быть представлена в виде

$$H_{\text{тэг}} = \widetilde{H}_{\text{фот}} + \widetilde{H}_{\text{фон}} + \frac{\omega_0}{2}\sum_l \sigma_l^z - \sum_{l,l'}\left[\frac{\Phi(l,l')}{N} + \frac{\lambda^2}{4N\omega_0} + \right.$$

$$\left. + 4\sum_k \frac{1}{\Omega_k}\operatorname{Re}(\overset{*}{\eta}_k B_k(l,l'))\right]\sigma_l^+\sigma_{l'}^- + 2\sum_k \frac{N}{\Omega_k}\overset{*}{\eta}_k\eta_k. \qquad (6)$$

Гамильтониан (6) представляет собой прямую сумму операторов, описывающих энергии фотонной, фононной и дипольной подсистем, каждый из которых вносит независимый вклад в термодинамику полной системы, причем вклад за счет первых двух членов имеет порядок $0(1/N)\to 0$, $N\to\infty$. Термодинамика дипольной подсистемы в (6) может быть рассмотрена строго в рамках метода аппроксимирующих гамильтонианов, распространенного на квазиспиновые системы [15]. Таким образом, квазиспиновая подсистема в (6) позволяет определить точное термодинамическое поведение полной системы двухуровневых атомов, взаимодействующих с длинноволновым электромагнитным полем с учетом поляризации и гармонических колебаний в твердом теле.

Авторы приносят благодарность Н. Н. Боголюбову (мл.) за научное руководство и поддержку, а также В. А. Загребнову за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Резонансные взаимодействия света с веществом. М., 1977.
2. Dicke R. H. «Phys. Rev.», 1954, **93**, 99.
3. Hepp K., Lieb E. H. «Ann. Phys.», 1973, **76**, 360.
4. Загребнов В. А., Бранков Й. Г., Тончев Н. С. «ДАН СССР», 1975, **225**. 71.
5. Боголюбов Н. Н. (мл.). Метод исследования модельных гамильтонианов. М., 1974.
6. Bogolubov N. N. (Jr.), Plechko V. N. Preprint IC/75/68, Miramare—Trieste, 1975.
7. Wang Y. K., Hioe F. T. «Phys. Rev.», 1973, **A7**, 831.
8. Hioe F. T. «Phys. Rev.», 1974, **A8**, 1440.
9. Thompson B. V. «J. Phys.», 1975, **A8**, 126.
10. Загребнов В. А., Клемм А. Препринты E17-9600 и P17-10249. Дубна, 1976.
11. Марадудин А., Монтролл Э., Вейс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М., 1965.
12. Кудрявцев И. К., Шумовский А. С. «ДАН СССР», 1977, **232**, 1293.
13. Ермилов А. Н., Курбатов А. М. Препринт P17-10247. Дубна, 1976.
14. Kudrjavtsev I. K., Shumovsky A. S. «Phys. Let.», 1977, **62A**, 253.
15. Боголюбов Н. Н. (мл.), Шумовская А. Г., Шумовский А. С. «Теор. и мат. физ.», 1976, **29**, 388.

Кафедра
квантовой статистики

Поступила в редакцию
07.04.78

УДК 539.219.1:530.145

Ш. Н. ГИФЕЙСМАН

ПРЯМОЙ РАСЧЕТ ИНТЕГРАЛА ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ ЧАСТИЦЫ В СЛУЧАЙНОМ ПОЛЕ

Проблема применения метода интегралов по траекториям в теории упорядоченных полупроводников детально анализируется в [1]. Там показано, что усредненная по случайному полю запаздывающая одночастичная функция Грина для частицы, движущейся в заданном поле $V(\mathbf{r})$, представима интегралом по траекториям

$$G(\mathbf{r}, t \mid \mathbf{r}_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \int D\mathbf{r}(\tau) \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \int_0^t \dot{r}^2(\tau)\, d\tau - \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2\hbar^2} \iint_0^t d\tau d\sigma \Psi(|\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)|)\right\}. \qquad (1)$$

Здесь m — масса частицы, $\theta(t)$ — ступенчатая функция и $D\mathbf{r}$ — символизирует интегрирование по всем классическим траекториям между точками $\mathbf{r}(0) \equiv \mathbf{r}_0$ и $\mathbf{r}(t) \equiv \mathbf{r}$. Через $\Psi(|\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)|)$ обозначена корреляционная функция случайного поля, монотонно убывающая с ростом $|\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)|$ и ограниченная при $\mathbf{r}(\tau) = \mathbf{r}(\sigma)$.

Простыми примерами такой функции служат выражения $\Psi(|\mathbf{r}|) = \psi_1 \exp(-\alpha|\mathbf{r}|)$ и $\Psi(|\mathbf{r}|) = \psi_1 \exp(-\alpha^3 \mathbf{r}^2)$. В случае малых времен, когда [1] $t \ll (m\hbar|\alpha^2\psi_1)^{1/3}$ аргумент корреляционной функции мал и допустимо разложение, приводящее к интегралу по траекториям

$$G(\mathbf{r}, t \mid \mathbf{r}_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\psi_1 t^2}{2\hbar^2}\right) D\mathbf{r} \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \dot{r}^2(\tau)\, d\tau - \right.$$

$$\left. - \frac{\psi_1 \alpha^2}{4\hbar^2} \iint_0^t d\tau d\sigma [\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(\sigma)]^2\right\}. \qquad (2)$$

Интеграл (2) вычислялся в работах [2, 3]. Однако в [2] не было получено явного выражения для предэкспоненциального множителя. В более поздней работе [3] есть указание на трудность, связанную с наличием недиагональных членов в последнем слагаемом показателя экспоненты (2) и для вычисления интеграла по траекториям используется искусственный прием.

Между тем диагонализация квадратичной формы, возникающей в показателе экспоненты (2), может быть выполнена в явном виде. В настоящей работе приводится прямой расчет интеграла по траекториям (2), основанный на функциональном интегрировании в представлении Фурье.

Интеграл (2) распадается на произведение трех одинаковых интегралов по траекториям. Для вычисления одного из них — $G(x, t \mid x_0, 0)$ — введем предварительно новую переменную функционального интегрирования $y(\tau)$ с помощью соотношения

$$x(\tau) = x_0 + \frac{x - x_0}{t} \tau + y(\tau), \qquad (3)$$

из которого следуют граничные условия $y(t) = y(0) = 0$. Преобразованная к траекториям $y(\tau)$ функция $G(x, t \mid x_0, 0)$ имеет вид

$$G(x, t \mid x_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{\psi_1 t^2}{6\hbar^2} + \frac{im}{2\hbar t}(x - x_0)^2\right] \times$$

$$\times \int Dy(\tau) \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \int_0^t \dot{y}^2(\tau)\, d\tau - \frac{\psi_1 \alpha^2}{4\hbar^2} \iint_0^t d\tau d\sigma \times \right.$$

$$\left. \times \left[\frac{x - x_0}{t}(\tau - \sigma) + y(\tau) - y(\sigma)\right]^2\right\}. \qquad (4)$$

Далее, следуя работе [4], введем систему ортонормированных на интервале $[0,\ t]$ функций $\varphi_n(\tau)=(2/t)^{1/2}\sin(\pi n\tau/t)$ (полную в пространстве функций, обращающихся в нуль при $\tau=0$) и в соответствии с граничными условиями для $y(\tau)$ положим

$$y(\tau)=\left(\frac{4\hbar t}{\pi m}\right)^{1/2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{a_n}{n}\sin\frac{\pi n\tau}{t}. \tag{5}$$

При этом показатель экспоненты в (4) преобразуется к виду

$$\frac{S}{\hbar}=\lim_{n\to\infty}\left\{i\pi\sum_{l=1}^{n}a_l^2-\frac{\psi_1\alpha^2}{4\hbar^2}\iint\limits_0^t d\tau d\sigma\left[\frac{x-x_0}{t}(\tau-\sigma)+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\left(\frac{4\hbar t}{\pi m}\right)^{1/2}\sum_{l=1}^{n}\frac{a_l}{l}\left(\sin\frac{\pi l\tau}{t}-\sin\frac{\pi l\sigma}{t}\right)\right]^2\right\}=$$

$$=\lim_{n\to\infty}\left\{-\frac{imw^2}{24\hbar t}(x-x_0)^2+i\pi\sum_{k=1}^{p}\left[1-\frac{w^2}{\pi^2(2k)^2}\right]a_{2k}^2+\right.$$

$$+\frac{2iw^2}{\pi^2}\left(\frac{\pi m}{\hbar t}\right)^{1/2}(x-x_0)\sum_{k=1}^{p}\frac{a_{2k}}{(2k)^2}+i\pi\sum_{k=1}^{q}\left[1-\frac{w^2}{\pi^2(2k-1)^2}\right]a_{2k-1}^2+$$

$$\left.+\frac{8iw^2}{\pi^3}\sum_{k=1}^{q}\sum_{k'=1}^{q}\frac{a_{2k-1}}{(2k-1)^2}\cdot\frac{a_{2k'-1}}{(2k'-1)^2}\right\}, \tag{6}$$

где мы положили $\psi_1\alpha^2t^3/m\hbar=iw^2$ и $p=q=n/2$ при n четном и $p=q-1=$ $=(n-1)/2$ при n нечетном.

Интегрирование $\exp(S/\hbar)$ по всем a_l от $-\infty$ до $+\infty$ исчерпывает все возможные траектории в y-пространстве, так что для интеграла по траекториям (4) в Фурье-представлении мы имеем

$$G(x,\ t\,|\,x_0,\ 0)=\theta(t)\left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{\psi_1t^2}{6\hbar^2}+\frac{im}{2\hbar t}(x-x_0)^2\right]\times$$

$$\times\lim_{n\to\infty}\frac{i^{-n/2}}{N}\int_{-\infty}^{\infty}\!\!\ldots\!\int da_1da_2\ldots da_n\exp\left(\frac{S}{\hbar}\right). \tag{7}$$

Нормировочная константа, как обычно, не зависит от вида потенциала Ψ и определяется из условия нормировки на свободную частицу $(w=0)$. Так как $\int\limits_{-\infty}^{\infty}da_l\exp(i\pi a_l^2)=i^{1/2}$, то $N=1$.

Таким образом, задача свелась к диагонализации квадратичной формы (6). Для той ее части, которая содержит нечетные Фурье-коэффициенты, необходимо диагонализовать матрицу

$$A_{kk'}=\left[1-\frac{v^2}{(2k-1)^2}\right]\delta_{kk'}+\frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{(2k-1)^2(2k'-1)^2},\quad v^2=\frac{w^2}{\pi^2}, \tag{8}$$

главные значения которой определяются из секулярного уравнения q-й степени

$$\Delta(\lambda) =$$

$$=\begin{vmatrix} 1-v^2+\frac{8}{\pi^2}v^2-\lambda & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{1\cdot 9} & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{1\cdot 25} & \ldots \\ \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{9\cdot 1} & 1-\frac{v^2}{9}+\frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{9\cdot 9}-\lambda & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{9\cdot 25} & \ldots \\ \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{25\cdot 1} & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{25\cdot 9} & 1-\frac{v^2}{25}+\frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{25\cdot 25}-\lambda & \ldots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ldots \end{vmatrix}=$$

$$= 0. \tag{9}$$

Определитель (9) раскрывается с помощью следующей процедуры: первая строка умножается на —1/9 и прибавляется ко второй, затем на —1/25 и прибавляется к третьей и т. д. В итоге получается

$$\Delta(\lambda) = \begin{vmatrix} 1-v^2+\frac{8}{\pi^2}v^2-\lambda & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{9} & \frac{8}{\pi^2}\frac{v^2}{25} & \ldots \\ -\frac{1}{9}(1-v^2-\lambda) & 1-\frac{v^2}{9}-\lambda & 0 & 0\ \ldots \\ -\frac{1}{25}(1-v^2-\lambda) & 0 & 1-\frac{v^2}{25}-\lambda & 0\ \ldots \\ \cdot & 0 & 0 & \ldots \end{vmatrix}.$$

Этот определитель мы раскроем по элементам первого столбца. Каждый его минор $q—1$ порядка (кроме первого, который вычисляется элементарно) содержит в одном из столбцов лишь один отличный от нуля элемент. Соответствующие этим элементам миноры $q—2$ порядка имеют отличные от нуля элементы лишь вдоль главной диагонали и равны

$$\prod_{k=1}^{q}\left[1-\frac{v^2}{(2k-1)^2}-\lambda\right] \Big/ \left\{(1-v^2-\lambda)\left[1-\frac{v^2}{(2k-1)^2}-\lambda\right]\right\},$$

так что секулярное уравнение (9) может быть записано в виде

$$\lim_{q\to\infty}\left\{1+\frac{8v^2}{\pi^2}\sum_{k=1}^{q}\frac{1}{(2k-1)^4\left[1-\frac{v^2}{(2k-1)^2}-\lambda\right]}\right\}\prod_{k=1}^{q}\left[1-\frac{v^2}{(2k-1)^2}-\lambda\right]=0. \tag{10}$$

Корни этого уравнения находятся приравниванием нулю выражения в фигурных скобках. Переходя к пределу, имеем

$$1+\frac{8}{\pi^2}\left[\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2-\frac{v^2}{1-\lambda}}-\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}\right]=$$

$$=\mathrm{tg}\left(\frac{\pi}{2}\frac{v}{\sqrt{1-\lambda}}\right)\Big/\left(\frac{\pi}{2}\frac{v}{\sqrt{1-\lambda}}\right)=0, \tag{11}$$

откуда

$$\lambda_k = 1 - \frac{v^2}{(2k)^2}, \quad k \geqslant 1. \tag{12}$$

Таким образом, для вклада нечетных Фурье-коэффициентов в $S/\hbar$ мы получаем выражение

$$i\pi \sum_{k \geqslant 1} \lambda_k a_{2k-1}'^2 = i\pi \sum_{k \geqslant 1} \left[1 - \frac{w^2}{\pi^2 (2k)^2}\right] a_{2k-1}'^2. \tag{13}$$

Дополняя слагаемые с четными Фурье-коэффициентами в квадратичной форме (6) до полных квадратов и используя для вычисления числового ряда при $p = \infty$ соотношение

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4\pi^2 k^2 (4\pi^2 k^2 - w^2)} = \frac{1}{w^2} \left(\frac{1}{2w^2} - \frac{1}{4w} \operatorname{ctg} \frac{w}{2} - \frac{1}{24}\right), \tag{14}$$

мы получаем приведенное к диагональному виду выражение для $S/\hbar$:

$$\frac{S}{\hbar} = -\frac{im}{2\hbar t}(x - x_0)^2 + \frac{imw}{4\hbar t}(x - x_0)^2 \operatorname{ctg} \frac{w}{2} +$$

$$+ i\pi \sum_{k \geqslant 1} \left[1 - \frac{w^2}{\pi^2 (2k)^2}\right] a_{2k}'^2 + i\pi \sum_{k \geqslant 1} \left[1 - \frac{w^2}{\pi^2 (2k)^2}\right] a_{2k-1}'^2. \tag{15}$$

Подставляя этот результат в (7) и выполняя интегрирование, находим

$$G(x, t \mid x_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \frac{\frac{w}{2}}{\sin \frac{w}{2}} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{\psi_1 t^2}{6\hbar^2} + \frac{imw}{4\hbar t}(x - x_0)^2 \operatorname{ctg} \frac{w}{2}\right], \tag{16}$$

где использовано известное правило разложения тригонометрических функций в бесконечные произведения

$$\frac{\sin x}{x} = \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \frac{x^2}{k^2 \pi^2}\right).$$

Соответственно

$$G(\mathbf{r}, t \mid \mathbf{r}_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \frac{\left(\frac{w}{2}\right)^3}{\sin^3 \frac{w}{2}} \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{\psi_1 t^2}{2\hbar^2} + \frac{imw}{4\hbar t}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \operatorname{ctg} \frac{w}{2}\right]. \tag{17}$$

Если в формуле (17) положить $w = \Omega t$, $t = -i\beta\hbar$, где $\beta = (kT)^{-1}$ и опустить в показателе экспоненты слагаемое $-\psi_1 t^2/2\hbar^2$, то она с точностью до множителя $2^{-3/2}$ переходит в формулу (2.7) работы [3]. Формула (17) нам представляется правильной, поскольку она приводит к верному результату при $w \to 0$.

Подставляя в (17) явное выражение для w, находим окончательно

$$G(\mathbf{r}, t \mid \mathbf{r}_0, 0) = \theta(t) \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \frac{\left[\frac{\alpha t}{2} \sqrt{\frac{\psi_1 t}{m\hbar}} \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)\right]^3}{\sin^3 \left[\frac{\alpha t}{2} \sqrt{\frac{\psi_1 t}{m\hbar}} \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)\right]} \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{\psi_1 t^2}{2\hbar^2} + \frac{\alpha}{4\hbar} \sqrt{\frac{m\psi_1 t}{\hbar}} \exp\left(\frac{i\pi}{4}\right) \times\right.$$

$$\left.\times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 \operatorname{ctg}\left[\frac{\alpha t}{2} \sqrt{\frac{\psi_1 t}{m\hbar}} \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)\right]\right\}. \tag{18}$$

Автор выражает глубокую благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и стимулирующие обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бонч-Бруевич В. Л., Миронов А. Г. Введение в электронную теорию неупорядоченных полупроводников. М., 1972.
2. Bezák V. «Proc. Roy. Soc.», 1970, A315, 339; «J. Phys. A: Gen. Phys.», 1971, 4, 324.
3. Paradopoulos G. J. «J. Phys. A: Gen. Phys.», 1974, 7, 183.
4. Zimmerman R. L. «J. Math. Phys.», 1965, 6, 1117.

Кафедра
физики полупроводников

Поступила в редакцию
03.03.78

УДК 536.758; 539.2.01

И. И. ОЛЬХОВСКИЙ

ОБ УЧЕТЕ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНОГО КРИСТАЛЛА ОТ РАССТОЯНИЙ МЕЖДУ УЗЛАМИ

1. Система уравнений Боголюбова [1] при температуре $\theta \to 0$ имеет «решетчатое» решение, например унарная и бинарная функции выражаются соответственно через трехмерную и шестимерную δ-функции:

$$F_1^{(0)} = \sum_i \delta_{i1}, \quad F_2^{(0)} = \sum_{i \neq j} \delta_{i1}\delta_{j2}, \tag{1}$$

где $\delta_{i1} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)$, $\delta_{j2} = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)$, а $\mathbf{R}_i$ — радиус-вектор i-го узла решетки. Функция $F_1^{(0)}$ вида (1) впервые была получена из стационарного уравнения Власова [2] как асимптотическое решение при $\theta \to 0$. Соответствующее термическое уравнение состояния было найдено раньше [3]. Как решение нулевого приближения системы Боголюбова функции (1) были получены в [4], где использовалось разложение функционала,