Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1967

УДК 53 : 519.25

НГУЕН ТАНГ

ОБЩИЕ ТЕОРЕМЫ О СРЕДНИХ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ В КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Общие теоремы о средних статистической механики исследованы в квазиклассическом приближении. Найдены квантовые поправки для обобщенной теоремы о вириале и теоремы о равномерном распределении, а также для общих теорем Гиббса о произведениях произвольных физических величин и производных от Гамильтониана.

В классической теории Гиббса многие практически важные средние могут быть легко вычислены при помощи обобщенной теории о вириале и о равномерном распределении [1]

$$\overline{F(x)\frac{\partial H}{\partial x_k}} = \theta\,\overline{\frac{\partial F}{\partial x_k}}.$$

Эти соотношения позволяют выражать более высокие моменты через более низкие.

В частном случае это соотношение сводится к известной теореме о вириале и к теореме о равномерном распределении кинетической энергии по степеням свободы. Действительно, полагая

$x_k = q_k$ или p_k, имеем

$$\overline{F(x)\frac{\partial H}{\partial q_k}} = \theta\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}}, \quad \overline{F(x)\frac{\partial H}{\partial p_k}} = \theta\,\overline{\frac{\partial F}{\partial p_k}}, \tag{1}$$

$$\overline{q_k\frac{\partial H}{\partial q_k}} = \theta \text{ (теорема о вириале)}$$

$$\overline{p\frac{\partial H}{\partial p_k}} = \theta \text{ (теорема о равномерном распределении)} \tag{2}$$

Практически важно получить обобщение этих теорем на случай квантовых систем.

Вычислим соответствующее (1) выражение для квантовой системы

$$\overline{\hat{F}\frac{\partial u^{\text{кв}}}{\partial q_k}}.$$

Черта сверху означает усреднение по квантовому ансамблю Гиббса. По определению статистического квантового среднего имеем

$$\overline{F\frac{\partial u^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = \frac{Sp\left(\widehat{F}\frac{\partial u}{\partial q_k}e^{-\beta\widehat{H}}\right)}{Spe^{-\beta\widehat{H}}}, \tag{3}$$

где $\beta = \frac{1}{\theta}$.

Ограничимся рассмотрением квазиклассического приближения. Согласно [2] в квазиклассическом приближении с точностью до $\hbar^2$ статистическая сумма равна

$$Z = Spe^{-\beta\widehat{H}} = (1 + \hbar^2\bar{x}_2)\int' e^{-\beta E(p,q)}\,d\Gamma, \tag{4}$$

где $E(p,q) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U$ — энергия системы и

$$\bar{x}_2 = -\frac{\beta^3}{24}\sum_i \frac{1}{m_i}\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}}\right)^2.$$

Штрих у знака интеграла (4) означает интегрирование лишь по тем областям фазового пространства, которые соответствуют физически различным состояниям системы.

Аналогично, как показано в [2], получим

$$Sp\left(\widehat{F}\frac{\partial U}{\partial q_k}e^{-\beta\widehat{H}}\right) = \int' A\,d\Gamma, \tag{5}$$

где

$$A = e^{\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i}\,\widehat{F}\frac{\partial U}{\partial q_k}e^{-\beta\widehat{H}}\,e^{-\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i},$$

или

$$A = e^{\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i}\,\widehat{F}\frac{\partial U}{\partial q_k}\,e^{-\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i}\,I, \tag{6}$$

где

$$I = e^{\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i}\,e^{-\beta\widehat{H}}\,e^{-\frac{1}{i\hbar}\sum p_i q_i}.$$

Для простоты вычисления предполагаем, что оператор $\widehat{F}$ имеет вид

$$\widehat{F} = f_1(\widehat{p}_j) + f_2(q_j). \tag{7}$$

И пусть $f_1(\widehat{p}_j)$ и $f_2(q_j)$ можно разложить в ряд. Итак

$$\widehat{F} = \sum_n (a_n\widehat{p}_j^n + b_n q_j^n). \tag{8}$$

Функция $F(x)$, соответствующая оператору $\widehat{F}$, равна

$$F(x) = \sum_n (a_n p_j^n + b_n q_j^n).$$

Подставляя (8) в (6) и оператор импульса $\widehat{p}_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i}$, получаем

$$A = F \frac{\partial U}{\partial q_k} I + \sum_n a_n \sum_{m=1}^{n} C_n^m (-i\hbar)^m p_j^{n-m} \frac{\partial^m}{\partial q_j^m} \left(\frac{\partial U}{\partial q_k} I \right). \tag{9}$$

Согласно [2], имеем

$$I = e^{-\beta E} (1 + \hbar x_1 + \hbar^2 x_2), \tag{10}$$

где

$$x_1 = -\frac{i\beta^2}{2} \sum_i \frac{p_i}{m_i} \frac{\partial U}{\partial q_i}$$

$$x_2 = -\frac{\beta^4}{\gamma} \left(\sum_i \frac{p_i}{m_i} \frac{\partial U}{\partial q_i} \right)^2 + \frac{\beta^3}{6} \sum_i \sum_l \frac{p^i}{m_i} \frac{p_l}{m_l} \frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_l} + \frac{\beta^3}{6} \sum_i \frac{1}{m_i} \left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \right)^2 - \frac{\beta^2}{4} \sum_i \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}.$$

Далее положим

$$A = (A_0 + \hbar A_1 + \hbar^2 A_2 + \ldots) e^{-\beta E(p,q)}. \tag{11}$$

Подставляя (11) и (10) в (9), отделяя члены с различными степенями $\hbar$ получим

$$'A = F \frac{\partial U}{\partial q_k},$$

$$A_1 = F x_1 \frac{\partial U}{\partial q_k} - i \sum_n n a_n \left(p_j^{n-1} \frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_k} - \beta p_j^{n-1} \frac{\partial U}{\partial q_k} \frac{\partial U}{\partial q_j} \right),$$

$$A_2 = F x_2 \frac{\partial U}{\partial q_k} - i \sum_n n a_n \left(p_j^{n-1} x_1 \frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k} + p_j^{n-1} \frac{\partial U}{\partial q_k} \frac{\partial x_1}{\partial q_j} - \beta^{n-1} p_j x_1 \frac{\partial U}{\partial q_k} \frac{\partial U}{\partial q_j} \right) + \sum_n \frac{n(n-1)}{2} a_n \times$$
$$\times \left[-p_j^{n-2} \frac{\partial^3 U}{\partial q_j^2 \partial q_k} + \beta p_j^{n-2} \frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k} \frac{\partial U}{\partial q_j} + \beta p_j^{n-2} \frac{\partial U}{\partial q_k} \frac{\partial^2 U}{\partial q_j^2} + \beta p_j^{n-2} \frac{\partial U}{\partial q_j} \frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k} - \beta^2 p_j^{n-2} \frac{\partial U}{\partial q_k} \left(\frac{\partial U}{\partial q_j} \right)^2 \right].$$

Из (3), (4), (5) и (11) получаем

$$\overline{\widehat{F} \frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = \frac{\overline{A}_0 + \hbar \overline{A}_1 + \hbar^2 \overline{A}_2}{1 + \hbar^2 \overline{x}_2},$$

где средними по классическому распределению Гиббса являются средние величины в правой части.

Используя (1), получим выражения:

$$\overline{A}_0 = \theta \frac{\overline{\partial F}}{\partial q_k},$$

$$\overline{A}_1 = -\frac{i}{2}\sum_i \overline{\frac{\partial F}{\partial p_i}\;\frac{\partial^2 U}{\partial q_i\,\partial q_k}},$$

$$\overline{A}_2 = \frac{\beta^2}{12}\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_k}} -$$

$$-\frac{\beta^2}{24}\sum_{il}\overline{\frac{\partial^2 F}{\partial p_i\,\partial p_l}\;\frac{\partial U}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_k}\;\frac{\partial U}{\partial q_l}} - \frac{\beta^2}{24}\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}\left(\frac{\partial U}{\partial q_i}\right)^2}.$$

Таким образом, пренебрегая членами со степенью выше $\hbar^2$, получаем

$$\overline{\widehat{F}\,\frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = \theta\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}} - \frac{i\hbar}{2}\sum_i \overline{\frac{\partial F}{\partial p_i}\;\frac{\partial^2 U}{\partial q_i\,\partial q_k}} +$$

$$+\frac{\hbar^2}{12\theta^2}\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_k}} - \frac{\hbar^2}{24\theta^2}\left[\sum_{il}\frac{\partial^2 F}{\partial p_i\,\partial p_l}\;\overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_l}\;\frac{\partial U}{\partial q_k}} +\right.$$

$$\left.+\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}\left(\frac{\partial U}{\partial q_i}\right)^2} - \sum_i \frac{1}{m_i}\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}}\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}}\right)^2\right]. \qquad (12)$$

Уравнение (12) применяется для произвольного оператора $\widehat{F}$, имеющего вид (7). Если $\hbar\to 0$, получаем классическое выражение (2). Из (12) видно, что квантовая поправка к классическому значению убывает с увеличением массы частицы и с возрастанием температуры. Если оператор $\widehat{F}$ зависит только от координат, получим

$$\overline{\widehat{F}\,\frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = \theta\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}}\;\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\left[\sum_i \frac{2}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_i}\;\frac{\partial U}{\partial q_k}} -\right.$$

$$\left.-\sum_i \frac{1}{m_i}\,\frac{\partial F}{\partial q_k}\left(\frac{\partial U}{\partial q_i}\right)^2 + \sum_i \frac{1}{m_i}\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}}\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}}\right)^2\right].$$

В том случае, когда $\widehat{F}=q_k$, получаем теорему о вириале

$$\overline{q_k\,\frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = \theta + \frac{\hbar^2}{12\theta^2}\,\frac{1}{m_k}\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}}\right)^2 = \theta_{\text{эфф}}. \qquad (13)$$

При квантовой системе вириал равен эффективной температуре $\theta_{\text{эфф}}$. Уравнение (13) может быть написано в общем виде

$$\overline{q_k\,\frac{\partial U}{\partial q_l}} = \theta\delta_{kl} + \frac{\hbar^2}{12\theta^2}\,\frac{1}{m_l}\,\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}\;\frac{\partial U}{\partial q_l}}.$$

В том случае, если $\widehat{F}=\widehat{p}_k$, из (12) получим

$$\overline{\widehat{p}\,\frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} = -\frac{i\hbar}{2\theta}\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}}\right)^2.$$

Если оператор $\widehat{F}$ имеет вид (8), то, как показано выше, найдем другое выражение:

$$\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}\,\widehat{F}^{\text{кв}}} = \overline{\widehat{F}\,\frac{\partial U^{\text{кв}}}{\partial q_k}} + \frac{i\hbar}{\theta^2}\sum_n n a_n\,\overline{p_j^{n-1}}\;\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_j\,\partial q_k}}.$$

Таким образом, из полученных формул найдем перестановочное соотношение

$$\overline{\widehat{p}_k \frac{\partial U}{\partial q_k}} - \overline{\frac{\partial U}{\partial q_k} \widehat{p}_k} = -i\hbar \overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_k^2}}.$$

Аналогично, как уже показано выше, найдем выражения

$$\overline{\widehat{F} \frac{\widehat{p}_k}{m_k}}^{\text{кв}} = \theta \overline{\frac{\partial F}{\partial p_k}} + \frac{i\hbar}{2m_k} \overline{\frac{\partial F}{\partial q_k}} + \frac{\hbar^2}{12\theta^2} \frac{1}{m_k} \sum_i \overline{\frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial U}{\partial q_i} \frac{\partial U}{\partial q_k}} +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{24\theta} \sum_{il} \overline{\frac{\partial^3 F}{\partial p_i \partial p_l \partial p_k} \frac{\partial U}{\partial q_i} \frac{\partial U}{\partial q_l}}; \tag{14}$$

$$\overline{\frac{\widehat{p}_k}{m_k} \widehat{F}}^{\text{кв}} = \overline{\widehat{F} \frac{\widehat{p}_k}{m_k}}^{\text{кв}} - i\hbar \sum_n \frac{nb_n}{m_k} \delta_{jk} \overline{q_j^{n-1}}. \tag{15}$$

Средними по классическому распределению Гиббса являются средние величины в правой части (14). Выражения (14) и (15) применяются для произвольного оператора $\widehat{F}$, имеющего вид (12). Как и в (12), квантовая поправка к классическому значению в (14) тоже убывает с увеличением массы частиц и с возрастанием температуры. Если оператор $\widehat{F}$ является функцией только оператора импульса $\widehat{p}$, получим выражение

$$\overline{\widehat{F} \frac{\widehat{p}_k}{m_k}}^{\text{кв}} = \theta \overline{\frac{\partial F}{\partial p_k}} + \frac{\hbar^2}{12\theta^2} \frac{1}{m_k} \sum_i \overline{\frac{\partial F}{\partial p_i}} \overline{\frac{\partial U}{\partial q_i} \frac{\partial U}{\partial q_k}} +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{24\theta} \sum_{il} \overline{\frac{\partial^3 F}{\partial p_i \partial p_l \partial p_k}} \overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}} \overline{\frac{\partial U}{\partial q_l}}.$$

В частном случае $\widehat{F} = \widehat{p}_i$

$$\overline{\widehat{p}_i \frac{\widehat{p}_k}{m_k}} = \theta\delta_{ik} + \frac{\hbar^2}{12\theta^2} \frac{1}{m_k} \overline{\frac{\partial U}{\partial q_i} \frac{\partial U}{\partial q_k}}. \tag{16}$$

Для кинетической энергии системы из (16) найдем выражения, полученные Вигнером [4]. Кроме того, получаем

$$\overline{\widehat{p}_k^{2m}} = (2n-1)!! (m_k\theta)^{n-1} m_k\theta_{\text{эфф}} +$$

$$+ \frac{(2n)!\ (2n-2)}{(2n)!!} (m_k\theta)^{n-2} \frac{m_k\hbar^2}{24\theta} \left(\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}}\right)^2.$$

Следствием (15) является перестановочное соотношение

$$\overline{\widehat{p}_k q_k} - \overline{q_k \widehat{p}_k} = -i\hbar.$$

Для проверки соотношений (13) и (16) воспользуемся ими для вычисления среднего статистического значения энергии квантового гармонического осциллятора. Гамильтониан осциллятора равен

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2},$$

откуда получаем

$$\overline{E}=\theta+\frac{\hbar^2\omega^2}{12\theta}.$$

С другой стороны, это выражение можем получить разложением точной формулы энергии осциллятора в ряд по степеням $\frac{\hbar\omega}{\theta}$ и выбрасыванием членов со степенью выше $\hbar^2$. Вычислим среднее значение величины по квантовому каноническому ансамблю.

Предположим, что оператор $\widehat{F}$ имеет вид (7). Как и показано выше, найдем выражение с точностью до члена со степенью $\hbar^2$

$$\overline{\widehat{F}}^{\text{кв}}=\overline{F}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\Bigg[\sum_{il}\overline{\frac{\partial^2 F}{\partial p_i\,\partial p_l}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}\,\frac{\partial V}{\partial q_l}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}}-$$
$$-\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{F\,\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{F}\,\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\Bigg].\tag{17}$$

Средними по классическому ансамблю Гиббса являются средние величины в правой части (17). Если $\widehat{F}$ зависит только от координат, то получим

$$\overline{\widehat{F}}^{\text{кв}}=\overline{\widehat{F}}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\Bigg[\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}}-$$
$$-\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{F\,\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\overline{F}\,\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\Bigg].\tag{18}$$

Когда $F=U$, получаем выражение потенциальной энергии [4]. В частном случае $\widehat{F}=q_k$

$$\overline{q_k}^{\text{кв}}=\overline{q_k}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\left(\frac{1}{m_k}\,\overline{\frac{\partial U}{\partial q_k}}-\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{q_k\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{q_k}\,\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\right),$$

так как $\widehat{F}$ — произвольный оператор, поэтому из (15) получим

$$\overline{\widehat{F}Q}^{\text{кв}}=\overline{FQ}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\Bigg(\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{Q\,\frac{\partial F}{\partial q_i}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{F\,\frac{\partial Q}{\partial q_i}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}}-$$
$$-\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{FQ\,\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}+\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{FQ}\,\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\Bigg),$$

где Q — обобщенная координата, зависящая только от координат.

Таким образом, корреляция величин F и Q в квантовой системе в квазиклассическом приближении равна

$$\overline{(\widehat{F}-\overline{\widehat{F}})(\widehat{Q}-\overline{\widehat{Q}})}^{\text{кв}}=\overline{(F-\overline{\widehat{F}})(Q-\overline{Q})}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\Bigg[\sum_i\frac{1}{m_i}\,\overline{\frac{\partial F}{\partial q_i}\,\frac{\partial U}{\partial q_i}\,(Q-\overline{Q})}+$$

$$+\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial Q}{\partial q_i}\frac{\partial U}{\partial q_i}(F-\overline{F})}-\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}(F-\overline{F})(Q-\overline{Q})}+$$

$$+\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\,\overline{F(Q-\overline{Q})}]. \qquad (19)$$

Частным случаем формулы (19) является выражение для среднего квадратичного уклонения

$$\overline{(\widehat{Q}-\overline{\widehat{Q}})^2}^{\text{кв}}=\overline{(Q-\overline{Q})^2}+\frac{\hbar^2}{24\theta^2}\left[\sum_i \frac{2}{m_i}\overline{\frac{\partial\theta}{\partial q_i}\frac{\partial U}{\partial q_i}(Q-\overline{Q})}-\right.$$

$$\left.-\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}(Q-\overline{Q})^2}+\sum_i \frac{1}{m_i}\overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}}\,\overline{(Q-\overline{Q})^2}\right]. \qquad (20)$$

Так, для квантового гармонического осциллятора, используя формулу (20), найдем

$$\overline{q^2}^{\text{кв}}=\frac{\theta}{m\omega^2}+\frac{\hbar^2}{12m\theta}. \qquad (21)$$

Согласно [3], для квантового гармонического осциллятора, получаем

$$\overline{q^2}=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}}-1}\right).$$

Разложив это выражение по степеням $\frac{h\omega}{\theta}$, выбросив члены со степенью выше $\hbar^2$, тоже получим (21).

С помощью классического распределения Гиббса можно найти выражение для флуктуации энергии при квантовой канонической системе.

Известно, что среднее значение произвольной величины по квантовому каноническому распределению равно

$$\overline{\widehat{F}}^{\text{кв}}=Sp\,\widehat{F}e^{\frac{\psi-\widehat{H}}{\theta}}, \qquad (22)$$

где ψ — свободная энергия системы. Дифференцируя (22) по θ и используя соотношение

$$\overline{\widehat{H}}=\psi-\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta},$$

получаем первую лемму Гиббса квантовой канонической системы

$$\overline{(\widehat{F}-\overline{\widehat{F}})(\widehat{H}-\overline{\widehat{H}})}^{\text{кв}}=\theta^2\frac{\partial\overline{\widehat{F}}^{\text{кв}}}{\partial\theta}. \qquad (23)$$

Таким образом, вид выражения первой леммы Гиббса при квантовой системе совпадает с видом этой леммы при классической системе [1].

Используя формулы (17), (23), получаем

$$\overline{(\widehat{F}-\overline{\widehat{F}})(\widehat{H}-\overline{\widehat{H}})}^{\text{кв}}=\theta^2\frac{\partial\overline{F}}{\partial\theta}-\frac{\hbar^2}{12\theta}\sum_{il}\overline{\frac{\partial^2 F}{\partial p_i\,\partial p_l}}\,\overline{\frac{\partial U}{\partial q_i}\frac{\partial U}{\partial q_l}}+$$

$$+\sum_i \frac{1}{m_i} \overline{\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial U}{\partial q_i}} - \sum_i \frac{1}{m_i} \overline{F \frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}} + \sum_i \frac{1}{m_i} \overline{F} \, \overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}} \Bigg].$$

Итак:

$$\overline{(\widehat{H} - \overline{\widehat{H}})^2}^{\text{кв}} = \theta^2 \frac{\partial \overline{H}}{\partial \theta} - \frac{\hbar^2}{12\theta} \sum_i \frac{1}{m_i} \left[2 \overline{\left(\frac{\partial U}{\partial q_i} \right)^2} - u \, \overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}} + \overline{U} \, \overline{\frac{\partial^2 U}{\partial q_i^2}} \right].$$

В заключение выражаю благодарность проф. Я. П. Терлецкому за руководство и В. Б. Магалинскому за интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Терлецкий Я. П. Статистическая физика. М., «Высшая школа», 1966.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., «Наука», 1964.
3. Леонтович М. А. Статистическая физика. М., ОГИЗ, 1944.
4. Wigner E. Phys. Rev., 40, 749, 1932.

Поступила в редакцию
30. 3 1966 г.

Кафедра
теоретической физики