

An Improvement of the Feynman  
Action in the Theory of Polaron II

..... at T finite the Improvement of  
Osaka's Theory of Polaron State

東大教養・基礎科学科 岡本謙一  
(4月19日受理)

序

我々は先に  $T = 0^\circ\text{K}$  の場合に 4つのパラメーターを用いて Feynman 理論を拡張した。以下これを I と呼ぶ。有限温度の場合も同様の取り扱いは簡単になされて、Osaka 理論の拡張となる。我々は以下 Osaka 理論と平行して、我々の結果を述べる。具体的な数値計算は、後に与えられるであろう。

§ 1 有限温度の場合の polaron state ..... 自由エネルギーの計算  
ポーラロンの密度行列の  $\mathbf{X}$  表示は経路積分法によって、

$$\rho(\mathbf{X}, \mathbf{X}'; \beta) = \int_0^\beta \exp S \mathcal{D}\mathbf{X}_t \begin{matrix} \mathbf{X}'(\beta) \\ \uparrow \\ \mathbf{X}(0) \end{matrix} \quad (1.1)$$

で与えられる。ここに作用  $S$  は

$$S = -\frac{1}{2} \int_0^\beta \left( \frac{d\mathbf{X}}{dt} \right)^2 dt + \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \left\{ \frac{e^\beta}{e^\beta - 1} \int_0^\beta \int_0^\beta |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} e^{-|t-s|} dt ds \right. \\ \left. + \frac{1}{e^\beta - 1} \int_0^\beta \int_0^\beta |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} e^{|t-s|} dt ds \right\} \quad (1.2)$$

である。我々は、 $\hbar \rightarrow 1$ ,  $m \rightarrow 1$ ,  $\omega \rightarrow 1$  の単位を取った。  $m$ ,  $\omega$  の意味は I と同じである。又、 $\beta = \frac{1}{k_B T}$  である。自由エネルギー  $F$  は

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln \left( \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{X}, \mathbf{X}) d\mathbf{X} \right) \quad (1.3)$$

岡本謙一

で与えられる。I と同様に自由エネルギーに対して変分原理が成立する。

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{X}, \mathbf{X}'; \beta) &= \int_0^\beta \exp S \mathcal{D}\mathbf{X}_t = \int_0^\beta \exp(S-S_1) \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \\
 &= \langle \exp(S-S_1) \rangle_{\mathbf{X}, \mathbf{X}'} \times \int_0^\beta \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \\
 &\geq \exp \langle S-S_1 \rangle_{\mathbf{X}, \mathbf{X}'} \int_0^\beta \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \\
 &= \exp \langle S-S_1 \rangle_{\mathbf{X}, \mathbf{X}'} \rho_{S_1}(\mathbf{X}, \mathbf{X}'; \beta) \equiv \rho_{\text{trial}}(\mathbf{X}, \mathbf{X}'; \beta) \quad (1.4)
 \end{aligned}$$

$$\therefore F \leq F_{\text{trial}} \text{ が成立する。} \quad (1.5)$$

ここに  $\langle \dots \rangle$  は

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{\int f(\dots) \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t}{\int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t} \text{ である。}$$

我々は  $S_1$  として有限温度の場合

$$\begin{aligned}
 S_1 &= -\frac{1}{2} \int_0^\beta \left( \frac{d\mathbf{X}}{dt} \right)^2 dt \\
 &\quad - \frac{C_1}{2} \left\{ \frac{e^{\beta\omega_1}}{\beta\omega_1} \int_0^\beta \int_0^\beta (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_1|t-s|} dt ds \right. \\
 &\quad \quad \quad \left. + \frac{1}{\beta\omega_1} \int_0^\beta \int_0^\beta (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{\omega_1|t-s|} dt ds \right\} \\
 &\quad - \frac{C_2}{2} \left\{ \frac{e^{\beta\omega_2}}{\beta\omega_2} \int_0^\beta \int_0^\beta (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{-\omega_2|t-s|} dt ds \right. \\
 &\quad \quad \quad \left. + \frac{1}{\beta\omega_2} \int_0^\beta \int_0^\beta (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 e^{\omega_2|t-s|} dt ds \right\} \quad (1.6)
 \end{aligned}$$

なる trial action を用いる。  $S_1$  により決定される運動方程式は、

$$\ddot{\mathbf{X}}_t = \frac{4C_1}{\omega_1} \mathbf{X}_t - 2C_1 \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_1}}{\beta\omega_1} e^{-\omega_1|t-s|} + \frac{1}{\beta\omega_1} e^{\omega_1|t-s|} \right\} \mathbf{X}_s ds$$

$$+\frac{4C_2}{\omega_2} \mathbf{X}_t - 2C_2 \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_2}}{e^{\beta\omega_2}-1} e^{-\omega_2|t-s|} + \frac{1}{e^{\beta\omega_2}-1} e^{\omega_2|t-s|} \right\} \mathbf{X}_s ds \quad (1.7)$$

(1.7) より  $\mathbf{X}(0) = \mathbf{X}$ ,  $\mathbf{X}(\beta) = \mathbf{X}'$  の境界条件を用いて決定される  $\mathbf{X}_t$  を使って,

$$\rho_{S_1}(\mathbf{X}, \mathbf{X}'; \beta) = \int_0^\beta \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{X}(\beta)\mathbf{X}(\beta) - \mathbf{X}(0)\mathbf{X}(0)) \right] \quad (1.8)$$

となる。

$S_1$  の物理的意味を明らかにするために、次の Lagrangian を考える。これは I の図 1 で示された three-coupled particle model である。

$$L = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{r}})^2 + \frac{M_1}{2} (\dot{\mathbf{R}}_1)^2 - \frac{\kappa_1}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)^2 + \frac{M_2}{2} (\dot{\mathbf{R}}_2)^2 - \frac{\kappa_2}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)^2 \quad (1.9)$$

この Lagrangian の密度行列が経路積分で計算されると,

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) = & \text{const} \times \int \exp \left[ -\int_0^\beta \left( \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{r}})^2 + \frac{1}{2} \kappa_1 r^2 + \frac{1}{2} \kappa_2 r^2 \right) dt \right. \\ & + \frac{M_1}{4} \omega_1^2 \int_0^\beta \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_1}}{e^{\beta\omega_1}-1} e^{-\omega_1|t-s|} + \frac{1}{e^{\beta\omega_1}-1} e^{\omega_1|t-s|} \right\} \mathbf{r}(t) \cdot \mathbf{r}(s) dt ds \\ & \left. + \frac{M_2}{4} \omega_2^2 \int_0^\beta \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_2}}{e^{\beta\omega_2}-1} e^{-\omega_2|t-s|} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{e^{\beta\omega_2}-1} e^{\omega_2|t-s|} \right\} \mathbf{r}(t) \cdot \mathbf{r}(s) dt ds \right] \mathcal{D}\mathbf{r}(t) \quad (1.10) \end{aligned}$$

(1.10) の作用より運動方程式

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{r}}_t = & \kappa_1 \mathbf{r}_t - \frac{M_1 \omega_1^3}{2} \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_1}}{e^{\beta\omega_1}-1} e^{-\omega_1|t-s|} + \frac{e^{\omega_1|t-s|}}{e^{\beta\omega_1}-1} \right\} \mathbf{r}_s ds \\ & - \frac{M_2 \omega_2^3}{2} \int_0^\beta \left\{ \frac{e^{\beta\omega_2}}{e^{\beta\omega_2}-1} e^{-\omega_2|t-s|} + \frac{e^{\omega_2|t-s|}}{e^{\beta\omega_2}-1} \right\} \mathbf{r}_s ds \quad (1.11) \end{aligned}$$

が得られ,  $\mathbf{r}(\beta) = \mathbf{r}'$ ,  $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}$  の境界条件で解かれた (1.10) に最も大きい寄与を与える (1.11) の解を用いて (1.10) は,

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta) \propto \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{r}(\beta) \dot{\mathbf{r}}(\beta) - \mathbf{r}(0) \dot{\mathbf{r}}(0)) \right] \text{ となる。 (1.12)}$$

$$\kappa_1 = M_1 \omega_1^2, \kappa_2 = M_2 \omega_2^2, M_1 = \frac{4C_1}{\omega_1^3}, M_2 = \frac{4C_2}{\omega_2^3} \text{ とおくと, 又, } \mathbf{r}' = \mathbf{X}',$$

$\mathbf{r} = \mathbf{X}$  とおくと (1.11), (1.12) は (1.7), (1.8) と一致する。従って  $S_1$  の物理的意味は (1.9) の Lagrangian に示されているものであることがわかると同時に action  $S_1$  の経路積分のかわりに Lagrangian  $L$  の経路積分を用いることができる。まず  $\langle S - S_1 \rangle$  の部分を計算する。

$$\begin{aligned} \langle S - S_1 \rangle &= \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \left\{ \frac{e^\beta}{e^{\beta-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} \rangle e^{-|t-s|} dt ds \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{e^{\beta-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle |\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s|^{-1} \rangle e^{|t-s|} dt ds \right\} \\ &+ \frac{C_1}{2} \left\{ \frac{e^{\beta\omega_1}}{e^{\beta\omega_1-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle e^{-\omega_1|t-s|} dt ds \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{e^{\beta\omega_1-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle e^{\omega_1|t-s|} dt ds \right\} \\ &+ \frac{C_2}{2} \left\{ \frac{e^{\beta\omega_2}}{e^{\beta\omega_2-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle e^{-\omega_2|t-s|} dt ds \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{e^{\beta\omega_2-1}} \int_0^\beta \int_0^\beta \langle (\mathbf{X}_t - \mathbf{X}_s)^2 \rangle e^{\omega_2|t-s|} dt ds \right\} \\ &= A + B + C \end{aligned} \tag{1.13}$$

$$\langle |\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma|^{-1} \rangle = \int \frac{d\mathbf{K}}{2\pi^2 \mathbf{K}^2} \langle \exp(i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)) \rangle i$$

$$\langle \exp(i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)) \rangle = \int \exp S_1 \exp(\int \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{X}_t dt) \mathcal{D}\mathbf{X}_t / \int \exp S_1 \mathcal{D}\mathbf{X}_t \tag{1.14}$$

$\mathbf{f}(t) = i\mathbf{K}(\delta(t-\tau) - \delta(t-\sigma))$  に注意して, (1.14) の経路積分は前と

同様にして、次の Lagrangian  $L'$

$$L' = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{r}})^2 + \frac{2C_1}{\omega_1^3} (\dot{\mathbf{R}}_1)^2 - \frac{2C_1}{\omega_1} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)^2 + \frac{2C_2}{\omega_2^3} (\dot{\mathbf{R}}_2)^2 - \frac{2C_2}{\omega_2} (\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)^2 + \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{r} \quad (1.15)$$

についての経路積分におきかえられる。Iと同様パラメーター  $v_{\pm}$  を導入する。 $v_{\pm}$  は I の (2.9c), (2.9d) で定義される。 $L'$  を対角化するため、 $\mathbf{r}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  より変数変換して、 $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3$  へうつる。

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{y}_1 - \frac{(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - \mathbf{v}_-^2)}{\mathbf{v}_+^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_2 - \frac{(\mathbf{v}_-^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_-^2 - \omega_2^2)}{\mathbf{v}_-^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_3 \\ \mathbf{R}_1 &= \mathbf{y}_1 + \frac{\omega_1^2(\omega_1^2 - \mathbf{v}_-^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_2^2)}{\mathbf{v}_+^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_2 + \frac{\omega_1^2(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_-^2 - \omega_2^2)}{\mathbf{v}_-^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_3 \\ \mathbf{R}_2 &= \mathbf{y}_1 + \frac{\omega_2^2(\omega_1^2 - \mathbf{v}_-^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)}{\mathbf{v}_+^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_2 + \frac{\omega_2^2(\mathbf{v}_-^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)}{\mathbf{v}_-^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{y}_3 \end{aligned} \quad (1.16)$$

Lagrangian  $L'$  は

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2} \frac{\mathbf{v}_+^2 \mathbf{v}_-^2}{\omega_1^2 \omega_2^2} (\dot{\mathbf{y}}_1)^2 + \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_2^2)(\mathbf{v}_-^2 - \omega_1^2)^2}{\mathbf{v}_+^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} (\dot{\mathbf{y}}_2)^2 \\ &+ \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{v}_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - \mathbf{v}_-^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)^2}{\mathbf{v}_-^2(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} (\dot{\mathbf{y}}_3)^2 \\ &- \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{v}_+^2 - \omega_2^2)(\mathbf{v}_+^2 - \omega_1^2)(\mathbf{v}_-^2 - \omega_1^2)^2}{(\mathbf{v}_+^2 - \mathbf{v}_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} (\mathbf{y}_2)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2} \frac{(\nu_-^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - \nu_-^2)(\nu_+^2 - \omega_1^2)^2}{(\nu_+^2 - \nu_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} (\mathbf{y}_3)^2 + \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_1 \\
 & -\frac{(\nu_+^2 - \omega_1^2)(\nu_+^2 - \omega_2^2)(\omega_1^2 - \nu_-^2)}{\nu_+^2(\nu_+^2 - \nu_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_2 + \frac{(\omega_1^2 - \nu_-^2)(\nu_+^2 - \omega_1^2)(\nu_-^2 - \omega_2^2)}{\nu_-^2(\nu_+^2 - \nu_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_3
 \end{aligned} \tag{1.17}$$

となる。この Lagrangian によって決定される運動方程式は、

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \mathbf{y}_1}{dt^2} &= -\frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{\nu_+ \nu_-} \mathbf{f} & \mathbf{y}_1(0) &= \mathbf{y}_1(\beta) = \mathbf{y}_1 \\
 \frac{d^2 \mathbf{y}_2}{dt^2} &= \nu_+^2 \mathbf{y}_2 + \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{\omega_1^2 - \nu_-^2} \mathbf{f} & \mathbf{y}_2(0) &= \mathbf{y}_2(\beta) = \mathbf{y}_2 \\
 \frac{d^2 \mathbf{y}_3}{dt^2} &= \nu_-^2 \mathbf{y}_3 + \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{\omega_1^2 - \nu_+^2} \mathbf{f} & \mathbf{y}_3(0) &= \mathbf{y}_3(\beta) = \mathbf{y}_3
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

(1.18) の解を用いて  $\langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)] \rangle$  は

$$\begin{aligned}
 & \langle \exp[i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)] \rangle_{\mathbf{y}_1 \mathbf{y}_2 \mathbf{y}_3; \beta} \\
 &= \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{\nu_+^2 \nu_-^2}{\omega_1^2 \omega_2^2} \mathbf{y}_1 (\dot{\mathbf{y}}_1(\beta) - \dot{\mathbf{y}}_1(0)) + \frac{1}{2} \int_0^\beta \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_1 dt \right] \\
 & \times \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(\nu_+^2 - \omega_1^2)(\nu_+^2 - \omega_2^2)(\nu_-^2 - \omega_1^2)^2}{\nu_+^2(\nu_+^2 - \nu_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} \mathbf{y}_2 (\dot{\mathbf{y}}_2(\beta) - \dot{\mathbf{y}}_2(0)) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{1}{2} \frac{(\nu_+^2 - \omega_2^2)(\nu_+^2 - \omega_1^2)(\omega_1^2 - \nu_-^2)}{\nu_+^2(\nu_+^2 - \nu_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \int_0^\beta \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_2 dt \right]
 \end{aligned}$$

[An Improvement of the Feynman  
Action in the Theory of PolaronII]

$$\begin{aligned} \times \exp \left[ -\frac{1}{2} \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)(v_+^2 - \omega_1^2)^2}{v_-^2(v_+^2 - v_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2} \mathbf{y}_3(\dot{\mathbf{y}}_3(\beta) - \dot{\mathbf{y}}_3(0)) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)(v_+^2 - \omega_1^2)}{v_-^2(v_+^2 - v_-^2)(\omega_1^2 - \omega_2^2)} \int_0^\beta \mathbf{f} \cdot \mathbf{y}_3 dt \right] \end{aligned} \quad (1.19)$$

$\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3$  を  $\mathbf{r}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  におきかえ  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  について積分すると,

$$\begin{aligned} < \exp [i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)] >_{\mathbf{r}, \mathbf{r}} \\ &= \exp \left( -\frac{\mathbf{K}^2}{2} \left[ \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+ v_-} |\tau - \sigma| \left\{ 1 - \frac{|\tau - \sigma|}{\beta} \right\} \right. \right. \\ &+ \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+^3(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \coth \left( \frac{v_+ \beta}{2} \right) (1 - \text{ch } v_+ |\tau - \sigma|) + \text{sh } v_+ |\tau - \sigma| \right\} \\ &+ \left. \left. \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{v_-^3(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \coth \left( \frac{v_- \beta}{2} \right) (1 - \text{ch } v_- |\tau - \sigma|) + \text{sh } v_- |\tau - \sigma| \right\} \right] \right) \end{aligned} \quad (1.20)$$

この結果は  $\mathbf{r}$  に依存しない。又  $\mathbf{K} = 0$  で両辺一致し、正しく規格化されていることがわかる。従って  $A$  は,

$$\begin{aligned} A &= \frac{\alpha}{2\sqrt{2}} \int \frac{d\mathbf{K}}{2\pi^2 \mathbf{K}^2} \int_0^\beta d\tau d\sigma \left( \frac{e^\beta}{e^\beta - 1} e^{-|\tau - \sigma|} + \frac{e^{|\tau - \sigma|}}{e^\beta - 1} \right) < \exp [i\mathbf{K}(\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_\sigma)] > \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \beta \frac{e^\beta}{e^\beta - 1} \int_0^\beta d\tau e^{-\tau} [G(\tau; \beta)]^{-1/2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

$$\begin{aligned} G(\tau; \beta) &= \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+^2(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ 1 - e^{-v_+ \tau} + \left( 1 - \coth \frac{v_+ \beta}{2} \right) (\text{ch } v_+ \tau - 1) \right\} \\ &+ \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{v_-^3(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ 1 - e^{-v_- \tau} + \left( 1 - \coth \frac{v_- \beta}{2} \right) (\text{ch } v_- \tau - 1) \right\} \end{aligned}$$

岡本謙一

$$+ \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+ v_-} \tau \left(1 - \frac{\tau}{\beta}\right) \quad (1.22)$$

(1.20) を  $\mathbf{K}$  のべきに展開することにより  $\mathbf{K}^2$  の係数を比較して  $\langle (\mathbf{X}_\tau - \mathbf{X}_0)^2 \rangle$  も得られる。従って、 $B$ ,  $C$  は各々

$$B = \frac{3C_1\beta}{\omega_1} \left\{ \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \frac{(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+} \coth\left(\frac{v_+\beta}{2}\right) - \frac{(v_-^2 - \omega_2^2)}{v_-} \coth\left(\frac{v_-\beta}{2}\right) \right\} - \frac{2\omega_2^2}{\beta v_+ v_-} \right\} \quad (1.23)$$

$$C = \frac{3C_2\beta}{\omega_2} \left\{ \frac{1}{(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)}{v_+} \coth\left(\frac{v_+\beta}{2}\right) - \frac{(v_-^2 - \omega_1^2)}{v_-} \coth\left(\frac{v_-\beta}{2}\right) \right\} - \frac{2\omega_1^2}{\beta v_+ v_-} \right\} \quad (1.24)$$

となる。

$Z_{S_1} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{S_1}(\mathbf{X}, \mathbf{X}; \beta) d\mathbf{X}$  を求めるため、trial action  $S_1$  において、 $C_1 \rightarrow C_1 r$ ,  $C_2 \rightarrow C_2 r$  とおきかえる。

$$Z_{S_1} = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{X} \int_0^\beta \exp \left[ -\frac{1}{2} \int_0^\beta \left( \frac{d\mathbf{X}}{dt} \right)^2 dt - \frac{C_1}{2} r \int_0^\beta \int_0^\beta dt ds (\dots\dots) - \frac{C_2}{2} r \int_0^\beta \int_0^\beta dt ds (\dots\dots) \right] \mathcal{D}\mathbf{X}_t \quad (1.25)$$

従って

$$\frac{\partial}{\partial r} \ln Z_{S_1} = -\frac{1}{r} (B + C) \quad (1.26)$$

が得られる。 $B$ ,  $C$  は  $v_+$ ,  $v_-$ ,  $C_1$ ,  $C_2$  を通して  $r$  に依存している。(1.26) を  $r$  で積分することにより、

$$\ln Z_{S_1} = - \int_0^1 \frac{dr}{r} (B+C) - \frac{3}{2} \ln(2\pi\beta) \quad (1.27)$$

(1.27) の積分は、一見やっかいだが、初等的な計算で実行できる。その結果

$$\begin{aligned} \ln Z_{S_1} = & -3 \ln \left| \frac{\text{sh}\left(\frac{v_+\beta}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\omega_1\beta}{2}\right)} \right| - 3 \ln \left| \frac{\text{sh}\left(\frac{v_-\beta}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\omega_2\beta}{2}\right)} \right| + 3 \ln \left| \frac{v_+v_-}{\omega_1\omega_2} \right| \\ & - \frac{3}{2} \ln(2\pi\beta) \end{aligned} \quad (1.28)$$

従って (1.21), (1.23), (1.24), (1.28) より

$$\begin{aligned} F_{\text{trial}} = & \frac{3}{\beta} \ln \left| \frac{\text{sh}\left(\frac{v_+\beta}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\omega_1\beta}{2}\right)} \right| + \frac{3}{\beta} \ln \left| \frac{\text{sh}\left(\frac{v_-\beta}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\omega_1\beta}{2}\right)} \right| - \frac{3}{\beta} \ln \left| \frac{v_+v_-}{\omega_1\omega_2} \right| \\ & + \frac{3}{2\beta} \ln(2\pi\beta) - \frac{3}{2\beta} \left( \frac{\omega_1^2 \omega_2^2}{v_+^2 v_-^2} - 1 \right) \\ & - \frac{3}{4} \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{(v_+^2 - v_-^2)v_+} \coth\left(\frac{v_+\beta}{2}\right) - \frac{3}{4} \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{(v_+^2 - v_-^2)v_-} \coth\left(\frac{v_-\beta}{2}\right) \\ & - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{e^\beta}{e^{\beta-1}} \int_0^\beta d\tau e^{-\tau} [G(\tau; \beta)]^{-1/2} \end{aligned} \quad (1.29)$$

が得られる。 $\beta \rightarrow \infty$  で我々が I で求めたエネルギーの表式と一致する。又、 $C_2 \rightarrow 0$  の極限をとると、 $v_- \rightarrow \omega_2$ ,  $v_+ \rightarrow v_1$  で

$$F_{\text{trial}} \rightarrow \frac{3}{\beta} \ln \left| \frac{\text{sh}\left(\frac{v_1\beta}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{\omega_1\beta}{2}\right)} \right| - \frac{3}{\beta} \ln \left| \frac{v_1}{\omega_1} \right| + \frac{3}{2\beta} \ln(2\pi\beta)$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{3}{4} \frac{(v_1^2 - \omega_1^2)}{v_1} \coth\left(\frac{v_1 \beta}{2}\right) - \frac{3}{2\beta} \left(\frac{\omega_1^2}{v_1^2} - 1\right) \\
 & - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{e^\beta}{e^{\beta-1}} v_1 \int_0^\beta d\tau e^{-\tau} \times \left[ \frac{1}{v_1} (v_1^2 - \omega_1^2) \left\{ 1 - e^{-v_1 \tau} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \left(1 - \coth\frac{v_1 \beta}{2}\right) (\operatorname{ch} v_1 \tau - 1) \right\} + \omega_1^2 \tau \left(1 - \frac{\tau}{\beta}\right) \right]^{-1/2}
 \end{aligned}$$

となり Osaka と一致する。

エネルギーの方は,  $E = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_{\text{trial}})$  より

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{3}{2\beta} + \frac{3}{2} v_+ \coth\left(\frac{v_+ \beta}{2}\right) - \frac{3}{2} \omega_1 \coth\left(\frac{\omega_1 \beta}{2}\right) + \frac{3}{2} v_- \coth\left(\frac{v_- \beta}{2}\right) \\
 & - \frac{3}{2} \omega_2 \coth\left(\frac{\omega_2 \beta}{2}\right) - \frac{3}{4} \frac{(v_+^2 - \omega_1^2)(v_+^2 - \omega_2^2)}{v_+(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \coth\left(\frac{v_+ \beta}{2}\right) \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\beta}{2} v_+ \operatorname{cosech}^2\left(\frac{v_+ \beta}{2}\right) \right\} \\
 & - \frac{3}{4} \frac{(\omega_1^2 - v_-^2)(v_-^2 - \omega_2^2)}{v_-(v_+^2 - v_-^2)} \left\{ \coth\left(\frac{v_- \beta}{2}\right) - \frac{\beta}{2} v_- \operatorname{cosech}^2\left(\frac{v_- \beta}{2}\right) \right\} \\
 & - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{e^\beta}{e^{\beta-1}} \left(1 - \frac{\beta}{e^{\beta-1}}\right) \int_0^{\sqrt{\beta/2}} dy y (e^{-y^2} + e^{-(\beta-y^2)}) [G(y^2; \beta)]^{-1/2} \\
 & - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{e^\beta}{e^{\beta-1}} \beta \left\{ -\int_0^{\sqrt{\beta/2}} dy y (e^{-y^2} + e^{-(\beta-y^2)}) [G(y^2; \beta)]^{-1/2} \frac{\partial}{\partial \beta} [G(y^2; \beta)] \right. \\
 & \quad \left. + e^{-\frac{\beta}{2}} [G(\frac{\beta}{2}; \beta)]^{-1/2} - 2 \int_0^{\sqrt{\beta/2}} dy y [G(y^2; \beta)]^{-1/2} e^{-(\beta-y^2)} \right\} \quad (1.30)
 \end{aligned}$$

となる。

$T = 0^\circ\text{K}$  の場合, 我々は4つのパラメーターを用いて Feynman より低いエネルギーの上限を得た。有限温度の場合, 変分原理は, 自由エネルギーに対して成立していて, エネルギーに対しては, 明らかではない。しかし  $T = 0^\circ\text{K}$

[An Improvement of the Feynman  
Action in the Theory of Polaron II]

の場合同様，我々の結果は Osaka 理論を極限状態 ( $C_2 \rightarrow 0$ ) で含んでいるゆえ，2つのパラメーターの Osaka 理論を補正することになると思う。具体的な数値計算の結果は，後に与えられるだろう。