第21卷 第6期 物 理 学 报 Vol. 21, No. 6
1965年6月 ACTA PHYSICA SINICA June, 1965

論三声子相互作用对色散的效果*

潘 金 声
（吉 林 大 学）

提　　要

本文应用格林函数方法讨论了晶体点阵的色散的二级电矩效应，并且也考虑了非简谐势的效果。结果表明，在不考虑非简谐势时，与博恩和黄昆应用其他方法所得到的结果一致；而非简谐势的效果将调变吸收分布的强度。

一、引　言

关于光的紅外吸收間題，在博恩和黃昆的著作中[1]有較詳尽的論述。大家都知道，在忽略势函数中的所有三級項和更高級項时，即在簡諧近似下，吸收綫是由一些无限銳的綫所組成的；可是，当考虑声子之間的相互作用时（非簡諧項），声子寿命将变为有限的，因此具有給定动量的声子的能量将表現一定的不确定性，这就导致吸收綫条加寬。

最近对于这个間題出現了一系列的論文，这些論文主要是集中在把理論普遍化，例如，Maradudin[2] 和 Кащеев[3] 等人曾針对这个問題提出了形式上与博恩和黃昆理論有所不同、但实质上却十分相近的理論。但这些作者的考虑都是基于这样的假定：晶体的电矩是核位移的綫性函数。然而，一般說来，电矩必須考虑为核位移的泰勒級数。当然，綫性項同高級項相比是非常大的，所以可以預料，高級电矩的效果只能在远离基本頻率的区域观察到。

但在有些晶体中，观察到了晶体的各种性质表現出与离子晶体結构有显著偏离，例如，Burstein 等人[4] 对 MgO 晶体所进行的观察就是如此。这是因为在这些晶体中，近邻离子之間的重迭比較大，所以当核位移时，电子云将有強烈的形变。因此可以預料，高級电矩效应对于說明远离基本色散頻率区域观察到的吸收来說是重要的。这篇文章就是要討論二級电矩效应。文章的第二节将討論一般的理論；第三节将討論在不考虑非簡諧項时二級电矩的效应；第四节将討論非簡諧項的效果。

二、一 般 理 論

久保亮五[5]曾发展了系統对外界微扰的反应的一般理論，这个理論使我們有可能討論諸如电导以及其他动力学系数等間題。

令系統最初是处于热平衡状态，然后寖漸地引入外微扰。为了方便起見，我們取初始瞬时 $x_0 \to -\infty$，那末描述系統与微扰的相互作用的哈密頓量 ΔH，在我們所討論的情形

* 1964年3月23日收到.

中便为

$$\Delta H = -\mathbf{E}\cdot\mathbf{M} = -\mathbf{E}_0\cdot\mathbf{M}e^{-i\omega x_0-\varepsilon|x_0|}, \tag{2.1}$$

其中 $\mathbf{E}$ 是电場，$\mathbf{M}$ 是系統的电矩算符：

$$M_\alpha = M_\alpha(X_0) + \sum_{l,k}^{N} M_\alpha\binom{l}{k}u_\alpha\binom{l}{k} + \frac{1}{2}\sum_{l,k}^{N}\sum_{l',k',\beta}^{N} M_{\alpha\beta}\binom{l\ l'}{k\ k'}u_\alpha\binom{l}{k}u_\beta\binom{l'}{k'} + \cdots,$$

而

$$u_\alpha\binom{l}{k} = \sum_{\mathbf{y}j}\left[Nm_k\hbar^{-1}\omega\binom{\mathbf{y}}{j}\right]^{-1/2} e_\alpha\left(k\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right)e^{i\mathbf{y}\cdot\mathbf{x}(l)}\left\{a\binom{\mathbf{y}}{j} - a^+\binom{-\mathbf{y}}{j}\right\}.$$

这里所采用的符号以及各个符号所代表的意义均与博恩和黄昆书中所采用的相同，只是在这种情形中必須把經典变量理解成量子算符．因此 $a^+\binom{\mathbf{y}}{j}$ 和 $a\binom{\mathbf{y}}{j}$ 是动量 $\hbar\mathbf{y}$、能量 $\hbar\omega\binom{\mathbf{y}}{j}$ 的第 j 支声子的产生算符与湮灭算符；$\mathbf{e}\left(k\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right)$ 为偏振矢量，滿足

$$e^*\left(k\middle|\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right) = -e\left(k\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right).$$

令

$$M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j & j\end{pmatrix} = \sum_{k,\beta}\sum_{l',k',\gamma} M_{\alpha,\beta\gamma}\binom{0\ l'}{k\ k'}\frac{1}{(m_k m_{k'})^{1/2}}e_\beta\left(k\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right)e_\gamma\left(k'\middle|\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j\end{matrix}\right)e^{-2\pi i\mathbf{y}\cdot\mathbf{x}(l')},$$

則

$$\begin{aligned} M_\alpha &= \sqrt{\frac{\hbar}{\omega\binom{0}{j}}}\sum_j M_\alpha\binom{0}{j}\left[a\binom{0}{j} - a^+\binom{0}{j}\right] + \frac{1}{2}\frac{\hbar}{\left[\omega\binom{\mathbf{y}}{j}\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'}\right]^{1/2}}\times \\ &\quad\times\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{jj'} M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j & j'\end{pmatrix}\left[a\binom{\mathbf{y}}{j} - a^+\binom{-\mathbf{y}}{j}\right]\left[a\binom{-\mathbf{y}}{j'} - a^+\binom{\mathbf{y}}{j'}\right] + \cdots \\ &= M_\alpha^{(1)} + M_\alpha^{(2)} + \cdots, \end{aligned} \tag{2.2}$$

$M_\alpha^{(1)}$、$M_\alpha^{(2)}$ 分别称为一級电矩算符、二級电矩算符．

电矩算符的平均值在有微扰时可以容易地求得．我們只考虑微微偏离于平衡的情形，这时，統計算符 ρ 可以表为

$$\rho = \rho_0 + \Delta\rho,$$

其中 ρ_0 为沒有微扰时的統計算符，滿足

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\rho_0 = [H_0\rho_0],$$

H_0 就是沒有微扰时的哈密頓算符

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\mathbf{y}j}\hbar\omega\binom{\mathbf{y}}{j}a^+\binom{\mathbf{y}}{j}a\binom{\mathbf{y}}{j} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_1j_1\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3} V_{\mathbf{y}_1j_1\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}\times \\ &\quad\times\left\{\frac{1}{3}a\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3} - \frac{1}{3}a^+\binom{-\mathbf{y}_1}{j_1}a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a^+\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3} + \right. \\ &\quad\left. + a^+\binom{-\mathbf{y}_1}{j_1}a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3} - a^+\binom{-\mathbf{y}_1}{j_1}a\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}\right\} + \cdots, \end{aligned} \tag{2.3}$$

而

$$V_{\mathbf{y}_1j_1\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}=\left(\frac{\hbar^3}{N^3\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_1\\j_1\end{pmatrix}\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\j_2\end{pmatrix}\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\j_3\end{pmatrix}}\right)^{1/2}\sum_{l,k;\,l'k';\,l''k''}\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\frac{\phi_{\alpha\beta\gamma}\begin{pmatrix}l\ l'\ l''\\k\ k'\ k''\end{pmatrix}}{\sqrt{m_km_{k'}m_{k''}}}\times$$
$$\times\, e_\alpha\left(k\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}_1\\j_1\end{matrix}\right)e_\beta\left(k'\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}_2\\j_2\end{matrix}\right)e_\gamma\left(k''\middle|\begin{matrix}\mathbf{y}_3\\j_3\end{matrix}\right)\exp\left\{i\left[\mathbf{y}_1\cdot\mathbf{R}\begin{pmatrix}l\\k\end{pmatrix}+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\,\mathbf{y}_2\cdot\mathbf{R}\begin{pmatrix}l'\\k'\end{pmatrix}+\mathbf{y}_3\cdot\mathbf{R}\begin{pmatrix}l''\\k''\end{pmatrix}\right]\right\}$$
$$=-V^*_{-\mathbf{y}_1j_1-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3}. \tag{2.4}$$

于是在有微扰存在时，我們有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\rho=[H\rho]\simeq[H_0\rho_0]+[H_0\Delta\rho]+[\Delta H\rho_0],$$

这个方程的解是

$$\Delta\rho=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{x_0}e^{-iH_0(x-x_0')/\hbar}[\Delta H\rho_0]e^{iH_0(x-x_0')/\hbar}\,dx_0'. \tag{2.5}$$

故电矩 $M_\alpha(x_0)$ 的平均值为

$$\overline{M_\alpha(x_0)}=\mathrm{Sp}\{(\rho_0+\Delta\rho)M_\alpha(x_0)\}=$$
$$=\mathrm{Sp}\,\rho_0M_\alpha(x_0)+\mathrm{Sp}\,\Delta\rho M_\alpha(x_0).$$

若系統沒有永久电矩，并且当我們忆及推迟格林函数的定义后[6]，则有

$$\overline{M_\alpha(x_0)}=\mathrm{Sp}\,\Delta\rho M_\alpha(x_0)=$$
$$=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\theta(x_0-x_0')\langle[M_\alpha(x_0),M_\beta(x_0')]^-\rangle E_{0\beta}e^{-i\omega x_0'-\varepsilon|x_0|}\,dx_0'.$$

这里凡有重复的希腊字脚标的地方就是暗指从 0 到 3 求和，$\langle\cdots\rangle$表示 $\mathrm{Sp}\{e^{-\beta H}[\cdots]^-\}/\mathrm{Sp}\,e^{-\beta H}$，$\theta(t)$ 乃是人所共知的阶梯函数：

$$\theta(t)=\begin{cases}1, & \text{当 } t>0 \text{ 时;}\\0, & \text{当 } t<0 \text{ 时.}\end{cases}$$

这样一来，

$$\overline{M_\alpha(x_0)}=-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx_0E_{0\beta}e^{-i\omega x_0'-\varepsilon|x_0|}\langle\!\langle M_\alpha(x_0)|M_\beta(x_0')\rangle\!\rangle^-, \tag{2.6}$$

$\langle\!\langle M_\alpha(x_0)|M_\beta(x_0')\rangle\!\rangle^-$ 就是双时間推迟格林函数，或者称为相关函数，我們用 $G^-_{\alpha\beta}(x_0,x_0')$ 表示．若令

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{iEt-\varepsilon t}G^-_{\alpha\beta}(x_0,x_0')=G^-_{\alpha\beta}(E+i\varepsilon), \tag{2.7}$$

则可得

$$\overline{M_\alpha(x_0)}=P_{\alpha\beta}(\omega)E_{0\beta}e^{-i\omega x_0},$$

其中

$$P_{\alpha\beta}(\omega)=-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t-\varepsilon t}G^-_{\alpha\beta}(t), \tag{2.8}$$

即

$$P_{\alpha\beta}(\omega) = 2\pi G^{-}_{\alpha\beta}(E + i\varepsilon)\big|_{E=\omega}. \tag{2.9}$$

$P_{\alpha\beta}(\omega)$ 就是系統的极化率．若将 (2.8) 式除以晶体体积 Nv_a（其中 v_a 为晶胞体积），并将 (2.2) 式代入，就得每单位体积的极化率：

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}(\omega) = &-\frac{1}{Nv_a\hbar}\Big\{\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(1)}(x_0),\, M_\beta^{(1)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t} + \\ &+\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(1)}(x_0),\, M_\beta^{(2)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t} + \\ &+\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(2)}(x_0),\, M_\beta^{(1)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t} + \\ &+\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(2)}(x_0),\, M_\beta^{(2)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t}\Big\} = \\ &= P_{\alpha\beta}^{(0)}(\omega) + P_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) + P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega), \end{aligned} \tag{2.10}$$

其中

$$t = x_0 - x_0',$$

而 $P_{\alpha\beta}^{(0)}(\omega)$、$P_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega)$、$P_{\alpha\beta}(\omega)$ 分别代表

$$P_{\alpha\beta}^{(0)}(\omega) = -\frac{1}{Nv_a\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(1)}(x_0),\, M_\beta^{(1)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t},$$

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) = &-\frac{1}{Nv_a\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(1)}(x_0),\, M_\beta^{(2)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t} - \\ &-\frac{1}{Nv_a\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(2)}(x_0),\, M_\beta^{(1)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t}, \end{aligned}$$

$$P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega) = -\frac{1}{Nv_a\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\langle[M_\alpha^{(2)}(x_0),\, M_\beta^{(2)}(x_0')]^{-}\rangle e^{i(\omega+\varepsilon)t}.$$

所以各級极化率的計算可分别根据上式来进行．极化率 $P_{\alpha\beta}^{(0)}(\omega)$ 以及非簡諧勢对它的影响，在論文 [2, 3] 中已有詳細討論；至于 $P_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega)$，可以把 (2.2) 式代入而証明它等于零；而 $P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega)$ 以及非簡諧勢对它的效果，则正是本文所要討論的．

三、二級电矩效应

将 $P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega)$ 用明显的符号表示出来后，即为

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega) = &-\frac{i}{4Nv_a\hbar}\frac{\hbar^2}{\left[\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha'\end{pmatrix}\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\beta\end{pmatrix}\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\beta'\end{pmatrix}\right]^{1/2}}\sum_{\mathbf{y}\mathbf{y}'}\sum_{i_\alpha j_\alpha'}\sum_{i_\beta j_\beta'} M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j_\alpha'\end{pmatrix}\times \\ &\times M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}' & -\mathbf{y}'\\ j_\beta & j_\beta'\end{pmatrix}\int_{-\infty}^{\infty} dt\theta(t)\, e^{i(\omega+\varepsilon)t}\Big\langle\Big[a\begin{pmatrix}\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha' & \end{pmatrix} - \\ &- a\begin{pmatrix}\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha' & \end{pmatrix} - a^{+}\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha' & \end{pmatrix} + \\ &+ a\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha & \end{pmatrix}a^{+}\begin{pmatrix}\mathbf{y} & |x_0\\ j_\alpha' & \end{pmatrix},\ a\begin{pmatrix}\mathbf{y}' & |x_0'\\ j_\beta & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0'\\ j_\beta' & \end{pmatrix} - a\begin{pmatrix}\mathbf{y}' & |x_0'\\ j_\beta & \end{pmatrix}a^{+}\begin{pmatrix}\mathbf{y} & |x_0'\\ j_\beta & \end{pmatrix} - \\ &- a^{+}\begin{pmatrix}-\mathbf{y}' & |x_0'\\ j_\beta & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & |x_0'\\ j_\beta' & \end{pmatrix} + a^{+}\begin{pmatrix}-\mathbf{y}' & |x_0'\\ j_\beta & \end{pmatrix}a\begin{pmatrix}\mathbf{y}' & |x_0'\\ j_\beta' & \end{pmatrix}\Big]^{-}\Big\rangle. \end{aligned} \tag{3.1}$$

根据泊松括号的性质，上式可化成若干推迟格林函数之和. 但是，根据动量守恆定律，相关函数 $\langle aa\rangle$ 和 $\langle a^+a^+\rangle$ 等于零，从而这許多項中只有少数几項保存下来. 如果我們不去考虑非簡諧項的效果，也就是說，当我們只取 (2.3) 式的第一項时，那末，根据格林函数的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}\langle\langle A(x)\,|\,B(x')\rangle\rangle^- = -\hbar\delta(x_0-x_0')\langle[A(x),\,B(x')]^-\rangle - \\ -\langle\langle H_0A(x)-A(x)H_0\,|\,B(x')\rangle\rangle^- \tag{3.2}$$

(其中 A、B 分别代表格林函数中的相应算符)，立刻可以看出，凡是在各个格林函数中产生算符数和湮灭算符数不等时，这个格林函数便等于零. 这样，(3.1)式便为[1)]

$$P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega) = \\ = -\frac{i}{4Nv_a}\frac{\hbar}{\left[\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\omega\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}\omega\binom{\mathbf{y}'}{j'_\beta}\right]^{1/2}}\sum_{\mathbf{y}\mathbf{y}'}\sum_{j_\alpha j'_\alpha}\sum_{j_\beta j'_\beta}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j'_\alpha\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}'\\ j_\beta & j'_\beta\end{pmatrix}\times \\ \times\int_{-\infty}^{\infty}dt\,\theta(t)e^{i\omega t}\left\{\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle+\right. \\ +\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle+ \\ +\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle+ \\ +\left\langle\left[a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle+ \\ +\left\langle\left[a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle+ \\ \left.+\left\langle\left[a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle\right\}. \tag{3.3}$$

为了以后描述方便，我們把上式中各項依次地用 $G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0x_0')\cdots G^{(6)}_{\alpha\beta}(x_0,\,x_0')$ 代表，即

$$G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0,x_0') = i\theta(t)\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]^-\right\rangle$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots.$$

这些格林函数可以根据(3.2)式来計算. 例如，对于 $G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0x_0')$，我們有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0,x_0') = -\hbar\delta(t)\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\,a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right]\right\rangle - \\ -\left\langle\left\langle\sum_{\mathbf{y}_1j_1}\hbar\omega\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a^+\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)-\right.\right. \\ \left.\left.-\sum_{\mathbf{y}_1j_1}\hbar\omega\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a^+\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}a\binom{\mathbf{y}_1}{j_1}\right|a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x_0'\right)\right\rangle\right\rangle,$$

經过簡单的运算后，立刻可得

1) 这里我们已经令时间指数中的 ε 等于零. 这是为了便于在第四节中利用这些结果；但是对于本节说来，我们始终都应该把 ω 理解成 $\omega+i\varepsilon$.

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} - \hbar\left(\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} + \omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right)\right] G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0, x'_0) =$$

$$= -\delta(t)\left\{\delta_{-\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\left\langle a\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}|x_0\Big) a^+\begin{pmatrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{pmatrix}|x'_0\Big)\right\rangle + \right.$$

$$+ \delta_{-\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\left\langle a\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}|x_0\Big) a^+\begin{pmatrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{pmatrix}|x'_0\Big)\right\rangle +$$

$$+ \delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\left\langle a^+\begin{pmatrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{pmatrix}|x'_0\Big) a\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}|x_0\Big)\right\rangle +$$

$$\left. + \delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\left\langle a^+\begin{pmatrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{pmatrix}|x'_0\Big) a\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}|x_0\Big)\right\rangle\right\},$$

在变到傅里叶表示后，就有

$$\left[-\omega - \omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} - \omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right] G^{(1)}_{\alpha\beta}(x, x'; \omega) =$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\left\{\delta_{-\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\left(n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} + 1\right) + \right.$$

$$+ \delta_{-\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\left(1 + n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right) + \delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\alpha} n\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix} +$$

$$\left. + \delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}j'_\beta}\ \delta_{-\mathbf{y}j'_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta} n\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right\}, \tag{3.4}$$

其中

$$n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix} = \left(e^{\beta\left(\mathbf{y}\atop j\right)} - 1\right)^{-1}, \tag{3.5}$$

$$\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix}}{kT}.$$

同理，对于其他五个格林函数的傅里叶表示也可类似地得到，它們分别为

$$\left[-\omega - \omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} + \omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right] G^{(2)}_{\alpha\beta}(x, x'; \omega) = -\frac{1}{2\pi}\left\{\delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\delta_{\mathbf{y}'j_\beta\mathbf{y}j'_\alpha}\left(1 + n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right) - \right.$$

$$\left. - \delta_{\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\left(1 + n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right)\right\}, \tag{3.6}$$

$$\left[-\omega - \omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} + \omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right] G^{(3)}_{\alpha\beta}(x, x'; \omega) = -\frac{1}{2\pi}\left\{\delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{-\mathbf{y}'j'_\beta\mathbf{y}j_\alpha} n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix} - \right.$$

$$\left. - \delta_{\mathbf{y}j'_\alpha-\mathbf{y}'j'_\beta}\delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta} n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right\}, \tag{3.7}$$

$$\left[-\omega + \omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} - \omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right] G^{(4)}_{\alpha\beta}(x, x'; \omega) =$$

$$= -\frac{1}{2\pi}\left\{\delta_{\mathbf{y}'j'_\beta-\mathbf{y}j'_\alpha}\delta_{-\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\left(1 + n\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right) - \right.$$

$$\left. - \delta_{-\mathbf{y}j'_\alpha-\mathbf{y}'j'_\beta}\delta_{\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j_\alpha}\left(1 + n\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right)\right\}, \tag{3.8}$$

$$\left[-\omega+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]G^{(5)}_{\alpha\beta}(x,x';\omega)=$$

$$=-\frac{1}{2\pi}\left\{\delta_{-\mathbf{y}i'_\alpha\mathbf{y}i_\beta}\,\delta_{\mathbf{y}i_\alpha-\mathbf{y}'i'_\beta}\,n\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}-\delta_{\mathbf{y}i_\alpha-\mathbf{y}i'_\beta}\,\delta_{-\mathbf{y}'i_\beta-\mathbf{y}i'_\alpha}\,n\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right\},\tag{3.9}$$

$$\left[-\omega+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]G^{(6)}_{\alpha\beta}(x,x';\omega)=-\frac{1}{2\pi}\left\{-\delta_{\mathbf{y}i_\alpha\mathbf{y}'i_\beta}\delta_{-\mathbf{y}i_\alpha-\mathbf{y}'i'_\beta}\,n\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}-\right.$$

$$-\delta_{\mathbf{y}i'_\alpha-\mathbf{y}'i'_\beta}\delta_{\mathbf{y}i'_\alpha-\mathbf{y}'i'_\beta}\,n\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}-\delta_{-\mathbf{y}i_\alpha\mathbf{y}'i_\beta}\delta_{-\mathbf{y}'i'_\beta\mathbf{y}i'_\alpha}\left(1+n\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right)-$$

$$\left.-\delta_{-\mathbf{y}i_\alpha-\mathbf{y}'i'_\beta}\delta_{\mathbf{y}'i_\beta\mathbf{y}i'_\alpha}\left(1+n\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right)\right\}.\tag{3.10}$$

将 (3.4)—(3.10) 諸式代入(3.3)式,并且考虑到(2.9)式以及关系式

$$M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y}&-\mathbf{y}\\ j_\alpha&j_\alpha\end{pmatrix}=M_\alpha\begin{pmatrix}-\mathbf{y}&\mathbf{y}\\ j_\alpha&j_\alpha\end{pmatrix},\tag{3.11}$$

即得

$$P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega)=-\frac{1}{4Nv_\alpha}\frac{\hbar}{\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y}&-\mathbf{y}\\ j_\alpha&j'_\alpha\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}&-\mathbf{y}\\ j'_\alpha&j_\alpha\end{pmatrix}\times$$

$$\times\left\{\frac{2\left[1+n\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+n\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}}+\frac{2\left[n\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}-n\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\right]}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}+\right.$$

$$\left.+\frac{2\left[n\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}-n\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]}{\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}}-\frac{2\left[1+n\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+n\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]}{\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}\right\}.\tag{3.12}$$

以后我們将应用关系

$$(x\pm i\varepsilon)^{-1}=Px^{-1}\mp i\pi\delta(x),$$

其中 P 表示取主值的符号. 把(3.5)的 n 值代入 (3.12), 并且考虑到 $\omega\binom{-\mathbf{y}}{j}=\omega\binom{\mathbf{y}}{j}$,

即得

$$P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega)=$$

$$=-\frac{1}{Nv_\alpha\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y}&-\mathbf{y}\\ j_\alpha&j'_\alpha\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}&-\mathbf{y}\\ j'_\alpha&j_\alpha\end{pmatrix}C\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}C\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\left(1-e^{-\beta\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\beta\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}}\right)\times$$

$$\times\left\{\frac{2\left[\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]}{\left[\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right]^2-\omega^2}+i\pi\left[\delta\left(\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\right.\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.+\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right)-\delta\left(\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}\right)\right]\right\}-$$

$$-\frac{1}{Nv_a\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_a j_a'}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a & j_a'\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a' & j_a\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\left(e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}\right)\times$$

$$\times\left\{\frac{2\left[\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right]}{\left[\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right]^2-\omega^2}+i\pi\left[\delta\left(\omega+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)-\right.\right.$$

$$\left.\left.-\delta\left(\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)\right]\right\},\tag{3.13}$$

其中

$$C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix}}\Big/\left[1-\exp\left(-\hbar\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j\end{pmatrix}\right)\Big/kT\right].\tag{3.14}$$

这就是二級色散表示式. 这个表示式还可变成如下的形式:

$$P_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega)=-\frac{1}{Nv_a\hbar}\sum_{\mathbf{y}}^{N/2}\sum_{j_a}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a & j_a\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a & j_a\end{pmatrix}C^2\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}\left(1-e^{-2\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}\right)\times$$

$$\times\left\{\frac{4\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}{4\omega^2\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega^2}+i\pi\left[\delta\left(\omega+2\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}\right)-\delta\left(\omega-2\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}\right)\right]\right\}-$$

$$-\frac{1}{Nv_a\hbar}\sum_{\mathbf{y}}^{N/2}\sum_{j_a>j_a'}\left[M_\alpha\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & \mathbf{y}\\ j_a & j_a'\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a & j_a'\end{pmatrix}+M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_a & j_a'\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}-\mathbf{y} & \mathbf{y}\\ j_a & j_a'\end{pmatrix}\right]\times$$

$$\times C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\left\{\left[1-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}\right]\left[\frac{2\left(\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)}{\left(\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)^2-\omega^2}+\right.\right.$$

$$\left.+i\pi\left\{\delta\left(\omega+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}\right)-\delta\left(\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)\right\}\right]+$$

$$+\left[e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}\right]\left[\frac{2\left(\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)}{\left(\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)^2-\omega^2}+\right.$$

$$\left.\left.+i\pi\left\{\delta\left(\omega+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)-\delta\left(\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\right)\right\}\right]\right\}.\tag{3.15}$$

这个結果完全与博恩和黄昆所得到的結果一致. 正如这两位作者所指出的，其虚部乃是描写連續的吸收；另一方面，二級色散不象一級色散那样与温度无关，而是与温度有关. 当 $T\to 0$ 时，因为 $e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}=e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}\to 0$，所以在絕对零度时，(3.15)式第二个花括号內的最后一項为零. 而在很高的温度下，M 函数将随温度綫性地增加，这是因为在高温时，$C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}\left(1-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}\right)$ 和 $C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}\left(e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a'\end{pmatrix}}-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_a\end{pmatrix}}\right)$ 均近似地与 T

成正比所致.

但是这里所描述的二級电矩效应是在簡諧近似下得到的,也就是說,我們忽略了势函数中的三級項以及更高級的項,而这些項将会在某种程度上調变所得到的結果,特别是在比較高的温度下，因此在簡諧近似下所得到的某些結論預料也将有所調变. 下一节我們就要討論这个問題.

四、非簡諧項的效果

为了簡单起見，我們只考慮 (2.3) 式的第三級項的效果. 在这种情形下,我們也只需要考虑它們对(3.3)式中各个双粒子相关函数的影响,无需考虑象得到(3.3)式所舍去的其他相关函数,因为这些相关函数在零級近似下是等于零的,所以預料非簡諧項不致对它們有多大影响;而且从我們下面所采用的近似看来,我們总是采取一定的近似方法把各个格林函数表成封閉的形式,所以作为一級近似說来,不去考虑非簡諧势对这些已經舍去的項引起的附加修正是完全允許的.

因此，我們現在的問題是，在考虑非簡諧势的情况下再根据格林函数的运动方程(3.2)把各个格林函数的一級近似表达出来. 这样,对于 $G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0-x'_0)$，我們有

$$
\begin{aligned}
&\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0}-\hbar\left(\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}\right)\right]G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0,x'_0)=\\
&=-\hbar\delta(t)\left\langle\left[a\left(\begin{matrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right)a\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{matrix}\Big|x_0\right),\ a^+\left(\begin{matrix}-\mathbf{y}'\\ j_\beta\end{matrix}\Big|x'_0\right)a^+\left(\begin{matrix}\mathbf{y}'\\ j'_\beta\end{matrix}\Big|x'_0\right)\right]^-\right\rangle-\\
&-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{-\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}\left\langle\!\left\langle a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a^+\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle-\\
&-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}\left\langle\!\left\langle a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a^+\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle+\\
&+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{-\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}2\left\langle\!\left\langle a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}'}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle+\\
&+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}2\left\langle\!\left\langle a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}'}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle-\\
&-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{-\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}\left\langle\!\left\langle a\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}'}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle-\\
&-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}V_{\mathbf{y}j'_\alpha\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}\left\langle\!\left\langle a\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}a\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}'}{j'_\beta}\right\rangle\!\right\rangle,
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

方程右边的各个格林函数,我們将依次用 $F^{(1)},\cdots,F^{(6)}$ 代表,例如

$$
F^{(1)\ \mathbf{y}'j_\beta\ -\mathbf{y}j'_\beta}_{\ \ -\mathbf{y}_2j_2\ -\mathbf{y}_3j_3\ -\mathbf{y}j'_\alpha}=\left\langle\!\left\langle a^+\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}a^+\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3}a\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}\middle|a^+\binom{\mathbf{y}'}{j_\beta}a^+\binom{-\mathbf{y}}{j_\beta}\right\rangle\!\right\rangle,
$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots.$$

而且由于声子之間的相互作用很小，所以 $V_{\mathbf{y}_1j_1\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3}$ 諸量可以認为是小的参量. 应用这种近似于上面方程中右边的各个格林函数，并且只保存包括格林函数 $G_{\alpha\beta}(x_0,x'_0)$ 的項，

于是，对于(4.1)式右边的第一个格林函数，就有

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\hbar\left(\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right)\right]F^{(1)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}j'_\alpha}(x_0,x'_0)\sim$$

$$\sim -V_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(x_0,x'_0).$$

这里我們已經略去 $V_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j_2-\mathbf{y}_3j_3}$ 前面的数值因子，因为从我們所取的这种近似看来，显然保存这样的因子是沒有意义的．将上式变到傅里叶表示后，卽得

$$\hbar\left[-\omega+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(1)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim -V_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega). \tag{4.2}$$

同理，对于(4.1)式的其他格林函数可类似地得到，它們分别为

$$\hbar\left[-\omega+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(2)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}j_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim -V_{-\mathbf{y}j'_\alpha-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}_3j_3}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega), \tag{4.3}$$

$$\hbar\left[-\omega+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(3)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim V_{-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}j_\alpha}\left(n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega), \tag{4.4}$$

$$\hbar\left[-\omega+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(4)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3\mathbf{y}j_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim V_{-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}j'_\alpha}\left(n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega), \tag{4.5}$$

$$\hbar\left[-\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(5)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{-\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim V_{-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}j_\alpha}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega), \tag{4.6}$$

$$\hbar\left[-\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right]F^{(6)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}_2j_2\mathbf{y}_3j_3\mathbf{y}j_\alpha}(\omega)\sim$$

$$\sim V_{-\mathbf{y}_3j_3-\mathbf{y}_2j_2-\mathbf{y}j'_\alpha}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_2\\ j_2\end{pmatrix}+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}_3\\ j_3\end{pmatrix}\right)G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega). \tag{4.7}$$

将(4.2)—(4.7)式代入(4.1)式，则得

$$G^{(1)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)\simeq$$

$$\simeq\frac{1}{2\pi}\frac{2\left[\delta_{-\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{\mathbf{y}j_\alpha\mathbf{y}'j'_\beta}\left(1+n\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\right)+\delta_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}'j_\beta}\delta_{\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\alpha}\,n\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right]}{\omega+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}+R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega)}. \tag{4.8}$$

这里 $G^{(1)\ \mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$ 就是 $G^{(1)}_{\alpha\beta}(\omega)$，并且

$$
\begin{aligned}
R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega) = {} & \frac{1}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3} |V_{-\mathbf{y}j_\alpha \mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3}|^2 \left\{ \frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}-\omega\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} - \right. \\
& \left. -\frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} + \frac{2\left(n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}\right)}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} \right\} + \\
& + \frac{1}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3} |V_{\mathbf{y}j'_\alpha \mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3}|^2 \left\{ \frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega-\omega\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}-\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}} - \right. \\
& \left. -\frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega+\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}} + \frac{2\left(n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}\right)}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}} \right\}.
\end{aligned}
\tag{4.9}
$$

根据类似的計算，同样可以得到其他几个格林函数在考虑非简諧势的情况下的一級近似表达式．例如，对于 $G^{(2)\,\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$，有

$$
G^{(2)\,\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega) \simeq \frac{1}{2\pi}\,\frac{\delta_{\mathbf{y}j_\alpha \mathbf{y}'j'_\beta}\,\delta_{\mathbf{y}'j_\beta \mathbf{y}j'_\alpha}\,n\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha} - \delta_{\mathbf{y}j'_\alpha \mathbf{y}'j_\beta}\,\delta_{\mathbf{y}j_\alpha \mathbf{y}'j'_\beta}\,n\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}+R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega)},
\tag{4.10}
$$

其中

$$
\begin{aligned}
R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega) = {} & \frac{1}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3} |V_{-\mathbf{y}j_\alpha \mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3}|^2 \left\{ \frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}-\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} - \right. \\
& \left. -\frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j_\alpha}} + \frac{2\left(n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}-n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}\right)}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} \right\} + \\
& + \frac{1}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3} |V_{\mathbf{y}j_\alpha \mathbf{y}_2 j_2 \mathbf{y}_3 j_3}|^2 \left\{ \frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}} - \right. \\
& \left. -\frac{1+n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}+n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}-\omega\binom{-\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}} + \frac{2\left(n\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}-n\binom{\mathbf{y}_2}{j_2}\right)}{\omega-\omega\binom{-\mathbf{y}_2}{j_2}+\omega\binom{\mathbf{y}_3}{j_3}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}} \right\}.
\end{aligned}
\tag{4.11}
$$

对于 $G^{(3)\,\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$，从計算表明与 $G^{(2)\,\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$ 有同样的形式．至于 $G^{(4)\,\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$

和 $G^{(5)\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$ 可以根据上面同样的方法，証明它們和 $G^{(2)\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}'j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(-\omega)$ 取同样的形式，并且

$$
\begin{aligned}
&\operatorname{Re} R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(-\omega) = \operatorname{Re} R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega);\\
&\operatorname{Im} R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(-\omega) = -\operatorname{Im} R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega).
\end{aligned}
\tag{4.12}
$$

最后，对于 $G^{(6)\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j'_\alpha}(\omega)$，也可以通过同样的計算，証明它和 $G^{(1)\mathbf{y}'j_\beta-\mathbf{y}j'_\beta}_{\mathbf{y}j_\alpha-\mathbf{y}j_\alpha}(-\omega)$ 是同样的，且

$$
\begin{aligned}
&\operatorname{Re} R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(-\omega) = \operatorname{Re} R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega);\\
&\operatorname{Im} R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(-\omega) = -\operatorname{Im} R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega).
\end{aligned}
\tag{4.13}
$$

将(4.8)、(4.10)以及根据上面分析所得到的有关諸式代入(3.3)式，經过簡短的整理，立刻可得

$$
\begin{aligned}
\operatorname{Re} P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega) = &-\frac{1}{Nv_a\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha} M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j'_\alpha\end{pmatrix} M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j'_\alpha & j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\times\\
&\times\left(1-e^{-\beta\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\beta\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}\right)\left\{\frac{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}+\operatorname{Re}R^{(1)}(\omega)}{\left[\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}+\operatorname{Re}R^{(1)}(\omega)\right]^2+[\hbar\operatorname{Im}R^{(1)}(\omega)]^2}-\right.\\
&\left.-\frac{\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(1)}(\omega)}{\left[\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(1)}(\omega)\right]^2+[\hbar\operatorname{Im}R^{(1)}(\omega)]^2}\right\}-\\
&-\frac{1}{Nv_a\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha} M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j'_\alpha\end{pmatrix} M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j'_\alpha & j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\times\\
&\times\left(e^{-\beta\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}-e^{-\beta\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}}\right)\left\{\frac{\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(2)}(\omega)}{\left[\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(2)}(\omega)\right]^2+[\hbar\operatorname{Im}R^{(2)}(\omega)]^2}-\right.\\
&\left.-\frac{\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(2)}(\omega)}{\left[\omega-\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\operatorname{Re}R^{(2)}(\omega)\right]^2+[\hbar\operatorname{Im}R^{(2)}(\omega)]^2}\right\}.
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

同样，对于 $P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega)$ 的虚部，有

$$
\begin{aligned}
\operatorname{Im} P^{(2)}_{\alpha\beta}(\omega) = &-\frac{1}{Nv_a\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha} M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j'_\alpha\end{pmatrix} M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j'_\alpha & j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix} C\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\times\\
&\times\left(1-e^{-\beta\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}-\beta\binom{\mathbf{y}}{j'_\alpha}}\right)\left\{\frac{\hbar\operatorname{Im}R^{(1)}(\omega)}{\left[\omega+\omega\binom{\mathbf{y}}{j_\alpha}+\omega\binom{-\mathbf{y}}{j'_\alpha}+\operatorname{Re}R^{(1)}(\omega)\right]^2+[\hbar\operatorname{Im}R^{(1)}(\omega)]^2}-\right.
\end{aligned}
$$

$$-\frac{\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(1)}(\omega)}{\left[\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}+\mathrm{Re}\,R^{(1)}(\omega)\right]^2+[\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(1)}(\omega)]^2}\Bigg\}-$$

$$-\frac{1}{Nv_\alpha\hbar}\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{y}}^{N}\sum_{j_\alpha j'_\alpha}M_\alpha\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j_\alpha & j'_\alpha\end{pmatrix}M_\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y} & -\mathbf{y}\\ j'_\alpha & j_\alpha\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}-\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}\times$$

$$\times\left(e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}}-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}}\right)\Bigg\{\frac{\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(2)}(\omega)}{\left[\omega+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}-\mathrm{Re}\,R^{(2)}(\omega)\right]^2+[\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(2)}(\omega)]^2}-$$

$$-\frac{\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(2)}(\omega)}{\left[\omega-\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}-\mathrm{Re}\,R^{(2)}(\omega)\right]^2+[\hbar\,\mathrm{Im}\,R^{(2)}(\omega)]^2}\Bigg\}. \tag{4.15}$$

这里 Re 和 Im 分别代表位于它右边的量应該取实部和虚部，并且 $R^{(1)}(\omega)$ 和 $R^{(2)}(\omega)$ 分别代表 $R^{(1)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega)$ 和 $R^{(2)}_{\mathbf{y}j_\alpha j'_\alpha}(\omega)$. 这两个表示式也可进一步变成与 (3.15) 式相对应的形式，但这里我們不再进行这种变换.

大家都知道，极化系数的虚部是对应着吸收，原因是，吸收系数 $\eta=-4\pi\dfrac{\omega}{C}\mathrm{Im}\,P_{\alpha\beta}$. 所以研究吸收系数和頻率以及温度的关系，只要研究 (4.15) 式中花括号內的函数与頻率以及温度的关系就够了. 吸收頻率的极大处由

$$\frac{\partial}{\partial\omega}\{\cdots\}=0$$

决定[3,7]，其中 $\{\cdots\}$ 代表(4.15)式花括号內的函数，可以証明，$\{\cdots\}$ 的极大值在非簡諧势的情形下将位移 $\mathrm{Re}\,R(\omega)$，这里 $R(\omega)$ 代表 $R^{(1)}(\omega)$ 或 $R^{(2)}(\omega)$，但因它們在数量級上差不多，所以我們无需区别开它們之間的差异. 另一方面，在极大处，$\{\cdots\}\simeq\dfrac{1}{\Gamma(\omega)}$，其中 $\Gamma(\omega)$ 是代表 $R(\omega)$ 的虚部乘以 $\hbar$. 但在 $kT>\hbar\omega_{极大}\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}$ 以及 $kT>\hbar\omega_{极大}\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}$ 时，$\Gamma(\omega)\propto T$，所以可以得出，$\{\cdots\}\propto T^{-1}$. 因此，在高温下，在极大处附近，吸收应該与温度无关，这是因为(4.15)式花括号前面的因子均近似地与 T 成正比的緣故，即

$$C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\left(1-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}}\right)\propto T,$$

$$C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}C\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\left(e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}}-e^{-\beta\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}}\right)\propto T.$$

另一方面，在 $\left|\omega-\left[\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j_\alpha\end{pmatrix}+\omega\begin{pmatrix}\mathbf{y}\\ j'_\alpha\end{pmatrix}\right]\right|\gg\mathrm{Re}\,R(\omega)$ 的区域，我們近似地有

$$\{\cdots\}\propto\Gamma(\omega)\omega^{-3}.$$

所以在高温下，$\{\cdots\}\propto T$，从而在这样的頻率区域，吸收应当正比于 T^2.

但是正如博恩和黃昆所指出的，二級电矩引起的吸收，也就是我們这里的 (4.15) 式，基本上是描述連續吸收的強度分布，所以虽然对应于每个吸收的极大处附近，其吸收基本上应与温度无关，但在远离每一吸收极大处的吸收却与 T^2 成比例，因此欲准确地确定这

种吸收与温度的关系是困难的，唯一可以作出結論的是，它和温度的关系可能是 T^0 与 T^2 的某个中間值，而且随着温度的增加，可能由偏近于与 T^0 成比例的方面向偏近于与 T^2 成比例的方面移动.

参　考　文　献

[1] Born, M. and Huang Kun (黄昆), Dynamical Theory of Crystal Lattices, Chap. VII.
[2] Maradudin, *Phys. Rev.*, **123** (1961), 777.
[3] Кащеев, В. Н., *ФТТ*, **5** (1963), 1358.
[4] Burstein, E., Oberley, J. J. and Plyler, E. K., *Proc. Ind. Acad. Sci.*, **28** (1948), 388.
[5] Kubo, R., *J. Phys. Soc.* (Japan), **12** (1957), 570.
[6] Бонч-Бруевич, В. Л., Тябликов, С. В., Метод функций грина в стастической механике, Москва (1961).
[7] Кащеев, В. Н. и Кривоглаз, М. А., *ФТТ*, **3** (1961), 1528.

EFFECT OF THREE-PHONON INTERACTION ON DISPERSION

PAN JIN-SHENG
(*Kirin University*)

ABSTRACT

A theory is given for the effect of the second order electric moment of crystal on dispersion by means of the Green's function method, in which account is taken of the anharmonic potential. When we ignore the effect of the anharmonic potential, the result obtained is reduced to that of M. Born and Huang Kun; the effect of the unharmonic potential is to modify the distribution of the strength of absorption.