

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ  
И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего профессионального образования  
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**Д. И. Кадыров, К. Б. Циберкин**

**ФИЗИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ:  
ТЕОРИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА**

*Допущено методическим советом Пермского  
государственного национального исследовательского  
университета в качестве учебно-методического пособия  
для студентов, обучающихся по направлениям подготовки  
бакалавров «Физика», «Прикладные математика и физика»,  
«Нанотехнологии и микросистемная техника»  
и по направлению подготовки магистров «Физика»*



Пермь 2015

УДК 530.145:536.75

ББК 22.311

К13

**Кадыров Д.И., Циберкин К.Б.**

К13 Физика неравновесных процессов: теория линейного отклика: учебно-методическое пособие / Д.И. Кадыров, К.Б. Циберкин; Перм. гос. нац. исслед. ун-т. – Пермь, 2015. – 87 с.

ISBN 978-5-7944-2488-1

В пособии изложен математический аппарат теории линейного отклика. Рассмотрены понятия линейного отклика системы, функции отклика, релаксационной и корреляционной функции, восприимчивости системы, их основные свойства и теоремы о физических характеристиках систем. Приведены примеры вычисления функции отклика классической системы на периодическую внешнюю силу, электропроводности системы заряженных квантовых частиц, находящейся под действием переменного электрического и постоянного магнитного поля, теплопроводности сплошной среды. Представлен обзор основ формализма двухвременных функций Грина.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлениям подготовки бакалавров «Физика», «Прикладные математика и физика», «Нанотехнологии и микросистемная техника» и направлению подготовки магистров «Физика». Также будет полезно аспирантам направления «Физика и астрономия», специализирующимся по теоретической физике и физике конденсированных сред, и преподавателям дисциплин теоретической физики.

**УДК 530.145:536.75**

**ББК 22.311**

*Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Пермского государственного национального исследовательского университета*

*Рецензенты:* лаборатория кинетики анизотропных жидкостей ИМСС УрО РАН (зав. лабораторией – д. ф.-м. н., профессор **Ю.Л. Райхер**); м. н. с. лаборатории вычислительной гидродинамики ИМСС УрО РАН, к. ф.-м. н. **Л.С. Клименко**

*Издание подготовлено при финансовой поддержке Охапкина А.М.*

ISBN 978-5-7944-2488-1

© Кадыров Д.И., Циберкин К. Б., 2015

© Пермский государственный национальный  
исследовательский университет, 2015

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	5
1. СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР.....	7
1.1. След .....	7
1.2. Чистое состояние.....	9
1.3. Смешанное состояние.....	10
1.4. Временная эволюция статистического оператора .....	12
2. РЕАКЦИЯ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ....	13
2.1. Оператор временной эволюции .....	14
2.2. Теория возмущений для оператора временной эволюции .....	17
2.3. Линейный отклик .....	19
3. ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА .....	23
3.1. Способы представления .....	23
3.2. Соотношения симметрии.....	26
3.3. Тождество Кубо.....	27
4. РЕЛАКСАЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ .....	29
4.1. Отклик на ступенчатое воздействие.....	29
4.2. Свойства релаксационной функции .....	30
4.3. Соотношения симметрии.....	31
5. ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ.....	33
5.1. Восприимчивость .....	33
5.2. Изотермическая статическая восприимчивость.....	36
5.3. Поглощение .....	39
5.4. Соотношения Кронига–Крамерса.....	41
6. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ .....	46
6.1. Свойства корреляционной функции.....	46
6.2. Флуктуационно-диссипативная теорема .....	53
7. МОМЕНТЫ И АСИМПТОТИКИ .....	55

8. ПРИМЕРЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ВОСПРИИМЧИВОСТИ .....	57
8.1. Классический гармонический осциллятор .....	57
8.2. Электропроводность .....	59
8.3. Соотношение Эйнштейна–Смолуховского .....	65
8.4. Теплопроводность.....	67
9. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА.....	70
9.1. Определение функций Грина.....	70
9.2. Применение функций Грина в теории линейного отклика .....	72
9.3. Магнитная восприимчивость модели Гейзенберга.....	73
9.4. К вычислению функций Грина .....	76
СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	85

## ВВЕДЕНИЕ

Физика неравновесных процессов – раздел термодинамики и статистической физики. Она исследует явления, которые не могут быть описаны в рамках традиционного термодинамического подхода, оперирующего понятиями квазиравновесных процессов. В число таких явлений входят, в частности, процессы переноса массы, тепла, импульса, электрического заряда в конденсированных средах, действие на системы периодических внешних сил разнообразной природы.

Существенным достижением в развитии неравновесной термодинамики стал начавшийся в 1960–1970-х гг. синтез идей и математического аппарата квантовой механики, квантовой теории поля и статистической физики. Это привело к возникновению квантовой теории систем многих частиц. Совокупный математический аппарат теории многих частиц – метод вторичного квантования, представление чисел заполнения, метод функций Грина, диаграммная техника и основанные на них способы реализации теории возмущений позволяют эффективно решать разнообразные задачи квантовой физики конденсированных сред, опираясь на сведения об их равновесных состояниях, доступные из элементарной термодинамики и квантовой механики.

В данном учебно-методическом пособии последовательно изложена теория линейного отклика, разработанная Р. Кубо. Эта теория позволяет описывать реакцию системы на внешнее воздействие, которое приводит к незначительным отклонениям от состояния термодинамического равновесия. Теория Кубо имеет две важные особенности. Во-первых, она охватывает максимально широкий спектр физических явлений, поскольку основана только на общих свойствах функций комплексной переменной и операторов. Во-вторых, метод Кубо не требует использования математического аппарата высокого уровня сложности, свойственного непосредственно квантовой теории поля, но при этом позволяет приближённо вычислять функции Грина – основные математические объекты квантовой теории поля и теории многих частиц.

В пособии рассмотрены понятия линейного отклика системы, функции отклика, релаксационной и корреляционной функции, восприимчивости системы к периодическому и статическому воздействию, описаны их свойства.

Описан ряд конкретных физических задач. Вычислена функция отклика классического осциллятора с трением на действие периодической внешней силы. Подробно рассмотрено вычисление асимптотических свойств электропроводности квантовой системы заряженных частиц, находящейся под воздействием постоянного магнитного и переменного электрического поля. Показана универсальность формализма теории линейного отклика на примере вычисления тензора теплопроводности сплошной среды. Приводятся элементарные сведения о формализме двухвременных функций Грина для статистических систем. Дан краткий обзор простейших методов их вычисления на примере задачи электропроводности.

Учебно-методическое пособие предназначено для студентов старших курсов бакалавриата, обучающихся по направлениям «Физика», «Прикладная математика и физика», «Нанотехнологии и микросистемная техника», студентов магистратуры направления «Физика», и аспирантов, обучающихся по направлению «Физика и астрономия» и специализирующихся по теоретической физике и физике конденсированных сред, а также для преподавателей дисциплин курса теоретической физики и физики конденсированных сред.

# 1. СТАТИСТИЧЕСКИЙ ОПЕРАТОР

В данном разделе вводятся основные понятия и математические операции, используемые в статистической механике квантовых систем и необходимые для последующего изложения теории линейного отклика. Дается краткий обзор их основных свойств.

## 1.1. След

Система, описываемая точно определённым вектором состояния, соответствует идеальному случаю, когда описание является максимально полным. Такое описание отвечает заданию вполне определённых значений всех одновременно измеримых величин, характеризующих систему (такие величины коммутируют между собой). Данный набор величин называется *полным набором коммутирующих наблюдаемых* (или *совместных наблюдаемых*) и определяет базис пространства состояний системы.

*Следом* (или *шпуром*, от нем. *Spur* – след) произвольного оператора  $F$  называют сумму диагональных элементов его представителя (например квадратной матрицы). Пусть  $|a\rangle = |a_1 a_2 \dots a_n\rangle$  – общий собственный вектор *полного набора коммутирующих наблюдаемых*  $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ , принадлежащий собственным значениям  $a_1, a_2, \dots, a_n$ . Тогда представителем оператора в  $a$ -представлении  $F$  будет матрица

$$\langle a|F|a'\rangle = \langle a_1 a_2 \dots a_n|F|a'_1 a'_2 \dots a'_n\rangle. \quad (1.1)$$

Соответственно, след оператора

$$\text{Sp } F = \sum_a \langle a|F|a\rangle = \sum_{a_1 a_2 \dots a_n} \langle a_1 a_2 \dots a_n|F|a_1 a_2 \dots a_n\rangle. \quad (1.2)$$

Отметим, что в математических текстах в равной мере употребляются два обозначения следа:  $\text{Sp } F$  (от нем.) и  $\text{Tr } F$  (от англ. *trace* – след).

Ниже перечислены основные свойства следа и их доказательства:

1) след инвариантен относительно выбора представления. Пусть  $|b\rangle = |b_1 b_2 \dots b_m\rangle$  – общий собственный вектор другого полного набора коммутирующих наблюдаемых  $\beta = \beta_1, \beta_2 \dots \beta_m$ , принадлежащего собственным значениям  $b = b_1, b_2, \dots, b_m$ . Тогда переход от  $\alpha$  к  $\beta$ -представлению состоит в подстановке в исходный представитель разложения единицы по элементам нового базиса:

$$\sum_b |b\rangle\langle b| = \sum_{b_1 b_2 \dots b_m} |b_1 b_2 \dots b_m\rangle\langle b_1 b_2 \dots b_m| = 1. \quad (1.3)$$

Такой оператор называется *проектором* и выполняет проекцию подпространств друг в друга. Аналогично в  $\alpha$ -представлении

$$\sum_a |a\rangle\langle a| = 1. \quad (1.4)$$

Подстановка единицы даёт

$$\begin{aligned} \text{Sp } F &= \sum_a \langle a|F|a\rangle = \sum_{a,b} \langle a|F|b\rangle\langle b|a\rangle = \\ &= \sum_{b,a} \langle b|a\rangle\langle a|F|b\rangle = \sum_b \langle b|F|b\rangle; \end{aligned} \quad (1.5)$$

2) след инвариантен относительно перестановки двух операторных множителей:

$$\text{Sp}\{FG\} = \text{Sp}\{GF\}. \quad (1.6)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{FG\} &= \sum_a \langle a|FG|a\rangle = \sum_{a,a'} \langle a|F|a'\rangle\langle a'|G|a\rangle = \\ &= \sum_{a',a} \langle a'|G|a\rangle\langle a|F|a'\rangle = \sum_{a'} \langle a'|GF|a'\rangle = \text{Sp}\{GF\}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Поэтому след инвариантен и относительно циклической перестановки операторов

$$\text{Sp}\{FGH\} = \text{Sp}\{F(GH)\} = \text{Sp}\{GHF\} = \text{Sp}\{HFG\}; \quad (1.8)$$



3) комплексное сопряжение следа приводит к следу эрмитово сопряжённого оператора. Используя определение такого оператора

$$\langle b|\alpha^\dagger|a\rangle = (\langle a|\alpha|b\rangle)^*, \quad (1.9)$$

непосредственно получим

$$(\text{Sp } F)^* = \sum_a (\langle a|F|a\rangle)^* = \sum_a \langle a|F^\dagger|a\rangle = \text{Sp } F^\dagger. \quad (1.10)$$

Напомним, что *эрмитово сопряжение* оператора (1.9) технически включает его одновременное транспонирование и комплексное сопряжение;

4) след инвариантен относительно преобразования подобия:

$$\text{Sp } F = \text{Sp}\{F(T^{-1}T)\} = \text{Sp}\{TF T^{-1}\}. \quad (1.11)$$

## 1.2. Чистое состояние

Состояние, которому может быть поставлен в соответствие *вектор состояния*, называется *чистым состоянием*. Пусть  $|v\rangle$  – нормированный вектор состояния (т.е. выполнено условие  $\langle v|v\rangle=1$ ). Тогда среднее значение произвольной наблюдаемой  $F$  в  $|v\rangle$ -представлении вычисляется по известной формуле:

$$\langle F\rangle(v) = \langle v|F|v\rangle. \quad (1.12)$$

С помощью разложения единицы (1.4) среднее может быть переписано в терминах следа:

$$\langle F\rangle(v) = \sum_a \langle v|F|a\rangle \langle a|v\rangle \equiv \sum_a \langle v|p_v F|a\rangle = \text{Sp}\{p_v F\}, \quad (1.13)$$

где  $p_v$  – *статистический оператор чистого состояния*:

$$p_v = |v\rangle\langle v|. \quad (1.14)$$

Он обладает следующими свойствами:

1) оператор  $p_v$  – эрмитов:

$$p_v = p_v^\dagger. \quad (1.15)$$

Действительно, по определению сопряжённого оператора (1.9)

$$\begin{aligned} \langle b | p_v^\dagger | a \rangle &= \langle b | \{ |v\rangle \langle v| \}^\dagger | a \rangle = (\langle a | p_v | b \rangle)^* \\ &= (\langle a | v \rangle \langle v | b \rangle)^* = \langle b | v \rangle \langle v | a \rangle = \langle b | p_v | a \rangle. \end{aligned} \quad (1.16)$$

В силу произвольности векторов  $A, B$  выполняется эрмитовость оператора чистого состояния;

2) оператор  $p_v$  положительно определён. Для произвольного вектора  $f$  выполнено

$$\langle f | p_v | f \rangle = \langle f | v \rangle \langle v | f \rangle = \|\langle v | f \rangle\|^2 \geq 0; \quad (1.17)$$

3) оператор  $p_v$  нормирован. Согласно (1.12) и (1.13):

$$\text{Sp } p_v = \text{Sp} \{ I \cdot p_v \} = \langle I \rangle (v) = \langle v | v \rangle = 1, \quad (1.18)$$

где  $I$  – единичный оператор.

### 1.3. Смешанное состояние

Со *смешанным состоянием* квантовомеханической системы, имеющей  $m$  чистых состояний, сопоставляется *статистический оператор*  $\rho$ , который является линейной суперпозицией статистических операторов чистых нормированных состояний:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_m w_m p_{v_m}, \\ p_{v_m} &= |v_m\rangle \langle v_m|. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Из определения (1.19) и свойств статистического оператора чистого состояния непосредственно выводятся основные свойства оператора  $\rho$ :

1) статистический оператор смешанного состояния эрмитов, если коэффициенты  $w_m$  вещественны. Действительно, пусть  $w_m^* = w_m$ , тогда

$$\rho^\dagger = \sum_m w_m^* P_{vm}^\dagger = \sum_m w_m P_{vm} = \rho; \quad (1.20)$$

2) оператор  $\rho$  положительно определен, если все  $w_m$  неотрицательны:

$$\langle f | \rho | f \rangle = \sum_m w_m \langle f | P_{vm} | f \rangle \geq 0, \quad (1.21)$$

т.к. оператор чистого состояния положительно определен;

3) если  $\sum_m w_m = 1$ , то статистический оператор оказывается нормирован на единицу:

$$\text{Sp} \rho = \sum_m w_m \text{Sp} P_{vm} = 1, \quad (1.22)$$

т.к. оператор чистого состояния нормирован;

4) среднее значение произвольной наблюдаемой  $F$  в смешанном состоянии, характеризуемом оператором  $\rho$ , даётся шпуром

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \text{Sp} \{ \rho F \} = \sum_m w_m \text{Sp} \{ P_{vm} F \} = \\ &= \sum_m w_m \langle F \rangle (P_{vm}). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Таким образом, свойства статистического оператора позволяют интерпретировать коэффициенты  $w_m$  как вероятности реализации чистого состояния  $|v_m\rangle$  при наблюдении за системой, пребывающей в некотором смешанном состоянии  $|v\rangle$ . Данный подход используется в ситуации, когда получить полное описание системы и выделить полный набор коммутирующих наблюдаемых невозможно. Неполный набор наблюдаемых величин позволяет лишь указать вероятности пребывания системы в отдельных чистых состояниях. Статистический оператор смешанного состояния в литературе обычно называется *матрицей плотности*.

## 1.4. Временная эволюция статистического оператора

В картине Шрёдингера векторы и совекторы состояний системы меняются во времени согласно нестационарному уравнению Шрёдингера:

$$\begin{aligned}i\hbar |\dot{v}_m\rangle(t) &= \mathcal{H}(t)|v_m\rangle(t), \\ -i\hbar \langle \dot{v}_m|(t) &= \langle v_m|(t)\mathcal{H}(t),\end{aligned}\tag{1.24}$$

где  $\mathcal{H}(t)$  – гамильтониан системы. Поэтому статистический оператор (1.19) эволюционирует во времени согласно уравнению

$$\begin{aligned}i\hbar \dot{\rho}(t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \sum_m w_m |v_m\rangle(t)\langle v_m|(t) = \\ &= \mathcal{H}(t)\rho(t) - \rho(t)\mathcal{H}(t) = -[\rho(t), \mathcal{H}(t)]_-.\end{aligned}\tag{1.25}$$

В правой части уравнения возникает коммутатор статистического оператора и гамильтониана. Полученное уравнение известно как *уравнение фон Неймана*:

$$i\hbar \dot{\rho}(t) = [\mathcal{H}(t), \rho(t)]_-,\tag{1.26}$$

или, в более удобной *системе естественных единиц*, где  $\hbar=1$ ,

$$\dot{\rho}(t) = -i[\mathcal{H}(t), \rho(t)]_-.\tag{1.27}$$

Данное уравнение иногда называют *квантовым уравнением Лиувилля*, по аналогии с уравнением для классических гамильтоновых систем, где правая часть уравнения содержит скобку Пуассона для функции распределения состояний классической системы в фазовом пространстве и её функции Гамильтона. Дальнейшее описание в настоящем пособии дано преимущественно для квантовомеханических нерелятивистских систем, однако по возможности будет показана универсальность рассматриваемого формализма и получены некоторые результаты, в том числе и для классических задач.

Сделаем небольшое отступление в связи с упомянутой выше системой естественных единиц. Впервые она была предложена М. Планком в 1899 г. (окончательный вид приняла в

1906 г.), так как широко используемые СГС, метрическая система (в 1960 г. оформленная Генеральной конференцией по мерам и весам как СИ), а также национальные системы во многом являются искусственными. Лежащие в их основе единицы исторически привязаны к антропометрическим данным (например, фут, сажень), географическим (метр), астрономическим (секунда) и иным уже существовавшим единицам (в частности, шкала температур Кельвина была введена с опорой на шкалу Цельсия).

Естественная система основана на пяти фундаментальных константах – постоянной Планка  $\hbar$ , скорости света в вакууме  $c$ , гравитационной постоянной  $G$ , постоянной Больцмана  $k_B$  и постоянной Кулона  $k=(4\pi\epsilon_0)^{-1}$ , где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая постоянная. Все они приравниваются единице и отсюда выводятся размерности основных величин, известные сегодня под названием *планковских единиц*. Эта система непосредственно показывает соотношение между фундаментальными взаимодействиями в различных процессах, а также позволяет существенно сократить число параметров в уравнениях, что обусловило её широкое применение в квантовой теории поля и современной физике элементарных частиц.

## 2. РЕАКЦИЯ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

Далее в этом и последующих разделах последовательно излагается теория линейного отклика, разработанная японским физиком Рёго Кубо (1920–1995, профессор университета Токио) в 1950–60-х гг. для описания процессов и явлений неравновесной статистической механики. Основным результатом данной теории выступает единая методика вычисления кинетических коэффициентов для самых разнообразных систем, таких как диэлектрическая проницаемость и магнитная восприимчивость в переменных полях, электропроводность, теплопроводность, коэффициент диффузии, вязкость и др.

Необходимость развития такого метода была обусловлена тем, что «традиционные» способы вычисления кинетических

коэффициентов базируются на решении уравнения для эволюции функции распределения (например *уравнение Больцмана*), которое обычно имеет точное решение только в простейших случаях и поэтому практически всегда рассматривается в некотором приближении с наложением ряда дополнительных ограничений на свойства системы. Более того, само по себе кинетическое уравнение является приближённым, в то время как исследуемые системы далеко не всегда отвечают использованным в модели допущениям. В наибольшей мере это проявляется при решении задач с межчастичным взаимодействием. Подход Кубо связывает кинетические коэффициенты с флуктуациями потоков (вещества, импульса, тепла) и соответствующими временными корреляционными функциями.

Разработанная Кубо теория является удобным и эффективным средством описания статистических неравновесных систем. Особенное развитие она получила в 1960–70-х гг. в результате синтеза идей и методов статистической физики и квантовой теории поля, которая к тому времени также достигла выдающихся результатов. Оказалось, что основные объекты формализма теории линейного отклика могут быть рассмотрены в терминах функций распространения частиц и квазичастиц (функций Грина), для вычисления которых с большим успехом применяется диаграммная техника, а также относительно простые приближённые аналитические методы.

Впоследствии Р. Кубо был удостоен медали Больцмана (высшая награда в области статистической физики, присуждается раз в три года Комиссией по статистической физике в составе Международного союза теоретической и прикладной физики) с формулировкой *«за его вклад в теорию неравновесной статистической механики и за теорию флуктуационных явлений»*.

## **2.1. Оператор временной эволюции**

Итак, в картине Шрёдингера временная эволюция статистического оператора описывается уравнением Неймана

(1.27). Используя для его записи *оператор Лиувилля*, определяемый соотношением

$$L(t)G = [\mathcal{H}(t), G]_-, \quad (2.1)$$

получим *уравнение Лиувилля*:

$$\dot{\rho}(t) = -iL(t)\rho(t). \quad (2.2)$$

Формальное решение уравнения Лиувилля с оператором временной эволюции записывается следующим образом:

$$\rho(t) = \mathfrak{L}(t)\mathfrak{L}(t_0)^{-1}\rho(t_0). \quad (2.3)$$

*Оператор временной эволюции*  $\mathfrak{L}(t)$  удовлетворяет задаче Коши:

$$\begin{aligned} \dot{\mathfrak{L}}(t) &= -iL(t)\mathfrak{L}(t), \\ \mathfrak{L}(0) &= 1. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Будем искать решение в виде ряда

$$\mathfrak{L}(t) = \mathfrak{L}_0(t) + \sum_{n=1} \mathfrak{L}_n(t), \quad (2.5)$$

где  $\mathfrak{L}_0(t) = 1$ , а для  $\mathfrak{L}_n$  выполняются рекуррентные соотношения

$$\mathfrak{L}_n(t) = -i \int_{t_0}^t d\tau L(\tau) \mathfrak{L}_{n-1}(\tau). \quad (2.6)$$

Интегрируя (2.4) по времени от 0 до  $t$ , получим

$$\mathfrak{L}(t) = 1 - i \int_0^t dt' L(t') \mathfrak{L}(t'). \quad (2.7)$$

Отсюда и вытекает вышеприведённое рекуррентное соотношение. Запишем его при различных значениях  $n$ :

$$\begin{aligned} n=1: \quad \mathfrak{L}_1(t) &= -i \int_0^t d\tau L(\tau), \\ n=2: \quad \mathfrak{L}_2(t) &= -i \int_0^t d\tau L(\tau) \mathfrak{L}_1(\tau) = (-i)^2 \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 L(\tau_1) L(\tau_2), \end{aligned} \quad (2.8)$$

и т.д. В произвольном порядке разложения

$$\mathcal{L}_n(t) = (-i)^n \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n L(\tau_1) L(\tau_2) \dots L(\tau_n). \quad (2.9)$$

Обратный оператор временной эволюции  $\mathcal{L}^{-1}(t)$  определяется условием

$$\mathcal{L}^{-1}(t) \mathcal{L}(t) = \mathcal{L}(t) \mathcal{L}^{-1}(t) = 1 \quad (2.10)$$

и удовлетворяет уравнению

$$\dot{\mathcal{L}}(t) \mathcal{L}^{-1}(t) + \mathcal{L}(t) \dot{\mathcal{L}}^{-1}(t) = 0, \quad (2.11)$$

из которого следует

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{L}}^{-1}(t) &= -\mathcal{L}^{-1}(t) \dot{\mathcal{L}}(t) \mathcal{L}^{-1}(t) = i \mathcal{L}^{-1}(t) L(t), \\ \mathcal{L}^{-1}(0) &= 1. \end{aligned} \quad (2.12)$$

При  $t > t_0$  временная эволюция статистического оператора от момента  $t_0$  до момента  $t$  описывается оператором

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t) \mathcal{L}^{-1}(t_0) &= T \exp \left( -i \int_{t_0}^t d\tau L(\tau) \right) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n L(\tau_1) L(\tau_2) \dots L(\tau_n) \equiv \mathcal{L}(t, t_0), \end{aligned} \quad (2.13)$$

где  $T$  – оператор хронологического упорядочения, который расставляет множители в порядке убывания времени слева направо. При  $t \rightarrow 0$  и  $t_0 < 0$  получим решение задачи Коши для обратного оператора  $\mathcal{L}^{-1}(t)$ .

Итак, операторы временной эволюции системы определяются задачами Коши:

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{L}}(t) &= -iL(t) \mathcal{L}(t), \\ \mathcal{L}(0) &= 1, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{L}}^{-1}(t) &= i \mathcal{L}^{-1}(t) L(t), \\ \mathcal{L}^{-1}(0) &= 1. \end{aligned} \quad (2.15)$$



## 2.2. Теория возмущений для оператора временной эволюции

Предположим, что возможно разбиение гамильтониана квантовой системы на невозмущённую часть и возмущение. Аналогично предполагаем и разбиение оператора Лиувилля:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(t) &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t), \\ L(t) &= L_0 + L_1(t).\end{aligned}\tag{2.16}$$

Пусть также и оператор временной эволюции можно записать в виде произведения

$$\mathfrak{L}(t) = \mathfrak{L}^{(0)}(t)\mathfrak{L}^{(1)}(t).\tag{2.17}$$

Уравнение для невозмущённой части будет следующим:

$$\begin{aligned}\dot{\mathfrak{L}}^{(0)}(t) &= -iL_0\mathfrak{L}^{(0)}(t), \\ \mathfrak{L}^{(0)}(0) &= 1.\end{aligned}\tag{2.18}$$

Его решение очевидно:

$$\mathfrak{L}^{(0)}(t) = e^{-itL_0}.\tag{2.19}$$

Множитель  $\mathfrak{L}^{(1)}(t)$  обусловлен возмущением системы и для него выполняется

$$\mathfrak{L}^{(1)}(t) = \mathfrak{L}^{(0)-1}(t)\mathfrak{L}(t) = e^{itL_0}\mathfrak{L}(t).\tag{2.20}$$

Соответственно, производная по времени от оператора  $\mathfrak{L}^{(1)}(t)$ :

$$\begin{aligned}\dot{\mathfrak{L}}^{(1)}(t) &= ie^{itL_0}L_0\mathfrak{L}(t) + e^{itL_0}\dot{\mathfrak{L}}(t) = \\ &= ie^{itL_0}L_0\mathfrak{L}(t) - e^{itL_0}L(t)\mathfrak{L}(t).\end{aligned}\tag{2.21}$$

Используя теперь разложение оператора Лиувилля (2.16) и оператора временной эволюции (2.17), получим уравнение для возмущённой части последнего:

$$\begin{aligned}\dot{\mathfrak{L}}^{(1)}(t) &= -ie^{itL_0}L_1(t)e^{-itL_0}\mathfrak{L}^{(1)}(t), \\ \mathfrak{L}^{(1)}(0) &= 1.\end{aligned}\tag{2.22}$$

Решение уравнения для возмущённой части оператора имеет вид

$$\begin{aligned}
\mathfrak{L}^{(1)}(t) &= T \exp \left( -i \int_0^t d\tau L_1(\tau, \tau) \right) = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n L_1(\tau_1, \tau_1) L_1(\tau_2, \tau_2) \dots L_1(\tau_n, \tau_n),
\end{aligned} \tag{2.23}$$

где  $L_1(t, t_1) = e^{it_1 L_0} L_1(t) e^{-it_1 L_0}$  – представление взаимодействия для оператора  $L_1(t)$ . Заметим, что в силу определения оператора Лиувилля (2.1) и следующего из него соотношения

$$\begin{aligned}
e^{itL_0} G &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n t^n}{n!} L_0^n G = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n t^n}{n!} \underbrace{\left[ \mathcal{H}_0, \dots, \left[ \mathcal{H}_0, \left[ \mathcal{H}_0, G \right]_- \right]_- \right]_-}_{n \text{ коммутаторов}} = \\
&= e^{it\mathcal{H}_0} G e^{-it\mathcal{H}_0} = G(t)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

выполняется

$$\begin{aligned}
e^{itL_0} G &= G(t), \\
e^{-itL_0} F &= F(-t),
\end{aligned} \tag{2.25}$$

и, соответственно,

$$e^{itL_0} G e^{-itL_0} F = G(t) F(-t). \tag{2.26}$$

В рамках теории возмущений оператор  $\mathfrak{L}(t) \mathfrak{L}_0^{-1}(t_0)$  представится следующим образом:

$$\mathfrak{L}(t, t_0) = \mathfrak{L}^{(0)}(t) \mathfrak{L}^{(1)}(t, t_0) \mathfrak{L}^{(0)-1}(t_0), \tag{2.27}$$

где

$$\begin{aligned}
\mathfrak{L}^{(1)}(t, t_0) &= T \exp \left( -i \int_{t_0}^t d\tau L_1(\tau, \tau) \right) = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n L_1(\tau_1, \tau_1) L_1(\tau_2, \tau_2) \dots L_1(\tau_n, \tau_n).
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Дополнительно продемонстрируем, как осуществляется переход от суммы коммутаторов к представлению взаимодействия и обратно в соотношении (2.24). Продифференцируем оператор  $G(t)$  по времени несколько раз:

$$\begin{aligned}\dot{G}(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{i\mathcal{H}_0} G e^{-i\mathcal{H}_0} \right) = \\ &= i\mathcal{H}_0 e^{i\mathcal{H}_0} G e^{-i\mathcal{H}_0} - e^{i\mathcal{H}_0} G i\mathcal{H}_0 e^{-i\mathcal{H}_0} = i[\mathcal{H}_0, G(t)]_-, \quad (2.29) \\ \ddot{G}(t) &= i[\mathcal{H}_0, \dot{G}(t)]_- = i^2[\mathcal{H}_0, [\mathcal{H}_0, G(t)]_-]_- \dots\end{aligned}$$

Вполне очевидно, что  $n$ -ая производная  $G(t)$

$$\frac{d^n G}{dt^n}(t) = (-i)^n \underbrace{[\mathcal{H}_0, \dots [\mathcal{H}_0, [\mathcal{H}_0, G]_-]_-]_-}_{n \text{ коммутаторов}}. \quad (2.30)$$

Используя разложение в ряд Тейлора вблизи нуля и полагая, что  $G(0) = G$ , можем записать

$$\begin{aligned}G(t) &= G(0) + \dot{G}(0)t + \frac{1}{2}\ddot{G}(0)t^2 + \dots = \\ &= G + i[\mathcal{H}_0, G]_- t + \frac{i^2}{2}[\mathcal{H}_0, [\mathcal{H}_0, G]_-]_- + \dots = \quad (2.31) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n t^n}{n!} \underbrace{[\mathcal{H}_0, \dots [\mathcal{H}_0, [\mathcal{H}_0, G]_-]_-]_-}_{n \text{ коммутаторов}}.\end{aligned}$$

Данное тождество выполняется для произвольных операторов и нередко используется при решении разнообразных задач:

$$e^A G e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \underbrace{[A, \dots [A, [A, G]_-]_-]_-}_{n \text{ коммутаторов}}. \quad (2.32)$$

### 2.3. Линейный отклик

Предположим, что возмущение обусловлено действием на систему переменного поля  $\vec{F}(t)$ . Энергия взаимодействия с

этим полем запишется как дипольная составляющая потенциальной энергии

$$\mathcal{H}_i(t) = -\vec{A} \cdot \vec{F}(t), \quad (2.33)$$

где  $\vec{A}$  – не зависящий явно от времени оператор, например, электрические и магнитные дипольные моменты системы. Поле дополнительно содержит регуляризующий множитель  $e^{\varepsilon t}$ ,  $\varepsilon > 0$ , обеспечивающий отсутствие поля на далёких временах в прошлом системы:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \vec{F}(t) = 0. \quad (2.34)$$

Технически работа с таким множителем заключается в удержании его в уравнениях вплоть до получения окончательного результата с последующим вычислением предела при  $\varepsilon \rightarrow +0$ . На всех промежуточных этапах вычислений  $\varepsilon$  считается конечной величиной, т.е.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \varepsilon t \rightarrow \infty. \quad (2.35)$$

Данный приём широко применяется в теории многих частиц и позволяет избежать сложностей, связанных с возможным наличием у регуляризуемой функции особой точки на бесконечности. Его строгое обоснование лежит за пределами нашего учебного пособия. Отметим только, что использование добавки  $e^{\varepsilon t}$  позволяет без больших затруднений производить обратное Фурье-преобразование характеризующих систему функций, поскольку она смещает полюсы их Фурье-образов с действительной оси в нижнюю полуплоскость комплексной плоскости, и вычисление обратного преобразования сводится к нахождению интеграла по вычетам в полюсах функции. Для сокращения записи указанный предел обычно не выписывается явным образом.

Пусть до включения поля система описывалась невозмущённым гамильтонианом  $\mathcal{H}_0$  и находилась в контакте с термостатом при температуре  $T$ . Такому состоянию отвечает статистический оператор, описывающий каноническое термодинамическое распределение Гиббса:

$$\rho_0(\mathcal{H}_0) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}_0}}{\text{Sp}\{e^{-\beta\mathcal{H}_0}\}}, \quad (2.36)$$

$$\beta = T^{-1},$$

температура здесь измеряется в энергетических единицах (при работе в СИ и СГС, параметр  $\beta = (k_B T)^{-1}$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана). В линейном по полю приближении временная эволюция статистического оператора от момента  $t_0$  до момента  $t$  описывается формулой

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \mathcal{L}(t, t_0)\rho(t_0) \approx \\ &\approx e^{-itL_0} \left( 1 - i \int_{t_0}^t dt L_1(\tau, \tau) + \dots \right) e^{itL_0} \rho(t_0), \end{aligned} \quad (2.37)$$

при этом в начальный момент времени  $\rho(t_0) = \rho_0(\mathcal{H}_0)$ . Между прочим, данное начальное условие является инвариантным в картине Гейзенберга с невозмущённым гамильтонианом. Поэтому согласно (2.24) справедливо

$$\rho(t) = e^{itL_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) = \rho_0(\mathcal{H}_0). \quad (2.38)$$

Заметим, что с учётом (2.33)

$$\begin{aligned} e^{-itL_0} L_1(\tau, \tau) e^{itL_0} G &= e^{i(t-\tau)L_0} L_1(\tau, \tau) e^{i(t-\tau)L_0} G = \\ &= \left[ e^{i(t-\tau)\mathcal{H}_0} \mathcal{H}_1(\tau) e^{i(t-\tau)\mathcal{H}_0}, G \right]_- = -\vec{F}(\tau) \cdot \left[ \vec{A}(\tau-t), G \right]_- . \end{aligned} \quad (2.39)$$

Таким образом, в линейном по полю приближении

$$\rho(t) = \rho_0(\mathcal{H}_0) + i \int_{-\infty}^t dt \vec{F}(\tau) \cdot \left[ \vec{A}(\tau-t), \rho_0(\mathcal{H}_0) \right]_- . \quad (2.40)$$

Используя свойство статистического оператора (1.23), для среднего значения произвольной наблюдаемой получим

$$\langle B \rangle(t) = \langle B \rangle_0 + i \int_{-\infty}^t dt F_j(\tau) \text{Sp} \left\{ B \left[ A_j(\tau-t), \rho_0(\mathcal{H}_0) \right]_- \right\}, \quad (2.41)$$

где введено равновесное среднее

$$\langle B \rangle_0 = \text{Sp} \{ B \rho_0(\mathcal{H}_0) \}. \quad (2.42)$$

Отклонение среднего значения наблюдаемой от равновесного, определяемое как разность

$$\Delta \langle B \rangle(t) = \langle B \rangle(t) - \langle B \rangle_0, \quad (2.43)$$

называется *откликом системы*. Вводя *функцию отклика* (иногда также называемую *функцией последействия*),

$$\varphi_{BA}(t) \equiv i \text{Sp} \left\{ B [A(-t), \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- \right\}, \quad (2.44)$$

можно записать его следующим образом:

$$\Delta \langle B \rangle(t) \approx \int_{-\infty}^t d\tau \varphi_{BAj}(t-\tau) F_j(\tau). \quad (2.45)$$

Данный результат известен как *формула Кубо*.

Отметим, что данный результат может быть записан и для классических гамильтоновых систем. В этом случае функция отклика классической системы выражается интегралом по её фазовому пространству:

$$\varphi_{BA}(t) = \int d\Gamma \{f, A\} B(t), \quad (2.46)$$

где  $f$  – функция распределения состояний статистического ансамбля в фазовом пространстве системы, а  $\{f, A\}$  – скобки Пуассона для  $f$  и  $A$ :

$$\{f, A\} = \sum_j \left( \frac{\partial f}{\partial p_j} \frac{\partial A}{\partial q_j} - \frac{\partial f}{\partial q_j} \frac{\partial A}{\partial p_j} \right). \quad (2.47)$$

Действительно, эволюция функции распределения  $f$  описывается уравнением Гамильтона

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{\mathcal{H}, f\}. \quad (2.48)$$

Используя разбиение (2.16) применительно к функции Гамильтона, а также полагая, что  $f(t) = f_0 + \Delta f$ , в пренебрежении высшими порядками малости получим уравнение

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Delta f}{\partial t} &= \{\mathcal{H}_0, \Delta f\} + \{\mathcal{H}_1(t), f_0\} = \\ &= \{\mathcal{H}_0, \Delta f\} - F(t)\{A, f_0\},\end{aligned}\tag{2.49}$$

решение которого может быть записано посредством классического аналога оператора Лиувилля (2.1):

$$\begin{aligned}\Delta f &= -\int_{-\infty}^t e^{i(t-\tau)L} \{A, f\} F(\tau) d\tau, \\ iLg &= \{\mathcal{H}_1, g\}.\end{aligned}\tag{2.50}$$

Соответственно, изменение обобщённой координаты  $B$  равно

$$\begin{aligned}\Delta B(t) &= \int d\Gamma \Delta f(t) B = \\ &= -\int_{-\infty}^t d\tau \{A, f\} B(t-\tau) F(\tau),\end{aligned}\tag{2.51}$$

откуда определяется указанный вид функции отклика (2.46). Кроме того, для простейших систем функцию отклика можно вычислить непосредственно из уравнений эволюции. Пример описания классической задачи в формализме теории линейного отклика – вычисление функции отклика одномерного осциллятора с трением – приведён в п. 8.1.

### 3. ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА

#### 3.1. Способы представления

Инвариантность следа относительно циклической перестановки операторов (см. п. 1.1) позволяет использовать для функции отклика любую из трёх форм записи:

$$\begin{aligned}\varphi_{BA}(t) &= i\text{Sp} \left\{ B \left[ A(-t), \rho_0(\mathcal{H}_0) \right]_- \right\} = \\ &= i\text{Sp} \left\{ \rho_0(\mathcal{H}_0) \left[ B, A(-t) \right]_- \right\} = \\ &= i\text{Sp} \left\{ A(-t) \left[ \rho_0(\mathcal{H}_0), B \right]_- \right\}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Инвариантность следа и матрицы плотности к преобразованию подобия

$$\begin{aligned} \text{Sp} \dots F \dots &= \text{Sp} \dots e^{i\mathcal{H}_0} F e^{-i\mathcal{H}_0} \dots, \\ \rho_0(\mathcal{H}_0) &= e^{i\mathcal{H}_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) e^{-i\mathcal{H}_0} \end{aligned} \quad (3.2)$$

совместно с применением выражения (2.26) приводит к ещё трём формам записи функции отклика:

$$\begin{aligned} \varphi_{BA}(t) &= i \text{Sp} \left\{ B(t) [A, \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- \right\} = \\ &= i \text{Sp} \left\{ \rho_0(\mathcal{H}_0) [B(t), A]_- \right\} = \\ &= i \text{Sp} \left\{ A [\rho_0(\mathcal{H}_0), B(t)]_- \right\}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

В качестве примера рассмотрим подробнее один из вариантов перехода между первым представлением от выражения (3.1) к (3.3). Применяя указанное преобразование подобия к содержащемуся под знаком следа оператору и вводя дополнительно произведение сопряжённых экспонент между  $B$  и коммутатором, получим

$$\begin{aligned} &\text{Sp} \left\{ B [A(-t), \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ e^{i\mathcal{H}_0} B e^{-i\mathcal{H}_0} e^{i\mathcal{H}_0} [A(-t), \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- e^{-i\mathcal{H}_0} \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ B(t) e^{i\mathcal{H}_0} [A(-t), \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- e^{-i\mathcal{H}_0} \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ B(t) e^{i\mathcal{H}_0} [e^{-i\mathcal{H}_0} A e^{i\mathcal{H}_0}, \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- e^{-i\mathcal{H}_0} \right\}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Раскрывая коммутатор и комбинируя экспоненты, непосредственно переходим к представлению (3.3). Аналогично производятся и остальные переходы.

Рассмотрим представление, в котором диагональны операторы  $\hat{\eta}$ ,  $\mathcal{H}_0$ . Пусть они удовлетворяют проблеме собственных значений

$$\begin{aligned} \hat{\eta} |\eta E\rangle &= \eta |\eta E\rangle, \\ H_0 |\eta E\rangle &= E |\eta E\rangle. \end{aligned} \quad (3.5)$$



Представим произвольный оператор  $G$  в виде суммы  $G^{(0)} + G^{(1)}$  таким образом, чтобы первое слагаемое было диагональным в данном представлении относительно собственных значений  $\mathcal{H}_0$ :

$$\langle \eta E | G^{(0)} | \eta' E' \rangle = \delta_{EE'} \langle \eta E | G | \eta' E' \rangle, \quad (3.6)$$

а диагональные относительно тех же собственных значений матричные элементы второго слагаемого были равны нулю:

$$\langle \eta E | G^{(1)} | \eta' E' \rangle = 0. \quad (3.7)$$

Представления функции отклика, содержащие коммутаторы  $[A, \rho_0(\mathcal{H}_0)]_-$ ,  $[\rho_0(\mathcal{H}_0), B]_-$ , показывают, что можно положить  $A = A^{(1)}$ ,  $B = B^{(1)}$  и считать невозмущённые средние равными нулю:

$$\langle A \rangle_0 = \langle B \rangle_0 = 0. \quad (3.8)$$

Продемонстрируем, что коммутаторы  $\rho_0(\mathcal{H}_0)$  с  $A = A^{(0)}$  и  $B = B^{(0)}$  не дают вклада в матричные элементы. Гамильтониан в статистическом операторе действует на свои собственные векторы соответственно уравнениям (3.5):

$$\begin{aligned} \langle \eta E | [A^{(0)}, \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- | \eta E \rangle &= \\ &= \langle \eta E | A^{(0)} \rho_0(\mathcal{H}_0) - \rho_0(\mathcal{H}_0) A^{(0)} | \eta E \rangle = \\ &= (\rho_0(E') - \rho_0(E)) \langle \eta E | A^{(0)} | \eta E \rangle = \\ &= \delta_{EE'} (\rho_0(E') - \rho_0(E)) \langle \eta E | A | \eta E \rangle = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Распишем след  $\text{Sp}\{\rho_0(\mathcal{H}_0)A^{(1)}\}$ . Статистический оператор эрмитов и здесь действует на совектор  $\langle \eta E |$ :

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{\rho_0(\mathcal{H}_0)A^{(1)}\} &= \sum_{\eta, E} \langle \eta E | \text{Sp}\{\rho_0(\mathcal{H}_0)A^{(1)}\} | \eta E \rangle = \\ &= \sum_{\eta, E} \langle \eta E | \text{Sp}\{\rho_0(E)A^{(1)}\} | \eta E \rangle = \sum_{\eta, E} \rho_0(E) \langle \eta E | A^{(1)} | \eta E \rangle = 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Таким образом, замена  $A = A^{(1)}$ ,  $B = B^{(1)}$  действительно позволяет приравнять невозмущённые средние нулю.

### 3.2. Соотношения симметрии

Функция отклика вещественна:

$$\varphi_{BA}^*(t) = \varphi_{BA}(t). \quad (3.11)$$

Для доказательства этого достаточно заметить, что оператор  $i\rho_0(\mathcal{H}_0)[B(t), A]_-$  ведёт себя под знаком следа как эрмитов, хотя сам таковым не является:

$$\begin{aligned} \varphi_{BA}^*(t) &= \left( i\text{Sp}\left\{ \rho_0(\mathcal{H}_0)[B(t), A]_- \right\} \right)^* = \\ &= \text{Sp}\left\{ \left( i\rho_0(\mathcal{H}_0)[B(t), A]_- \right)^\dagger \right\}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

при этом

$$\begin{aligned} \left( i\rho_0(\mathcal{H}_0)[B(t), A]_- \right)^\dagger &= \left( i\rho_0(\mathcal{H}_0)(B(t)A - AB(t)) \right)^\dagger = \\ &= (B(t)A - AB(t))^\dagger (-i\rho_0(\mathcal{H}_0)) = \\ &= -[B(t), A]_-^\dagger i\rho_0(\mathcal{H}_0) = i[B(t), A]_- \rho_0(\mathcal{H}_0). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Таким образом, получаем соотношение (3.11):

$$\varphi_{BA}^*(t) = \text{Sp}\left\{ i[B(t), A]_- \rho_0(\mathcal{H}_0) \right\} = \varphi_{BA}(t). \quad (3.14)$$

Также имеет место соотношение взаимности

$$\varphi_{AB}(-t) = -\varphi_{BA}(t). \quad (3.15)$$

Докажем его:

$$\begin{aligned} \varphi_{AB}(-t) &= \text{Sp}\left\{ i\rho_0(\mathcal{H}_0)[B(-t), A]_- \right\} = \\ &= i\text{Sp}\left\{ \rho_0(\mathcal{H}_0)[A(-t), B]_- \right\} = \\ &= i\text{Sp}\left\{ e^{it\mathcal{H}_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) e^{-it\mathcal{H}_0} \left[ e^{it\mathcal{H}_0} A(-t) e^{-it\mathcal{H}_0}, e^{it\mathcal{H}_0} B e^{-it\mathcal{H}_0} \right]_- \right\} = \\ &= i\text{Sp}\left\{ \rho_0(\mathcal{H}_0)[A, B(t)]_- \right\} = -\varphi_{BA}(t). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Поскольку след – вещественный, потребуем его инвариантности к инверсии времени. Операция инверсии времени определяется заменами

$$\begin{aligned}
i &\rightarrow -i, \\
\vec{q} &\rightarrow \vec{q}, \\
\vec{p} &\rightarrow -\vec{p}, \\
\vec{J} &\rightarrow -\vec{J}, \\
\mathcal{H}_0(\vec{F}) &\rightarrow \mathcal{H}_0(-\vec{F}).
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Она приводит к соотношению симметрии

$$\begin{aligned}
\varphi_{BA}(t, \vec{F}) &= \text{Sp} \left\{ i\rho_0(\mathcal{H}_0, \vec{F}) [B(t, \vec{F}), A]_- \right\} = \\
&= -\text{Sp} \left\{ i\rho_0(\mathcal{H}_0, -\vec{F}) [B(-t, -\vec{F}), A]_- \varepsilon_A \varepsilon_B \right\} = \\
&= -\varepsilon_A \varepsilon_B \varphi_{BA}(-t, -\vec{F}) = \varepsilon_A \varepsilon_B \varphi_{AB}(t, -\vec{F}),
\end{aligned} \tag{3.18}$$

где  $\varepsilon_{A,B} = \pm 1$ , а конкретный знак определяется чётностью операторов  $A$  и  $B$  по отношению к операции инверсии времени. Полученное соотношение симметрии называется *соотношением Онсагера*:

$$\varphi_{BA}(t, \vec{F}) = \varepsilon_A \varepsilon_B \varphi(t, -\vec{F}). \tag{3.19}$$

### 3.3. Тожество Кубо

Оператор  $A(t) = e^{it\mathcal{H}_0} A e^{-it\mathcal{H}_0}$  при  $t = -i\lambda$  удовлетворяет уравнению движения

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} A(-i\lambda) = -i\dot{A}(-i\lambda). \tag{3.20}$$

Также справедливо равенство

$$e^{-\beta\mathcal{H}_0} \int_0^\beta d\lambda \frac{\partial A(-i\lambda)}{\partial \lambda} = e^{-\beta\mathcal{H}_0} (e^{\beta\mathcal{H}_0} A e^{-\beta\mathcal{H}_0} - A) = [A, e^{-\beta\mathcal{H}_0}]_-. \tag{3.21}$$

Поэтому справедливо *тождество Кубо*:

$$[A, \rho_0(\mathcal{H}_0)]_- = -i\rho_0 \int_0^\beta d\lambda \dot{A}(-i\lambda) \equiv -i\rho_0 \tilde{A}, \tag{3.22}$$

где  $\rho_0(\mathcal{H}_0)$  определяется согласно (2.36).

Из квантовой теории систем многих частиц известно тождество для средних значений двух величин:

$$\langle A(t)B \rangle = \langle BA(t+i\beta) \rangle. \quad (3.23)$$

Напомним, что в системе естественных единиц (см. п. 1.4) температура измеряется в энергетических единицах, а время приобретает размерность обратной энергии, как и параметр  $\beta$ . Докажем соотношение (3.23), используя представление Гейзенберга для независящего от времени гамильтониана:

$$\begin{aligned} \langle A(t)B \rangle &= \text{Sp} \{ \rho_0(\mathcal{H}_0) A(t) B \} = \\ &= \text{Sp} \{ \rho_0(\mathcal{H}_0) A(t) \rho_0^{-1}(\mathcal{H}_0) \rho_0(\mathcal{H}_0) B \} = \\ &= \text{Sp} \left\{ \frac{e^{-\beta\mathcal{H}_0}}{\text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} \}} A(t) \frac{\text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} \}}{e^{-\beta\mathcal{H}_0}} \rho_0(\mathcal{H}_0) B \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Сокращая на  $\text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} \}$ , получим

$$\begin{aligned} &\text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} A(t) e^{\beta\mathcal{H}_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) B \} = \\ &= \text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}_0} e^{it\mathcal{H}_0} A e^{-it\mathcal{H}_0} e^{\beta\mathcal{H}_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) B \} = \\ &= \text{Sp} \{ e^{i(t+i\beta)\mathcal{H}_0} A e^{-i(t+i\beta)\mathcal{H}_0} \rho_0(\mathcal{H}_0) B \} = \\ &= \text{Sp} \{ A(t+i\beta) \rho_0(\mathcal{H}_0) B \} = \\ &= \text{Sp} \{ \rho_0(\mathcal{H}_0) BA(t+i\beta) \} = \langle BA(t+i\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Используем введённое выше обозначение

$$\tilde{G} = \int_0^\beta d\lambda G(-i\lambda) \quad (3.26)$$

и рассмотрим среднее  $\langle \tilde{G}_1 \tilde{G}_2 \rangle_0$ :

$$\langle \tilde{G}_1 \tilde{G}_2 \rangle_0 = \int_0^\beta d\lambda \langle G_1(-i\lambda) G_2 \rangle_0 = \int_0^\beta d\lambda \langle G_2 G_1(-i(\lambda-\beta)) \rangle_0. \quad (3.27)$$

Переход ко второму интегралу выполнен согласно равенству (3.23). Заменяя  $\lambda - \beta = -\lambda'$ , получим

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\lambda \langle G_2 G_1(-i(\lambda - \beta)) \rangle_0 &= \int_0^\beta d\lambda' \langle G_2 G_1(i\lambda') \rangle_0 = \\ &= \int_0^\beta d\lambda' \langle G_2(-i\lambda') G_1 \rangle_0 = \langle \tilde{G}_2 G_1 \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.28)$$

При переходе к последнему интегралу производится сдвиг переменной интегрирования на величину  $-i\lambda'$ . Итак, выполняется

$$\langle \tilde{G}_1 G_2 \rangle_0 = \langle \tilde{G}_2 G_1 \rangle_0. \quad (3.29)$$

Применяя данный результат совместно с тождеством Кубо к определению функции отклика, получим ещё три варианта представления для неё:

$$\begin{aligned} \varphi_{BA}(t) &= \text{Sp} \left\{ \rho_0 \tilde{A} B(t) \right\} = \langle \tilde{A} B(t) \rangle_0, \\ \varphi_{BA}(t) &= -\text{Sp} \left\{ \rho_0 \tilde{B}(t) A \right\} = \langle \tilde{B}(t) A \rangle_0, \\ \varphi_{BA}(t) &= \langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.30)$$

## 4. РЕЛАКСАЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

### 4.1. Отклик на ступенчатое воздействие

Пусть *постоянное* внешнее поле действует на систему от момента  $t = -\infty$  до  $t = 0$  и при  $t = 0$  отключается:

$$F_j(t) = F_{j0} \Theta(-t) e^{ct}, \quad (4.1)$$

где  $\Theta(t)$  – ступенчатая функция (функция Хэвисайда):

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x \geq 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Тогда отклик системы определится соотношением

$$\Delta\langle B\rangle(t) = \int_{-\infty}^t dt' \varphi_{BAj}(t-t') F_j(t'). \quad (4.3)$$

Произведя замену переменной  $t-t' = \tau$ , преобразуем интеграл к виду

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) F_j(t-\tau) &= \int_t^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{\varepsilon(t-\tau)} F_{j0} = \\ &= \int_t^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{-\varepsilon\tau} F_{j0}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Можно ввести релаксационную функцию, как отклик системы на снятие постоянного внешнего возмущения величиной  $F_{j0} = 1$ :

$$\Phi_{BA}(t) = \int_t^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{-\varepsilon\tau}. \quad (4.5)$$

## 4.2. Свойства релаксационной функции

Непосредственно из определения (4.5) следует, что  $\lim_{t \rightarrow \infty} \Phi_{BA}(t) = 0$ . Кроме того, отсюда же следует

$$\dot{\Phi}_{BA}(t) = -\varphi_{BA}(t) e^{-\varepsilon t}. \quad (4.6)$$

Используя представление функции отклика, можно вычислить интеграл, входящий в определение релаксационной функции. Производя интегрирование по частям, последовательно получаем

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(t) &= -\int_t^{\infty} d\tau \langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0 e^{-\varepsilon\tau} = \\ &= -\langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0 e^{-\varepsilon t} \Big|_t^{\infty} - \varepsilon \int_t^{\infty} d\tau \langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0 e^{-\varepsilon\tau}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Замена  $\langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0 = \langle \tilde{A}(-t) \dot{B}(\tau-t) \rangle_0$  и  $t' = \tau - t$  в подынтегральном выражении даёт

$$\Phi_{BA}(t) = \langle \tilde{A} \dot{B}(t) \rangle_0 - \varepsilon \int_0^{\infty} dt' e^{-\varepsilon t'} \langle \tilde{A}(-t) \dot{B}(t') \rangle_0 e^{-\varepsilon t}. \quad (4.8)$$

В используемом представлении для оператора  $B$  имеем

$$\begin{aligned} B(t) &= B^{(1)}(t) = \\ &= \sum_{E, E', \eta, \eta'} |E\eta\rangle \langle E\eta| e^{it\mathcal{H}_0} B e^{-it\mathcal{H}_0} |\eta'E'\rangle \langle \eta'E'| = \\ &= \sum_{E, E', \eta, \eta'} |E\eta\rangle \langle E\eta| B |\eta'E'\rangle \langle \eta'E'| e^{it(E-E')}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

В итоге интеграл может быть вычислен (с точностью до числового множителя):

$$\varepsilon \int_0^{\infty} dt' e^{-\varepsilon t'} e^{i(E-E')t'} = -\frac{\varepsilon}{i(E-E') - \varepsilon} = \begin{cases} 1, & E = E', \\ 0, & E \neq E'. \end{cases} \quad (4.10)$$

Поскольку в нашем случае  $B = B^{(1)}$ , то  $E \neq E'$ . Соответственно, диагональные элементы  $B^{(1)}$  равны нулю. Для релаксационной функции получается

$$\Phi_{BA}(t) = \langle \tilde{A} B(t) \rangle_0. \quad (4.11)$$

### 4.3. Соотношения симметрии

Релаксационная функция является вещественной:

$$\Phi_{BA}^*(t) = \Phi_{BA}(t) \quad (4.12)$$

и удовлетворяет соотношению взаимности

$$\Phi_{AB}(-t) = \Phi_{BA}(t). \quad (4.13)$$

Докажем далее эти соотношения.

Запишем комплексно-сопряжённую релаксационную функцию и применим свойство сопряжения произведения трёх операторов  $(\alpha\beta\gamma)^\dagger = \gamma^\dagger\beta^\dagger\alpha^\dagger$ :

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}^*(t) &= \text{Sp} \left\{ \rho_0 \left( \int_0^\beta d\lambda A(-i\lambda) \right) B(t) \right\}^\dagger = \\
&= \text{Sp} \left\{ B(t) \left( \int_0^\beta d\lambda A(i\lambda) \right) \rho_0 \right\}.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Сдвигая по времени на  $i\lambda$ , получим

$$\text{Sp} \left\{ \rho_0 \int_0^\beta d\lambda B(t - i\lambda) A \right\} = \langle \tilde{B}(t) A \rangle_0 = \langle \tilde{A} B(t) \rangle_0. \tag{4.15}$$

Теперь перейдём к соотношению взаимности. Сдвиг функции по времени на  $+t$  даёт

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}(-t) &= \langle \tilde{B} A(-t) \rangle_0 = \text{Sp} \left\{ \rho_0 \tilde{B}(t) A \right\} = \\
&= \text{Sp} \left\{ \rho_0 \left( \int_0^\beta d\lambda B(t - i\lambda) \right) A \right\} = \langle \tilde{B}(t) A \rangle_0 = \langle \tilde{A} B(t) \rangle_0.
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Рассмотрим также влияние на релаксационную функцию инверсии времени (3.17). Применим инверсию к функции  $\Phi_{BA}(t, \vec{F})$ :

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}(t, \vec{F}) &= \text{Sp} \left\{ \rho_0(\vec{F}) \left( \int_0^\beta d\lambda \tilde{A}(-i\lambda, \vec{F}) \right) B(t, \vec{F}) \right\} = \\
&= \text{Sp} \left\{ \rho_0(-\vec{F}) \left( \int_0^\beta d\lambda \tilde{A}(-i\lambda, -\vec{F}) \right) B(-t, -\vec{F}) \varepsilon_A \varepsilon_B \right\} = \\
&= \varepsilon_A \varepsilon_B \Phi_{BA}(-t, -\vec{F}).
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Наконец, применяя соотношение взаимности, получим соотношение Онсагера для релаксационной функции:

$$\Phi_{BA}(t, \vec{F}) = \varepsilon_A \varepsilon_B \Phi_{BA}(t, -\vec{F}). \tag{4.18}$$



## 5. ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

### 5.1. Восприимчивость

Пусть внешнее приложенное к системе поле является простой периодической функцией времени и колеблется с постоянной частотой  $\omega$ :

$$F_j(t) = (F_j e^{-i\omega t} + F_j^* e^{i\omega t}) e^{\varepsilon t}. \quad (5.1)$$

Тогда отклик системы будет даваться выражением

$$\begin{aligned} \Delta\langle B \rangle(t) &= \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) F_j(t - \tau) = \\ &= \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{i\omega\tau - \varepsilon\tau} F_j e^{-i\omega t} e^{\varepsilon t} + \\ &+ \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{-i\omega\tau - \varepsilon\tau} F_j^* e^{i\omega t} e^{\varepsilon t} = \\ &= \chi_{BAj}(\omega) F_j e^{-i\omega t} + \chi_{BAj}(-\omega) F_j^* e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где введена функция частоты

$$\chi_{BAj}(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{i\omega\tau - \varepsilon\tau}, \quad (5.3)$$

называемая *восприимчивостью системы*.

Ввиду вещественности функции отклика восприимчивость меняет знак аргумента при комплексном сопряжении:

$$\chi_{BAj}^*(\omega) = \chi_{BAj}(-\omega). \quad (5.4)$$

При рассмотрении отдельно мнимой и вещественной частей восприимчивости это приводит к соотношению

$$\chi_{BAj}(\omega) = \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{-\varepsilon\tau} \cos \omega\tau + i \int_0^{\infty} d\tau \varphi_{BAj}(\tau) e^{-\varepsilon\tau} \sin \omega\tau, \quad (5.5)$$

откуда непосредственно следуют свойства симметрии восприимчивости:

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} \chi_{BAj}(\omega) &= \operatorname{Re} \chi_{BAj}(-\omega), \\ \operatorname{Im} \chi_{BAj}(\omega) &= -\operatorname{Im} \chi_{BAj}(-\omega).\end{aligned}\tag{5.6}$$

Таким образом, действительная часть восприимчивости является чётной функцией частоты, а мнимая – нечётной.

При  $\omega=0$  реализуется статический случай. При этом восприимчивость является строго вещественной величиной и называется *статической восприимчивостью*:

$$\chi_{BAj}^*(0) = \chi_{BAj}(0) = \int_0^{\infty} d\tau \Phi_{BAj}(\tau) e^{-\epsilon\tau}.\tag{5.7}$$

Восприимчивость может быть выражена также посредством релаксационной функции. Для этого следует выразить через последнюю функцию отклика согласно (4.6):

$$\Phi_{BAj}(t) = -\Phi_{BAj}(t) e^{\epsilon t}.\tag{5.8}$$

Тогда

$$\begin{aligned}\chi_{BAj}(\omega) &= -\int_0^{\infty} d\tau \Phi_{BAj} e^{i\omega\tau} = \\ &= -\Phi_{BAj}(\tau) e^{i\omega\tau} \Big|_0^{\infty} + i\omega \int_0^{\infty} d\tau \Phi_{BAj}(\tau) e^{i\omega\tau}.\end{aligned}\tag{5.9}$$

Отсюда для статической восприимчивости можно написать

$$\chi_{BAj}(0) = \Phi_{BAj}(0) = \langle \tilde{A}B(t) \rangle_0 \Big|_{t=0} = \langle \tilde{A}B \rangle_0.\tag{5.10}$$

В терминах восприимчивости могут быть описаны характеристики разнообразных классических и квантовых систем, для которых существует линейная связь между полем и значением наблюдаемой вида

$$B = \chi_{BAj} A_j\tag{5.11}$$

при установлении должного соответствия между  $A$ ,  $B$ ,  $\vec{F}$  и реальными физическими свойствами. В общем случае

размерность  $B$  ничем не ограничена и наблюдаемая может быть тензором любого ранга. В свою очередь оператор  $A$  и поле  $\vec{F}$  также могут иметь произвольную размерность, но с тем условием, что их свёртка должна быть энергетической характеристикой воздействия на систему (см. п. 2.4).

С другой стороны, в отдельных случаях гамильтониан возмущения не может быть явно записан в форме (2.33). В таких системах соответствие формальных объектов теории физическим характеристикам устанавливается в ходе дополнительного исследования (см. п. 8.3).

**Соответствие формальных объектов теории линейного отклика  
физическим величинам при описании различных явлений**

<b>Явление</b>	$\chi_{BA}$	$A$	$B$	<b>Поле <math>F</math></b>
Электропроводность	проводимость $\sigma_{kl}$	поляризация $P_k$	ток $j_k = \sigma_{kl} E_l$	электрическое поле $E_l$
Поляризация линейных диэлектриков	поляризуемость $\alpha_{kl}$	поляризация $P_k$	поляризация $P_k = \alpha_{kl} E_l$	электрическое поле $E_l$
Намагничение диа- и парамагнетиков	магнитная восприимчивость $\chi_{kl}$	намагниченность $M_k$	намагниченность $M_k = \chi_{kl} H_l$	магнитное поле $H_l$
Теплопроводность	тензор теплопроводности $\kappa_{kl}$	поток энтропии $s_j = q_j V/T$	поток энергии $q_j = \kappa_{jl} \nabla_l T$	градиент температуры $\nabla_l T$
Вязкость текучей среды	тензор модулей вязкости $\eta_{kilm}$	тензор вязких напряжений $\sigma_{kj}$	тензор вязких напряжений $\sigma_{kj} = \eta_{kilm} V_{lm}$	тензор градиентов скорости $V_{lm} = \nabla_l v_m$
Упругость сплошной среды	тензор модулей упругости $\lambda_{kilm}$	тензор упругих напряжений $\sigma_{kj}$	тензор упругих напряжений $\sigma_{kj}$	тензор деформации $u_{jk}$

При работе с классическими системами  $\vec{F}$  имеет смысл действующей на систему сторонней обобщённой силы,  $V$  является некоторой обобщённой координатой, характеризующей отклонение от равновесного состояния, а функция отклика обычно может быть найдена непосредственно без привлечения функции Гамильтона и дополнительного оператора  $A$  (см. п. 8.1).

Рассматриваемый формализм является эффективным и универсальным инструментом для описания материальных свойств диэлектриков и магнетиков, кинетических явлений в твёрдых телах, жидкостях, газах, плазме, например, электропроводности (см. п. 8.2), теплопроводности (п. 8.3), вязкости и упругости, акустических свойств, распространению спиновых волн, и др.

Примеры соответствия разнообразных физических величин формальным операторам теории приведены в таблице.

## 5.2. Изотермическая статическая восприимчивость

Состояние подсистемы в термостате в приложенном постоянном поле характеризуется статистическим оператором

$$\rho(\beta) = \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)}}{\text{Sp}\{e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)}\}}, \quad (5.12)$$

где  $\mathcal{H}_1 = -\vec{A} \cdot \vec{F}$ . Найдём функцию распределения в линейном по  $\vec{A}$  поле. Определим операторы

$$e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} \equiv e^{-\beta\mathcal{H}_0} \sigma(\beta), \quad (5.13)$$

$$\sigma(\beta) = e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)}. \quad (5.14)$$

Дифференцируя  $\sigma(\beta)$  по аргументу

$$\frac{\partial \sigma(\beta)}{\partial \beta} = (\mathcal{H}_0 - (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)) e^{\beta\mathcal{H}_0} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} = -\mathcal{H}_1 \sigma(\beta) \quad (5.15)$$

и подставляя явный вид гамильтониана взаимодействия, получим задачу Коши

$$\frac{\partial \sigma(\beta)}{\partial \beta} = \vec{F} \cdot \vec{A}(-i\beta) \sigma(\beta), \quad (5.16)$$

$$\sigma(0) = 1.$$

Интегрируя далее по  $\beta$ , получим уравнение для оператора  $\sigma(\beta)$ :

$$\begin{aligned} \sigma(\beta) &= 1 + \vec{F} \cdot \int_0^\beta d\lambda \vec{A}(-i\lambda) \sigma(\lambda) \approx \\ &\approx 1 + \left( \int_0^\beta d\lambda \vec{A}(-i\lambda) \right) \cdot \vec{F} = 1 + \tilde{\vec{A}} \cdot \vec{F}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Таким образом, в линейном приближении оператор  $e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)}$  с использованием обозначений (3.22) может быть записан как

$$e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} = e^{\beta \mathcal{H}_0} \sigma(\beta) \approx e^{\beta \mathcal{H}_0} (1 + \tilde{\vec{A}} \cdot \vec{F}), \quad (5.18)$$

а его след –

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left\{ e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)} \right\} &= \text{Sp} \left\{ e^{\beta \mathcal{H}_0} (1 + \tilde{\vec{A}} \cdot \vec{F}) \right\} = \\ &= e^{\beta \mathcal{H}_0} (1 + \langle \tilde{\vec{A}} \rangle_0 \cdot \vec{F}). \end{aligned} \quad (5.19)$$

С учётом определения равновесного среднего  $\langle A \rangle_0 = \text{Sp} \{ \rho_0 A \}$  получим для статистического оператора

$$\rho(\beta) = \rho_0 + \rho_0 (\tilde{\vec{A}} - \langle \tilde{\vec{A}} \rangle_0) \cdot \vec{F} = \rho_0 + \rho_0 \Delta \tilde{\vec{A}} \cdot \vec{F}. \quad (5.20)$$

Соответственно, для среднего значения наблюдаемой будем иметь

$$\langle B \rangle = \text{Sp} \{ \rho(\beta) B \} = \langle B \rangle_0 + \vec{F} \cdot \langle \Delta \tilde{\vec{A}} B \rangle_0. \quad (5.21)$$

Отсюда следует, что статическая изотермическая восприимчивость определяется формулой

$$\chi_{BA}^T = \langle \Delta \tilde{\vec{A}} B \rangle_0. \quad (5.22)$$

Она отличается от статической восприимчивости в теории Кубо на величину

$$\begin{aligned}
\chi_{BA}^T - \chi_{BA}(0) &= \langle \Delta \tilde{A} \cdot B \rangle_0 - \langle \tilde{A}^{(1)} B^{(1)} \rangle_0 = \\
&= \langle \tilde{A} B \rangle_0 - \langle \tilde{A} \rangle_0 \langle B \rangle_0 - \langle \tilde{A}^{(1)} B \rangle_0 = \\
&= \langle \tilde{A} B \rangle_0 - \langle \tilde{A} \rangle_0 \langle B \rangle_0 = \langle \tilde{A}^{(0)} B^{(0)} \rangle_0 - \langle A^{(0)} \rangle_0 \langle B^{(0)} \rangle_0 = \\
&= \beta (\langle A^{(0)} B^{(0)} \rangle_0 - \langle A^{(0)} \rangle_0 \langle B^{(0)} \rangle_0).
\end{aligned} \tag{5.23}$$

Здесь были использованы следующие свойства:

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{A}^{(1)} B^{(0)} \rangle_0 &= 0, \\
\langle \tilde{A}^{(0)} B^{(1)} \rangle_0 &= 0, \\
\tilde{A}^{(0)} &= \beta A^{(0)}.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Таким образом, сравниваемые восприимчивости совпадают при статистической независимости операторов, что в терминах среднего выражается как

$$\langle A^{(0)} B^{(0)} \rangle_0 = \langle A^{(0)} \rangle_0 \langle B^{(0)} \rangle_0. \tag{5.25}$$

Приведём доказательства соотношений (5.24). Для  $\tilde{A}^{(0)} = \beta A^{(0)}$  имеем:

$$\begin{aligned}
\langle \eta E | \tilde{A}^{(0)} | \eta' E' \rangle &= \int_0^\beta d\lambda \langle \eta E | A^{(0)} (-i\lambda) | \eta' E' \rangle = \\
&= \int_0^\beta d\lambda \langle \eta E | e^{\lambda H_0} A^{(0)} e^{-\lambda H_0} | \eta' E' \rangle = \\
&= \int_0^\beta d\lambda \langle \eta E | e^{\lambda E} A^{(0)} e^{-\lambda E'} | \eta' E' \rangle = \\
&= \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda(E-E')} \delta_{EE'} \langle \eta E | A | \eta' E' \rangle = \int_0^\beta d\lambda \langle \eta E | A | \eta E \rangle = \\
&= \langle \eta E | A^{(0)} | \eta E \rangle \beta = \langle \eta E | \beta A^{(0)} | \eta E \rangle.
\end{aligned} \tag{5.26}$$

Также с использованием равенства  $\langle \eta E | A^{(1)} | \eta' E' \rangle = 0$ , которое следует из (3.7), доказывается равенство нулю среднего значения  $\langle \tilde{A}^{(1)} B^{(0)} \rangle_0$ :

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{A}^{(1)} B^{(0)} \rangle_0 &= \text{Sp} \left\{ \rho_0 \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \mathcal{H}_0} A^{(1)} e^{-\lambda \mathcal{H}_0} B^{(0)} \right\} = \\
&= \sum_{\eta, E} \langle \eta E | \rho_0(\mathcal{H}_0) \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \mathcal{H}_0} A^{(1)} e^{-\lambda \mathcal{H}_0} B^{(0)} | \eta E \rangle = \\
&= \sum_{\eta, \eta', E, E'} \langle \eta E | \rho_0(E) \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda E} A^{(1)} e^{-\lambda E'} | \eta' E' \rangle \langle \eta' E' | B^{(0)} | \eta E \rangle = \quad (5.27) \\
&= \sum_{\eta, \eta', E, E'} \langle \eta E | \rho_0(E) \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda E} A^{(1)} e^{-\lambda E'} | \eta' E' \rangle \delta_{EE'} \times \\
&\quad \times \langle \eta' E' | B | \eta E \rangle = \\
&= \sum_{\eta, \eta', E} \rho_0(E) \beta \langle \eta E | A^{(1)} | \eta' E' \rangle \langle \eta' E' | B | \eta E \rangle = 0.
\end{aligned}$$

### 5.3. Поглощение

Найдём среднее количество энергии, поглощённой системой за период внешнего воздействия  $T$ . Воспользуемся для этого вполне очевидной формулой осреднения по времени:

$$w(\omega) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^T dt \frac{d\langle \mathcal{H}(t) \rangle}{dt}. \quad (5.28)$$

Производная по времени от среднего значения гамильтониана равна среднему значению его производной. Действительно,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle \mathcal{H}(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \text{Sp} \{ \rho(t) \mathcal{H}_1(t) \} = \\
&= \text{Sp} \{ \dot{\rho}(t) \mathcal{H}_1(t) \} + \text{Sp} \{ \rho(t) \dot{\mathcal{H}}_1(t) \}.
\end{aligned} \quad (5.29)$$

Воспользуемся в первом слагаемом уравнении Неймана (1.27) и свойствами инвариантности следа к перестановкам операторов:

$$\begin{aligned}
\text{Sp} \{ \dot{\rho}(t) \mathcal{H}_1(t) \} &= -i \text{Sp} \{ [ \mathcal{H}_1(t), \rho(t) ]_- \mathcal{H}_1(t) \} = \\
&= -i \text{Sp} \{ [ \mathcal{H}_1(t), \mathcal{H}_1(t) ]_- \rho(t) \} = 0.
\end{aligned} \quad (5.30)$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathcal{H}(t) \rangle &= \text{Sp} \{ \rho(t) \dot{\mathcal{H}}_1(t) \} = \langle \dot{\mathcal{H}}_1(t) \rangle = \\ &= -\langle \vec{A} \rangle(t) \cdot \dot{\vec{F}}(t), \end{aligned} \quad (5.31)$$

здесь подставлен явный вид гамильтониана взаимодействия с полем (2.33).

В рамках линейной теории возмущений получим для  $k$ -й компоненты вектора:

$$\begin{aligned} \langle A_k \rangle(t) &= \langle A_k \rangle_0 + \Delta \langle A_k \rangle(t) = \\ &= \chi_{kj}(\omega) F_j e^{-i\omega t} + \chi_{kj}^*(\omega) F_j^* e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

где  $\chi_{kj}(\omega) = \chi_{A_k A_j}(\omega)$ , а среднее значение статической части величины  $A_k$  равно нулю согласно (3.8). Производная по времени от поля (5.1):

$$\dot{F}_k(t) = \frac{d}{dt} (F_k e^{-i\omega t} + F_k^* e^{i\omega t}) = i\omega (F_k^* e^{i\omega t} - F_k e^{-i\omega t}). \quad (5.33)$$

Осциллирующие слагаемые с удвоенными частотами при интегрировании по периоду вклада не дают и потому для искомого поглощения получается

$$\begin{aligned} w(\omega) &= -i\omega (\chi_{kj}(\omega) F_j F_k^* - \chi_{kj}^*(\omega) F_j^* F_k) = \\ &= 2\omega \text{Im} \{ \chi_{kj}(\omega) F_j F_k^* \} = \\ &= 2\omega \text{Re} \chi_{kj}(\omega) (\text{Re} F_k \text{Im} F_j - \text{Im} F_k \text{Re} F_j) + \\ &+ 2\omega \text{Im} \chi_{kj}(\omega) (\text{Re} F_k \text{Re} F_j + \text{Im} F_k \text{Im} F_j). \end{aligned} \quad (5.34)$$

Здесь использован известный факт, что разность числа и его комплексного сопряжения равна

$$z - z^* = 2i \text{Im} z. \quad (5.35)$$

Выделим в восприимчивости симметричную и антисимметричную части



$$\begin{aligned}\chi_{kj}^s &= \frac{1}{2}(\chi_{kj} + \chi_{jk}), \\ \chi_{kj}^a &= \frac{1}{2}(\chi_{kj} - \chi_{jk}).\end{aligned}\tag{5.36}$$

Первая скобка в (5.34) антисимметрична по индексам  $k$  и  $j$ , а вторая – симметрична. Таким образом, учитывая, что свёртка симметричного тензора с антисимметричным по произвольной паре индексов всегда даёт нуль, получим

$$\begin{aligned}w(\omega) &= 2\omega \operatorname{Re} \chi_{kj}^a(\omega) (\operatorname{Re} F_k \operatorname{Im} F_j - \operatorname{Im} F_k \operatorname{Re} F_j) + \\ &+ 2\omega \operatorname{Im} \chi_{kj}^s(\omega) (\operatorname{Re} F_k \operatorname{Re} F_j + \operatorname{Im} F_k \operatorname{Im} F_j).\end{aligned}\tag{5.37}$$

Таким образом, за диссипацию энергии отвечает антисимметричное слагаемое в вещественной части восприимчивости и симметричное – в мнимой. В частности, в изотропных системах тензор восприимчивости всегда симметричен, и поэтому в таком случае за диссипацию энергии отвечает только его мнимая часть, как это реализуется для диэлектрической проницаемости и показателя преломления изотропной сплошной среды.

#### 5.4. Соотношения Кронига–Крамерса

Полную восприимчивость (5.3) можно разбить на два слагаемых:

$$\chi_{BA}(\omega) = \chi_{BA}(0) + i\omega \tilde{\chi}_{BA}(\omega),\tag{5.38}$$

где  $\chi_{BA}(0) = \langle \tilde{A}B \rangle_0 = \langle \tilde{B}A \rangle_0$  – статическая восприимчивость, а величина

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = \int_0^{\infty} dt \Phi_{BA}(t) e^{i\omega t}\tag{5.39}$$

называется *приведённой восприимчивостью*.

Выразим приведённую восприимчивость через *Фурье-образ* (в литературе часто встречается термин *Фурье-трансформанта*) релаксационной функции:

$$\Phi_{BA}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Phi_{BA}(\omega') e^{-i\omega' t}, \quad (5.40)$$

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \Phi_{BA}(\omega') \int_0^{+\infty} dt e^{-i(\omega-\omega')t}.$$

Кроме того, из определения релаксационной функции (4.5) следует наличие не указанной здесь явно регуляризующей поправки к интегралу  $e^{-\varepsilon t}$ . Вычислим интеграл по времени:

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} dt e^{-i(\omega-\omega')t-\varepsilon t} &= -\frac{1}{i(\omega-\omega')-\varepsilon} = \\ &= \frac{i}{(\omega-\omega') + i\varepsilon} = i \left( \text{P.} \frac{1}{\omega-\omega'} - i\pi\delta(\omega-\omega') \right), \end{aligned} \quad (5.41)$$

где P. обозначает функцию в смысле главного значения. Последний переход в вычислении выполнен согласно *формуле Племеля–Сохоцкого*:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \text{P.} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x). \quad (5.42)$$

Поэтому для приведённой восприимчивости получим

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = \frac{1}{2} \Phi_{BA}(t) + i\text{P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Phi_{BA}(\omega')}{\omega-\omega'}. \quad (5.43)$$

Обратимся к свойствам симметрии релаксационной функции (4.12), (4.13). Из соотношения взаимности непосредственно можно получить отдельные соотношения для симметричной и антисимметричной части релаксационной функции:

$$\Phi_{BA}^s(t) = \Phi_{BA}^s(-t), \quad (5.44)$$

$$\Phi_{BA}^a(t) = -\Phi_{BA}^a(-t),$$

или в терминах Фурье-образа  $\Phi_{BA}(\omega)$ :

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \Phi_{BA}(t) e^{i\omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \Phi_{BA}(-t) e^{i\omega t} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \Phi_{BA}(t) e^{-i\omega t} = \Phi_{AB}^*(\omega).
\end{aligned}
\tag{5.45}$$

При переходе между предпоследним и последним интегралами произведена замена  $t$  на  $-t$ .

При этом симметричная часть оказывается вещественной, а антисимметричная – чисто мнимой:

$$\begin{aligned}
\Phi_{BA}^s(\omega) &= \Phi_{AB}^{s*}(\omega), \\
\Phi_{BA}^a(\omega) &= -\Phi_{AB}^{a*}(\omega).
\end{aligned}
\tag{5.46}$$

Использование этих свойств даёт следующее:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \frac{1}{2} \Phi_{BA}^s(\omega), \\
\operatorname{Im} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \text{P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Phi_{BA}^s(\omega')}{\omega - \omega'}, \\
\operatorname{Im} \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= -\frac{i}{2} \Phi_{BA}^a(\omega), \\
\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= i \text{P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{\Phi_{BA}^a(\omega')}{\omega - \omega'}.
\end{aligned}
\tag{5.47}$$

Соответственно, компоненты Фурье-образа  $\Phi^s$  и  $\Phi^a$  могут быть выражены через соответствующие компоненты восприимчивости  $\chi^s$  и  $\chi^a$ . Отсюда следует и непосредственная взаимосвязь между последними:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Im} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \text{P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega')}{\omega - \omega'}, \\
\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= -\text{P.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\operatorname{Im} \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega')}{\omega - \omega'}.
\end{aligned}
\tag{5.48}$$

Данные соотношения называются *соотношениями Кронига–Краммера*. Они устанавливают связь между дисперсионными

(справа) и диссипативными (слева) частями восприимчивости. Такие соотношения могут быть написаны для любой комплексной функции, аналитичной в верхней полуплоскости (при условии, что частота  $\omega'$  также является комплексной переменной). В математике известны альтернативные формулировки соотношений Кронига–Крамерса и их аналоги под названием *теоремы Племелья–Сохоцкого* и *преобразования Гильберта*.

Физически соотношения Кронига–Крамерса реализуются для любой характеристики, которая может быть описана как восприимчивость, в частности – диэлектрическая проницаемость и показатель преломления, магнитная восприимчивость, электрическая проводимость. К примеру, на рис. 1 показаны типичные экспериментальные частотные зависимости показателя преломления и показателя затухания (мнимой части комплексного показателя преломления) диэлектрической среды вблизи некоторой собственной частоты  $\omega_0$ . Поведение показателя преломления в полной мере согласуется с указанными выше свойствами действительной и мнимой части восприимчивости (5.6).

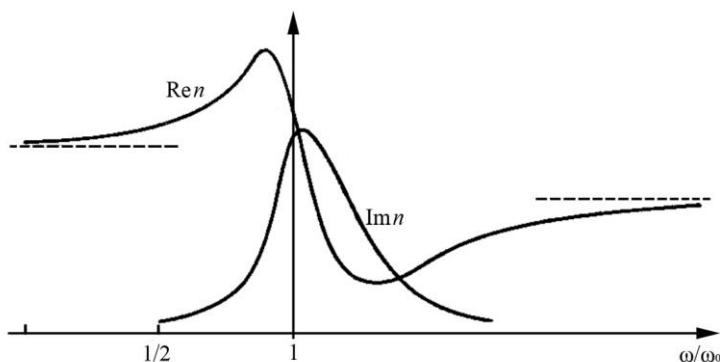


Рис. 1. Частотные зависимости действительной и мнимой части комплексного показателя преломления диэлектрической среды в окрестности собственной частоты  $\omega_0$

Следует отметить, что теория линейного отклика приводит к возникновению резонансной расходимости на

собственной частоте, однако достоверно передаёт форму и асимптотическое поведение кривых в достаточно большом интервале частот. В непосредственной окрестности собственной частоты системы теория неприменима и реальная восприимчивость всегда остаётся конечной.

Соотношения Кронига–Крамерса играют важную роль в исследовании свойств реальных сред, поскольку позволяют вдвое сократить объём экспериментальных данных, достаточный для полного описания системы.

В заключение приведём доказательство формул Племяля–Сохоцкого. Рассмотрим интегральное представление дельта-функции (как и ранее,  $-\epsilon t$  в показателе экспоненты – малая регуляризирующая добавка для обеспечения сходимости интеграла, устремляемая в конце вычисления к нулю):

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{ixt - \epsilon t}. \quad (5.49)$$

Разделяя бесконечный интервал интегрирования на два полуинтервала, получим:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{ixt - \epsilon t} &= \frac{1}{2\pi} \left[ \int_0^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{ixt - \epsilon t} + \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{2\pi} e^{ixt + \epsilon t} \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{1}{ix - \epsilon} \left( e^{ixt - \epsilon t} \Big|_{t \rightarrow +\infty} - 1 \right) + \frac{1}{ix + \epsilon} \left( 1 - e^{ixt + \epsilon t} \Big|_{t \rightarrow -\infty} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi} \left( \frac{-1}{ix - \epsilon} + \frac{1}{ix + \epsilon} \right) = \frac{1}{2\pi i} \left( \frac{1}{x - i\epsilon} - \frac{1}{x + i\epsilon} \right) = \\ &= \frac{i}{2\pi} \left( \frac{1}{x + i\epsilon} - \frac{1}{x - i\epsilon} \right) = \frac{i}{2\pi} \frac{2\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} = \begin{cases} 0, & x \neq 0, \\ \infty, & x = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (5.50)$$

Проверим нормировку правой части:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-b}^{+b} dx \frac{2\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} &= \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{x}{\epsilon} \Big|_{-b}^{+b} = \\ &= \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{b}{\epsilon} = \frac{2}{\pi} \frac{\pi}{2} = 1. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Таким образом, правая часть является альтернативным представлением дельта-функции Дирака и поэтому выполняется соотношение

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} - \frac{1}{x-i\varepsilon} = -2\pi\delta(x). \quad (5.52)$$

Введём обозначения

$$I^+(x) = \int_0^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{ixt - \varepsilon t},$$

$$I^-(x) = \int_{-\infty}^0 \frac{dt}{2\pi} e^{ixt + \varepsilon t}$$
(5.53)

и рассмотрим разность данных интегралов (в (5.50) уже была вычислена их сумма):

$$I^+(x) - I^-(x) = i \left( \frac{1}{x+i\varepsilon} + \frac{1}{x-i\varepsilon} \right) =$$

$$= \frac{2ix}{x^2 + \varepsilon^2} = \begin{cases} \frac{2i}{x}, & x \neq 0, \\ 0, & x = 0 \end{cases} = 2iP. \frac{1}{x}. \quad (5.54)$$

Итак, получаем соотношения:

$$I^+(x) + I^-(x) = 2\pi\delta(x),$$

$$I^+(x) - I^-(x) = 2iP. \frac{1}{x}. \quad (5.55)$$

Складывая их и вычитая одно из другого, непосредственно переходим к формулам Племеля–Сохоцкого (5.42).

## 6. КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

### 6.1. Свойства корреляционной функции

Корреляцию величин  $A$  и  $B$  в моменты времени  $0$  и  $t$  характеризует *корреляционная функция*, определяемая как среднее от *антикоммутатора* данных величин:

$$\Psi_{BA}(t) = \left\langle \frac{1}{2} [A, B(t)]_+ \right\rangle_0 = \frac{1}{2} \langle AB(t) + B(t)A \rangle_0. \quad (6.1)$$

Корреляционная функция связана с релаксационной. Для установления этой связи введём в рассмотрение *спектральную функцию*  $I_{BA}(\omega)$ :

$$\langle AB(t) \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{BA}(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (6.2)$$

Так как согласно (3.23)  $\langle B(t)A \rangle_0 = \langle AB(t+i\beta) \rangle_0$ , то интеграл Фурье для второго среднего также может быть выражен в терминах спектральной функции:

$$\langle B(t)A \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{BA}(\omega) e^{\beta\omega} e^{-i\omega t}. \quad (6.3)$$

Элементарное сложение показывает, что корреляционная функция имеет следующий интеграл Фурье:

$$\begin{aligned} \Psi_{BA}(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{BA}(\omega) \frac{1+e^{\beta\omega}}{2} e^{-i\omega t}, \\ \Psi_{BA}(\omega) &= I_{BA}(\omega) \frac{1+e^{\beta\omega}}{2}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Выразим теперь релаксационную функцию через спектральную:

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(t) &= \langle \tilde{A}B(t) \rangle_0 = \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\lambda)B(t) \rangle_0 = \\ &= \int_0^\beta d\lambda \langle AB(t+i\lambda) \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda\omega} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{BA}(\omega) \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\omega} e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Таким образом, Фурье-образ релаксационной функции

$$\Phi_{BA}(\omega) = I_{BA}(\omega) \frac{e^{\beta\omega} - 1}{\omega}. \quad (6.6)$$

В результате, становится очевидна связь Фурье-образов корреляционной и релаксационной функций:

$$\frac{\Psi_{BA}(\omega)}{\Phi_{BA}(\omega)} = \frac{\omega e^{\beta\omega} + 1}{2 e^{\beta\omega} - 1} = \frac{\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\beta\omega}{2} \equiv E_{\beta}(\omega). \quad (6.7)$$

По смыслу  $E_{\beta}(\omega)$  является равновесным средним значением энергии квантово-механического осциллятора с собственной частотой  $\omega$  при температуре  $T = \beta^{-1}$ .

Используя соотношение между Фурье-образами, возможно связать между собой и оригиналы рассматриваемых функций:

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \Phi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\Psi_{BA}(\omega)}{E_{\beta}(\omega)} e^{-i\omega t} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \Psi_{BA}(t') \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} E_{\beta}^{-1}(\omega) e^{-i(t'-t)\omega}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Получается

$$\Phi_{BA}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \Gamma(t-t') \Psi_{BA}(t'), \quad (6.9)$$

где

$$\Gamma(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} E_{\beta}^{-1}(\omega) e^{i\omega t}. \quad (6.10)$$

Данный интеграл вполне вычислим (см. ниже).

Имеет место и обратное соотношение между корреляционной и релаксационной функцией:



$$\begin{aligned}
\Psi_{BA}(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \Psi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} E_{\beta}(\omega) \Phi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} E_{\beta} \left( i \frac{d}{dt} \right) \Phi_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} = E_{\beta} \left( i \frac{d}{dt} \right) \Phi_{BA}(t).
\end{aligned} \tag{6.11}$$

Здесь для перехода к операторному соотношению использовано уравнение проблемы собственных значений

$$i \frac{d}{dt} e^{-i\omega t} = \omega e^{-i\omega t}. \tag{6.12}$$

Для вычисления полученного операторного соотношения можно воспользоваться разложением  $E_{\beta}(i d/dt)$  в ряд по аргументу:

$$\begin{aligned}
\beta E_{\beta}(\omega) &= \frac{\beta\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\beta\omega}{2} = \\
&= \frac{\beta\omega}{2} \left( \frac{2}{\beta\omega} + \frac{1}{3} \frac{\beta\omega}{2} - \frac{1}{45} \left( \frac{\beta\omega}{2} \right)^3 + \dots \right) = \\
&= 1 + \frac{1}{3} \left( \frac{\beta\omega}{2} \right)^2 - \frac{1}{45} \left( \frac{\beta\omega}{2} \right)^4 + \dots,
\end{aligned} \tag{6.13}$$

подставляя затем вместо частоты оператор дифференцирования по времени  $\omega = i d/dt$ .

В заключение продемонстрируем процедуру вычисления интеграла (6.10). Данный интеграл не может быть вычислен непосредственным образом или на основе теории вычетов, однако успешно находится с помощью разложения подынтегральной функции на элементарные дроби, которое, однако, выполняется нетривиальным способом.

Замена переменных

$$x = \frac{\beta\omega}{2},$$

$$\tilde{t} = \frac{2}{\beta}t$$
(6.14)

приводит интеграл к виду

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{th } x}{x} e^{i\tilde{t}x} dx.$$
(6.15)

Далее обратимся к известному представлению гиперболического косинуса в виде бесконечного произведения [6]:

$$\text{ch } x = \prod_{k=0}^{\infty} \left( 1 + \frac{4x^2}{\pi^2 (2k+1)^2} \right).$$
(6.16)

Логарифмируя это выражение, можно перейти от произведения к сумме бесконечного ряда:

$$\ln \text{ch } x = \sum_{k=0}^{\infty} \ln \left( 1 + \frac{4x^2}{\pi^2 (2k+1)^2} \right).$$
(6.17)

Дифференцируя ряд по  $x$ , получаем представление для гиперболического тангенса:

$$\text{th } x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{8x}{4x^2 + \pi^2 (2k+1)^2},$$
(6.18)

и, соответственно, для подынтегральной функции:

$$\frac{\text{th } x}{x} = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{x^2 + \left( \frac{\pi}{2} (2k+1) \right)^2}.$$
(6.19)

В результате, искомый интеграл записывается в форме бесконечного ряда:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\operatorname{th} x}{x} e^{i\tilde{x}} = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i\tilde{x}}}{x^2 + \left(\frac{\pi}{2}(2k+1)\right)^2}. \quad (6.20)$$

Содержащиеся в нём интегралы вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i\alpha x}}{x^2 + a^2} \quad (6.21)$$

однотипны и легко могут быть вычислены с применением теории вычетов.

Напомним подробнее соответствующую процедуру из теории функций комплексной переменной. По *теореме о вычетах* интеграл по замкнутому контуру  $C$  в комплексной плоскости от функции, аналитической на этом контуре, определяется суммой её вычетов в особых точках  $a_k$ , лежащих внутри заданного контура:

$$\int_C f(z) dz = 2\pi i \sum_{a_k} \operatorname{Res} f(z). \quad (6.22)$$

В рассматриваемом случае функция имеет две особые точки  $z = \pm ia$ , которые лежат на мнимой оси и являются полюсами первого порядка (рис. 2).

Контур для вычисления интеграла (6.21) необходимо выбирать исходя из знака параметра  $\alpha$  (рис. 2) так, чтобы интеграл по всем элементам контура, кроме интересующей нас действительной оси, был равен нулю. В любом из возможных случаев контур состоит из двух элементов – всей вещественной оси и замыкающей дуги полуокружности бесконечного радиуса. Внутри него лежит только одна особая точка. При  $\alpha > 0$  замыкающая дуга располагается в верхней полуплоскости, а при  $\alpha < 0$  – в нижней.

Применение леммы Жордана показывает, что интегралы по внешним дугам равны нулю, поскольку

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left| e^{\pm i|\alpha|z} \right| = \lim_{R \rightarrow \infty} e^{\mp |\alpha|R} = 0. \quad (6.23)$$

Кроме того, следует учесть, что при  $\alpha < 0$  направление движения по действительной оси изменяется (обход контура

интегрирования в теореме (6.22) всегда осуществляется *против часовой стрелки*) и соответственно изменяется знак интеграла.

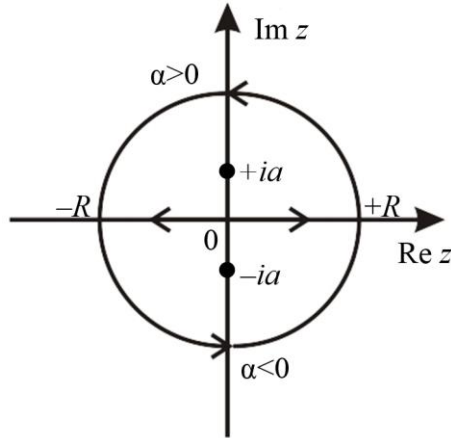


Рис. 2. Контуры для вычисления интеграла (6.21) и особые точки подынтегральной функции. Радиус окружности  $R$  стремится к бесконечности

Вычет функции в полюсе первого порядка  $z=a$  равен пределу

$$\operatorname{Res}_{z=a} f(z) = \lim_{z \rightarrow a} (z-a) f(z). \quad (6.24)$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{\pm i|a|x}}{x^2 + a^2} &= \pm 2\pi i \operatorname{Res}_{z=\pm ia} \frac{e^{\pm i|a|z}}{z^2 + a^2} = \\ &= \pm 2\pi i \lim_{z \rightarrow \pm ia} \frac{e^{\pm i|a|z}}{z \pm ia} = 2\pi i \frac{e^{-a|a|}}{2ai} = \frac{\pi}{a} e^{-a|a|}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

При  $\alpha=0$  интеграл вычисляется непосредственно.

Итак, получается бесконечный ряд

$$\begin{aligned} \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} e^{-\frac{\pi|t|}{2}(2k+1)} &= \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \left( e^{-\frac{\pi|t|}{2}} \right)^{2k+1} = \\ &= \frac{4}{\pi} \operatorname{Arth} \left( e^{-\frac{\pi|t|}{2}} \right). \end{aligned} \quad (6.26)$$

Данная сумма является разложением гиперболического арктангенса  $\operatorname{Arth}(x)$  в ряд Маклорена [6], справедливым при значениях аргумента  $|x| < 1$ , что заведомо выполняется. Наконец, поскольку

$$\operatorname{Arth}(x) = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{x+1}{x-1} \right), \quad (6.27)$$

результат может быть переписан в окончательном виде:

$$\Gamma(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{i\omega t}}{E_{\beta}(\omega)} = \frac{2}{\pi} \ln \operatorname{cth} \frac{\pi|t|}{2\beta}. \quad (6.28)$$

## 6.2. Флуктуационно-диссипативная теорема

Спонтанные флуктуации в макроскопической системе описываются временной корреляционной функцией  $\Psi_{BA}(t)$ . Чтобы убедиться в этом, достаточно заметить, что корреляционная функция (6.1), вычисленная для одной и той же величины, равна её дисперсии:

$$\Psi_{AA}(0) = \langle A^2 \rangle_0 \equiv \langle A^2 \rangle_0 - \langle A \rangle_0^2 = D[A], \quad (6.29)$$

т.к.  $\langle A \rangle_0 = 0$ . Отсюда вполне очевидна связь корреляционной функции и флуктуации.

Между флуктуациями в системе, подвергаемой периодическому внешнему воздействию, и происходящими в ней диссипативными процессами также существует взаимосвязь, реализуемая соотношением между диссипативной частью приведённой восприимчивости и Фурье-образом корреляционной функции. Действительно, ранее было доказано [см. (5.47), (6.7)]:

$$\begin{aligned}
\Psi_{BA}(\omega) &= E_{\beta}(\omega)\Phi_{BA}(\omega), \\
\operatorname{Re}\tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \frac{1}{2}\Phi_{BA}^s(\omega), \\
\operatorname{Im}\tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= -\frac{i}{2}\Phi_{BA}^a(\omega).
\end{aligned}
\tag{6.30}$$

Соответственно,

$$\begin{aligned}
E_{\beta}(\omega)\operatorname{Re}\tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \Psi_{BA}^s(t)e^{i\omega t}, \\
E_{\beta}(\omega)\operatorname{Im}\tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= -\frac{i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \Psi_{BA}^a(t)e^{i\omega t}.
\end{aligned}
\tag{6.31}$$

Кроме того, из соотношений симметрии релаксационной функции (5.46) следуют аналогичные соотношения для корреляционной:

$$\begin{aligned}
\Psi_{BA}^s(t) &= \Psi_{BA}^s(-t), \\
\Psi_{BA}^a(t) &= -\Psi_{BA}^a(-t).
\end{aligned}
\tag{6.32}$$

Комбинируя всё вместе, из соображений чётности-нечётности приходим к выводу

$$\begin{aligned}
E_{\beta}(\omega)\operatorname{Re}\tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \int_0^{\infty} dt \Psi_{BA}^s(t)\cos\omega t, \\
E_{\beta}(\omega)\operatorname{Im}\tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= \int_0^{\infty} dt \Psi_{BA}^a(t)\sin\omega t.
\end{aligned}
\tag{6.33}$$

Данные соотношения выражают содержание *флуктуационно-диссипативной теоремы*, также известной как *теорема Велтона–Коллена–Найквиста (Welton–Callen–Nyquist theorem)*. Оригинальная формулировка была предложена Г. Найквистом в 1928 г., а доказательство было предложено Т.А. Велтоном и Г. Колленом в 1951 г. В приведённом здесь виде теорема была получена Р. Кубо в работе 1957 г. Физически соотношения (6.33) непосредственно позволяют определить, каким будет отклик системы на спонтанные термодинамические флуктуации параметров и наоборот.

## 7. МОМЕНТЫ И АСИМПТОТИКИ

Приведённая восприимчивость определена соотношением (5.39). Можно рассматривать её вещественную часть как косинус-преобразование релаксационной функции

$$\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) = \int_0^{\infty} dt \Phi_{BA}^s(t) \cos \omega t. \quad (7.1)$$

Соответственно, для симметричной части релаксационной функции справедливо:

$$\Phi_{BA}^s(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) \cos \omega t. \quad (7.2)$$

Дифференцирование этого соотношения при  $t=0$  даёт

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^{2n}}{\partial t^{2n}} \Phi_{BA}^s(t) \right) \Big|_{t=0} &= (-1)^n \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \omega^{2n} \operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega), \\ \left( \frac{\partial^{2n-1}}{\partial t^{2n-1}} \Phi_{BA}^s(t) \right) \Big|_{t=0} &= 0. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Таким образом, полученная интегральная формула определяет чётные моменты действительной симметричной части восприимчивости  $\operatorname{Re} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega)$  через производные релаксационной функции в нуле.

Для мнимой части  $\chi^s$  имеет место асимптотическое разложение по обратным частотам. Интегрируя один раз по частям, находим первое слагаемое:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) &= \int_0^{\infty} dt \Phi_{BA}^s(t) \sin \omega t = \\ &= -\frac{1}{\omega} \Phi_{BA}^s(t) \cos \omega t \Big|_0^{\infty} + \frac{1}{\omega} \int_0^{\infty} dt \dot{\Phi}_{BA}^s(t) \cos \omega t = \\ &= \frac{\Phi_{BA}^s(0)}{\omega} + \frac{1}{\omega} \dot{\Phi}_{BA}^s(t) \sin \omega t \Big|_0^{\infty} - \frac{1}{\omega^2} \int_0^{\infty} dt \ddot{\Phi}_{BA}^s(t) \sin \omega t. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Продолжая интегрирование, получаем высшие порядки разложения, содержащего только нечётные степени частоты и чётные производные симметричной части релаксационной функции:

$$\text{Im } \tilde{\chi}_{BA}^s(\omega) = \frac{\Phi_{BA}^s(0)}{\omega} - \frac{\ddot{\Phi}_{BA}^s(0)}{\omega^3} + \frac{\dddot{\Phi}_{BA}^s(0)}{\omega^5} + \dots \quad (7.5)$$

В пределе высоких частот мнимая часть симметричной части восприимчивости системы обратно пропорциональна частоте внешнего поля.

Перейдём к антисимметричной части восприимчивости. Аналогично предыдущему она может быть рассмотрена как синус-преобразование релаксационной функции:

$$\begin{aligned} \text{Im } \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) &= \int_0^{\infty} dt \Phi_{BA}^a(t) \sin \omega t, \\ \Phi_{BA}^a(t) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \text{Im } \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) \sin \omega t. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Вычисление производных даёт:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^{2n-1}}{\partial t^{2n-1}} \Phi_{BA}^a(t) \right) \Big|_{t=0} &= (-1)^{n+1} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \omega^{2n-1} \text{Im } \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega), \\ \left( \frac{\partial^{2n}}{\partial t^{2n}} \Phi_{BA}^a(t) \right) \Big|_{t=0} &= 0. \end{aligned} \quad (7.7)$$

И, соответственно, для  $\text{Re } \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega)$  существует асимптотическое разложение по чётным обратным степеням частоты и нечётным производным  $\Phi_{BA}^a(t)$ :

$$\text{Re } \tilde{\chi}_{BA}^a(\omega) = -\frac{\dot{\Phi}_{BA}^a(0)}{\omega^2} + \frac{\ddot{\Phi}_{BA}^a(0)}{\omega^4} - \frac{\dddot{\Phi}_{BA}^a(0)}{\omega^6} + \dots \quad (7.8)$$

На высоких частотах действительная часть антисимметричной части восприимчивости убывает пропорционально квадрату частоты.



Найденные высокочастотные асимптотики компонент тензора восприимчивости выполняются для всех систем без исключения, поскольку вычислены только на основе общих математических свойств релаксационной функции.

## 8. ПРИМЕРЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

### 8.1. Классический гармонический осциллятор

Простейшим примером использования техники линейного отклика является описание классического гармонического осциллятора с затуханием, находящегося под действием внешней силы. Рассмотрим уравнение одномерных вынужденных колебаний:

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = F(t), \quad (8.1)$$

где  $\gamma$  – коэффициент затухания,  $\omega_0$  – собственная частота колебаний осциллятора. Сила  $F(t)$  является периодической, с частотой  $\omega$ .

Предполагается, что в начальном состоянии осциллятор пребывает в состоянии равновесия. Тогда, используя выражение для отклика системы (2.45), можно записать закон движения как

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \varphi(t - \tau) F(\tau), \quad (8.2)$$

где  $\varphi$  – некоторая не известная пока функция отклика. Вводя для неё обратное преобразование Фурье

$$\varphi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \varphi(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (8.3)$$

и подставляя интегральное представление решения в уравнение (8.1), получим:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-\omega^2 - i\gamma\omega + \omega_0^2) \varphi(\omega) e^{-i\omega(t-\tau)} F(\tau) = F(t). \quad (8.4)$$

Левая и правая части равны между собой. Это достигается только когда интеграл по частоте равен дельта-функции

[см. (5.49)], что непосредственно определяет вид функции отклика. Она является Фурье-образом *функции Грина* исходного уравнения:

$$\varphi(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - i\gamma\omega - \omega^2}. \quad (8.5)$$

Напомним, что функцией Грина неоднородного дифференциального уравнения называется его решение при мгновенно действующем источнике. Для уравнений с пространственными производными источник также должен быть локализован в одной точке. Иными словами, он описывается дельта-функцией Дирака, что в рассмотренном примере означает

$$F(t) \sim \delta(t - t_0). \quad (8.6)$$

При  $\omega=0$  полученное выражение определяет статическую восприимчивость осциллятора к внешнему воздействию, равную  $\chi(0) = \omega_0^{-2}$ . Физически она задаёт смещение положения равновесия под действием постоянной силы:

$$x|_{\omega=0} = \frac{F}{\omega_0^2}. \quad (8.7)$$

Далее можно исследовать поведение функции отклика в комплексной плоскости. Она имеет два полюса

$$\omega_c = -\frac{i\gamma}{2} \pm \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}, \quad (8.8)$$

которые при  $\omega_0^2 > \gamma/4$  лежат в нижней полуплоскости симметрично относительно мнимой оси, а при  $\omega_0^2 < \gamma/4$  – на её отрицательной ветви. Сопоставляя (8.8) с известными результатами классической механики, видим, что полюсы определяют собственные частоты ( $\text{Re } \omega_c$ ) и декремент затухания ( $\text{Im } \omega_c$ ) осциллятора.

Важно отметить, что в данном примере мы непосредственно показали значимость функций Грина в исследовании различных задач и нахождении отклика системы

на воздействие. Наибольшее развитие метод функций Грина, также называемых *пропагаторами* или *функциями распространения*, получил в квантовой теории поля и квантовой теории систем многих частиц, где с их помощью определяются уровни энергии систем, сечения рассеяния взаимодействий частиц и вычисляются матричные элементы операторов взаимодействия. В указанных областях физики точное нахождение функций Грина возможно только для ряда простейших систем и поэтому они вычисляются преимущественно приближёнными методами, основанными на теории возмущений. Наиболее ярким и известным среди этих методов является *диаграммная техника Фейнмана*, подробно излагаемая в рамках курса квантовой электродинамики.

Как и в классическом случае, важная информация о состояниях квантовой системы содержится в особых точках Фурье-образа функции Грина. А именно, его полюсы на комплексной плоскости отвечают значениям частот, определяющих разность энергий возбуждённых состояний системы из  $N+1$  взаимодействующей частицы и энергии основного состояния системы из  $N$  частиц, и позволяют определить спектральные характеристики системы, исследовать свойства коллективных возбуждений и др. Кроме того, рассмотренные в п. 3, 4, 6 функция отклика, релаксационная функция и корреляционная функция также являются т.н. *двухвременными функциями Грина*, определяемыми в рамках формализма, предложенного Д.Н. Зубаревым (см. п. 9, а также работы [2,3] и основополагающую статью [11] в списке рекомендованной литературы).

## 8.2. Электропроводность

В качестве примера применения изложенного выше математического аппарата к квантовым системам рассмотрим задачу о возникновении тока в системе электрических зарядов под действием переменного электрического поля  $\vec{E}(t)$ . Система состоит из микроскопических частиц массами  $m_a$ , несущих заряды  $e_a$ . Предполагается, что она электрически нейтральна, но

может иметь некоторый дипольный момент. Интерес в данном случае представляет проводимость системы, которая и играет роль восприимчивости.

В рамках теории линейного отклика между формальными переменными и конкретными характеристиками задачи устанавливается однозначное соответствие. Оператором внешнего поля является электрическое

$$\vec{F}(t) \leftrightarrow \vec{E}(t), \quad (8.9)$$

а в качестве операторов  $A$  и  $B$  выбраны следующие характеристики системы:

$$\begin{aligned} A \leftrightarrow \vec{d} &= \sum_a e_a \vec{q}_a, \\ B \leftrightarrow \vec{j} &= \sum_a e_a \vec{v}_a = \dot{\vec{d}}, \end{aligned} \quad (8.10)$$

где  $\vec{q}_a$ ,  $\vec{v}_a$  – обобщённые координаты и скорости частиц,  $\vec{d}$  – суммарный дипольный момент системы,  $\vec{j}$  – полный ток в системе. Аналогичным способом может быть описана и пространственно-непрерывная система с соответствующей заменой дискретных величин на непрерывные (плотность заряда, вектор поляризации и плотность тока), а также сумм – на интегралы:

$$\begin{aligned} A \leftrightarrow \vec{d} &= \int_V \rho(\vec{q}) \vec{q} dV, \\ B \leftrightarrow \vec{j} &= \int_V \rho(\vec{q}) \dot{\vec{q}} dV = \int_V \rho(\vec{q}) \vec{v} dV, \end{aligned} \quad (8.11)$$

где  $\rho(\vec{r})$  – объёмная плотность электрического заряда,  $V$  – занимаемый системой объём.

Для функции отклика в данном случае удобно использовать представление вида (3.3):

$$\begin{aligned} \varphi_{j_k d_l}(t) &= i \text{Sp} \left\{ j_k(t) [d_l, \rho_0]_- \right\} = \\ &= i \text{Sp} \left\{ \rho_0 [j_k(t), d_l]_- \right\} = i \left\langle [j_k(t), d_l]_- \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (8.12)$$

либо с применением тождества Кубо (3.22):

$$\varphi_{j_k d_l}(t) = \left\langle \tilde{d}_l j_k(t) \right\rangle_0. \quad (8.13)$$

Проводимость системы выражается через функцию отклика согласно (5.3):

$$\sigma_{kl}(\omega) = \int_0^{\infty} dt \varphi_{j_k d_l}(t) e^{i\omega t - \epsilon t}. \quad (8.14)$$

Поскольку ток является производной по времени от дипольного момента системы [см. (8.9)], функция отклика может рассматриваться как релаксационная функция (4.11):

$$\varphi_{j_k d_l}(t) = \Phi_{j_k j_l}(t) = \left\langle \tilde{j}_l j_k(t) \right\rangle_0. \quad (8.15)$$

Соответственно, проводимость действительно является приведённой восприимчивостью:

$$\sigma_{kl}(\omega) = \int_0^{\infty} dt \Phi_{j_k j_l}(t) e^{i\omega t}, \quad (8.16)$$

и обладает всеми свойствами последней, в частности, в отношении моментов и асимптотических разложений, полученных в п. 7. Следовательно, вычислив моменты функции отклика системы зарядов в невозмущённом состоянии, можно получить асимптотическую зависимость проводимости от частоты.

Результат (8.16) для проводимости впервые был описан Р. Кубо в 1957 г. Математически он означает, что проводимость системы является автокорреляционной функцией полного потока заряда, а физически – устанавливает соотношение между проводимостью и термодинамическими флуктуациями плотности тока в основном состоянии. В рамках описанного формализма аналогичным образом выражается теплопроводность сред (через потоки энергии), вязкость жидкостей (через потоки импульсов) и другие характеристики разнообразных классических и квантовых систем.

Примем в качестве невозмущённого состояния пребывания системы зарядов в постоянном электромагнитном

поле с  $\text{div } \vec{A}_a = 0$ , что совместно с применением калибровки Лоренца, когда выполняется

$$\text{div } \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (8.17)$$

позволяет положить электростатический потенциал  $\phi$  равным нулю.

Гамильтониан невозмущённого состояния системы нерелятивистских заряженных частиц в присутствии магнитного поля записывается в следующей форме:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_a \frac{1}{2m_a} \left( \vec{p}_a - \frac{e_a}{c} \vec{A}_a \right)^2 + U(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_N). \quad (8.18)$$

Видоизменение компонент импульса в гамильтониане связано с действием на частицы силы Лоренца и оказывается одинаковым как в классической, так и квантовой механике. С подробным описанием общей процедуры учёта влияния электромагнитного поля на движение заряда и переходом к нерелятивистскому пределу малых скоростей движения можно ознакомиться в работе [5].

Вычислим далее функцию отклика и несколько её первых производных при  $t=0$ . Для определения тока предварительно выразим обобщённую скорость частиц через их импульсы. Она может быть определена посредством уравнения Гейзенберга:

$$v_{aj} = \dot{q}_{aj} = i \left[ \mathcal{H}_0, q_{aj} \right]_-. \quad (8.19)$$

Непосредственное вычисление коммутатора гамильтониана (8.18) и координаты с учётом соотношения неопределённости для координаты и импульса

$$\left[ q_{ak}, p_{a'l} \right]_- = i \delta_{aa'} \delta_{kl} \quad (8.20)$$

даёт

$$v_{aj} = \frac{1}{m_a} \left( p_{aj} - \frac{e_a}{c} A_{aj} \right). \quad (8.21)$$

Функция отклика определяется коммутатором тока и дипольного момента:

$$\begin{aligned}
 \Phi_{j_k d_l}(0) &= i \langle [j_k(t), d_l]_- \rangle_0 = \\
 &= i \left\langle \left[ \sum_b \frac{e_b}{m_b} \left( p_{bk} - \frac{e_b}{c} A_{bk} \right), \sum_a e_a q_{al} \right]_- \right\rangle_0 = \quad (8.22) \\
 &= \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} \delta_{kl} = \Phi_{j_k d_l}^s(0).
 \end{aligned}$$

Видно, что её антисимметричная часть в начальный момент времени равна нулю, как это и следует из выражения (7.7).

С учётом второго варианта представления функции отклика в формуле (3.1) её первая производная может быть найдена через коммутаторы скоростей частиц:

$$\begin{aligned}
 \dot{\Phi}_{j_k d_l}(0) &= \frac{d}{dt} \left( i \langle [j_k(t), d_l]_- \rangle_0 \right) = \\
 &= \frac{d}{dt} \left( i \langle [j_k, d_l(-t)]_- \rangle_0 \right) = \quad (8.23) \\
 &= -i \langle [j_k, j_l]_- \rangle_0 = -i \left\langle \sum_{a, a'} e_a e_{a'} [v_{ak}, v_{a'l}]_- \right\rangle_0.
 \end{aligned}$$

Используя найденную выше скорость (8.21), вычисляем данный коммутатор:

$$\begin{aligned}
 [v_{ak}, v_{a'l}]_- &= \frac{1}{m_a m_{a'}} \left[ p_{ak} - \frac{e_a}{c} A_{ak}, p_{a'l} - \frac{e_{a'}}{c} A_{a'l} \right]_- = \\
 &= -\frac{ie_a}{m_a^2 c} \delta_{aa'} \left( \frac{\partial A_{ak}}{\partial q_{al}} - \frac{\partial A_{a'l}}{\partial q_{a'k}} \right) = -\frac{ie_a}{m_a^2 c} \delta_{aa'} \varepsilon_{klp} H_{ap}, \quad (8.24)
 \end{aligned}$$

где  $\varepsilon_{klp}$  – символ Леви-Чивиты,  $H_{ap}$  – напряжённость магнитного поля. Переход к напряжённости производится, поскольку в выражении возникает компонента ротора векторного потенциала. Здесь также использовано известное выражение для коммутатора импульса с произвольной функцией координат:

$$\left[ f(q_k), p_j \right]_- = i \nabla_j f(q_k). \quad (8.25)$$

Направляя ось  $z$  вдоль поля, получим

$$H_{ap} = \delta_{pz} H_z. \quad (8.26)$$

Из результата (8.24) находим первую производную функции отклика:

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_{j_k d_l}(0) &= \left\langle \sum_a \frac{e_a^3}{m_a^2 c} \varepsilon_{lkp} H_{ap} \right\rangle_0 = \\ &= \sum_a \frac{e_a^3}{m_a^2 c} \varepsilon_{lkz} H_{az} = \dot{\phi}_{j_k d_l}^a(0). \end{aligned} \quad (8.27)$$

Учитывая свойства тензора Леви-Чивиты, легко заметить, что в данном случае существует только антисимметричная компонента функции отклика.

Таким образом, в высокочастотном приближении для диссипативных компонент электропроводности получается

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{kl}^s(\omega) &= \frac{1}{\omega} \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} \delta_{kl} + O(\omega^{-3}), \\ \text{Re } \sigma_{kl}^a(\omega) &= -\frac{1}{\omega^2} \sum_a \frac{e_a^3}{m_a^2 c} \varepsilon_{lkz} H_{az} + O(\omega^{-4}). \end{aligned} \quad (8.28)$$

Очевидно, наложение магнитного поля приводит к возникновению анизотропии характеристик системы, что вызвано влиянием на отдельные частицы силы Лоренца и проявляется на макроскопическом уровне в виде *эффекта Холла*, а также явлений *магнетосопротивления* – т.е. зависимости электропроводности веществ от направления и величины приложенного к ним магнитного поля.

Найденные значения функции отклика и её производной определяют также и младшие моменты дисперсионных компонент электропроводности согласно соотношениям Кронига–Краммера:



$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \operatorname{Re} \sigma_{kl}^s(\omega) = \sum_a \frac{e_a^2}{m_a} \delta_{kl},$$

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \omega \operatorname{Im} \sigma_{kl}^a(\omega) = \sum_a \frac{e_a^3}{m_a^2 c} \varepsilon_{lkz} H_{az}.$$
(8.29)

Отсюда может быть установлена предельная высокочастотная асимптотика входящих в них компонент электропроводности:

$$\operatorname{Re} \sigma_{kl}^s(\omega) \lesssim \frac{1}{\omega^{1+\varepsilon}},$$

$$\operatorname{Im} \sigma_{kl}^a(\omega) \lesssim \frac{1}{\omega^{2+\varepsilon}}.$$
(8.30)

Видно, что асимптотика дисперсионных компонент электропроводности совпадает с результатом, полученным для её диссипативных частей. Меньшие значения показателя приводят к возникновению расходимости интегралов.

Продолжая вычисление производных функции отклика, можно получить высокочастотную аппроксимацию электропроводности до любого порядка точности. Однако данная процедура становится весьма громоздкой ввиду усложнения коммутаторов и необходимости учёта ускорений частиц и старших производных координат. Вычисление средних вида (8.22) в более широком частотном диапазоне доступно с применением аппарата функций Грина в теории многих частиц, но также может быть выполнено лишь приближённо.

Стоит отметить, что современные компьютерные пакеты аналитических вычислений, такие как Maplesoft Maple или Wolfram Mathematica, обладают широким набором встроенных средств решения различных задач в области математики и физики и потому могут быть эффективно применены для выполнения аналитических расчётов в рамках теории линейного отклика.

### 8.3. Соотношение Эйнштейна–Смолуховского

Основываясь на общем выражении для электропроводности (8.16), можно записать её в статическом

случае через коэффициент диффузии носителей заряда в системе. Используя связь корреляционной и релаксационной функций (6.7), а также разложение (6.13) в пределе нулевой частоты, находим

$$\Psi_{BA}(0) = \beta \Phi_{BA}(0). \quad (8.31)$$

Соответственно, статическая электропроводность согласно (8.16) может быть определена как

$$\sigma_{kl}(0) = \beta \int_0^{\infty} dt \Psi_{j_k j_l}(t). \quad (8.32)$$

Принимая далее, что система – классическая и переходя от плотности тока к скоростям частиц, получим

$$\sigma_{kl}(0) = \beta n e^2 \int_0^{\infty} dt \langle v_k(0) v_l(t) \rangle. \quad (8.33)$$

Если скорости частиц статистически независимы, то среднее под интегралом в на больших временах равно нулю:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle v_k(0) v_l(t) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle v_k \rangle \langle v_l \rangle = 0. \quad (8.34)$$

С использованием данного свойства можно преобразовать интеграл:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dt \langle v_k(0) v_l(t) \rangle &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_0^T \int_0^T \langle v_k(t') v_l(t) \rangle dt dt' = \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \langle (x_k(T) - x_k(0))(x_l(T) - x_l(0)) \rangle = D_{kl}, \end{aligned} \quad (8.35)$$

где  $D_{kl}$  – коэффициент диффузии. Соответственно, электропроводность будет такой:

$$\sigma_{kl}(0) = \beta n e^2 D_{kl} = \frac{n e^2}{k_B T} D_{kl}, \quad (8.36)$$

откуда непосредственно получается известное соотношение Эйнштейна–Смолуховского, связывающее коэффициент диффузии, температуру и подвижность частиц  $\mu_{kl}$ :

$$D_{kl} = k_B T \frac{\sigma_{kl}(0)}{ne^2} \equiv \mu_{kl} k_B T. \quad (8.37)$$

Подвижность частицы по отношению к действию внешней силы  $F$  определяется соотношением

$$F_k = \mu_{kl} v_l, \quad (8.38)$$

что в рассмотренном случае движения под действием электрического поля и приводит к результату (8.37). Таким образом, видно, что коэффициент диффузии частиц выражается через корреляционную функцию их объёмных потоков. Соотношение для коэффициента диффузии, модифицированное с учётом межчастичного взаимодействия, может быть применено для его вычисления в самых разнообразных системах.

#### 8.4. Теплопроводность

В дополнение продемонстрируем способ применения теории линейного отклика к нахождению коэффициента теплопроводности сплошной среды. Данный пример отличается нетривиальным заданием операторов и гамильтониана системы и демонстрирует универсальность формализма теории линейного отклика.

Полный тепловой поток в некотором объёме  $V$  неоднородно нагретой среды определяется законом Фурье:

$$Q_j = \langle q_j \rangle = - \int dV \kappa_{jk}(\vec{r}, \vec{r}') \nabla_k T(\vec{r}'), \quad (8.39)$$

где  $\kappa_{jk}$  – тензор коэффициентов теплопроводности, играющий в данном случае роль восприимчивости. Поскольку типичные времена теплопередачи в макроскопических объектах существенно больше микроскопических времён релаксации, то можно рассматривать только предельный случай статической восприимчивости.

Тепловой поток  $Q_j$  и является откликом системы на локальное изменение температуры. Градиент температуры, как это видно из структуры выражения (8.39), играет роль внешнего

поля  $F$ , возмущающего равновесное состояние с постоянной температурой  $T$ . Однако он не может быть включён в гамильтониан системы непосредственно, и простой выбор соответствующих операторов для вычислений оказывается невозможен. Покажем возможный вариант вычисления эффективного возмущения гамильтониана и функции отклика системы в данной задаче. Такие возмущения, которые не могут быть непосредственно заданы аддитивной поправкой в гамильтониану, принято называть *термическими*. Рассмотренные выше возмущения с энергией вида (2.33) обычно называются *механическими*.

Полагая, что в системе реализуется принцип локального равновесия, можем записать для функции распределения системы стандартное распределение Гиббса (2.36). Поскольку  $T = \beta^{-1}$ , то при отклонении её от равновесия на величину  $\delta T$  можно записать для  $\beta$  в первом приближении

$$\beta(\vec{r}) \approx \beta_0 \left( 1 - \frac{\delta T(\vec{r})}{T} \right). \quad (8.40)$$

Подставляя данную величину в функцию распределения и полагая дополнительно, что гамильтониан основного состояния определён через объёмную плотность:

$$\mathcal{H}_0 = \int dV h_0(\vec{r}), \quad (8.41)$$

получим

$$\rho(\mathcal{H}_0, \delta T) \approx \frac{e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{eff}})}}{\text{Sp} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \right\}}, \quad (8.42)$$

где введён эффективный гамильтониан возмущения

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{T} \int dV \delta T(\vec{r}) h_0(\vec{r}). \quad (8.43)$$

Поправка в знаменателе функции распределения не учитывается в линейном порядке точности.

В свою очередь объёмная плотность гамильтониана может быть записана через тепловой поток, основываясь на локальном

законе сохранения энергии. При отсутствии дополнительного объёмного тепловыделения в среде она определяется как

$$\frac{\partial h_0(\vec{r})}{\partial t} = -\nabla_j q_j(\vec{r}), \quad (8.44)$$

$$h_0(\vec{r}) = -\int dt \nabla_j q_j(\vec{r}).$$

Подставляя данный результат в выражение (8.43), вносим возмущение температуры под знак градиента и, принимая, что на границах рассматриваемого объёма среды возмущение равно нулю, получаем

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{1}{T} \int dV \int dt \nabla_j T(\vec{r}) q_j(\vec{r}), \quad (8.45)$$

или, при однородном градиенте температуры,

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{1}{T} \int dt \nabla_j T \int dV q_j(r) = -\frac{V}{T} \int_{-\infty}^0 dt \nabla_j T Q_j. \quad (8.46)$$

Отсюда следует, что оператором  $A$  в рассматриваемой задаче выступает интеграл по времени:

$$A_j = \frac{V}{T} \int_{-\infty}^0 dt Q_j. \quad (8.47)$$

Наблюдаемой  $B$  согласно уравнению (8.39) является усреднённый по объёму тепловой поток  $Q_j$ . Таким образом, теплопроводность может быть определена через флуктуации тепловых потоков:

$$\kappa_{jk} = \left\langle \tilde{A}_j Q_k \right\rangle_0. \quad (8.48)$$

Если в выражении (8.47) внести температуру под знак интеграла, получится, что  $A$  – это средний поток энтропии в некотором объёме среды.

Итак, нам удалось продемонстрировать возможность применения теории линейного отклика и для задачи, в которой невозможно непосредственно записать гамильтониан возмущения. Соответственно, максимально общим подходом при исследовании неравновесных систем при малом отклонении

от основного состояния является вычисление поправки первого порядка к функции распределения, откуда уже можно получить поправку к равновесному гамильтониану и установить вид эффективного гамильтониана взаимодействия и обобщённого внешнего поля. Данный результат одинаково применим и к классическим, и к квантовым системам, что определяется заданием конкретного  $\mathcal{H}_0$  как функции Гамильтона или гамильтониана, соответственно.

## 9. МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА

В пункте 8.1 на примере классического осциллятора была показана роль функций Грина в решении задач неравновесной статистической физики. Сделаем небольшое дополнение, чтобы прокомментировать данный метод более подробно.

Многочисленные задачи физики конденсированного состояния опираются на представления о *квазичастицах* – *фононах, магнонах, экситонах, куперовских парах* и др. – элементарных возбуждениях основного состояния термодинамических систем, обладающих свойствами, подобными свойствам «обычных» частиц. В частности, они имеют собственную энергию, импульс, взаимодействуют друг с другом и «обычными» частицами. Все эти частицы так или иначе определяют свойства системы в целом, на макроскопическом уровне. Описание в терминах квазичастиц позволяет отказаться от рассмотрения неравновесного состояния системы, содержащей большое число элементов, и описывать лишь отклонения от её равновесного состояния с привлечением относительно небольшого количества объектов и формализма квантовопольевых операторов рождения и уничтожения квазичастиц. Для этого используется *метод вторичного квантования*, обычно демонстрируемый в квантовой механике на примере гармонического осциллятора.

### 9.1. Определение функций Грина

Функции Грина определяют амплитуды вероятности обнаружения в системе частиц с заданными свойствами.

Например, *одночастичная функция Грина*  $G(r_2, t_2; r_1, t_1)$  определяет амплитуду вероятности того, что частица, находившаяся в момент времени  $t_1$  в точке  $r_1$ , окажется в момент  $t_2$  в точке  $r_2$ . При этом в промежутке между данными моментами времени частица может каким угодно образом двигаться в пределах рассматриваемой системы, рассеиваться на составных элементах системы и т.п. Аналогично *двухчастичная функция Грина*  $G(r_3, t_3, r_4, t_4; r_1, t_1, r_2, t_2)$  определяет амплитуду вероятности обнаружить одну частицу в точке  $(r_3, t_3)$ , а другую – в  $(r_4, t_4)$ , если они проходили через точки  $(r_1, t_1)$  и  $(r_2, t_2)$ , соответственно, и т.д. Функции Грина позволяют определить энергии и времена жизни квазичастиц, их распределение по импульсам и спинам, а также описать макроскопические неравновесные свойства систем вблизи основного состояния.

Формально функции Грина являются обобщением рассмотренных ранее корреляционных и релаксационных функций. Существует множество их типов, однако наиболее используемым на практике является семейство *двухвременных функций Грина* [11]. К ним относится *причинная* функция

$$\begin{aligned} G_{AB}^{\eta}(t_1, t_2) &= -i \langle TA(t_1)B(t_2) \rangle \equiv \\ &\equiv \frac{1}{i} \Theta(t_1 - t_2) \langle A(t_1)B(t_2) \rangle + \frac{\eta}{i} \Theta(t_2 - t_1) \langle B(t_2)A(t_1) \rangle, \end{aligned} \quad (9.1)$$

а также *запаздывающие* и *опережающие* функции

$$\begin{aligned} G_{AB}^{\eta, j}(t_1, t_2) &= \langle \langle A(t_1) | B(t_2) \rangle \rangle_j^{\eta} \equiv \\ &\equiv ij \Theta(-j(t_1 - t_2)) \langle [A(t_1), B(t_2)]_{-\eta} \rangle. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Здесь  $T$  – оператор хронологического упорядочения (см. п. 2.2);  $\Theta(t)$  – функция Хэвисайда (4.2);  $j = -1$  для запаздывающих и  $j = +1$  для опережающих функций, а  $\eta = +1$  для произвольных бозевских операторов  $A$  и  $B$ ,  $\eta = -1$  – для фермиевских. Как и ранее, усреднение здесь производится по распределению Гиббса. Для операторов  $A$ ,  $B$  используется представление Гейзенберга. Можно показать, что все введённые функции Грина в действительности зависят только от разности

аргументов  $(t_1-t_2)$ , равно как и входящие в них средние значения коммутаторов и антикоммутаторов.

## 9.2. Применение функций Грина в теории линейного отклика

Продемонстрируем далее некоторые примеры, позволяющие указать взаимосвязь изложенной выше теории Кубо и метода функций Грина. Сопоставляя выражения (3.3) и (9.2), можно заметить, что функция отклика в представлении

$$\begin{aligned}\varphi_{BA}(t) &= i\text{Sp}\left\{\rho_0(\mathcal{H}_0)[B(t), A]_-\right\} = \\ &= i\langle [B(t), A]_- \rangle\end{aligned}\quad (9.3)$$

может быть описана запаздывающей функцией Грина  $G_{BA}^{n-}(t, 0)$ . Соответственно, функция отклика и производные от неё – релаксационная функция и восприимчивость – тоже являются функциями Грина и для них выполняются все основные свойства последних. Отклик системы, таким образом, может быть записан в следующей форме:

$$\Delta B(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt' F_j(t') G_{BA_j}^{n-}(t-t'), \quad (9.4)$$

минус перед интегралом возникает напрямую из определения (9.2). Этот результат также известен как *формула Кубо* для отклика системы [см. (2.45)].

На практике удобно использовать Фурье-образы функций Грина, поскольку, как указано выше, их полюсы определяют собственные энергии и времена жизни квазичастиц в системе. Соответственно, можно записать отклик непосредственно в терминах Фурье-образов. Запишем обратное преобразование Фурье для внешнего поля  $F_j$ :

$$F_j(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F(\omega) e^{-i\omega t} \quad (9.5)$$

и подставим в (9.4):



$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_j(\omega) e^{-i\omega t'} G_{BA_j}^{\eta,-}(t-t'). \quad (9.6)$$

Меняя порядок интегрирования, получаем

$$\begin{aligned} \Delta B(t) &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_j(\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} dt' G_{BA_j}^{\eta,-}(t-t') e^{-i\omega t'} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_j(\omega) e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') G_{BA_j}^{\eta,-}(t-t') e^{i\omega(t-t')}. \end{aligned} \quad (9.7)$$

Интеграл по времени от функции Грина определяет её Фурье-образ, поэтому

$$\Delta B(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega F_j(\omega) G_{BA_j}^{\eta,-}(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (9.8)$$

### 9.3. Магнитная восприимчивость модели Гейзенберга

Рассмотрим в качестве примера ещё физической задачи вычисление магнитной восприимчивости системы взаимодействующих спинов на основе *модели Гейзенберга*. Гамильтониан этой модели учитывает только обменное взаимодействие  $N$  спинов, зафиксированных в узлах решётки. Спин может ориентироваться в различных направлениях относительно внешних полей согласно правилам квантования, в отличие от *модели Изинга*, где рассматриваются только два возможных направления.

Энергия взаимодействия частиц на различных узлах решётки определяется скалярным произведением их спинов:

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2} \sum_{a \neq b} J_{ab} \vec{s}^{(a)} \cdot \vec{s}^{(b)}, \quad (9.9)$$

где  $J_{ab}$  – *обменный интеграл*, характеризующий взаимодействие отдельных спиновых моментов, а индексы  $a$  и  $b$  нумеруют узлы решётки. Параметр  $J_{ab}$  не является тензором – это скаляр, который в общем случае может зависеть от относительных расстояний между частицами. Это и выражают приписанные ему индексы. Суммирование производится по всем узлам, хотя

на практике обычно достаточно учитывать взаимодействие спина с ближайшими соседями.

Если рассматривать только вклад от соседей первого порядка, то обменный интеграл является константой в пределах всей решётки, а его знак полностью определяет характер упорядочения системы. При  $J > 0$  энергетически выгодно, чтобы спины были сонаправлены. Тогда система обладает *ферромагнитными* свойствами, прежде всего спонтанной намагниченностью. Напротив, при  $J < 0$  реализуется *антиферромагнитное* упорядочение с противоположно направленными спинами, в основном состоянии намагниченностью не обладающее. При учёте следующих координационных сфер в сумме (9.9) можно получить более сложные магнитные структуры, например, *неколлинеарные* и *геликоидальные* магнетики.

Полный магнитный момент системы равен сумме моментов отдельных спинов:

$$\vec{m} = \sum_a \vec{m}^{(a)} = \mu_B \sum_a \vec{s}^{(a)}, \quad (9.10)$$

где  $\mu_B$  – магнетон Бора. При воздействии на систему однородного переменного магнитного поля  $H_j(t)$  возмущение равновесного гамильтониана определяется энергией взаимодействия полного магнитного момента с полем:

$$\mathcal{H}_1(t) = -\vec{m} \cdot \vec{H}(t) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega m_j H_j(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (9.11)$$

Интерес в данной задаче представляет *намагниченность* – магнитный момент единицы объёма вещества

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \langle \vec{m} \rangle \quad (9.12)$$

и её изменение при включении поля. В формальных обозначениях, используемых в тексте, намагниченность выступает в качестве наблюдаемой  $B$ , а полный магнитный момент системы является оператором  $A$ . Отклик намагниченности определяется формулой Кубо (9.4):

$$\begin{aligned}\Delta M_j(t) &= M_j(t) - M_j^0 = \\ &= -\frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' H_k(t') \langle \langle m_j(t) | m_k(t') \rangle \rangle, \end{aligned} \quad (9.13)$$

или в терминах Фурье-преобразования

$$\Delta M_j(t) = \frac{1}{2\pi V} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega H_k(\omega) \chi_{jk}(\omega) e^{-i\omega t + \epsilon t}, \quad (9.14)$$

где введён тензор магнитной восприимчивости

$$\chi_{jk}(\omega) = -\frac{1}{V} \langle \langle m_j(t) | m_k(t) \rangle \rangle(\omega). \quad (9.15)$$

Здесь возможны различные случаи. Так, важной величиной является *поперечная восприимчивость*, определяемая через циклические компоненты магнитных моментов  $m_{\pm} = m_x \pm im_y$ :

$$\begin{aligned}\chi_{+-}^{(a,b)}(\omega) &= -\frac{1}{V} \langle \langle m_+^{(a)} | m_-^{(b)} \rangle \rangle(\omega), \\ \chi_{+-}(\vec{q}, \omega) &= \frac{1}{N} \sum_{a,b} \chi_{+-}^{(a,b)}(\omega) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_a - \vec{R}_b)}. \end{aligned} \quad (9.16)$$

Вычисление восприимчивости в приближении, что система близка к насыщению и поэтому проекция спинов на направление поля  $S_z$  в среднем постоянна и равна некоторому среднему  $\langle S_z \rangle$  (т.н. *приближение случайных фаз*), приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned}\chi_{+-}(\vec{q}, \omega) &= \frac{2\langle S_z \rangle}{E(\vec{q}) - \omega} - 2\pi i \langle S_z \rangle \delta(\omega - E(\vec{q})), \\ \chi_{-+}(\vec{q}, \omega) &= \frac{2\langle S_z \rangle}{E(\vec{q}) + \omega} - 2\pi i \langle S_z \rangle \delta(\omega + E(\vec{q})). \end{aligned} \quad (9.17)$$

Полюса функции Грина определяют собственную энергию системы  $E(\vec{q})$ :

$$E(\vec{q}) = \langle S_z \rangle (J(0) - J(\vec{q})),$$

$$J(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{a,b} J_{ab} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_a - \vec{R}_b)}. \quad (9.18)$$

Данные энергии и частоты отвечают характерным для магнитных кристаллов квазичастицам – *спиновым волнам* или *магнонам* – возмущениям магнитного порядка, которые распространяются в среде в виде волны. Они вносят значительный вклад в термодинамические, акустические, электрические и другие свойства магнитных материалов.

Мнимая часть восприимчивости отвечает за поглощение энергии магнонов и определяет время их жизни. Экспериментально измеримые величины в данной задаче –  $\chi_{xx}$ - и  $\chi_{yy}$ -компоненты тензора  $\chi_{jk}(\vec{q}, \omega)$ :

$$\chi_{xx}(\vec{q}, \omega) = \chi_{yy}(\vec{q}, \omega) =$$

$$= \frac{1}{4} (\chi_{+-}(\vec{q}, \omega) + \chi_{-+}(\vec{q}, \omega)). \quad (9.19)$$

Процедура вычисления  $\chi_{jk}(\vec{q}, \omega)$  в форме функции Грина требует качественно иного подхода по сравнению с описанным в п. 8.2, где восприимчивость системы удаётся определить непосредственно.

#### 9.4. К вычислению функций Грина

Для систематического вычисления функций Грина разработаны два эквивалентных способа. Получим уравнение для обобщённой двухвременной функции произвольных операторов  $\langle\langle A(t_1) | B(t_2) \rangle\rangle$ . Входящие в неё операторы  $A$  и  $B$  удовлетворяют уравнению Гейзенберга (8.19). С учётом этого, дифференцируя функцию Грина по  $t_1$ , получим для неё *уравнение движения*

$$\begin{aligned}
& i \frac{d}{dt_1} \langle\langle A(t_1) | B(t_2) \rangle\rangle = \\
& = j \frac{d}{dt_1} \Theta(-j(t_1 - t_2)) \langle\langle [A(t_1), B(t_2)]_{-n} \rangle\rangle + \\
& \quad + \langle\langle \dot{A}(t_1) | B(t_2) \rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{9.20}$$

Применяя здесь уравнение эволюции оператора  $A$  и учитывая, что производная от функции Хэвисайда есть дельта-функция Дирака, получим

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt_1} \langle\langle A(t_1) | B(t_2) \rangle\rangle &= j \delta(t_1 - t_2) \langle\langle [A(t_1), B(t_2)]_{-n} \rangle\rangle + \\
& + \langle\langle [A(t_1), \mathcal{H}]_{-n} | B(t_2) \rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{9.21}$$

Здесь можно перейти и к Фурье-образам:

$$\omega \langle\langle A | B \rangle\rangle(\omega) = \frac{1}{2\pi} \langle\langle [A, B]_{-n} \rangle\rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_{-n} | B \rangle\rangle(\omega). \tag{9.22}$$

Данное уравнение является точным. При этом в правой части уравнения возникает функция Грина более высокого порядка, нежели исходная. Для неё можно составить аналогичное уравнение, содержащее функцию ещё более высокого порядка. В итоге всегда получается незамкнутая цепочка уравнений. Точное их решение невозможно и приходится использовать различные приближённые методы, каким-либо способом обрывающие ряд и аппроксимирующие входящие в уравнения функции Грина старших порядков посредством функций меньшего порядка, что позволяет в итоге получить замкнутую систему уравнений.

Для замыкания задачи на определённом шаге функция Грина наивысшего порядка может быть приближённо выражена через все остальные на основе каких-либо сведений или предположений о физических свойствах системы. Такой подход часто используется в теории магнетизма, но сопряжён со значительной сложностью оценки достоверности применяемых приближений [1,12,13]. Другим столь же простым, но более

обоснованным методом замыкания цепочки уравнений (9.22) является *метод массового оператора*, изначально разработанный в квантовой электродинамике для вычисления пропагаторов взаимодействующих элементарных частиц [8,12]. Продемонстрируем его на коротком примере.

Вернёмся к рассмотренной выше задаче электропроводности (п. 8.2). Используя первое представление функции отклика из перечисленных в (8.12) вариантов, можно записать тензор проводимости в виде

$$\sigma_{kl} = i \text{Sp} \left\{ j_k(t) [d_l, \rho_0]_- \right\}. \quad (9.23)$$

Преобразуем операторы плотности тока  $j_k$  и дипольного момента  $d_l$ :

$$\begin{aligned} \sigma_{kl} &= i \text{Sp} \left\{ \frac{e}{m} \sum_a p_k^{(a)} \left[ e \sum_b q_l^{(b)} \rho_0 \right]_- \right\} = \\ &= \frac{ie^2}{m} \text{Sp} \left\{ P_k [X_l, \rho_0]_- \right\}. \end{aligned} \quad (9.24)$$

Здесь введены операторы

$$\begin{aligned} P_k &= \frac{1}{V} \sum_a p_k^{(a)}, \\ X_l &= \frac{1}{V} \sum_a q_l^{(a)}, \end{aligned} \quad (9.25)$$

где  $V$  – занятый системой объём пространства, а суммирование ведётся по всем частицам, входящим в систему. Тогда Фурье-образ тензора проводимости принимает следующий вид:

$$\sigma_{kl}(\omega) = \frac{ie^2}{m} \int_0^\infty dt e^{i\omega t - \epsilon t} \text{Sp} \left\{ P_k [X_l, \rho_0]_- \right\}, \quad (9.26)$$

здесь вновь явно указана регуляризующая поправка. Согласно определению (9.2) подынтегральная функция на самом деле может быть представлена функцией Грина

$$\begin{aligned}
G_{kl}(t) &= i\Theta(t)e^{st} \text{Sp}\{P_k[X_l, \rho_0]_-\} = \\
&= e^{st} \langle\langle P_k | X_l(t) \rangle\rangle_{+1}^+ .
\end{aligned} \tag{9.27}$$

Соответственно, выражение (9.26) является её Фурье-образом и поэтому

$$\sigma_{kl}(\omega) \equiv \frac{e^2}{m} G_{kl}(\omega). \tag{9.28}$$

Перейдём к процедуре вычисления функции  $G_{kl}$ . Дифференцируя (9.27) по времени, получим уравнение движения первого порядка:

$$\begin{aligned}
\frac{dG_{kl}(t)}{dt} &= i\delta(t)e^{st} \text{Sp}\{P_k[X_l(t), \rho_0]_-\} + \\
&+ \varepsilon G_{kl}(t) + G_{kl}^{(1)}(t),
\end{aligned} \tag{9.29}$$

где введена функция Грина первого порядка

$$G_{kl}^{(1)}(t) = i\Theta(t)e^{st} \text{Sp}\{P_k[\dot{X}_l(t), \rho_0]_-\}. \tag{9.30}$$

Согласно уравнению Гейзенберга

$$\dot{X}_l(t) = i[\mathcal{H}_0, X_j(t)]_- = \frac{1}{m} P_l(t), \tag{9.31}$$

поэтому

$$G_{kl}^{(1)}(t) = \frac{i}{m} \Theta(t)e^{st} \text{Sp}\{P_k[P_l(t), \rho_0]_-\}. \tag{9.32}$$

Дифференцируя по времени выражение (9.32), получим уравнение движения для функции Грина первого порядка  $G_{kl}^{(1)}(t)$ :

$$\begin{aligned}
\frac{dG_{kl}^{(1)}(t)}{dt} &= \frac{i}{m} \delta(t)e^{st} \text{Sp}\{P_k[P_l(t), \rho_0]_-\} + \\
&+ \varepsilon G_{kl}^{(1)}(t) - G_{kl}^{(2)}(t),
\end{aligned} \tag{9.33}$$

где введена функция второго порядка:

$$G_{kl}^{(2)}(t) = \frac{i}{m} \Theta(t) e^{st} \text{Sp} \left\{ P_k \left[ \dot{P}_l(t), \rho_0 \right]_- \right\}. \quad (9.34)$$

Инвариантность к циклической перестановке операторов наряду с определением (2.25) позволяет вынести дифференцирование по времени в выражении (9.34) за коммутатор:

$$\begin{aligned} \text{Sp} \left\{ P_k \left[ \dot{P}_l(t), \rho_0 \right]_- \right\} &= \text{Sp} \left\{ P_k iL e^{itL} [P_l, \rho_0]_- \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ P_k iL e^{it\mathcal{H}_0} [P_l, \rho_0]_- e^{-it\mathcal{H}_0} \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ e^{-it\mathcal{H}_0} P_k iL e^{it\mathcal{H}_0} [P_l, \rho_0]_- \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ e^{-itL} P_k iL [P_l, \rho_0]_- \right\} = -\text{Sp} \left\{ \dot{P}_k(t) [P_l, \rho_0]_- \right\}. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Итак, видно, что в уравнение для функции первого порядка  $G_{kl}^{(1)}(t)$  входит новая функция Грина  $G_{kl}^{(2)}(t)$ , и действительно возникает неограниченная цепочка дифференциальных уравнений, точное решение которой невозможно.

Перепишем полученные уравнения движения в частотном представлении:

$$(i\omega - \varepsilon) G_{kl}(\omega) = \frac{n}{2\pi} \delta_{kl} + G_{kl}^{(1)}(\omega), \quad (9.36)$$

$$(i\omega - \varepsilon) G_{kl}^{(1)}(\omega) = -G_{kl}^{(2)}(\omega). \quad (9.37)$$

При данном переходе учтены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} i \text{Sp} \left\{ P_k [X_l, \rho_0]_- \right\} &= i \text{Sp} \left\{ \rho_0 [P_k, X_l]_- \right\} = \\ &= \sum_{a,b} i \text{Sp} \left\{ \rho_0 [p_k^{(a)}, q_l^{(b)}]_- \right\} = n \delta_{kl}, \end{aligned} \quad (9.38)$$

$$\text{Sp} \left\{ P_k [P_l, \rho_0]_- \right\} = i \text{Sp} \left\{ \rho_0 [P_k, P_l]_- \right\} = 0, \quad (9.39)$$

где  $n$  – объёмная концентрация частиц в рассматриваемой системе.

Исходя из структуры уравнений (9.36), (9.37), будем искать решение в виде



$$G_{kl}(t) = \frac{1}{2\pi} \frac{n\delta_{kl}}{i\omega - \varepsilon - M_{kl}(\omega)}, \quad (9.40)$$

где  $M_{kl}(\omega)$  – *массовый оператор*. Для сокращения записей воспользуемся эквивалентной алгебраической системой уравнений

$$\begin{aligned} \alpha x &= a + x_1, \\ \alpha x_1 &= x_2 \end{aligned} \quad (9.41)$$

и решением с аналогичной (9.40) структурой:

$$x = \frac{a}{\alpha - M}. \quad (9.42)$$

Определим  $M$  из первого уравнения

$$M = \frac{\alpha x_1}{a + x_1}, \quad (9.43)$$

а  $x_1$  – из второго:

$$x_1 = \frac{x_2}{\alpha}. \quad (9.44)$$

Комбинируя эти результаты, получим

$$M = \frac{x_2}{a + x_1} = \frac{x_2}{a} \left( 1 + \frac{x_1}{a} \right)^{-1}. \quad (9.45)$$

Полагая  $x_1$  малой величиной по сравнению с  $a$ , что действительно выполняется для функций Грина старших порядков, запишем разложение в ряд

$$M \approx \frac{x_2}{a} \left( 1 - \frac{x_1}{a} + \left( \frac{x_1}{a} \right)^2 + \dots \right). \quad (9.46)$$

Наконец, возвращаясь к исходным обозначениям, получим выражение для массового оператора в главном порядке разложения:

$$\begin{aligned}
 M_{kl}(\omega) &\approx \frac{2\pi}{n} G_{kl}^{(2)}(\omega) = \frac{2\pi}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G_{kl}^{(2)}(t) = \\
 &= \frac{2\pi i}{nm} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t - \epsilon t} \text{Sp} \left\{ \dot{P}_k(t) [P_l, P_0]_- \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{9.47}$$

Дополнительно прокомментируем физический смысл массового оператора. В задачах квантовой теории поля он описывает эффективную массу элементарных частиц, взаимодействующих друг с другом и различными внешними полями, и включает собственно массу частицы и *радиационные поправки*, связанные с рождением и уничтожением виртуальных частиц в собственном поле реальной. Использование массового оператора позволяет записать полный пропагатор частицы в форме (9.42), подобной пропагатору свободной частицы.

Применительно к задаче электропроводности, массовый оператор играет роль обратного *времени релаксации* импульса движущихся частиц в системе. В классической *теории Друде* проводимость металла в электрическом поле равна

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega}, \tag{9.48}$$

где  $\tau$  – упомянутое время релаксации. Оно равно среднему времени между столкновениями электронов друг с другом. Сопоставляя выражения (9.40) и (9.48), легко видеть, что

$$M_{kl}(\omega) = 2\pi\tau^{-1}. \tag{9.49}$$

Во всех случаях массовый оператор описывает спектр элементарных возбуждений, или *квазичастиц*, над основным состоянием системы. Его действительная часть описывает затухание возбуждений и время их жизни, а мнимая, если существует – собственные частоты.

Результат (9.47) является максимально общим, поскольку при его выводе никак не использован явный вид гамильтониана системы. Массовый оператор определяется функцией Грина второго порядка, и, следовательно, сам является величиной второго порядка малости по величине возмущения. Поэтому при его вычислении по формуле (9.47) можно использовать

статистический оператор равновесного состояния, опустив в нём слагаемые с возмущением.

Вычисление массового оператора требует задания конкретных характеристик системы, статистического оператора и равновесного гамильтониана. В частности, в работе [16] подробно рассмотрена задача электропроводности кристаллического тела с учётом рассеяния электронов на фононах. Кроме того, там же приводится сопоставление результата теории линейного отклика с расчётом времени релаксации электронов в кристалле на основе кинетического уравнения Больцмана, которые в итоге полностью совпадают. Однако теория Кубо обладает значительно большей общностью, поскольку в её основе, как упоминалось ранее, не содержится каких-либо предположений о физических свойствах системы. Также существует ряд задач физической кинетики, в которых применение уравнения Больцмана оказывается невозможным, тогда как теория линейного отклика позволяет легко определить искомые свойства системы. Особенно ярко это проявляется при решении задач теории магнетизма и спиновой динамики.

Альтернативным способом вычисления функции Грина является *диаграммный метод*, рассмотрение которого остаётся за пределами пособия. Технически, он основан на графическом представлении функций распространения и операторов взаимодействия по определённым правилам. С формальной точки зрения, диаграммный метод, как и теория линейного отклика, также базируется на теории возмущений и позволяет представить функцию Грина для системы с межчастичным взаимодействием и/или находящейся под влиянием некоторого внешнего поля в виде некоторого бесконечного ряда. Особенностью последнего является невозможность получить приближение «традиционным» для теории возмущений способом, т.е. путём суммирования нескольких первых порядков. Связано это с тем, что каждое отдельное слагаемое в ряду оказывается расходящимся. Несмотря на это, диаграммная техника позволяет легко выделить в ряду члены, отвечающие вполне определённым физическим приближениям, и произвести *выборочное суммирование* их бесконечного количества.

Например, при описании взаимодействия частицы с определённым рассеивающим центром в пренебрежении влиянием всех остальных следует учесть, что она может взаимодействовать с ним один раз, два, три и т.д. В результате ряд, описывающий такое рассеяние, сводится к сумме бесконечно убывающей геометрической прогрессии, выражающейся посредством легко вычислимого пропагатора свободной частицы.

Наиболее известным применением диаграммной техники являются *диаграммы Фейнмана*, получившие широкое применение в квантовой электродинамике, хромодинамике и других областях квантовой теории поля, где с их помощью вычисляются сечения разнообразных процессов взаимодействия элементарных частиц. Высокую эффективность и значительное удобство диаграммный метод показал также и в решении разнообразных задач физики конденсированного состояния. В частности, его применение позволило значительно продвинуться в разработке теории ферромагнетизма, сверхпроводимости, в том числе высокотемпературной, сверхтекучести, статистической теории жидкостей (теория Орнштейна–Цернике), гидродинамической теории плазмы, активно развивающейся сегодня физике двумерных материалов.

Для подробного ознакомления с методом функций Грина, их свойствами, техниками вычисления и применением к расчёту конкретных физических систем рекомендуем обратиться к работам [2,3,10–20].

## СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Уайт Р.* Квантовая теория магнетизма / ред. А.С. Боровик-Романов, Л.П. Питаевский. М.: Мир, 1985. 304 с.
2. *Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёнке Г.* Статистическая механика неравновесных процессов. М.: Физматлит, 2002. Т. 1. 432 с.
3. *Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёнке Г.* Статистическая механика неравновесных процессов. М.: Физматлит, 2002. Т. 2. 296 с.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. II: Теория поля / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2001. 536 с.
5. *Мессиа А.* Квантовая механика / ред. Л.Д. Фадеев. М.: Наука, 1978. Т. 1. 478 с.
6. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров) / ред. И.Г. Араманович. М.: Наука, 1970. 720 с.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. III: Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. М.: Физматлит, 2002. 808 с.
8. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. IV: Квантовая электродинамика / Е.М. Лифшиц, В.Б. Берестецкий, Л.П. Питаевский. М.: Физматлит, 2006. 716 с.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособие для вузов: в 10 т. Т. IX: Статистическая физика. Ч. 2: Теория конденсированного состояния / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. М.: Физматлит, 2004. 496 с.
10. *Маттук Р.* Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел / ред. В.Л. Бонч-Бруевич. М.: Мир, 1969. 368 с.

11. *Зубарев Д.Н.* Двухвременные функции Грина в статистической физике // *Успехи физических наук*. 1960. Т. 71, вып. 1. С. 71–116.
12. *Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В.* Метод функций Грина в статистической механике. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961. 312 с.
13. *Вонсовский С.В.* Магнетизм: магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферримагнетиков. М.: Наука, 1971. 1032 с.
14. *Nolting W., Ramakhan A.* Quantum theory of magnetism. Berlin: Springer, 2009. 762 p.
15. *Тябликов С.В.* Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 530 с.
16. *Биккин Х.М., Ляпилин И.И.* Неравновесная термодинамика и физическая кинетика. Екатеринбург: УрО РАН, 2009. 500 с.
17. *Боголюбов Н.Н., Толмачев В.В., Ширков Д.В.* Новый метод в теории сверхпроводимости. М.: АН СССР, 1958. 128 с.
18. *Бондарев Б.В.* Метод матриц плотности в квантовой теории сверхпроводимости. М.: Спутник+, 2014. 88 с.
19. *Киржниц Д.А.* Полевые методы теории многих частиц. М.: Либроком, 2010. 344 с.
20. *Гаулес Д.* Квантовая механика систем многих частиц. М.: Мир, 1975. 383 с.

*Учебное издание*

**Кадыров Дальво Ибрагимович  
Циберкин Кирилл Борисович**

**ФИЗИКА НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ:  
ТЕОРИЯ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА**

Учебно-методическое пособие

Редактор *Л.П. Сидорова*  
Корректор *Л.П. Северова*  
Компьютерная верстка *К.Б. Циберкина*

Подписано в печать 12.03.2015. Формат 60×84/16.  
Усл. печ. л. 5,06. Тираж 50 экз. Заказ \_\_\_\_\_

Издательский центр  
Пермского государственного  
национального исследовательского университета.  
614990, г. Пермь, ул. А.И. Букирева, 15