigma). \tag{4.14}$$

Здесь в правой части взято предельное выражение. Отметим важное свойство $\mathcal{D}$:

$$\mathcal{D}(s)=\mathcal{D}(-s); \quad \mathcal{D}(\hbar\beta-s)=\mathcal{D}(s). \tag{4.15}$$

Напомним сейчас выражение (I.52) §I для усреднения по $H^{(L)}$:

$$\langle \tau_\alpha(t)\,\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = \frac{\hbar i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\;\frac{1}{m\Omega^2-\gamma_l^2+\Omega\,\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega\;\delta_{\alpha\beta},$$

и заметим, что функция

$$\tilde{F}(\Omega) = -\frac{1}{m\Omega^2-\gamma_l^2+\Omega\cdot\Delta(\Omega)}$$

инвариантна по отношению к замене $\Omega \to -\Omega$:

$$\tilde{F}(\Omega)=\tilde{F}(-\Omega).$$

Поэтому

$$\tilde{F}(-\omega+i0)-\tilde{F}(-\omega-i0) = -(\tilde{F}(\omega+i0)-\tilde{F}(\omega-i0)),$$

и мы можем записать

$$\langle \tau_\alpha(t)\,\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = \frac{\hbar i}{2\pi}\int_0^{\infty}\left\{\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}} - \frac{e^{i\omega(t-\tau)}}{1-e^{\beta\hbar\omega}}\right\}\tilde{F}(\Omega)\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega\;\delta_{\alpha,\beta}$$

или

$$\langle \tau_\alpha(t)\,\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = \delta_{\alpha,\beta}\frac{\hbar i}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}+e^{-\beta\omega\hbar+i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{1}{m\Omega^2-\gamma_l^2+\Omega\cdot\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega ,$$

из которого следует

$$\langle p_\alpha(t)\cdot\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = m\frac{d}{dt}\langle \tau_\alpha(t)\cdot\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} =$$

$$= \delta_{\alpha,\beta}\frac{\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}-e^{-\beta\omega\hbar+i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\omega\;\frac{1}{m\Omega^2-\gamma_l^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega ,$$

$$\langle \tau_\alpha(t)p_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = -\delta_{\alpha,\beta}\frac{\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}-e^{-\beta\omega\hbar+i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\omega\hbar}}\cdot\frac{\omega}{m\Omega^2-\gamma_l^2+\Omega\Delta(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega .$$

Совершая здесь наш обычный предельный переход, получим

$$\langle p_\alpha(t)\cdot\tau_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = \delta_{\alpha\beta}\frac{\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}-e^{-\beta\omega\hbar+i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\cdot\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega ,$$

$$\langle \tau_\alpha(t)\cdot p_\beta(\tau)\rangle_{H^{(L)}} = -\delta_{\alpha\beta}\frac{\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-\tau)}-e^{-\beta\omega\hbar+i\omega(t-\tau)}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\;\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega . \tag{4.16}$$

Рассмотрим функции

$$F(s) = -\frac{i\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{-\omega s}-e^{-\beta\hbar\omega+\omega s}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\cdot\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega \tag{4.17}$$

для $0<s<\beta\hbar$,

$$F(s) = \frac{i\hbar m}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{e^{\omega s}-e^{-\beta\hbar\omega-\omega s}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\;\frac{1}{m\Omega+\Delta_\infty(\Omega)}\Bigg|_{\omega-i0}^{\omega+i0} d\omega$$

для $-\beta\hbar<s<0$

с очевидными свойствами:

$$
\begin{aligned}
F(-s) &= -F(s), & -\beta\hbar < s < \beta\hbar,\\
F(s+\beta\hbar) &= F(s), & -\beta\hbar < s < 0,\\
F(s-\beta\hbar) &= F(s), & 0 < s < \beta\hbar.
\end{aligned}
\qquad (4.17')
$$

Положим теперь в первом соотношении (4.16) $t=-iu$, $\tau=-is$, а в следующем соотношении $t=-is$, $\tau=-iu$.

Получим

$$
\begin{aligned}
&\langle p_\alpha(-iu)\, \gamma_\beta(-is)\rangle_{H(\omega)} = i\delta_{\alpha,\beta}\, F(u-s) = -i\delta_{\alpha,\beta}\, F(s-u),\\
&\langle \gamma_\alpha(-is)\cdot p_\beta(-iu)\rangle_{H(L)} = -i\delta_{\alpha,\beta}\, F(s-u).
\end{aligned}
\qquad (4.18)
$$

Поэтому, в частности,

$$
\langle(\gamma_\alpha(-is)-\gamma_\alpha(-i\sigma))\, p_\beta(0)\rangle_{H(L)} = -i\delta_{\alpha,\beta}\left\{F(s)-F(\sigma)\right\}, \qquad (4.19)
$$

откуда следует

$$
\langle[\vec f(\vec\gamma(-is)-\vec\gamma(-i\sigma)]\cdot\vec\lambda\cdot\vec p(0)\rangle_{H(L)} = -i(\vec f\cdot\vec\lambda)\left\{F(s)-F(\sigma)\right\}.
$$

Благодаря формулам (4.13), (4.14), (4.19) имеем

$$
\frac{\langle T\{e^{\Phi_c+i\vec f(\vec R(s)-\vec R(\sigma))+i\vec\lambda\cdot\vec p(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} =
\qquad (4.20)
$$

$$
= \exp\left\{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(|s-\sigma|)+i(\vec f\cdot\vec\lambda)(F(s)-F(\sigma))-\frac{\lambda^2}{6}\langle\vec p^2\rangle_{H(L)}\right\}.
$$

Отсюда из (4.11) имеем

$$
\frac{\langle T\{e^{\Phi_c}(\vec R(s)-\vec R(\sigma))^2 e^{i\vec\lambda\vec p(0)}\}\rangle_\Gamma}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_\Gamma} =
\qquad (4.21)
$$

$$
= \left\{\mathcal{D}(|s-\sigma|)+\lambda^2(F(s)-F(\sigma))^2\right\} e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle\vec p^2\rangle_{H(L)}}.
$$

Поэтому для $I(\vec\lambda)$ (4.10) имеем

$$
\begin{aligned}
I(\vec\lambda) \equiv\ & \frac{1}{4\hbar^2}\int d\vec f\, L^2(f)\frac{\hbar}{\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left\{e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s-\sigma|}\right\}\frac{1}{(2\pi)^3}\otimes\\
&\otimes\exp\left\{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(|s-\sigma|)+i(\vec f\cdot\vec\lambda)(F(s)-F(\sigma))-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H(L)}\right\}+\\
&+\frac{1}{4\hbar^2}\int_0^{+\infty} d\omega'\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, E(\omega')\frac{\hbar\omega'}{1-e^{-\beta\hbar\omega'}}\left\{e^{-\omega'|s-\sigma|}+e^{-\omega'\beta\hbar+\omega'|s-\sigma|}\right\}\otimes\\
&\otimes\left\{\mathcal{D}(|s-\sigma|)+\lambda^2(F(s)-F(\sigma))^2\right\} e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H(L)}}.
\end{aligned}
\qquad (4.22)
$$

Но ввиду (4.6), (4.7), (4.10)

$$
\widetilde W_{app}(\vec\lambda) = e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^L}} + I(\vec\lambda) - I(0)\, e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^L}}. \qquad (4.23)
$$

Таким образом, получаем

$$
\begin{aligned}
\widetilde W_{app}(\vec\lambda) = \Big\{1 &+ \frac{1}{(2\pi)^3\cdot 4}\int d\vec f\,\frac{L^2(f)}{\hbar\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\left(e^{-\omega|s-\sigma|}+e^{-\beta\omega\hbar+\omega|s-\sigma|}\right)\otimes\\
&\otimes e^{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(|s-\sigma|)}\left[\exp\left\{i(\vec f\cdot\vec\lambda)(F(s)-F(\sigma))\right\}-1\right]+\\
&+\frac{\lambda^2}{4\hbar^2}\int_0^{+\infty} d\omega'\int_0^{\beta\hbar} ds\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\, E(\omega')\frac{\hbar\omega'}{1-e^{-\beta\hbar\omega'}}\left(e^{-\omega'|s-\sigma|}+e^{-\beta\omega'\hbar+\omega'|s-\sigma|}\right)(F(s)-F(\sigma))^2\Big\}\otimes\\
&\otimes e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^L}}.
\end{aligned}
\qquad (4.24)
$$

Замечание

Мы хотим здесь заметить, что формула (4.23) для $\widetilde{W}_{app}(\lambda)$ может быть получена другим способом, исходя непосредственно из выражения для свободной энергии.

Рассмотрим гамильтониан

$$H^{(P)} + \delta\Gamma = H^{(P)} + \Psi(\bar{p})\,\delta\xi\,, \tag{C4.I}$$

$\delta\xi$ – инфинитезимальный параметр.

Соответствующая свободная энергия будет

$$F(H^{(P)} + \delta\Gamma) = -\theta \ln \mathop{Sp}_{(S,\Sigma)} e^{-\beta(H^{(P)}+\delta\Gamma)}$$

и, таким образом,

$$\delta F = F(H^{(P)} + \delta\Gamma) - F(H^{(P)}) =$$

$$= \frac{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(P)}}\delta\Gamma}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(P)}}} = \langle \delta\Gamma \rangle_{H^{(P)}} = \langle \Psi(\bar{p}) \rangle_{H^{(P)}} \delta\xi =$$

$$= \int \langle \delta(\bar{p} - \bar{p}_0) \rangle_{H^{(P)}}\, \Psi(\bar{p}_0)\, d\bar{p}_0 \cdot \delta\xi\,.$$

Из формулы (4.I) теперь следует

$$\delta F = \int W(\bar{p}_0)\,\Psi(\bar{p}_0)\,d\bar{p}_0\,\delta\xi\,. \tag{C4.2}$$

Скажем теперь здесь несколько слов о свободной энергии, соответствующей гамильтониану H', которая получена из $H^{(P)}$ заменой $\frac{p^2}{2m}$ – кинетической энергии S-частицы более общей функцией $\Gamma'(p)$ импульса.

Вспоминая наш способ, разъясненный в §3, который привел нас к формуле (3.17), мы видим, что это не зависит от специального вида кинетической энергии S, так что мы можем записать

$$F_{int}(H') = -\theta \cdot \ln \langle T\{e^{\Phi}\} \rangle_{\Gamma'}\,, \tag{C4.3}$$
$$F(H') = F_{int}(H') + F(\Gamma') + F(H(\Sigma)).$$

Здесь Φ имеет тот же самый вид, что и в §3, только $\vec{R}(s)$, задаваемый формулой (3.II), заменяется на

$$\vec{R}(s) = e^{-\frac{s\Gamma'}{\hbar}}\,\vec{\tau}\cdot e^{-\frac{s\Gamma'}{\hbar}}\,. \tag{C4.4}$$

Полезно также заметить, что в полной аналогии с (3.38)

$$\frac{\langle T\{e^{\Phi_c + i\int_0^{\beta\hbar} ds\,\tilde{\lambda}(s)(\vec{f}\cdot\vec{R}(s))}\}\rangle_{\Gamma'}}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_{\Gamma'}} = \frac{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} U'(\hbar\beta)}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H'^{(L)}}}\,. \tag{C4.5}$$

Здесь $H'^{(L)}$ есть гамильтониан $H^{(L)}$, в котором $\frac{p^2}{2m}$ заменено на гамильтониан $\Gamma'(p)$, Φ_c имеет тот же вид, что и в §3 с $\vec{R}(s)$ из формулы (C4.4), и $U'(s)$ определяется уравнением, обобщающим формулу (3.37):

$$\hbar \frac{dU'(s)}{ds} = -\left(H'^{(L)} - \hbar\tilde{\lambda}(s)\cdot i(\vec{f}\cdot\vec{\tau})\right)\cdot U'(s), \tag{C4.6}$$
$$U'(0) = 1.$$

После этих предварительных замечаний возвратимся к выражению (C4.3) для свободной энергии и введем аппроксимационное выражение:

$$app\,F_{int}(H') = -\theta \ln \langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_{\Gamma'} - \theta\,\frac{\langle T\{e^{\Phi_c}(\Phi - \Phi_c)\}\rangle_{\Gamma'}}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_{\Gamma'}}\,, \tag{C4.7}$$

$$app\,F(H') = app\,F_{int}(H') + F(\Gamma') + F(H(\Sigma)). \tag{C4.8}$$

Рассмотрим вариацию первого порядка:

$$\delta_{app} F = app\,F(H^{(P)} + \delta\Gamma) - app\,F(H^{(P)}) =$$
$$= app\,F(H^{(P)} + \Psi(\bar{p})\delta\xi) - app\,F(H^{(P)}). \tag{C4.9}$$

Поскольку $\delta\xi$ инфинитезимально, эта вариация будет пропорциональна $\delta\xi$. Соответствующий коэффициент есть, очевидно, линейный функционал $\Psi(\bar{p})$. Мы, таким образом, запишем

$$\delta(app\,F)=\int f(\vec{p}_0)\,\Psi(\vec{p}_0)\,d\vec{p}_0\cdot\delta\xi\,.$$

Исходя из (C4.2), будем рассматривать $f(\vec{p}_0)$ как приближение к выражению $W(\vec{p}_0)$:

$$\delta(app\,F)=\int W_{app}(\vec{p}_0)\,\Psi(\vec{p}_0)\,d\vec{p}_0\cdot\delta\xi\,. \tag{C4.10}$$

Мы хотим показать, что преобразование Фурье

$$\widetilde{W}(\vec{\lambda})=\int W_{app}(\vec{p}_0)\,e^{i\vec{\lambda}\cdot\vec{p}_0}\,d\vec{p}_0 \tag{C4.11}$$

точно равно ранее полученному выражению (4.23).

Приступим теперь к оценке (C4.9). Здесь следует указать, что $H^{(L)}$, от которого зависит $app\,F(H^{(L)})$, содержит некоторые параметры, появляющиеся в выражении $H^{(L)}_{int}$, $H^{(L)}(\Sigma)$ и определяющиеся из принципа минимума:

$$app\,F_{int}\,(H^{P})=min\,. \tag{C4.12}$$

Например, в §3 мы специально рассмотрели случай зависимости левой части (C4.12) от двух параметров: ν, μ.

В общем случае некоторые другие параметры могут быть включены в $app\,F_{int}(H^{(P)})$ через $H^{(L)}_{int}$ и $H^{(L)}(\Sigma)$. Обозначим их через C_j. В этом случае левая часть формулы (C4.12) была бы функцией от $C_j\ldots$:

$$app\,F_{int}\,(H^{(P)})=f(\cdots C_j\cdots),$$

и благодаря принципу минимума эти параметры должны удовлетворять уравнениям

$$\frac{\partial f(\cdots C_j\cdots)}{\partial C_j}=0.$$

Кроме того, как следует из формулы (C4.8), разность

$$app\,F(H^{(P)})-app\,F_{int}(H^{(P)})=F(\Gamma)+F(H(\Sigma))$$

не зависит от параметров $\cdots C_j\cdots$. Поэтому вариация первого порядка

$$\delta(app\,F(H^{(P)})=\sum_{(j)}\frac{\partial f(\cdots C_j\cdots)}{\partial C_j}\,\delta C_j\,,$$

относящаяся к инфинитезимальным вариациям C_j, есть нуль.

Это обстоятельство позволяет нам при вычислении вариации первого порядка (C4.9) считать $\cdots C_j\cdots$ фиксированными.

Рассмотрим форму

$$F(H'^{(L)})=-\theta\ln<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma'}+F(\Gamma')+F(H^{(L)}(\Sigma))$$

и заметим, что благодаря описанному свойству вариации по параметрам C_j мы имеем

$$F(H^{(L)}+\delta\Gamma)-F(H^{(L)})=\{-\theta\ln<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma+\delta\Gamma}+F(\Gamma+\delta\Gamma)\}-$$

$$-\{-\theta\ln<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma}+F(\Gamma)\}$$

или, в краткой записи:

$$\delta F(H'^{(L)})=-\theta\,\delta\ln<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma'}+\delta F(\Gamma'). \tag{C4.13}$$

С другой стороны, аргументы, которые были использованы при выводе (C4.2), приводят к

$$\delta F\,(H'^{(L)})=\int W_L\,(\vec{p}_0)\cdot\Psi(\vec{p}_0)\,d\vec{p}_0\cdot\delta\xi\,, \tag{C4.14}$$

где $W_L(\vec{p}_0)$-функция распределения по импульсам частицы S динамической системы, характеризуемой гамильтонианом $H'^{L)}$.

Благодаря (C4.7), (C4.8), (C4.10) имеем

$$\int W_{app}(\vec{p}_0)\Psi(\vec{p}_0)d\vec{p}_0\,\delta\xi=\delta\ln<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma'}+\delta F(\Gamma')-$$

$$-\theta\delta\,\frac{<T\{e^{\Phi_c}(\phi-\phi_c)\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma'}}=$$

$$=\delta F(H'^{(L)})-\theta\delta\,\frac{<T\{e^{\Phi_c}(\phi-\phi_c)\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_c}\}>_{\Gamma'}}$$

и, учитывая формулу (С4.14), получим

$$\delta(F_{app}) = \int W_{app}(\bar{p}_0)\Psi(\bar{p}_0)d\bar{p}\,\delta\xi = \int W_L(\bar{p}_0)\Psi(\bar{p}_0)d\bar{p}_0\,\delta\xi - \\ -\theta\delta\frac{<T\{e^{\Phi_0}(\Phi-\Phi_0)\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}}. \tag{C4.15}$$

Определения Φ и Φ_0 (см. (3.16), (3.23), (3.24)) делают ясным, что

$$\delta\frac{<T\{e^{\Phi_0}(\Phi-\Phi_0)\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}} =$$

$$= \frac{1}{4\hbar^2 V}\sum_{(f)}L^2(f)\frac{\hbar}{\omega(1-e^{-\beta\omega\hbar})}\int_0^{\beta\hbar}ds_1\int_0^{\beta\hbar}ds_2\left\{e^{-\omega|s_1-s_2|}+e^{-\beta\omega\hbar+\omega|s_1-s_2|}\right\}\delta\frac{<T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s_1)-\vec{R}(s_2))}\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}} \tag{C4.16}$$

$$+\frac{1}{4\hbar^2}\int_0^{+\infty}d\omega' E_V(\omega')\int_0^{\beta\hbar}ds_1\int_0^{\beta\hbar}ds_2\,\frac{\hbar\omega'}{1-e^{-\beta\omega'\hbar}}\left\{e^{-\omega'|s_1-s_2|}+e^{-\beta\omega'\hbar+\omega'|s_1-s_2|}\right\}\otimes$$

$$\otimes\left\{-\sum_{\alpha=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial f_\alpha^2}\,\delta\,\frac{<T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s_1)-\vec{R}(s_2))}\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}}\right\}_{\vec{f}=0}.$$

Введем функцию

$$\tilde{\lambda}(s) = \delta(s-s_1)-\delta(s-s_2).$$

Тогда из (С4.5) следует

$$\delta\frac{<T\{e^{\Phi_0+i\vec{f}(\vec{R}(s_1)-\vec{R}(s_2))}\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}} =$$

$$= \delta\frac{<T\{e^{\Phi_0+i\int_0^{\beta\hbar}ds\,\tilde{\lambda}(s)(\vec{f}\,\vec{R}(s))}\}>_{\Gamma'}}{<T\{e^{\Phi_0}\}>_{\Gamma'}} =$$

$$= \delta\frac{\mathrm{Sp}_{(s,\Sigma)}\,U'(\hbar\beta)}{\mathrm{Sp}_{(s,\Sigma)}\,e^{-\beta H'(L)}}. \tag{C4.17}$$

Здесь

$$\hbar\frac{dU'(s)}{ds} = -\left(H^{(L)}-i\hbar\tilde{\lambda}(s)(\vec{f}\cdot\vec{r})+\Psi(\bar{p})\delta\xi\right)U'(s),$$
$$U'(0)=1,$$

и поэтому

$$U'(s) = U(s)+\delta U(s), \tag{C4.18}$$

где

$$\hbar\frac{dU(s)}{ds} = -H^{(L)}U(s)+\hbar\tilde{\lambda}(s)i(\vec{f}\cdot\vec{r})U(s), \tag{C4.19}$$

$$U(0)=1 \tag{C4.20}$$

и

$$\hbar\frac{d\,\delta U(s)}{ds} = (-H^{(L)}+i\hbar\tilde{\lambda}(s)(\vec{f}\cdot\vec{r}))\delta U(s)-\Psi(\bar{p})U(s)\delta\xi, \tag{C4.21}$$
$$\delta U(0)=0.$$

Заметим, что также благодаря (С4.14)

$$\delta\frac{1}{\mathrm{Sp}_{(s,\Sigma)}e^{-\beta H'(L)}} = \delta e^{\beta F(H'(L))} = \beta e^{\beta F(H'(L))}\delta F(H'(L)) =$$

$$= \beta e^{\beta F(H^{(L)})}\int W_L(\bar{p}_0)\Psi(\bar{p}_0)d\bar{p}_0\,\delta\xi = \frac{\beta\int W_L(\bar{p}_0)\Psi(\bar{p}_0)d\bar{p}_0\,\delta\xi}{\mathrm{Sp}_{(s,\Sigma)}e^{-\beta H^{(L)}}}.$$

С помощью формулы (C4.I7) имеем

$$
\delta \frac{\langle T\{e^{\Phi_c + i\bar f(\bar R(s_1)-\bar R(s_2))}\}\rangle_{\Gamma'}}{\langle T\{e^{\Phi_c}\}\rangle_{\Gamma'}} = \frac{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} \delta U(\hbar\beta)}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(L)}}} +
$$

$$
+\left\{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} U(\hbar\beta)\right\} \delta \frac{1}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(L)}}} = \tag{C4.22}
$$

$$
= \frac{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} \delta U(\hbar\beta)}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(L)}}} + \beta\, \frac{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} U(\hbar\beta)}{\mathop{Sp}\limits_{(S,\Sigma)} e^{-\beta H^{(L)}}} \cdot \int W_L(\bar p_0)\,\Psi(\bar p_0)\,d\bar p_0\,\delta\xi .
$$

Из формул (C4.I9), (C4.20) следует

$$
U(s) = e^{-s\frac{H^{(L)}}{\hbar}}\, T\left\{ exp\left[i\int_0^s \tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\,d\sigma\right]\right\}. \tag{C4.23}
$$

Для того чтобы решить уравнение (C4.2I), рассмотрим такое решение $U = U(s,u)$ уравнения (C4.I9), что оно становится равным единичному оператору при $s = u$:

$$
\hbar\,\frac{\partial U(s,u)}{\partial s} = \left(-H^{(L)} + \hbar i\,\tilde\lambda(s)(\bar f\cdot\bar\tau)\right) U(s,u) ,
$$

$$
U(u,u) = 1. \tag{C4.24}
$$

Положим здесь

$$
U(s,u) = e^{-\frac{s}{\hbar}H^{(L)}}\, A(s,u)\, e^{\frac{u}{\hbar}H^{(L)}} .
$$

Тогда

$$
\hbar\,\frac{\partial A(s,u)}{\partial s} = i\hbar\,\tilde\lambda(s)\, e^{\frac{s}{\hbar}H^{(L)}} (\bar f\cdot\bar\tau)\, e^{-\frac{s}{\hbar}H^{(L)}} A(s,u) =
$$

$$
= i\hbar\,\tilde\lambda(s)\,(\bar f\cdot\bar\tau(-is))\,A(s,u) ,
$$

$$
A(u,u) = 1.
$$

Откуда имеем

$$
A(s,u) = T\left\{ exp\left[i\int_u^s d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\}
$$

и

$$
U(s,u) = e^{-\frac{s}{\hbar}H^{(L)}}\, T\left\{ exp\left[i\int_u^s d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\} e^{\frac{u}{\hbar}H^{(L)}} . \tag{C4.25}
$$

Теперь легко подтвердить, что

$$
\delta U(s) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^s U(s,u)\,\Psi(\bar p)\,U(u)\,du\,\delta\xi . \tag{C4.26}
$$

Действительно,(C4.26) дает

$$
\hbar\,\frac{\partial\delta U(s)}{\partial s} = -U(s,s)\,\Psi(p)\,U(s)\,\delta\xi - \int_0^s \frac{\partial U(s,u)}{\partial s}\cdot\Psi(\bar p)\,U(u)\,du\,\delta\xi
$$

или благодаря (C4.24)

$$
\hbar\,\frac{\partial\delta U(s)}{\partial s} = -\Psi(\bar p)\,U(s)\,\delta\xi - \left(-H^{(L)} + i\hbar\,\lambda(s)(\bar f\cdot\bar\tau)\right)\frac{1}{\hbar}\int_0^s U(s,u)\,\Psi(\bar p)\,U(v)\,du\,\delta\xi .
$$

Видим,таким образом, что выражение (C4.26) действительно удовлетворяет уравнению (C4.2I) вместе с начальным условием

$$
\delta U(0) = 0 .
$$

Из (C4.26) следует

$$
\delta U(\beta\hbar) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} U(\beta\hbar,u)\,\Psi(\bar p)\,U(u)\,du\,\delta\xi . \tag{C4.27}
$$

Но благодаря (C4.25), (C4.23)

$$
U(\beta\hbar,u)\,\Psi(\bar p)\,U(u) =
$$

$$
= e^{-\beta H^{(L)}}\, T\left\{ exp\left[i\int_u^{\beta\hbar} d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\} e^{\frac{u}{\hbar}H^{(L)}}\,\Psi(\bar p)\,e^{-\frac{u}{\hbar}H^{(L)}}\, T\left\{ exp\left[i\int_0^u d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\} =
$$

$$
= e^{-\beta H^{(L)}}\, T\left\{ exp\left[i\int_u^{\beta\hbar} d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\} \Psi(\bar p(-iu))\, T\left\{ exp\left[i\int_0^u d\sigma\,\tilde\lambda(\sigma)(\bar f\cdot\bar\tau(-i\sigma))\right]\right\} .
$$

Обращая внимание на структуру упорядочения в T –произведениях, мы можем записать это уравнение в более компактной форме:

$$U(\beta\hbar,u)\,\Psi(\vec{p})\,U(u) = e^{-\beta H^{(u)}}\, T\left\{ e^{\,i\int_0^{\beta\hbar} d\sigma\,\tilde{\lambda}(\sigma)(\vec{f}\cdot\vec{r}(-i\sigma))}\;\Psi(\vec{p}(-iu))\right\}. \qquad \text{(C4.28)}$$

Подставим теперь формулы (C4.23), (C4.27), (C4.28) в (C4.22) и напомним, что

$$\tilde{\lambda}(\sigma) = \delta(\sigma - s_1) - \delta(\sigma - s_2).$$

Получим

$$\delta\,\frac{\langle T\{e^{\Phi_0 + i\vec{f}(\vec{R}(s_1)-\vec{R}(s_2))}\}\rangle_{\Gamma'}}{\langle T\{e^{\Phi_0}\}\rangle_{\Gamma'}} =$$

$$= -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du\,\langle T\{e^{\,i\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))}\;\Psi(\vec{p}(-iu))\}\rangle_{H^{(u)}}\,\delta\vec{\xi}\; +$$

$$+\beta\,\langle T\{e^{\,i\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))}\}\rangle_{H^{(u)}}\cdot\int W_L(\vec{p}_0)\,\Psi(\vec{p}_0)\,d\vec{p}_0\,\delta\vec{\xi}\,. \qquad \text{(C4.29)}$$

До сих пор мы не контролировали функцию $\Psi(\vec{p})$. Положим теперь

$$\Psi(\vec{p}) = e^{\,i\vec{\lambda}\vec{p}}.$$

Благодаря определению $W_L(\vec{p})$ очевидно, что

$$\int W_L(\vec{p}_0)\,e^{\,i\vec{\lambda}\vec{p}_0}\,d\vec{p}_0 = \langle e^{\,i\vec{\lambda}\cdot\vec{p}}\rangle_{H^{(u)}},$$

и поэтому

$$\int W_L(\vec{p}_0)\,e^{\,i\vec{\lambda}\vec{p}_0}\,d\vec{p}_0 = e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle\vec{p}^{\,2}\rangle_{H^{(u)}}}. \qquad \text{(C4.30)}$$

Мы далее имеем в (C4.29)

$$\langle T\{e^{\,i\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))}\;\Psi(\vec{p}(-iu))\}\rangle_{H^{(u)}} =$$

$$= \langle T\{e^{\,i\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))+i\vec{\lambda}\vec{p}(-iu)}\}\rangle_{H^{(u)}} = \qquad \text{(C4.31)}$$

$$= \exp\left(-\frac{1}{2}\langle T\{[\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))+\vec{\lambda}\vec{p}(-iu)]^2\}\rangle_{H^{(u)}}\right).$$

Обычным путем мы можем написать (сравни с (4.13))

$$\langle T\{[\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))+\vec{\lambda}\cdot\vec{p}(-iu)]^2\}\rangle_{H^{(u)}} =$$

$$= \langle T\{[\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))]^2\}\rangle_{H^{(u)}} + 2\langle T\{[\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))]\cdot\vec{\lambda}\cdot\vec{p}(-iu)\}\rangle_{H^{(u)}} +$$

$$+\frac{\lambda^2}{3}\langle\vec{p}^{\,2}\rangle_{H^{(u)}}\,.$$

Но из (4.18) вытекает

$$\langle T\{r_\alpha(-is)\cdot p_\beta(-iu)\}\rangle_{H^{(u)}} = -i\delta_{\alpha,\beta}F(s-u),$$

что дает

$$\langle T\{[\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))]\cdot\vec{\lambda}\cdot\vec{p}(-iu)\}\rangle_{H^{(u)}} = -i(\vec{f}\cdot\vec{\lambda})\{F(s_1-u)-F(s_2-u)\}\,.$$

Вспоминая также нашу предыдущую формулу (4.14), мы сведем (C4.31) к виду

$$\langle T\{e^{\,i\vec{f}(\vec{r}(-is_1)-\vec{r}(-is_2))}\;\Psi(\vec{p}(-iu))\}\rangle_{H^{(u)}} = \qquad \text{(C4.32)}$$

$$= \exp\left\{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(s_1-s_2) + i(\vec{f}\cdot\vec{\lambda})(F(s_1-u)-F(s_2-u)) - \frac{\lambda^2}{6}\langle\vec{p}^{\,2}\rangle_{H^{(u)}}\right\}.$$

Разделим теперь обе части соотношений (C4.I5), (C4.I6) на $\delta\xi$ с использованием формул (C4.29), (C4.30), (C4.32).

Тогда можно получить следующую формулу:

$$\widetilde{W}_{app}(\bar{\lambda}) = e^{-\lambda^2 \frac{\langle p^2 \rangle_{H^L}}{6}} + J(\bar{\lambda}) - J(0)\, e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2 \rangle_{H^L}}, \tag{C4.33}$$

где

$$J(\bar{\lambda}) = \frac{1}{4\hbar^2}\int \frac{d\bar{f}\, L^2(f)}{(2\pi)^3}\, \frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \frac{\hbar\left\{e^{-\omega|s_1-s_2|} + e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s_1-s_2|}\right\}}{\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})} \otimes$$

$$\otimes \exp\left\{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(s_1-s_2) + i(\bar{f}\bar{\lambda})\big(F(s_1-u)-F(s_2-u)\big) - \frac{\lambda^2}{6}\langle \bar{p}^2 \rangle_{H^L}\right\} +$$

$$+ \frac{1}{4\hbar^2}\int_0^{+\infty} d\omega' \frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, E(\omega')\, \frac{\hbar\omega'}{1-e^{-\hbar\beta\omega'}}\left\{e^{-\omega'|s_1-s_2|} + e^{-\omega'\beta\hbar+\omega'|s_1-s_2|}\right\} \otimes \tag{C4.34}$$

$$\otimes \left\{\mathcal{D}(s_1-s_2) + \lambda^2\big(F(s_1-u)-F(s_2-u)\big)^2\right\} e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle \bar{p}^2 \rangle_{H^{(L)}}}.$$

Из (4.23) следует, что требуется только показать, что

$$J(\bar{\lambda}) = I(\bar{\lambda}) \tag{C4.35}$$

(где $I(\bar{\lambda})$ определяется формулой (4.22)) для доказательства равенства между выражениями (C4.34) и (4.23).

Сравнивая эти выражения, мы можем написать:

$$J(\bar{\lambda}) = \frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1-u, s_2-u \mid \bar{\lambda}), \tag{C4.36}$$

$$I(\bar{\lambda}) = \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1, s_2 \mid \bar{\lambda}). \tag{C4.37}$$

Но, как было показано в §3, функции

$$\mathcal{D}(s),\ e^{-\omega|s|} + e^{-\omega\beta\hbar+\omega|s|},\ e^{-\omega'|s|} + e^{-\omega'\beta\hbar+\omega'|s|},$$

входящие в $\Phi(s_1, s_2)$, определенные только на интервале $(-\beta\hbar, \beta\hbar)$, могут быть продолжены на всю действительную ось таким образом, что они были бы периодическими функциями s с периодом $\beta\hbar$.

Из формулы (4.17) мы замечаем *, что

$$F(s') = F(s''), \text{ когда } |s'-s''| = \beta\hbar,\quad -\beta\hbar < s',\ s'' < \beta\hbar.$$

Так что можно продолжить $F(s)$ из соответствующего интервала $(-\beta\hbar, \beta\hbar)$ на $(-\infty, +\infty)$, при этом она будет периодической функцией s с периодом $\beta\hbar$.

Мы можем положить, например,

$$F(s) = F(s-\beta\hbar) \quad \text{для} \quad \beta\hbar < s < 2\beta\hbar,$$

$$F(s) = F(s+\beta\hbar) \quad \text{для} \quad -2\beta\hbar < s < -\beta\hbar$$

и так далее.

Мы, таким образом, видим, что $\Phi(s_1, s_2 / \bar{\lambda})$ может быть рассматриваема как периодическая функция s_1 и s_2 с периодом $\beta\hbar$.

В этой ситуации мы воспользуемся разложением Фурье:

$$\Phi(s_1, s_2 \mid \bar{\lambda}) = \sum_{(n_1, n_2)} A_{n_1, n_2}(\bar{\lambda})\, e^{i(n_1 s_1 + n_2 s_2)\frac{2\pi}{\beta\hbar}},$$

$$\Phi(s_1-u, s_2-u \mid \bar{\lambda}) = \sum_{(n_1, n_2)} A_{n_1, n_2}(\bar{\lambda})\, e^{i\frac{2\pi}{\beta\hbar}(n_1 s_1 + n_2 s_2)}\, e^{-i\frac{2\pi}{\beta\hbar}(n_1+n_2)u},$$

что дает

$$\int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1-u, s_2-u / \bar{\lambda}) = (\beta\hbar)^2 A_{0,0}(\bar{\lambda}) = \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1, s_2 \mid \bar{\lambda})$$

и

$$\frac{1}{\beta\hbar}\int_0^{\beta\hbar} du \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1-u, s_2-u \mid \bar{\lambda}) = \int_0^{\beta\hbar} ds_1 \int_0^{\beta\hbar} ds_2\, \Phi(s_1, s_2 \mid \bar{\lambda}).$$

---

* Заметим, что для $0 < s_j < \beta\hbar$, $(j = 1, 2)$, $0 < u < \beta\hbar$ мы имеем

$$-\beta\hbar < s_j - u < \beta\hbar.$$

Поэтому оба выражения (С4.36), (С4.37) одинаковы, так что соотношение (С4.35) правильно.

Это завершает доказательство равенства между выражениями (С4.33) и (4.23).

Возвратимся к рассмотрению (4.24) для случая стандартной модели Фрёлиха (3.3):

$$L^2(f) = \frac{g^2}{f^2}.$$

Заметим, что здесь можем выполнить интегрирование типа

$$\int d\bar{f}\;F(f^2, \bar{f}\bar{\lambda}).$$

Будет удобно выбрать $\bar{\lambda}$ как Z -ось в $\bar{f}$ -пространстве. Тогда

$$\int d\bar{f}\cdot F(f^2, \bar{f}\bar{\lambda}) = 2\pi\int_0^\infty df\int_0^\pi d\theta\, f^2 F(f^2, \lambda f\cos\theta)\sin\theta =$$

$$= 2\pi\int_0^\infty df\cdot\int_{-1}^{+1} dt\,F(f^2, f\lambda t)f^2 = 2\pi\int_{-\infty}^{+\infty} df\int_0^1 dt\; f^2 F(f^2, f\lambda t).$$

Поэтому (4.24) дает

$$\widetilde{W}_{app}(\lambda) = \Big\{1 + \int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2 \frac{g^2}{4\cdot(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} df\int_0^1 dt\,\frac{e^{-\omega|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega|s_1-s_2|}}{\hbar\omega(1-e^{-\beta\hbar\omega})}\, e^{-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(s_1-s_2)} \otimes$$

$$\otimes\big[\exp\{if\cdot\lambda t\,(F(s_1)-F(s_2))\} - 1\big] +$$

$$+ \frac{\lambda^2}{4\hbar^2}\int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2\int_0^{+\infty} d\omega' E(\omega')\hbar\omega'\,\frac{e^{-\omega'|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\omega'+\omega'|s_1-s_2|}}{1-e^{-\beta\hbar\omega'}}\,(F(s_1)-F(s_2))^2\Big\}\, e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H\omega}}.$$

С другой стороны,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} df\,\exp\Big\{\Big[-\frac{f^2}{6}\mathcal{D}(s_1-s_2) + if\lambda t\big(F(s_1)-F(s_2)\big)\Big\} =$$

$$= \sqrt{\pi}\;\sqrt{\frac{6}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}}\cdot e^{-\frac{3}{2}t^2\lambda^2\frac{(F(s_1)-F(s_2))^2}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}},$$

и мы имеем

$$\widetilde{W}_{app}(\bar{\lambda}) = \Big\{1 + \frac{g^2}{4(2\pi)^2\omega\hbar}\int_0^1 dt\int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2\sqrt{\frac{6\pi}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}}\;\frac{\big(e^{-\omega|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega|s_1-s_2|}\big)}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \otimes$$

$$\otimes\Big[e^{-\frac{3}{2}t^2\lambda^2\frac{(F(s_1)-F(s_2))^2}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}} - 1\Big] +$$

$$+ \frac{\lambda^2}{4\hbar^2}\int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2\int_0^{+\infty} d\omega' E(\omega')\hbar\omega'\,\frac{e^{-\omega'|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\omega'+\omega'|s_1-s_2|}}{1-e^{-\beta\hbar\omega'}}\,(F(s_1)-F(s_2))^2\Big\}\, e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H\omega}}. \qquad (4.25)$$

Рассмотрим теперь случай обсуждавшейся в §3 одночастотной системы $\Sigma^{(L)}$, когда справедливо (3.89) и

$$E(\omega') = \frac{K_0^2}{2}\big\{\delta(\omega'-\nu_0) + \delta(\omega'+\nu_0)\big\},$$
$$K_0^2 = m(\mu_0^2 - \nu_0^2). \qquad (4.26)$$

Тогда (4.25) дает

$$\widetilde{W}_{app}(\lambda) = \Big\{1 + \frac{g^2}{4(2\pi)^2\hbar\omega}\int_0^1 dt\int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2\sqrt{\frac{6\pi}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}}\cdot\frac{e^{-\omega|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\omega+\omega|s_1-s_2|}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \otimes$$

$$\otimes\Big[e^{-\frac{3}{2}t^2\lambda^2\frac{(F(s_1)-F(s_2))^2}{\mathcal{D}(s_1-s_2)}} - 1\Big] + \qquad (4.27)$$

$$+ \frac{\lambda^2 m(\mu_0^2-\nu_0^2)\nu_0}{8\hbar}\int_0^{\beta\hbar} ds_1\int_0^{\beta\hbar} ds_2\,\frac{e^{-\nu_0|s_1-s_2|} + e^{-\beta\hbar\nu_0+\nu_0|s_1-s_2|}}{1-e^{-\beta\hbar\nu_0}}\,(F(s_1)-F(s_2))^2\Big\}\, e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H\omega}}.$$

Напомним, что (см. (I.34), (3.9I))

$$\mathcal{D}(s) = \frac{3\hbar}{m}\Big\{\Big(\frac{\nu_0}{\mu_0}\Big)^2|s|\Big(1-\frac{|s|}{\beta\hbar}\Big) - \frac{\mu_0^2-\nu_0^2}{\mu_0^3}\Big(\frac{1+e^{-\hbar\beta\mu_0} - e^{-|s|\mu_0} - e^{-\beta\hbar\mu_0+\mu_0|s|}}{1-e^{-\beta\hbar\mu_0}}\Big)\Big\}, \qquad (4.28)$$

$$-\beta\hbar < s < \beta\hbar ,$$

$$\frac{1}{3m}\langle \vec{p}^{\,2} \rangle_{H^{(L)}} = \frac{\beta^{-1}\cdot\nu_0^2}{\mu_0^2} + \frac{\mu_0^2-\nu_0^2}{2\mu_0}\hbar\;\frac{1+e^{-\beta\hbar\mu_0}}{1-e^{-\beta\hbar\mu_0}} \qquad (4.28')$$

и что в рассмотренном случае из (4.I7) следует:

$$F(s) = \hbar\left\{\left(\frac{\nu_0}{\mu_0}\right)^2\left(\frac{s}{\beta\hbar}-\frac{1}{2}\right) + \frac{\mu_0^2-\nu_0^2}{2\mu_0^2}\;\frac{e^{-\beta\hbar\mu_0+\mu_0 s}-e^{-\mu_0 s}}{1-e^{-\beta\hbar\mu_0}}\right\}. \qquad (4.29)$$

$$0 < s < \beta\hbar$$

Введем здесь безразмерные параметры и переменные:

$$\frac{\mu_0}{\omega}=\mu , \quad \frac{\nu_0}{\omega}=\nu , \quad \beta\hbar\omega=\beta_d , \quad \alpha=\frac{g^2}{4\pi\hbar\omega^2}\sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} , \qquad (4.30)$$

$$\sigma_1=\omega s_1 , \qquad \sigma_2=\omega s_2 .$$

Тогда

$$\mathcal{D}(s)=\frac{3\hbar}{m\omega}\mathcal{D}_d(\sigma) \quad ; \quad F(s)=\hbar F_d(\sigma) ,$$

$$\mathcal{D}_d(\sigma)=\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2|\sigma|\left(1-\frac{|\sigma|}{\beta_d}\right)+\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu^3}\;\frac{1+e^{-\beta_d\mu}-e^{-|\sigma|\mu}-e^{-\beta_d\mu+\mu|\sigma|}}{1-e^{-\beta_d\mu}} ,$$

$$-\beta_d < \sigma < \beta_d , \qquad (4.31)$$

$$F_d(\sigma)=\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2\left(\frac{\sigma}{\beta_d}-\frac{1}{2}\right)+\frac{\mu^2-\nu^2}{2\mu^2}\;\frac{e^{-\beta_d\mu+\mu\sigma}-e^{-\mu\sigma}}{1-e^{-\beta_d\mu}} ,$$

$$0<\sigma<\beta_d ,$$

$$\langle \vec{p}^{\,2}\rangle_{H^{(L)}}=3m\omega\hbar\left\{\frac{1}{\beta_d}\left(\frac{\nu}{\mu}\right)^2+\frac{\mu^2-\nu^2}{2\mu}\;\frac{1+e^{-\beta_d\mu}}{1-e^{-\beta_d\mu}}\right\}.$$

В этих обозначениях (4.27) примет вид

$$\widetilde{W}_{app}(\bar\lambda)=\left\{1+\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\int_0^1 dt\int_0^{\beta_d}d\sigma_1\int_0^{\beta_d}d\sigma_2\sqrt{\frac{1}{\mathcal{D}_d(\sigma_1-\sigma_2)}}\left(\frac{e^{-|\sigma_1-\sigma_2|}+e^{-\beta_d+|\sigma_1-\sigma_2|}}{1-e^{-\beta_d}}\right)\left(e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2}m\omega\hbar\frac{(F_d(\sigma_1)-F_d(\sigma_2))^2}{\mathcal{D}_d(\sigma_1-\sigma_2)}}-1\right)+\right.$$

$$\left.+\frac{\lambda^2(m\omega\hbar)}{8}\nu(\mu^2-\nu^2)\int_0^{\beta_d}d\sigma_1\int_0^{\beta_d}d\sigma_2\;\frac{e^{-\nu|\sigma_1-\sigma_2|}+e^{-\beta_d\nu+\nu|\sigma_1-\sigma_2|}}{1-e^{-\beta_d\nu}}\left(F(\sigma_1)-F(\sigma_2)\right)^2\right\}e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^{(L)}}} \qquad (4.32)$$

Рассмотрим простейший выбор параметров ν , μ :

$$\nu=\mu=1 , \qquad (4.33)$$

который соответствует случаю, когда мы полагаем

$$H^{(L)}_{int}=0 \quad , \quad H^{(L)}(\Sigma)=H(\Sigma) , \qquad (4.34)$$

и поэтому

$$\bar{\tau}(-is)=\bar{R}(s), \qquad (4.35)$$
$$\Phi_0=0.$$

В такой ситуации функционал Φ , который фигурирует в формуле (4.5), пропорционален g^2 , т.е. α . Мы можем поэтому использовать формальное разложение правой части (4.5) по степеням α . Легко видеть, что если пренебрежем членами второго (и выше) порядка по степеням α , то получим нашу формулу (4.32). Таким образом, члены в формуле (4.32) точно равны членам нулевого и первого порядка по α этого разложения.

В рассматриваемом случае (4.33) формула (4.3I) дает

$$\mathcal{D}_d(\sigma)=|\sigma|\left(1-\frac{|\sigma|}{\beta_d}\right); \quad -\beta_d<\sigma<\beta_d ,$$

$$F_d(\sigma_1)-F_d(\sigma_2)=\frac{1}{\beta_d}(\sigma_1-\sigma_2)\,;\; 0<\sigma_1<\beta_d \,,\; 0<\sigma_2<\beta_d , \qquad (4.36)$$

$$\langle p^2\rangle_{H^{(L)}}=\frac{3m\omega\hbar}{\beta_d}=3m\theta ,$$

из которой следует

$$\sqrt{\frac{1}{\mathcal{D}_d(\sigma_1-\sigma_2)}}\cdot\left(\frac{e^{-|\sigma_1-\sigma_2|}+e^{-\beta_d+|\sigma_1-\sigma_2|}}{1-e^{-\beta_d}}\right)\left(e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2}m\omega\hbar\frac{(F_d(\sigma_1)-F_d(\sigma_2))^2}{\mathcal{D}_d(\sigma_1-\sigma_2)}}-1\right)=$$

$$=\Phi(|\sigma_1-\sigma_2|)\,;\; 0<\sigma_1<\beta_d ,\; 0<\sigma_2<\beta_d ,$$

где

$$\Phi(z) = \left(z\cdot\left(1-\frac{z}{\beta_d}\right)\right)^{-1/2} \frac{e^{-z}+e^{-\beta_d+z}}{1-e^{-\beta_d}}\cdot\left(e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2\beta_d^2}m\omega\hbar\frac{z}{1-\frac{z}{\beta_d}}}-1\right),$$

$$0 < z < \beta_d .$$

Поскольку $\Phi(|\sigma_1-\sigma_2|)$ – симметричная функция σ_1, σ_2, имеем

$$\int_0^{\beta_d} d\sigma_1 \int_0^{\beta_d} d\sigma_2\, \Phi(|\sigma_1-\sigma_2|) = 2\int_0^{\beta_d} d\sigma_1 \int_0^{\sigma_1} d\sigma_2\, \Phi(\sigma_1-\sigma_2) = 2\int_0^{\beta_d} dz \int_0^{\beta_d - z}\Phi(z)\, d\sigma_2 = 2\int_0^{\beta_d}(\beta_d - z)\,\Phi(z)\,dz =$$

$$= 2\int_0^{\beta_d/2}(\beta_d-z)\,\Phi(z)\,dz + 2\int_{\beta_d/2}^{\beta_d}(\beta_d-z)\,\Phi(z)\,dz =$$

$$= 2\int_0^{\beta_d/2}(\beta_d-z)\,\Phi(z)\,dz + 2\int_0^{\beta_d/2} z\,\Phi(\beta_d-z)\,dz .$$

Поэтому (4.32) дает

$$\widetilde{W}_I(\vec\lambda) = e^{-\frac{\lambda^2 m\theta}{2}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\lambda^2 m\omega\hbar}{2\beta_d}} \left\{ \int_0^1 dt \int_0^{\beta_d/2} dz\, \beta_d \left(\frac{1-\frac{z}{\beta_d}}{z}\right)^{1/2} \frac{e^{-z}+e^{-\beta_d+z}}{1-e^{-\beta_d}} \left(e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2\beta_d^2}m\omega\hbar\frac{z}{1-z/\beta_d}}-1\right) + \right.$$

$$\left. + \int_0^1 dt \int_0^{\beta_d/2} dz \left(\frac{z}{1-\frac{z}{\beta_d}}\right)^{1/2} \frac{e^{-z}+e^{-\beta_d+z}}{1-e^{-\beta_d}} \left(e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2}m\omega\hbar\frac{1-\frac{z}{\beta_d}}{z}}-1\right)\right\}. \tag{4.37}$$

Когда $\beta_d \gg 1$, так что членами $e^{-\frac{\beta_d}{2}}$, $e^{-\beta_d}$ можно пренебречь, формула (4.37) принимает вид

$$\widetilde{W}_I(\vec\lambda) = e^{-\frac{\lambda^2 m\omega\hbar}{2\beta_d}} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\lambda^2 m\omega\hbar}{2\beta_d}} \int_0^1 dt \int_0^{\beta_d/2} dz \left(\frac{1}{z}-\frac{1}{\beta_d}\right)^{1/2} e^{-z}\,\beta_d \left[\exp\left(-\frac{t^2\lambda^2}{2\beta_d^2} m\omega\hbar \frac{z}{1-\frac{z}{\beta_d}}\right)-1\right] +$$

$$+ \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\lambda^2 m\omega\hbar}{2\beta_d}} \int_0^1 dt \int_0^{\beta_d/2} \left(\frac{z}{1-\frac{z}{\beta_d}}\right)^{1/2} e^{-z} \left[e^{-\frac{t^2\lambda^2}{2}m\omega\hbar\left(\frac{1}{z}-\frac{1}{\beta_d}\right)}-1\right] dz . \tag{4.38}$$

Замечая, что

$$\int e^{-A\lambda^2 - i\vec p\cdot\vec\lambda}\, d\vec\lambda = \left(\frac{\pi}{A}\right)^{3/2}\cdot e^{-\frac{p^2}{4A}}, \quad A > 0 , \tag{4.39}$$

легко получить функцию распределения по импульсам в первом приближении:

$$W_I(\vec p) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \widetilde{W}_I(\vec\lambda)\, e^{-i\vec\lambda\vec p}\, d\vec\lambda .$$

Для простоты ограничимся случаем нулевой температуры, когда $\beta_d \to 0$. Тогда формула (4.38) дает

$$\widetilde{W}_I(\lambda) = 1 + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 dt \int_0^\infty dz \sqrt{z}\, e^{-z}\left(e^{-\frac{t^2\lambda^2 m\omega\hbar}{2z}}-1\right) =$$

$$= 1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 dt \int_0^\infty dz \sqrt{z}\cdot e^{-z} e^{-\frac{t^2\lambda^2 m\omega\hbar}{2z}} , \tag{4.40}$$

и поэтому

$$W_I(\vec p) = \left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\delta(\vec p) +$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 dt \int_0^\infty dz \sqrt{z}\, e^{-z} e^{-\frac{z p^2}{2t^2 m\omega\hbar}} \left(\frac{2\pi z}{t^2 m\omega\hbar}\right)^{3/2} =$$

$$= \left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\delta(\vec p) + \frac{\alpha}{\pi^2 (2m\omega\hbar)^{3/2}} \cdot \int_0^1 \frac{dt}{t^3} \int_0^\infty dz\, z^2 e^{-z\left(1+\frac{p^2}{2t^2 m\omega\hbar}\right)} = \tag{4.41}$$

$$= \left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\delta(\vec p) + \frac{\alpha}{\pi^2 (2m\omega\hbar)^{3/2}} \cdot 2\int_0^1 \frac{dt}{t^3} \frac{1}{\left(1+\frac{p^2}{2t^2 m\omega\hbar}\right)^3} =$$

$$= \left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\delta(\vec p) + \frac{\alpha}{\pi^2 (2m\omega\hbar)^{3/2}} \int_1^\infty d\tau \frac{1}{\left(1+\frac{p^2\tau}{2m\omega\hbar}\right)^3} .$$

Таким образом, находим

$$W_I(\vec p) = \left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\delta(\vec p) + \frac{\alpha}{(2\pi^2)(2m\omega\hbar)^{1/2}} \cdot \frac{1}{p^2\left(1+\frac{p^2}{2m\omega\hbar}\right)^2} . \tag{4.42}$$

Можно заметить теперь, что один только рассматривавшийся выше аппроксимирующий гамильтониан $H^{(L)}$ не дает корректной аппроксимации для функции распределения $W(\vec{p})$ при любом возможном выборе спектральной функции $E(\omega')$.

Действительно, мы всегда имеем

$$\langle e^{i\vec{\lambda}\vec{p}}\rangle_{H^{(L)}} = e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^{(L)}}}.$$

Поэтому соответствующая функция распределения по импульсам всегда "почти максвелловская":

$$W_L(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{-\frac{\lambda^2}{6}\langle p^2\rangle_{H^L} - i\vec{\lambda}\vec{p}}\, d\vec{\lambda} = \frac{1}{(2\pi)^3}\left(\frac{6\pi}{\langle p^2\rangle_{H^L}}\right)^{3/2} e^{-\frac{3p^2}{2\langle p^2\rangle_{H^L}}}. \qquad (4.43)$$

Выбор $E(\omega')$ может влиять только на значение $\langle p^2\rangle_{H^L}$ (см. (4.8)). Например, если $E(\omega')$ выбирается в виде (4.26), то из (4.26) вытекает

$$\frac{\langle p^2\rangle_{H^L}}{m\omega\hbar} = \frac{3}{2}\,\frac{\mu^2-\nu^2}{\mu}. \qquad (4.44)$$

Рассматривая первое приближение (4.42), видим, что $W_L(\vec{p})$ не учитывает даже членов первого порядка по α.

Возвратимся к нашей формуле (4.32). Как было показано в "Замечании", мы имеем

$$\delta F(\Gamma) + \delta(app\,F_{int}) = \int W_{app}(\vec{p})\,\Psi(\vec{p})\,d\vec{p}\;\delta\xi,$$

т.е.

$$\langle\Psi(\vec{p})\rangle_\Gamma\,\delta\xi + \delta(app\,F_{int}) = \int W_{app}(\vec{p})\,\Psi(\vec{p})\,d\vec{p}\,\delta\xi, \qquad (4.45)$$

где вариация соответствует

$$\frac{p^2}{2m} \to \frac{p^2}{2m} + \Psi(\vec{p})\,\delta\xi.$$

Рассмотрим вариацию массы:

$$\frac{p^2}{2m} \to \frac{p^2}{2(m+\delta m)} = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^2}{2m^2}\,\delta m.$$

Поэтому

$$-\left\langle\frac{p^2}{2m^2}\right\rangle_\Gamma + \frac{\partial(app\,F_{int})}{\partial m} = -\int W_{app}(\vec{p})\,\frac{p^2}{2m^2}\,d\vec{p}. \qquad (4.46)$$

В частности, для случая нулевой температуры $(\theta = 0)$ имеем

$$\left\langle\frac{p^2}{2m^2}\right\rangle_\Gamma = 0,$$

так что

$$\int p^2 W_{app}(\vec{p})\,d\vec{p} = -2m^2\,\frac{\partial(app\,F_{int})}{\partial m}.$$

Но, как было показано в §3,

$$\frac{app\,F_{int}}{\hbar\omega}\;;\quad \theta = 0$$

есть функция только от α и, с другой стороны, α пропорционально $\sqrt{m}$.

Отсюда

$$m\,\frac{\partial}{\partial m} = \frac{\alpha}{2}\,\frac{\partial}{\partial\alpha}$$

и

$$\frac{1}{m\omega\hbar}\int p^2 W_{app}(\vec{p})\,d\vec{p} = -\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{app\,F_{int}}{\omega\hbar}\right) \quad \text{для } \theta = 0. \qquad (4.47)$$

Имеем также

$$\frac{1}{m\omega\hbar}\int p^2 W(\vec{p})\,d\vec{p} = -\alpha\,\frac{\partial}{\partial\alpha}\,\frac{F_{int}}{\omega\hbar} \quad \text{для } \theta = 0. \qquad (4.48)$$

Поскольку $(app\,F_{int})$ есть хорошая аппроксимация к выражению F_{int}, мы можем заключить, что и

$$\int p^2 W_{app}(\vec{p})\,d\vec{p}$$

дает достаточно корректную аппроксимацию к выражению

$$\int p^2 W(\vec{p})\,d\vec{p}.$$

Но, что касается качества аппроксимации функции $W(\vec{p})$ функцией $W_{app}(\vec{p})$, то в некоторых случаях ситуация становится менее удовлетворительной. Например, можно показать, что для малых значений α $(\beta = 0)$ функция $W_{app}(\vec{p})$ даже становится отрицательной для некоторой области значений $\frac{p^2}{m\omega\hbar}$ (порядка α).

Литература

1. Feynman R.P., Hibbs A.R. Quantum Mechanics and Path Integrals. Copyright 1965, Library of Congress Catalog Card Number,64-25171.
2. Фейнман Р. Статистическая механика. "Мир", М., 1975.
3. Боголюбов Н.Н. Украинский математический журнал, 1950, т.II, № 2 (Об одной новой форме адиабатической теории возмущений в задаче о взаимодействии частицы с квантовым полем).
4. Боголюбов Н.Н., Боголюбов Н.Н. /мл./. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 1980, том. II, вып.2.
5. Боголюбов Н.Н. /мл./, Садовников Б.И. ЖЭТФ, 1962, т.43, вып.8.
6. Боголюбов Н.Н. /мл./, Садовников Б.И. Некоторые вопросы статистической механики. "Высшая школа", М., 1975.
7. Devreese J.T., Evard R. Linear and Nonlinear Transport in Solids. Plenum Press, N.Y., 1976, p.91.
8. Thornber K.K., Feynman R.P. Phys.Rev., 1970, B1, p.4099.
9. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. Гостехиздат, М., 1951.
10. Солодовникова Е.П., Тавхелидзе А.Н., Хрусталев О.А. Осцилляторные уровни частицы как следствие сильного взаимодействия с полем. ТМФ, 1972, т.10, с.162-181.
11. Солодовникова Е.П., Тавхелидзе А.Н., Хрусталев О.А. Преобразование Н.Н.Боголюбова в теории сильной связи.II. ТМФ, 1972, т.II, с.317-330.
12. Fedyanin V.K., Mochinsky B.V., Rodriguez C. Generating Functional and Functional Analog of the Variational Principle of N.N.Bogolubov. JINR, E17-12850, Dubna, 1979.
13. Кочетов Е.А., Кулешов С.П., Смондырев М.А. Исследование модели полярона методом функционального интегрирования. ТМФ, 1978, т.25, с.30-36.
14. Vo Hong Ahn. A Quantum Approach to the Parametric Excitation Problem in Solids. Physics Reports, 1980, vol.64, No.1, p.1-45.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 января 1981 года.