

H – гамильтониан в лабораторной системе, \mathcal{H} – гамильтониан в молекулярной системе.

$$H = \mathcal{H} + \frac{1}{2\mu} P_x^2 + \frac{1}{2\mu} P_y^2 + \frac{1}{2\mu} P_z^2 \quad (1)$$

Рассмотрим выражение для вклада траектории $d\omega$ в спектральную функцию:

$$d\omega = \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dx_{cm} dy_{cm} dz_{cm} dP_x dP_y dP_z dR dp_R d\theta dp_\theta \quad (2)$$

$$J(\omega) \sim \frac{1}{\text{Norm}} \int \frac{d\omega}{dt} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{d}(t | R, p_R, \theta, p_\theta) \exp(-i\omega t) dt \right|^2 \quad (3)$$

$$\frac{d\omega}{dt} = \exp\left(-\frac{H}{kT}\right) dx_{cm} dy_{cm} dz_{cm} dP_x dP_y dP_z \frac{dR}{dt} dp_R d\theta dp_\theta = \quad (4)$$

$$= \frac{p_R}{\mu} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dx_{cm} dy_{cm} dz_{cm} dP_x dP_y dP_z dp_R d\theta dp_\theta \quad (5)$$

Нормировочный множитель Norm равен интегралу $d\omega$.

$$\text{Norm} = \int d\omega \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{Norm} &= \int dx_{cm} \int dy_{cm} \int dz_{cm} \int dP_x \int dP_y \int dP_z \int dR \int dp_R \int d\theta \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta = \\ &= V (2\pi M kT)^{3/2} \int dR \int dp_R \int d\theta \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta \end{aligned} \quad (7)$$

В выражении для спектральной функции (3) также можно проинтегрировать по переменным центра масс $x_{cm}, y_{cm}, z_{cm}, P_x, P_y, P_z$, что также приведет к множителям V и $(2\pi M kT)^{3/2}$. Сократив их в числителе и знаменателе, а также избавившись от эйлера угла θ , т.к. гамильтониан \mathcal{H} не зависит от него, приходим к

$$J(\omega) \sim \frac{\int dp_R \int \frac{p_R}{\mu} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(t | R, p_R, p_\theta) \exp(-i\omega t) dt \right|^2}{\int dR \int dp_R \int \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{kT}\right) dp_\theta} \quad (8)$$

Проведем анализ размерностей в этом выражении. Заметим, что отношение размерностей преобразованных интегралов $d\omega/dt$ и Norm равно c^{-1} .

$$\text{Dim} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(t | R, p_R, p_\theta) \exp(-i\omega t) dt \right|^2 = (\text{Кл} \cdot \text{м} \cdot \text{с})^2 \quad (9)$$

Коэффициент пропорциональности в (8) равен $\frac{1}{2\pi} \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ (основываясь на статье А.А.)

$$\text{Dim} [\epsilon_0^{-1}] = \text{Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{Кл}^{-2} \quad (10)$$

Полная размерность выражения для спектральной функции $J(\omega)$:

$$\text{Dim} J(\omega) = \text{с}^{-1} \cdot \text{Н} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{Кл}^{-2} \cdot \text{Кл}^2 \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^2 = \text{Дж} \cdot \text{м}^3 \cdot \text{с} \quad (11)$$