Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Церковников, Двухвременные температурные функции Грина в кинетической теории и молекулярной гидродинамике. I. Цепочка уравнений для неприводимых функций, *ТМФ*, 1999, том 118, номер 1, 105–125

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf689>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 11:42:12

**ДВУХВРЕМЕННЫЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ
ФУНКЦИИ ГРИНА В КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ
И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ГИДРОДИНАМИКЕ.
I. ЦЕПОЧКА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ
НЕПРИВОДИМЫХ ФУНКЦИЙ**

Разработана схема построения цепочек уравнений для неприводимых функций Грина. Структура уравнений позволяет при решении конкретных задач выйти за рамки обычной теории возмущений. Получены общие соотношения, позволяющие выразить любые корреляционные функции через решения бесконечной цепочки уравнений для неприводимых функций.

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод двухвременных температурных функций Грина, сформулированный в конце пятидесятих годов в работах Боголюбова, Тябликова [1] и Зубарева [2], нашел широкое применение при решении задач как равновесной, так и неравновесной статистической механики. Этот метод позволяет получить на основе законов взаимодействия частиц как термодинамические характеристики системы (теплоемкость, сжимаемость и т. д.), так и неравновесные характеристики (коэффициенты переноса или кинетические коэффициенты), не выходя при этом за рамки равновесной статистической механики.

Решение конкретной физической задачи в методе двухвременных функций Грина сводится к решению бесконечной системы зацепляющихся уравнений для функций Грина возрастающего порядка, получаемой исходя из уравнений движения для динамических переменных, описывающих рассматриваемую систему.

Изначально главным недостатком метода было отсутствие универсальной техники (такой, например, как диаграммная техника при температуре $T = 0$), позволяющей последовательно и однозначно учитывать вклад высших приближений.

Впоследствии, однако, такая техника была разработана. Отметим прежде всего широко применяемый метод Мори [3, 4], основанный на введении проекционных операторов

* Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, Москва, Россия

и операторов урезанной эволюции, что позволяет выделить из высших корреляционных функций неприводимые части.

В этой работе изложен эквивалентный методу Мори способ перестройки исходной цепочки уравнений, основанный на дифференцировании по двум временам, не требующий введения операторов проецирования и достаточно неудобных в обращении операторов урезанной эволюции.

Впервые метод дифференцирования по двум временам был использован в работе автора [5] и более подробно изложен в работе [6]. Из дальнейших работ в этом направлении упомянем работы [7, 8], в которых рассматривались соответственно нормальная и сверхтекучая бозе-системы. Метод дифференцирования по двум временам широко использовался также Плакидой [9].

В работе [6] показано, что в предлагаемом методе задача сводится к решению цепочки уравнений дайсоновского типа, связывающих последовательность функций Грина возрастающего порядка, каждая из которых неприводима относительно предыдущих функций и входит в массовый оператор предшествующего уравнения. Этот метод позволяет выйти за рамки обычной теории возмущений по взаимодействию. Теория возмущений применяется в том или ином виде в последнем уравнении, на котором производится обрыв цепочки. Таким путем мы приходим в принципе к иному типу теории возмущений, в которой вместо пренебрежения высшими порядками константы взаимодействия производится пренебрежение высшими корреляциями. Это приводит, например, к тому, что многие результаты, получаемые в обычной теории возмущений путем суммирования бесконечной последовательности выделенных (“главных”) диаграмм, в данном методе получаются автоматически.

Вид цепочки уравнений для неприводимых функций определяется выбором базисного оператора или набора базисных операторов, на которых строятся первые уравнения цепочки. Так, если в качестве исходного базиса выбрать операторы рождения и уничтожения частиц (a_p^+ и a_p), получим цепочку уравнений для одночастичной функции Грина. Выбрав в качестве базиса произведение $a_{p-q/2}^+ a_{p+q/2}$, получим бесконечную систему, первое уравнение которой представляет собой линеаризованное кинетическое уравнение для функции Вигнера. Заметим, что кинетическое уравнение мы получаем, не выходя за рамки равновесной статистической механики. При решении практических задач использование линеаризованного кинетического уравнения часто оказывается вполне достаточным. На его основе можно получить линеаризованные уравнения гидродинамики и выражения для кинетических коэффициентов. Однако значительно эффективнее задачу построения функций распределения и уравнений гидродинамики можно решить, выбрав в качестве базисного набора операторы плотностей числа частиц, импульса и энергии (ρ_q, J_q, h_q). При этом в качестве первого звена бесконечной цепочки получаем уравнения молекулярной гидродинамики [10], вообще говоря, пригодные не только в гидродинамической области значений импульсов q и частот ω , но и вне ее. Кинетические коэффициенты, входящие в уравнения молекулярной гидродинамики, определяются исходя из последующих уравнений цепочки, не прибегая к обычным кинетическим уравнениям. Подобные вычисления были проведены в работах [7]

и [8, 11] соответственно для нормальной и сверхтекучей бозе-систем. Полученные кинетические коэффициенты точно совпали с результатами, основанными на кинетических уравнениях. Более того, удалось получить интерполяционные выражения для функций Грина плотностей сохраняющихся величин, пригодные в широком интервале частот и волновых векторов, что затруднительно сделать, основываясь на обычных кинетических уравнениях больцмановского типа.

В работах [7, 8, 11] вычисления проводились с точностью до членов второго порядка. Целью данной и последующих работ является разработка на основе полученных ранее результатов [6–8, 11] последовательного и универсального метода решения бесконечных цепочек уравнений для неприводимых функций Грина.

Во втором разделе статьи даны определения функций Грина различного типа (коммутаторные, антикоммутаторные, релаксационные), которые будут далее рассматриваться, и устанавливаются соотношения между ними. В третьем разделе на основе уравнений движения для операторов в гейзенберговском представлении строится цепочка уравнений для неприводимых функций Грина. Получена связь неприводимых функций Грина с обычными функциями, благодаря которой мы можем получить выражение для любой корреляционной функции рассматриваемой задачи, если известно решение цепочки уравнений для неприводимых функций.

В четвертом разделе строятся уравнения для коммутаторных функций Грина и на их основе уравнения для статических восприимчивостей, которые служат в качестве начальных данных в уравнениях для релаксационных функций Грина.

В последующих статьях развитая в данной работе методика будет использована для построения цепочки уравнений, определяющей линеаризованное кинетическое уравнение для вигнеровской функции распределения, а также цепочки, первым звеном которой являются уравнения молекулярной гидродинамики. В последнем случае функция распределения, получаемая обычно как решение кинетического уравнения, выразится через решения уравнений молекулярной гидродинамики с помощью соотношений, введенных в третьем разделе этой работы. В результате мы придем к альтернативному способу решения задач кинетической теории, преимущества которого по сравнению с методом, основанным на использовании уравнения больцмановского типа, будут обсуждаться при последующем изложении предлагаемой методики.

2. ИСХОДНЫЕ СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ДВУХВРЕМЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Содержание этого и следующих разделов частично повторяет результаты работы [6]. Однако вывод основных уравнений для неприводимых функций Грина, изложенный в третьем разделе, проще и универсальнее, чем в работе [6], т.к. позволяет одновременно получить связи между неприводимыми и обычными функциями, а также другие важные соотношения, необходимые для полного решения задачи на микроскопическом уровне.

Как и в работах [6–8, 11], мы будем использовать три типа запаздывающих двухвременных функций Грина, основанных соответственно на усредненном коммутаторе (или антикоммутаторе), на функции релаксации Кубо и на изотермической восприимчивос-

ти. Фурье-образы этих функций равны

$$\langle \langle A | B^+ \rangle \rangle_E = -i \int_0^\infty e^{iEt} \langle [A(t), B^+]_{\mp} \rangle dt, \quad (2.1)$$

$$((A | B^+))_E = -i \int_0^\infty e^{iEt} (A(t) | B^+) dt, \quad (2.2)$$

$$((A | B^+))_E^T = -i \int_0^\infty e^{iEt} (A(t) | B^+)^T dt, \quad (2.3)$$

где $\text{Im } E > 0$, $A(t) = \exp(i\mathcal{H}t)A \exp(-i\mathcal{H}t)$ – оператор или столбец операторов в гейзенберговском представлении, $\mathcal{H} = H - \mu\mathcal{N}$, H и $\mathcal{N}$ – гамильтониан и оператор числа частиц, μ – химический потенциал. Усреднение ведется по большому каноническому ансамблю $\langle \dots \rangle = Q^{-1} \text{Sp} \{ e^{-\beta\mathcal{H}} \dots \}$, $Q = \text{Sp } e^{-\beta\mathcal{H}}$, $\beta = 1/\theta$, $\theta = kT$, T – температура. Используются единицы, в которых постоянная Планка $\hbar = 1$. B^+ – сопряженный оператор или сопряженная операторная строка и $[A(t), B^+]_{\mp} = A(t)B^+ \mp B^+A(t)$.

Функции Грина (2.1)–(2.3) могут быть как отдельными функциями, так и матрицами, построенными по правилу “строка на столбец”, если A представляет собой столбец операторов, а B^+ – сопряженную строку.

Функция релаксации Кубо [12] и изотермическая восприимчивость, входящие в правые части (2.2) и (2.3), имеют соответственно вид

$$(A(t) | B^+) = i \int_t^\infty \langle [A(t_1), B^+]_- \rangle dt_1, \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} (A(t) | B^+)^T &= \int_0^\beta \langle \Delta A(t - i\tau) \Delta B^+ \rangle d\tau = \\ &= \int_0^\beta (\langle A(t - i\tau) B^+ \rangle - \langle A \rangle \langle B^+ \rangle) d\tau, \end{aligned} \quad (2.5)$$

где $\Delta A = A - \langle A \rangle$ и $\Delta B^+ = B^+ - \langle B^+ \rangle$. В случае равновесных средних $(A(t) | B^+(t')) = (A(t - t') | B^+) = (A | B^+(t' - t))$, откуда следует возможность дифференцирования по двум временам:

$$i \frac{d}{dt} (A(t) | B^+(t')) = -i \frac{d}{dt'} (A(t) | B^+(t')) \quad (2.6)$$

для функций (2.4), (2.5) и аналогично для функции $\langle [A(t), B^+(t')]_{\mp} \rangle$. Используя определения (2.1)–(2.5), получим также соотношения, которые потребуются нам в дальнейшем,

$$\begin{aligned} (i\dot{A}(t) | B^+) &= (A | -i\dot{B}^+(-t)) = \langle [A(t), B^+]_- \rangle, \\ ((i\dot{A} | B^+))_E &= ((A | -i\dot{B}^+))_E = \langle \langle A | B^+ \rangle \rangle_E, \end{aligned} \quad (2.7)$$

где $\langle \langle A | B^+ \rangle \rangle_E$ – коммутаторная функция (2.1); $i\dot{A} = [A, \mathcal{H}]_-$, $-i\dot{B}^+ = [\mathcal{H}, B^+]_-$ – уравнения движения для операторов A и B^+ ($i\dot{A} \equiv i dA/dt$).

Исходя из (2.1), (2.3) и (2.6) получаем уравнения для фурье-образов функций Грина

$$E \langle \langle A | B^+ \rangle \rangle_E = \eta_{AB^+} + \langle \langle i\dot{A} | B^+ \rangle \rangle_E = \eta_{AB^+} + \langle \langle A | -i\dot{B}^+ \rangle \rangle_E, \quad (2.8)$$

$$E ((A | B^+))_E = \chi_{AB^+} + ((i\dot{A} | B^+))_E = \chi_{AB^+} + ((A | -i\dot{B}^+))_E, \quad (2.9)$$

где вторые равенства в правых частях получены с помощью дифференцирования по “второму времени” (2.6), $\eta_{AB^+} = \langle [A, B^+]_{\mp} \rangle$, а χ_{AB^+} – статическая или изотермическая восприимчивость (см. (2.4) и (2.5)) при $t = 0$,

$$\chi_{AB^+} = (A | B^+), \quad \chi_{AB^+}^T = (A | B^+)^T. \quad (2.10)$$

В случае эргодических систем обе восприимчивости совпадают [13, 14], что мы и будем далее предполагать. Билинейные относительно символов A и B^+ формы (2.4) и (2.5) обладают всеми свойствами скалярных произведений, и, следовательно, $\chi_{AA^+} = (A | A^+) \geq 0$.

Из определения коммутаторной функции Грина (2.1) и функции релаксации (2.4) следует, что

$$\langle \langle A | B^+ \rangle \rangle_{E=0} = -(A | B^+) = -\chi_{AB^+}. \quad (2.11)$$

В дальнейшем с помощью угловых скобок мы будем обозначать коммутаторные или антикоммутаторные запаздывающие функции Грина (2.1), введенные в работах [1, 2], а с помощью круглых – релаксационные (2.2) или изотермические (2.3) функции. Средние значения произведений операторов $\langle B^+ A \rangle$ получаются обычным путем из спектральных представлений [1, 2].

При рассмотрении конкретных задач мы будем пользоваться в основном функциями релаксации (2.2). Дело в том, что эти функции пропорциональны отклонению $\delta \langle A \rangle$ от среднего значения $\langle A \rangle$ динамической переменной A при мгновенном включении малого возмущения гамильтониана $H_1^+ = -\theta(-t)B^+$ [2], т.е.

$$\delta \langle A \rangle_t = (A(t) | B^+), \quad \delta \langle A \rangle_{t=0} = \chi_{AB^+}. \quad (2.12)$$

Сопоставляя с помощью соотношений (2.12) функции (2.2)–(2.5) и уравнения (2.9) с макроскопическими уравнениями для $\delta \langle A \rangle_t$ и их решениями при начальном условии $\delta \langle A \rangle_{t=0} = \chi_{AB^+}$, мы получаем возможность выразить макроскопические характеристики системы непосредственно через корреляционные функции, являющиеся решением микроскопических уравнений.

3. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕПРИВОДИМЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА

В этом разделе рассматриваются функции Грина (2.2), (2.3), построенные на основе функций релаксации (2.4) или изотермических восприимчивостей (2.5).

Коммутаторные (антикоммутаторные) функции (2.1) рассмотрены в следующем разделе. Многие рассуждения, используемые при рассмотрении релаксационных функций, почти без изменения приложимы также и к функциям (2.1).

3.1. Уравнения движения. Пусть $((a(1) | b^+(1'))_E)$ – функция Грина (например, релаксационная функция (2.2)), в которой содержится интересующая нас информация об исследуемой физической системе. Индекс “1” означает порядковый номер оператора в цепочках уравнений движения и одновременно совокупности индексов квантовых

состояний (импульсы, спины и т. д.), которые в $a(1)$ и $b^+(1')$ могут быть разными. Кроме того, $a(1)$ и $b^+(1')$ – либо отдельные операторы, либо соответственно операторный столбец и строка, векторные размерности которых также могут не совпадать. Таким образом, в общем случае функция $((a(1) | b^+(1')))_E$ – прямоугольная матрица, составленная по правилу умножения “строка на столбец”. В качестве примера приведем несколько вариантов выбора $a(1)$ и $b^+(1')$:

$$a(1) = a_p, \quad b^+(1') = a_{p'}^+, \quad (3.1)$$

$$a(1) = a_{p-\frac{q}{2}}^+ a_{p+\frac{q}{2}}, \quad b^+(1') = a_{p'+\frac{q}{2}}^+ a_{p'-\frac{q}{2}}, \quad (3.2)$$

$$a(1) = \text{col}(\rho_q, \mathbf{J}_q, h_q), \quad b^+(1') = a^+(1') = (\rho_{-q}, \mathbf{J}_{-q}, h_{-q}) \quad (3.3)$$

и т. д., где a_p и a_p^+ – операторы уничтожения и рождения частицы в состоянии p (в случае ферми-частиц $p = (\mathbf{p}, \sigma)$, где $\mathbf{p}$ – импульс частицы и $\sigma = \pm 1/2$ – ее спин). На операторах (3.1) строится одночастичная функция. Функция Грина, построенная на операторах (3.2), представляет собой фурье-образ функции Вигнера и удовлетворяет обобщенному линеаризованному кинетическому уравнению. В (3.3) ρ_q , $\mathbf{J}_q$ и h_q – плотности соответственно числа частиц, потока и энергии. Функция Грина $((a(1) | b^+(1')))_E$ в этом случае будет квадратной матрицей, компоненты которой удовлетворяют линеаризованной системе уравнений молекулярной гидродинамики [7, 10].

Функция Грина $((a(1) | b^+(1')))_E$ удовлетворяет уравнению (2.9). Благодаря уравнению движения $i\dot{a}(1) = [a(1), \mathcal{H}]_-$ в правые части (2.9) войдут операторы более высокого порядка, которые естественно обозначить как $a(2)$ и $b^+(2')$. Для них процедура построения уравнений может быть продолжена. В результате мы приходим к цепочке уравнений, которую представим в достаточно общем виде:

$$i\dot{a}(n) = [a(n), \mathcal{H}]_- = \varepsilon(n, \bar{n})a(\bar{n}) + \nu(n | \overline{n+1})a(\overline{n+1}), \quad (3.4)$$

$$-ib(n') = [\mathcal{H}, b^+(n')]_- = b^+(\bar{n})\bar{\varepsilon}(\bar{n} | n') + b^+(\overline{n+1})\bar{\nu}(\overline{n+1} | n'), \quad (3.5)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$. Коэффициенты ε и $\bar{\varepsilon}$ соответствуют “свободному движению”, а матрицы ν и $\bar{\nu}$ представляют собой “взаимодействие” соответственно в уравнении (3.4) и сопряженном ему уравнении (3.5). Черта сверху над стоящими рядом, не разделенными вертикальной чертой или запятой, индексами $\bar{n}$ и $\overline{n+1}$ означает свертку по квантовым состояниям и векторным индексам столбцов и строк, соответствующих этим номерам. Индексы состояний и векторные размерности, соответствующие одному и тому же номеру n , но разделенные вертикальной чертой, могут не совпадать.

Используя соотношения (2.9), (3.4) и (3.5), приходим к бесконечной цепочке уравнений для функций Грина

$$E((a(n) | b^+(m)))_E = \chi(n | m) + \varepsilon(n, \bar{n})((a(\bar{n}) | b^+(m)))_E + \nu(n | \overline{n+1})((a(\overline{n+1}) | b^+(m)))_E \quad (3.6)$$

и ей эквивалентной сопряженной цепочке

$$E((a(n) | b^+(m')))_E = \chi(n | m) + ((a(n) | b^+(\overline{m}'))_E \bar{\varepsilon}(\overline{m}', m') + \\ + ((a(n) | b^+(\overline{n+1}))_E \bar{\nu}(\overline{n+1} | m'), \quad (3.7)$$

где $\chi(n | m') = (a(n) | b^+(m'))$ (см. (2.10)), $n, m = 1, 2, 3, \dots$.

Система уравнений (3.6) или (3.7) может быть использована для построения теории возмущений по “взаимодействию” ν . Однако это “взаимодействие” не всегда мало и даже может быть одного порядка с “кинетической энергией” ε , как, например, в случае спиновой системы. Поэтому мы сформулируем другой подход, основанный на пренебрежении или приближенном учете корреляций динамических переменных, ортогональных основным динамическим переменным. Для этого нам нужно будет перестроить исходную цепочку уравнений (3.6), (3.7).

3.2. Уравнения движения для ортогонализированных операторов. Прежде чем приступить к перестройке цепочки уравнений для функций Грина, удобно (хотя и не обязательно) ввести вместо последовательности операторов $a(n)$, $b^+(n')$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), порожденной уравнениями движения (3.4), (3.5), ортогонализированную относительно скалярных произведений (2.4), (2.5) и (2.11) систему операторов.

Положим

$$A(1) = a(1), \quad A(n) = a(n) - \sum_{j=1}^{n-1} (a(n) | B^+(\bar{j}')) \chi^{-1}(\bar{j}' | \bar{j}) A(\bar{j}), \quad (3.8)$$

$$B^+(1') = b^+(1'), \quad B^+(n') = b^+(n') - \sum_{j=1}^{n-1} B^+(\bar{j}') \chi^{-1}(\bar{j}' | \bar{j}) (A(\bar{j}) | b^+(n')), \quad (3.9)$$

где $n = 2, 3, \dots$. Черта над индексом $\bar{j}$ означает, что, кроме суммирования по индексу j , обозначенному знаком суммы, необходимо произвести свертку по индексам квантовых состояний и векторным индексам операторов $A(j)$, $B^+(j')$, соответствующих данному j .

В соотношениях (3.8) и (3.9) $\chi(1 | 1') = (a(1) | b^+(1'))$. При $n = 2, 3, \dots$ имеем

$$\chi(n | n') = (A(n) | B^+(n')) = (A(n) | b^+(n')) = (a(n) | B^+(n')) = \\ = (a(n) | b^+(n')) - \sum_{j=1}^{n-1} (a(n) | B^+(\bar{j}')) \chi^{-1}(\bar{j}' | \bar{j}) (A(\bar{j}) | b^+(n')), \quad (3.10)$$

и предполагается, что для каждого номера $n = 1, 2, 3, \dots$ существует обратная матрица $\chi^{-1}(n | n')$ такая, что

$$\chi(n | \bar{n}) \chi^{-1}(\bar{n} | n') = \delta(n, n'), \quad \chi^{-1}(n | \bar{n}) \chi(\bar{n} | n') = \bar{\delta}(n, n'). \quad (3.11)$$

В формулах (3.11) номер n слева от вертикальной черты в матрице $\chi(n | n')$ содержит индексы состояния и векторные индексы, соответствующие оператору $A(n)$, а справа

от черты — индексы, соответствующие оператору $B^+(n')$. В $\chi^{-1}(n|n')$, наоборот, левый индекс соответствует $B^+(n')$, а правый — $A(n)$. В обобщенных символах Кронекера $\delta(n, n')$ оба индекса n и n' относятся к операторам $A(n)$ в различных квантовых состояниях, соответствующих номеру n (как и в функциях $\varepsilon(n, n')$ и $\bar{\varepsilon}(n, n')$ из формул (2.4)–(2.7)). Поэтому они разделены не вертикальной чертой, а запятой. Аналогично в $\bar{\delta}(n, n')$ индексы n и n' соответствуют оператору $B^+(n)$. Таким образом, в отличие от $\chi(n|n')$ и $\chi^{-1}(n|n')$, которые могут быть прямоугольными матрицами, матрицы $\delta(n, n')$ и $\bar{\delta}(n, n')$ всегда квадратны. Порядок каждой такой матрицы определяется векторными размерностями соответственно операторного столбца $A(n)$ и строки $B^+(n')$. Обобщенные символы Кронекера $\delta(n, n')$ и $\bar{\delta}(n, n')$ удовлетворяют соотношениям

$$\delta(n, \bar{n})\delta(\bar{n}, n') = \delta(n, n'), \quad \bar{\delta}(n, \bar{n})\bar{\delta}(\bar{n}, n') = \bar{\delta}(n, n'); \quad (3.12)$$

$$\delta(n, \bar{n})A(\bar{n}) = A(n), \quad B^+(\bar{n})\bar{\delta}(\bar{n}, n') = B^+(n'); \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \delta(n, \bar{n})\chi(\bar{n}|n') &= \chi(n|\bar{n})\bar{\delta}(\bar{n}, n') = \chi(n|n'), \\ \bar{\delta}(n, \bar{n})\chi^{-1}(\bar{n}|n') &= \chi^{-1}(n|\bar{n})\delta(\bar{n}, n') = \chi^{-1}(n|n'). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Вид функций $\delta(n, n')$ и $\bar{\delta}(n, n')$ зависит от вида операторов $A(n)$ и $B^+(n')$, описывающих рассматриваемую задачу. Если $B^+(n') = A^+(n')$, то $\bar{\delta}(n, n') = \delta(n, n') = \delta(n', n)$.

Определенные таким способом операторы $A(n)$ и $B^+(m')$ из (3.8) и (3.9) взаимно ортогональны в указанном выше смысле, и, следовательно,

$$(A(n)|B^+(m')) = \chi(n|n')\delta_{n,m}, \quad (3.15)$$

где $n, m = 1, 2, 3, \dots$. Уравнения движения для операторов $A(n)$ и $B^+(n')$, устанавливаемые на основе уравнений (3.4), (3.5) для $a(n)$ и $b^+(n')$ и определений (3.8), (3.9), будут, очевидно, иметь вид

$$i\dot{A}(n) = \sum_{j < n} \lambda(n|\bar{j})A(\bar{j}) + \omega(n, \bar{n})A(\bar{n}) + \nu(n|\overline{n+1})A(\overline{n+1}), \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} -i\dot{B}^+(n') &= \sum_{j < n} B^+(\bar{j}')\bar{\lambda}(\bar{j}'|n') + B^+(\bar{n}')\bar{\omega}(\bar{n}', n') + \\ &+ B^+(\overline{n+1}')\bar{\nu}(\overline{n+1}', n'), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где перенормированные матрицы “свободного движения” $\omega(n, n')$ и $\bar{\omega}(n, n')$ принимают вид

$$\begin{aligned} \omega(n, n') &= \varepsilon(n, n') + \nu(n|\overline{n+1})(a(\overline{n+1})|B^+(\bar{n}'))\chi^{-1}(\bar{n}'|n') - \\ &- (a(n)|B^+(\overline{n-1}'))\chi^{-1}(\overline{n-1}'|\overline{n-1})\bar{\nu}(\overline{n-1}|n'), \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} \bar{\omega}(n, n') &= \bar{\varepsilon}(n, n') + \chi^{-1}(n'|\bar{n})(A(\bar{n})|b^+(\overline{n+1}))\bar{\nu}(\overline{n+1}|n') - \\ &- \bar{\nu}(n|\overline{n-1}')\chi^{-1}(\overline{n-1}'|\overline{n-1})(A(\overline{n-1})|b^+(n')). \end{aligned} \quad (3.18')$$

При $n = 1$ последние члены в правых частях (3.18), (3.18') отсутствуют, так что следует формально положить $A(0) = 0$ и $B^+(0) = 0$. Используя ортогональность операторов $A(n)$ и $B^+(n')$ из (3.15), соотношения (3.11) и свойство скалярных произведений (2.7), из формул (3.16) и (3.17) можем также получить, что

$$\begin{aligned}\omega(n, \bar{n})\delta(\bar{n}, n') &= (i\dot{A}(n) | B^+(\bar{n}'))\chi^{-1}(\bar{n}', n') = \eta(n | \bar{n})\chi^{-1}(\bar{n} | n'), \\ \bar{\delta}(n, \bar{n})\bar{\omega}(\bar{n}, n') &= \chi^{-1}(n | \bar{n})(A(\bar{n}) | -i\dot{B}^+(n')) = \chi^{-1}(n | \bar{n})\eta(\bar{n} | n'),\end{aligned}\quad (3.19)$$

где

$$\eta(n | n') = \langle [A(n), B^+(n')]_- \rangle. \quad (3.20)$$

Аналогично определяются λ и $\bar{\lambda}$, но они нам в дальнейшем не понадобятся.

3.3. Уравнения для неприводимых функций Грина. Введем для произвольных, вообще говоря, операторов $\mathcal{A}$ и B^+ неприводимые относительно $A(m)$ и $B^+(m')$ функции Грина $((\mathcal{A} | B^+))_{n,E}$ такие, что при $m \leq n$ выполняются соотношения

$$((A(m) | B^+))_{n,E} = ((\mathcal{A} | B^+(m'))_{n,E} = 0. \quad (3.21)$$

В случае, если $\mathcal{A}$ и B^+ – операторы из наборов $A(m)$ и $B^+(l)$, будем, очевидно, иметь

$$((A(m) | B^+(l)))_{n,E} = 0 \quad \text{при } m \leq n \text{ или } l \leq n. \quad (3.21')$$

Введем для функции Грина, построенной на операторах $A(n)$ и $B^+(n')$ с одинаковым n (т.е. функции, диагональной по порядковому номеру n), неприводимой относительно всех $A(m)$ и $B^+(l)$ при $m, l \leq n-1$, специальное обозначение

$$G_E(n | n') = ((A(n) | B^+(n'))_{n-1,E}. \quad (3.22)$$

Тогда неприводимые функции $((\mathcal{A} | B^+))_{n,E}$ можно представить в явном виде с помощью рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned}((\mathcal{A} | B^+))_{n,E} &= ((\mathcal{A} | B^+))_{n-1,E} - \\ &- ((\mathcal{A} | B^+(\bar{n}'))_{n-1,E} G_E^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) ((A(\bar{n}) | B^+))_{n-1,E},\end{aligned}\quad (3.23)$$

где $n = 1, 2, \dots$; при $n = 0$ полагаем $((\mathcal{A} | B^+))_{0,E} \equiv ((\mathcal{A} | B^+))_E$; обратная матрица $G_E^{-1}(n' | n)$ определяется соотношениями, аналогичными (3.11)–(3.14), и черта над индексами $\bar{n}$ и $\bar{n}'$ означает суммирование по квантовым состояниям и векторным индексам столбцов $A(n)$ и строк $B^+(n')$, соответствующих номеру n . В частности, при $n = 1$ и $n = 2$ будем иметь

$$\begin{aligned}((\mathcal{A} | B^+))_{1,E} &= ((\mathcal{A} | B^+))_E - \\ &- ((\mathcal{A} | B^+(\bar{1}'))_E G_E^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) ((A(\bar{1}) | B^+))_E,\end{aligned}\quad (3.23')$$

$$\begin{aligned}((\mathcal{A} | B^+))_{2,E} &= ((\mathcal{A} | B^+))_{1,E} - \\ &- ((\mathcal{A} | B^+(\bar{2}'))_{1,E} G_E^{-1}(\bar{2}' | \bar{2}) ((A(\bar{2}) | B^+))_{1,E}.\end{aligned}\quad (3.23'')$$

Из уравнения (2.9) следует, что $E((\mathcal{A}|\mathcal{B}^+))_E \rightarrow (\mathcal{A}|\mathcal{B}^+)$ при $E \rightarrow \infty$. Переходя к такому же пределу в (3.23), получим аналогичное рекуррентное соотношение для неприводимого скалярного произведения

$$(\mathcal{A}|\mathcal{B}^+)_n = (\mathcal{A}|\mathcal{B}^+)_{n-1} - (\mathcal{A}|B^+(\bar{n}'))_{n-1}\chi^{-1}(\bar{n}'|\bar{n})(A(\bar{n})|\mathcal{B}^+), \quad (3.24)$$

где матрица $\chi(n|n') = (A(n)|B^+(n'))_{n-1} = (A(n)|B^+(n'))$ определяется формулой (3.10).

Приступим теперь к построению уравнения для неприводимой функции $((A(n)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E}$, где $A(n)$ принадлежит последовательности ортогонализированных операторов, а $\mathcal{B}^+$ – произвольный оператор. Раскрывая эту неприводимую функцию с помощью рекуррентных соотношений (3.23), будем иметь сумму членов, первый из которых – обычная функция $((A(n)|\mathcal{B}^+))_E$. Остальные члены представляют собой произведения функций Грина, в которых левый множитель есть $((A(n)|B^+(j'))_E$ при $j < n$. Эти функции согласно уравнениям (2.9) и (2.10) удовлетворяют уравнениям

$$E((A(n)|\mathcal{B}^+))_E = (A(n)|\mathcal{B}^+) + ((i\dot{A}(n)|\mathcal{B}^+))_E, \quad (3.25)$$

$$E((A(n)|B^+(j'))_E = ((i\dot{A}(n)|B^+(j'))_E. \quad (3.26)$$

Уравнение (3.26) однородно, т.к. $(A(n)|B^+(j')) = 0$ при $j < n$. Таким образом, учитывая уравнения (3.25) и (3.26), для неприводимой функции $((A(n)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E}$ можем написать уравнение

$$\begin{aligned} E((A(n)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E} &= (A(n)|\mathcal{B}^+) + ((i\dot{A}(n)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E} = \\ &= (A(n)|\mathcal{B}^+) + \omega(n, \bar{n})((A(\bar{n})|\mathcal{B}^+))_{n-1,E} + \\ &\quad + \nu(n|\bar{n}+1)((A(\bar{n}+1)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

соответствующее дифференцированию по “первому времени” (см. (2.6) и (2.9)). Второе равенство в (3.27) получено с помощью уравнения движения (3.16). Члены с коэффициентами $\lambda(n|j)$ в (3.27) не вошли, т.к. в силу неприводимости $((A(j)|\mathcal{B}^+))_{n-1,E} = 0$ при $j < n$. Уравнение (3.27) для неприводимых функций аналогично уравнению (3.6) для обычных функций Грина и отличается от него перенормировкой свободного члена и оператора “свободного движения”. Особых преимуществ по сравнению с уравнениями (3.6) это не дает. Поэтому займемся дальнейшей перестройкой цепочки уравнений (3.27).

3.4. Цепочка уравнений дайсоновского типа. Прежде всего получим формулы, связывающие функции Грина с разной степенью неприводимости. Воспользовав-

шись определениями (3.23), (3.10) и уравнением (3.27), будет иметь

$$\begin{aligned}
 ((i\dot{A}(n) | \mathcal{B}^+))_{n,E} &= ((i\dot{A}(n) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} - \\
 &\quad - ((i\dot{A}(n) | B^+(\bar{n}'))_{n-1,E} G_E^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) ((A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} = \\
 &= E((A(n) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} - (A(n) | \mathcal{B}^+) - \\
 &\quad - \left\{ E((A(n) | B^+(\bar{n}'))_{n-1,E} - \chi(n | \bar{n}') \right\} \times \\
 &\quad \times G_E^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) ((A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} = \\
 &= -(A(n) | \mathcal{B}^+) + \chi(n | \bar{n}') G_E^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) ((A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E}, \quad (3.28)
 \end{aligned}$$

где члены, пропорциональные E , сократились, т.к. (аналогично формулам (3.11))

$$((A(n) | B^+(\bar{n}'))_{n-1,E} G_E^{-1}(\bar{n}' | n') = G_E(n | \bar{n}') G_E^{-1}(\bar{n}' | n') = \delta(n, n')$$

и

$$\delta(n, \bar{n}) ((A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} = ((A(n) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E}.$$

Разрешая уравнение (3.28) относительно последней функции, будем иметь

$$\begin{aligned}
 ((A(n) | \mathcal{B}^+))_{n-1,E} &= G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \left\{ (A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+) + ((i\dot{A}(n) | \mathcal{B}^+))_{n,E} \right\} = \\
 &= G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \times \\
 &\quad \times \left\{ (A(\bar{n}) | \mathcal{B}^+) + \nu(n | \overline{n+1}) ((A(\overline{n+1}) | \mathcal{B}^+))_{n,E} \right\}. \quad (3.29)
 \end{aligned}$$

Сопряженное равенство, соответствующее дифференцированию по “второму времени”, имеет вид

$$\begin{aligned}
 ((\mathcal{A} | B^+(n'))_{n-1,E} &= \left\{ (\mathcal{A} | B^+(\bar{n}')) + ((\mathcal{A} | -i\dot{B}^+(\bar{n}'))_{n,E} \right\} \times \\
 &\quad \times \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n') = \\
 &= \left\{ (\mathcal{A} | B^+(\bar{n}')) + ((\mathcal{A} | B^+(\overline{n+1}'))_{n,E} \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \right\} \times \\
 &\quad \times \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n'). \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

Соотношения (3.29), (3.30) позволяют выразить недиагональные по номерам n и m функции Грина через диагональные. Так, полагая в (3.30) $\mathcal{A} = A(m)$ и $m = n + 1$, $n + 2, \dots$ (при этом $(A(m) | B^+(n')) = 0$ в силу (3.15)), получим

$$\begin{aligned}
 ((A(n+1) | B^+(n'))_{n-1,E} &= G_E(n+1 | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \times \\
 &\quad \times \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n'), \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 ((A(n+2) | B^+(n'))_{n-1,E} &= ((A(n+2) | B^+(\overline{n+1}'))_{n,E} \times \\
 &\quad \times \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n') = \\
 &= G_E(n+2 | \overline{n+2}') \bar{\nu}(\overline{n+2}' | \overline{n+1}') \times \\
 &\quad \times \chi^{-1}(\overline{n+1}' | \overline{n+1}) G_E(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \times \\
 &\quad \times \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n') \quad (3.32)
 \end{aligned}$$

и т. д. Второе равенство в (3.32) получено с помощью соотношения (3.31), в котором n заменено на $n + 1$. Сопряженные равенства будут иметь вид (в (3.29) следует положить $\mathcal{B}^+ = B^+(m')$, $m = n + 1, n + 2, \dots$)

$$\begin{aligned} ((A(n) | B^+(n + 1'))_{n-1, E} &= G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \nu(\bar{n} | \overline{n+1}) \times \\ &\times G_E(\overline{n+1} | n + 1'), \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} ((A(n) | B^+(n + 2'))_{n-1, E} &= G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \nu(\bar{n} | \overline{n+1}) G_E(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \times \\ &\times \chi^{-1}(\overline{n+1}' | \overline{n+1}) \nu(\overline{n+1} | \overline{n+2}) \times \\ &\times G_E(\overline{n+2} | n + 2'). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Наконец, положив в (3.27) $\mathcal{B}^+ = B^+(n')$ и воспользовавшись для $((i\dot{A}(n) | B^+(n'))_{n-1, E}$ соотношением (3.30) при $\mathcal{A} = i\dot{A}(n)$, приходим к цепочке уравнений, связывающих только диагональные неприводимые функции Грина,

$$\begin{aligned} EG_E(n | n') &= \chi(n | n') + \left\{ (i\dot{A}(n) | B^+(\bar{n}')) + ((i\dot{A}(n) | -i\dot{B}^+(\bar{n}'))_{n, E} \right\} \times \\ &\times \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_{qE}(\bar{n} | n') = \chi(n | n') + \omega(n, \bar{n}) G_E(\bar{n} | n') + \\ &+ \nu(n | \overline{n+1}) G_E(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \times \\ &\times \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | n'), \end{aligned} \quad (3.35)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ (штрих у n' означает, что при данном номере n квантовые и векторные индексы могут не совпадать),

$$\begin{aligned} G_E(n | n') &= ((A(n) | B^+(n'))_{n-1, E}, \\ G_E(n + 1 | n + 1') &= ((A(n + 1) | B^+(n + 1'))_{n, E}, \quad \dots \end{aligned}$$

Аналогично получаем уравнение, соответствующее дифференцированию по “второму времени”,

$$\begin{aligned} EG_E(n | n') &= \chi(n | n') + G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \times \\ &\times \left\{ (A(\bar{n}) | -i\dot{B}^+(n')) + ((i\dot{A}(\bar{n}) | -i\dot{B}^+(n'))_{n, E} \right\} = \\ &= \chi(n | n') + G_E(n | \bar{n}') \bar{\omega}(\bar{n}' | n') + G_E(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) \times \\ &\times \nu(\bar{n} | \overline{n+1}) G_E(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | n'). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Заметим, что первые равенства в соотношениях (3.27), (3.29), (3.30), (3.35) и (3.36) по сравнению со вторыми являются более общими, т.к. их вывод не зависел от предположения, что последовательность ортогонализированных операторов $A(n)$ и $B^+(n)$ порождена уравнениями движения (3.16), (3.17). Если ввести функцию $G_E^{(0)}(n | n')$, удовлетворяющую уравнению

$$EG_E^{(0)}(n | n') = \chi(n | n') + \omega(n | \bar{n}) G_E^{(0)}(\bar{n} | n'), \quad (3.37)$$

то уравнения для функции $G_E(n | n')$, например (3.35), можно представить в форме уравнений Дайсона

$$G_E(n | n') = G_E^{(0)}(n | n') + G_E^{(0)}(n | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) M_E(\bar{n} | \bar{n}') \chi^{-1}(\bar{n}' | \bar{n}) G_E(\bar{n} | \bar{n}'), \quad (3.38)$$

где “массовый оператор”

$$\begin{aligned} M_E(n | n') &= ((i\dot{A}(n) | -i\dot{B}^+(n'))_{n,E} = \\ &= \nu(n | \overline{n+1}) G_E(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \nu(\overline{n+1}' | n'). \end{aligned}$$

Уравнения (3.35)–(3.38) наряду с соотношениями (3.29)–(3.34) составляют основу предлагаемого метода вычислений функций Грина. Цепочка уравнений (3.35), (3.38) может быть “оборвана”, например, путем замены в “массовом операторе” n -го уравнения функции $G_E(n+1 | n+1')$ на функцию $G_E^{(0)}(n+1 | n+1')$. Поскольку в цепочке уравнений каждая последующая функция входит в массовый оператор предыдущего уравнения, решение будет иметь характер ветвящейся цепной дроби [15]. Если решения цепочки – диагональные функции $G_E(n | n')$ – найдены, то недиагональные функции $((A(m) | B^+(n)))_{n-1,E}$, $((A(n) | B^+(m'))_{n-1,E}$ при $m > n$ выражаются через диагональные с помощью последовательного применения соотношений (3.31)–(3.34). Более того, с помощью этих соотношений и рекуррентных формул (3.23) неприводимые функции могут быть сведены к обычным функциям, а по ним с помощью спектральных представлений [1, 2] можно вычислить необходимые корреляционные функции. Так, например, при $n, m = 1, 2$ будем иметь (см. (3.33))

$$((A(2) | B^+(1'))_E = G_E(2 | \bar{2}) \bar{\nu}(\bar{2} | \bar{1}') \chi^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) G_E(\bar{1} | 1'), \quad (3.39)$$

$$((A(1) | B^+(2'))_E = G_E(1 | \bar{1}') \chi^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) \nu(\bar{1} | \bar{2}) G_E(\bar{2} | 2'), \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} ((A(2) | B^+(2'))_E &= ((A(2) | B^+(2'))_{1,E} + ((A(2) | B^+(\bar{1}'))_E \times \\ &\times G_E^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) ((A(\bar{1}) | B^+(2'))_E = G_E(2 | 2') + \\ &+ G_E(2 | \bar{2}') \bar{\nu}(\bar{2}' | \bar{1}') \chi^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) G_E(\bar{1} | \bar{1}') \times \\ &\times \chi^{-1}(\bar{1}' | \bar{1}) \nu(\bar{1} | \bar{2}) G_E(\bar{2} | 2'). \end{aligned} \quad (3.41)$$

В правые части соотношений (3.39)–(3.41) входят только неприводимые функции, являющиеся решением цепочки (3.35). Заметим, что в функциях $G_E(n | n')$ можно заменить операторы $A(n)$, $B^+(n')$ из (3.8), (3.9) исходными операторами $a(n)$ и $b^+(n')$, определяемыми уравнениями (3.4), (3.5),

$$G_E(n | n') = ((A(n) | B^+(n'))_{n-1,E} = ((a(n) | b^+(n'))_{n-1,E}, \quad (3.42)$$

т.к. в силу неприводимости функций операторы $A(j)$ и $B^+(j')$ при $j < n$ вклад не дают. Аналогично для $\chi(n | n')$ из (3.10) будем иметь

$$\chi(n | n') = (A(n) | B^+(n')) = (a(n) | b^+(n'))_{n-1}. \quad (3.43)$$

Все это указывает на то, что при выводе уравнений для функции $G_E(n | n')$ можно было бы и не производить предварительной ортогонализации (3.8), (3.9). Однако в этом случае все доказательства и окончательные выражения были бы слишком громоздкими.

Уравнения для восприимчивостей $\chi(n | n')$ можно получить из уравнений (3.35), разлагая входящие в них функции Грина по степеням $1/E$ ($E \rightarrow \infty$) и приравнявая члены при первой степени $1/E$, или же непосредственно из (3.19), используя соотношения (3.11), (3.14). В результате получаем

$$\omega(n | \bar{n})\chi(\bar{n} | n') = \chi(n | \bar{n})\bar{\omega}(\bar{n} | n') = \eta(n | n'), \quad (3.44)$$

где $\eta(n | n')$ – усредненный коммутатор (3.20).

3.5. Графическое (диаграммное) представление. Изобразим неприводимые функции $G_E(n | n')$, $G_E^{(0)}(n | n')$ и параметры взаимодействия (см. (3.22), (3.37), (3.4), (3.5)) в виде заштрихованных и незаштрихованных квадратов и кружков:

$$\begin{aligned} G_E^{(0)}(1 | 1') &= \square, & G_E^{(0)}(2 | 2') &= \square, \\ G_E^{(0)}(3 | 3') &= \square, & \dots, \\ G_E(1 | 1') &= \blacksquare, & G_E(2 | 2') &= \blacksquare, \\ G_E(3 | 3') &= \blacksquare, & \dots, \\ \chi^{-1}(1 | \bar{1})\nu(\bar{1} | 2) &= \bigcirc, & \bar{\nu}(2 | \bar{1})\chi^{-1}(\bar{1} | 1) &= \bigcirc, \\ \chi^{-1}(2 | \bar{2})\nu(\bar{2} | 3) &= \bigcirc, & \dots, \end{aligned} \quad (3.45)$$

где число выходящих горизонтальных линий соответствует номерам n и $n + 1$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Первые два уравнения цепочки уравнений дайсоновского типа (3.38) представляется в виде

$$\blacksquare = \square + \square \bigcirc \blacksquare, \quad (3.46)$$

$$\blacksquare = \square + \square \bigcirc \blacksquare, \quad (3.47)$$

где по индексам состояний (и по векторным индексам, если $A(n)$ и $B^+(n')$ – операторные столбец и строка), соответствующих линиям, соединяющим квадраты и кружки, производится суммирование.

Выражение недиагональных, а также приводимых функций через неприводимые функции (см. (3.31)–(3.34), (3.39)–(3.41)) представляется следующим образом:

$$\begin{aligned} ((A(1) | B^+(2'))_E &= \blacksquare \bigcirc \blacksquare, \\ ((A(2) | B^+(3'))_{1,E} &= \blacksquare \bigcirc \blacksquare, \\ ((A(1) | B^+(3'))_E &= \blacksquare \bigcirc \blacksquare \bigcirc \blacksquare, \quad \dots \end{aligned} \quad (3.48)$$

и

$$\begin{aligned} ((A(2) | B^+(2'))_E &= \blacksquare + \blacksquare \bigcirc \blacksquare, \\ ((A(2) | B^+(3'))_E &= \blacksquare \bigcirc \blacksquare + \blacksquare \bigcirc \blacksquare \bigcirc \blacksquare, \quad \dots \end{aligned} \quad (3.49)$$

Из соотношений (3.48) видно, что порядок приводимой функции $((A(n) | B^+(m)))_E$ ($n \leq m$) по “взаимодействию” тем выше, чем больше разность $m - n$. Если $n \neq 1$, то в выражение приводимой функции войдут также неприводимые функции $G_E(l | l')$ при $l < n$ (см. (3.49)). В случае, если $n \geq m$, для приводимых функций будем иметь представления, аналогичные (3.48), (3.49), но записанные “в обратном порядке”.

Уравнения (3.35)–(3.38) для функций релаксации (2.2), (2.4), полученные в этом разделе, удобны тем, что непосредственно соотносятся с флуктуациями в равновесном состоянии (2.12) и уравнениями для них. Например, в случае гидродинамических флуктуаций, когда в качестве базисных выбираются операторы (3.3), это позволяет вычислить кинетические коэффициенты, не выходя за рамки равновесной статистической механики [7]. Однако эти уравнения еще не вполне замкнуты, т.к. содержат неизвестные пока скалярные произведения, входящие в определения $A(n)$ и $B^+(n')$ (3.8), (3.9) и в выражения для $\omega(n, n')$ и $\bar{\omega}(n, n')$ (3.18), (3.18'). При приближенных вычислениях это обстоятельство обычно не вызывает особых затруднений. В общем же случае необходимо дополнить полученные соотношения уравнениями, позволяющими находить нужные скалярные произведения, исходя из “первых принципов”. Эта проблема будет рассмотрена в следующем разделе.

4. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КОММУТАТОРНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА И СКАЛЯРНЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ

В этом разделе мы получим бесконечную систему уравнений для коммутаторных функций Грина (2.1) и, воспользовавшись связью (2.11) коммутаторной функции при $E = 0$ с функцией релаксации (2.4) при $t = 0$, найдем соотношения, позволяющие вычислить скалярные произведения и восприимчивости $\chi(n | n')$, входящие в уравнения предыдущего раздела.

4.1. Уравнения для коммутаторных функций. Все уравнения и соотношения, полученные в третьем разделе формально, почти полностью переносятся на случай коммутаторных функций, если всюду заменить скалярные произведения $(\mathcal{A} | \mathcal{B}^+)$ (2.4) усредненными коммутаторами $\langle [\mathcal{A}, \mathcal{B}^+]_- \rangle$. Как и в предыдущем разделе, будем исходить из последовательности операторов $a(n)$, $b^+(n')$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), вообще говоря, отличных от операторов $a(n)$, $b^+(n')$ третьего раздела, которые определяются цепочками уравнений движения типа (3.4), (3.5). По аналогии с (3.8), (3.9) “ортогонализируем” эти операторы, заменив их на $A[n]$ и $B^+[n']$, где $A[1] \equiv a(1)$, $B^+[1'] \equiv b^+(1')$, и при $n = 2, 3, \dots$ имеем

$$A[n] = a(n) - \sum_{j=1}^{n-1} \langle [a(n), B^+[\bar{j}']] \rangle \eta^{-1} [\bar{j}' | \bar{j}] A[\bar{j}], \quad (4.1)$$

$$B^+[n'] = b^+(n') - \sum_{j=1}^{n-1} B^+[\bar{j}'] \eta^{-1} [\bar{j}' | \bar{j}] \langle [A[\bar{j}], b^+(n')] \rangle. \quad (4.2)$$

Вместо восприимчивости $\chi(n | n')$ в формулах (3.8), (3.9), (3.1) и (3.2) имеем усредненный коммутатор

$$\eta[n | n'] = \langle [A[n], B^+[n']] \rangle, \quad (4.3)$$

вообще говоря, отличный от $\eta(n | n')$ (3.20), а вместо (3.11) – соотношение

$$\eta[n | \bar{n}] \eta^{-1}[\bar{n} | n'] = \delta(n, n'), \quad \eta^{-1}[n | \bar{n}] \eta[\bar{n} | n'] = \bar{\delta}(n, n'). \quad (4.4)$$

Операторы $A[n]$ и $B^+[m']$ “ортогонализированы” в том смысле, что их усредненные коммутаторы удовлетворяют соотношению

$$\langle [A[n], B^+[m']] \rangle = \eta[n | n'] \delta_{n,m}, \quad (4.5)$$

аналогичному соотношению (3.5) для скалярных произведений. Чтобы отличить новые операторы $A[n]$, $B^+[n']$ от прежних $A(n)$, $B^+(n')$, круглые скобки заменены на квадратные.

Важно отметить, что для данной последовательности операторов $a(n)$, $b^+(n)$, определяемой цепочками уравнений движения (3.4), (3.5), обратные матрицы $\chi^{-1}(n | n')$ и $\eta^{-1}[n | n']$ не всегда существуют одновременно. Так, в случае базиса (3.1) или (3.2) обратные матрицы существуют как для $\chi(1 | 1') = (a(1) | b^+(1'))$, так и для $\eta[1 | 1'] = \langle [a(1), b^+(1')] \rangle$. В случае же (3.3) обратная матрица $\chi^{-1}(1 | 1')$ существует, но не существует $\eta^{-1}[1 | 1']$, т.к. $\det \eta[1 | 1'] = 0$. Отсюда следует, что не всегда можно использовать одну и ту же цепочку операторных уравнений (3.4), (3.5) в схемах вычислений, разработанных для релаксационных функций и для коммутаторных функций, рассматриваемых в этом разделе. Указанное обстоятельство вносит некоторые затруднения при использовании коммутаторных функций для вычисления на основе соотношений (2.11) скалярных произведений, входящих в уравнения предыдущего раздела. Однако эти трудности преодолимы. Можно, например, дополнить гидродинамический базис (3.3) оператором $i\hbar_q$, в результате чего будем иметь $\det \eta[1 | 1'] \neq 0$. Имея все это в виду и определяя по аналогии с (3.23) неприводимые коммутаторные функции

$$\begin{aligned} \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B}^+ \rangle \rangle_{n,E} &= \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B}^+ \rangle \rangle_{n-1,E} - \\ &- \langle \langle \mathcal{A} | B^+[\bar{n}'] \rangle \rangle_{n-1,E} G_E^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] \langle \langle A[\bar{n}] | \mathcal{B}^+ \rangle \rangle_{n-1,E}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

где $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}^+$ – произвольные операторы и

$$G_E[n | n'] = \langle \langle A[n] | B^+[n'] \rangle \rangle_{n-1,E} = \langle \langle a(n) | b^+(n') \rangle \rangle_{n-1,E}, \quad (4.7)$$

для диагональных по номеру n коммутаторных функций Грина (4.7) будем иметь цепочку уравнений

$$\begin{aligned} EG_E[n | n'] &= \eta[n | n'] + \omega[n, \bar{n}] G_E[\bar{n} | n'] + \\ &+ \nu(n | \overline{n+1}) G_E[\overline{n+1} | \overline{n+1}'] \times \\ &\times \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] G_E[\bar{n} | n'] \end{aligned} \quad (4.8)$$

($n = 1, 2, 3, \dots$), аналогичную цепочке (3.35), где (см. (3.18)–(3.20))

$$\omega[n, n'] = \varepsilon(n, n') + \nu(n | \overline{n+1}) \langle [a(\overline{n+1}), B^+[\bar{n}']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}' | n'] - \langle [a(n), B^+[\overline{n-1}']] \rangle \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] \nu(\overline{n-1} | n'), \quad (4.9)$$

$$\omega[n, \bar{n}] \delta(\bar{n}, n') = \langle [i\dot{A}[n], B^+[\bar{n}']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}' | n']. \quad (4.9')$$

Последний член в правой части формулы (4.9) при $n = 1$ отсутствует. Соотношения, соответствующие дифференцированию по “второму времени” (см. (3.36), (3.18')), выписывать не будем вследствие их очевидности.

Аналогично формулам (3.29), (3.30) будем иметь также формулы, связывающие коммутаторные функции разной степени неприводимости,

$$\begin{aligned} \langle \langle A[n] | \mathcal{B}^+ \rangle \rangle_{n-1, E} &= G_E[n | \bar{n}'] \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] \left\{ \langle [A[\bar{n}], \mathcal{B}^+] \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \nu(\bar{n} | \overline{n+1}) \langle \langle A[\overline{n+1}] | \mathcal{B}^+ \rangle \rangle_{n, E} \right\}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \mathcal{A} | B^+[n'] \rangle \rangle_{n-1, E} &= \left\{ \langle [\mathcal{A}, B^+[\bar{n}']] \rangle + \langle \langle \mathcal{A} | B^+[\overline{n+1}'] \rangle \rangle_{n, E} \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \right\} \times \\ &\quad \times \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] G_E[\bar{n} | n'], \end{aligned} \quad (4.11)$$

где $\mathcal{A}$ и $\mathcal{B}^+$ – произвольные операторы. С помощью этих формул можно, например, при $n = 1$, $\mathcal{A} = A[2]$ и $\mathcal{B}^+ = B^+[2']$ (см. (3.39)–(3.41)) выразить обычные функции Грина через неприводимые “диагональные” функции, являющиеся решением цепочки уравнений (4.8):

$$\langle \langle A[2] | B^+[1'] \rangle \rangle_E = G_E[2 | \bar{2}'] \bar{\nu}(\bar{2}' | \bar{1}') \eta^{-1}[\bar{1}' | \bar{1}] G_E[\bar{1} | 1'], \quad (4.12)$$

$$\langle \langle A[1] | B^+[2'] \rangle \rangle_E = G_E[1 | \bar{1}'] \eta^{-1}[\bar{1}' | \bar{1}] \nu(\bar{1} | \bar{2}) G_E[\bar{2} | 2'], \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} \langle \langle A[2] | B^+[2'] \rangle \rangle_E &= G_E[2 | 2'] + G_E[2 | \bar{2}'] \bar{\nu}(\bar{2}' | \bar{1}') \eta^{-1}[\bar{1}' | \bar{1}] \times \\ &\quad \times G_E[\bar{1} | \bar{1}'] \eta^{-1}[\bar{1}' | \bar{1}] \nu(\bar{1} | \bar{2}) G_E[\bar{2} | 2']. \end{aligned} \quad (4.14)$$

В отличие от (3.35) в уравнениях (4.8) проблема вычисления неоднородных членов $\eta[n | n'] = \langle [A[n], B^+[n']] \rangle$ не возникает. Эти усредненные коммутаторы представляют собой средние от произведений операторов рождения и уничтожения, порядок которых ниже, чем в усредненном произведении $\langle B^+[n'] A[n] \rangle$. Например, в случае (3.1) $\eta[1 | 1'] = \langle [a_p, a_{p'}^+] \rangle = \delta_{p, p'}$ и в случае (3.2)

$$\eta[1 | 1'] = \left\langle \left[a_{p-\frac{q}{2}}^+ a_{p+\frac{q}{2}}, a_{p'+\frac{q}{2}}^+ a_{p'-\frac{q}{2}} \right] \right\rangle = \left(n_{p-\frac{q}{2}} - n_{p+\frac{q}{2}} \right) \delta_{p, p'}.$$

В результате в отличие от $\chi(n | n')$ в уравнениях (3.35), (3.36) они могут быть вычислены, не выходя за рамки уравнений (4.8).

Чтобы получить уравнения для антикоммутаторных функций (2.1), достаточно во всех приведенных выше формулах заменить коммутаторы $[A, \mathcal{B}^+]$ антикоммутаторами $[A, \mathcal{B}^+]_+ = A\mathcal{B}^+ + \mathcal{B}^+A$.

Полученные уравнения (4.8)–(4.14) представляют самостоятельный интерес, т.к. непосредственно через коммутаторные функции выражаются динамические восприимчивости. По ним же с помощью спектральных представлений [1, 2] восстанавливаются статистические средние.

При $E = 0$ из уравнений (4.8)–(4.14) с учетом (2.11) можно найти скалярные произведения, входящие в качестве коэффициентов в уравнения для релаксационных функций (3.35), (3.36), (3.18) и уравнения (3.44) для функции $\chi(n | n')$.

4.2. Уравнения для статистических восприимчивостей в случае одновременного существования $\chi^{-1}(n | n')$ и $\eta^{-1}[n | n']$. Особенно просто исключение скалярных произведений из уравнений (3.35), (3.36) и (3.44) производится, если существуют обратные матрицы как для функции $\chi(n | n')$ (3.10), так и для функции $\eta[n | n']$ (4.3), построенных исходя из одних и тех же последовательностей операторов $a(n)$, $b^+(n')$ ($n = 1, 2, 3, \dots$), определяемых цепочкой уравнений движения (3.4), (3.5). Этому условию, как уже отмечалось, удовлетворяют базисные операторы (3.1) и (3.2), но не удовлетворяют операторы (3.3). Далее мы будем считать условие одновременного существования указанных матриц выполненным. Исходя при этом из соотношений (4.7), (2.11), (3.10), (3.24) получаем, что

$$\begin{aligned} G_{E=0}[n | n'] &= \langle \langle A[n] | B^+[n'] \rangle \rangle_{n-1, E=0} = \langle \langle A(n) | B^+(n') \rangle \rangle_{n-1, E=0} = \\ &= -(A(n) | B^+(n'))_{n-1} = -(A(n) | B^+(n')) = -\chi(n | n'), \end{aligned} \quad (4.15)$$

т.е. при $E = 0$ диагональная коммутаторная функция напрямую связана с восприимчивостью $\chi(n | n')$, входящей в уравнения для диагональной релаксационной функции (3.35), (3.18). Уравнение для $\chi(n | n')$ следует из (4.8) при $E = 0$:

$$\begin{aligned} \omega[n, \bar{n}] \chi(\bar{n} | n') - \nu(n | \overline{n+1}) \chi(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \times \\ \times \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] \chi(\bar{n} | n') = \eta[n | n']. \end{aligned} \quad (4.16)$$

В отличие от (3.44) уравнение (4.16) не содержит неизвестных скалярных произведений.

Вводя по аналогии с формулой (3.37) “нулевую” восприимчивость $\chi^{(0)}(n | n')$, удовлетворяющую уравнению

$$\omega[n, \bar{n}] \chi^{(0)}(\bar{n} | n') = \eta[n | n'], \quad (4.17)$$

мы можем представить уравнение (4.16) в виде

$$\begin{aligned} \chi(n | n') &= \chi^{(0)}(n | n') + \chi^{(0)}(n | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] \nu(n | \overline{n+1}) \chi(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \times \\ &\times \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | \bar{n}] \chi(\bar{n} | n'). \end{aligned} \quad (4.16')$$

Если в (4.16) положить $\chi(n+1 | n+1') \cong \chi^{(0)}(n+1 | n+1')$, то цепочка уравнений оборвется на n -м уравнении, которое превратится в линейное интегральное уравнение для $\chi(n | n')$.

Производя с помощью соотношений (3.12)–(3.14) свертку уравнения (4.16') справа с $\chi^{-1}(n|n')$ и слева с $\chi^{(0)-1}(n|n')$, получим выражение для обратной матрицы $\chi^{-1}(n|n')$:

$$\begin{aligned} \chi^{-1}(n|n') &= \chi^{(0)-1}(n|n') - \eta^{-1}[n|\bar{n}]\nu(\bar{n}|\overline{n+1}) \times \\ &\times \chi(\overline{n+1}|\overline{n+1'})\bar{\nu}(\overline{n+1'}|\bar{n}')\eta^{-1}[\bar{n}'|n'], \end{aligned}$$

где согласно (4.17) и (4.9') имеем

$$\begin{aligned} \chi^{(0)-1}(n|n') &= \eta^{-1}[n|\bar{n}]\langle [i\dot{A}[\bar{n}], B^+[\bar{n}']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}'|n'] = \\ &= \eta^{-1}[n|\bar{n}]\langle [A[\bar{n}], -i\dot{B}^+[\bar{n}']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}'|n']. \end{aligned}$$

4.3. Исключение скалярных произведений из $\omega(n|n')$ (3.18). Уравнения (4.16), (4.17) дают возможность вычислить восприимчивости $\chi(n|n')$, не вычисляя скалярных произведений, входящих в определение (3.10) и уравнения (3.44). Однако скалярные произведения все еще входят в основные уравнения (3.35)–(3.38) через величину $\omega(n, n')$, заданную соотношением (3.18).

Для их исключения воспользуемся формулами, получаемыми из (4.10), (4.11) при $E = 0$. Учитывая (4.15) и аналогичное ему соотношение

$$\langle \langle \mathcal{A} | B^+[n'] \rangle \rangle_{n-1, E} = -(\mathcal{A} | B^+[n'])_{n-1} = -(\mathcal{A} | b^+(n'))_{n-1} = -(\mathcal{A} | B^+(n')),$$

будем иметь равенство, следующее из формулы (4.11),

$$(\mathcal{A} | B^+(n')) = \left\{ \langle [\mathcal{A}, B^+[n']] \rangle - (\mathcal{A} | B^+(\overline{n+1'}))\bar{\nu}(\overline{n+1'}|\bar{n}') \right\} \eta^{-1}[\bar{n}'|\bar{n}]\chi(\bar{n}|\bar{n}').$$

Используя соотношения (3.11) и (3.14) (с заменой $\chi(n|n')$ на $\eta[n|n']$), представим последнее равенство в виде

$$\begin{aligned} \langle [\mathcal{A}, B^+[n']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}'|n'] - (\mathcal{A} | B^+(\bar{n}'))\chi^{-1}(\bar{n}'|n') &= \\ = (\mathcal{A} | B^+(\overline{n+1'}))\bar{\nu}(\overline{n+1'}|\bar{n}')\eta^{-1}[\bar{n}'|n]. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Из формулы (4.10) аналогично получаем

$$\begin{aligned} \eta^{-1}[n|\bar{n}]\langle [A[\bar{n}], B^+] \rangle - \chi^{-1}(n|\bar{n})(A(\bar{n}) | B^+) &= \\ = \eta^{-1}[n|\bar{n}]\nu(\bar{n}|\overline{n+1})(A(\overline{n+1}) | B^+). \end{aligned} \quad (4.18')$$

Напомним, что в соотношениях (4.14) и (4.18') операторы $A(n)$, $B^+(n')$ (3.8), (3.9) и $A[n]$, $B^+[n']$ (4.1), (4.2) по предположению построены исходя из одних и тех же операторов $a(n)$, $b^+(n')$ (см. (3.4), (3.5)). Предполагается также одновременное существование обратных матриц $\chi^{-1}(n|n')$ и $\eta^{-1}[n|n']$.

При $\mathcal{A} = a(n+1)$, учитывая, что

$$(a(n+1) | B^+(n+1')) = (A(n+1) | B^+(n+1')) = \chi(n+1|n+1'),$$

из (4.18) получаем соотношение

$$(a(n+1) | B^+(\bar{n}')) \chi^{-1}(\bar{n}' | n') = \langle [a(n+1), B^+[\bar{n}']] \rangle \eta^{-1}[\bar{n}' | n'] - \\ - \chi(n+1 | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | n'], \quad (4.19)$$

позволяющее исключить скалярные произведения из второго, а при замене n на $n-1$ и из третьего члена в правой части выражения (3.18) для $\omega(n, n')$.

В результате будем иметь

$$\omega(n, n') = \varepsilon(n, n') + \nu(n | \overline{n+1}) \left\{ \langle [a(\overline{n+1}), B^+[\bar{n}']] \rangle - \right. \\ \left. - \chi(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \right\} \eta^{-1}[\bar{n}' | n'] - \left\{ \langle [a(n), B^+[\overline{n-1}']] \rangle - \right. \\ \left. - \chi(n | \bar{n}') \bar{\nu}(\bar{n}' | \overline{n-1}') \right\} \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] \nu(\overline{n-1} | n') = \\ = \omega[n, n'] - \nu(n | \overline{n+1}) \chi(\overline{n+1} | \overline{n+1}') \bar{\nu}(\overline{n+1}' | \bar{n}') \eta^{-1}[\bar{n}' | n'] + \\ + \chi(n | \bar{n}') \bar{\nu}(\bar{n}' | \overline{n-1}') \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] \nu(\overline{n-1} | n'), \quad (4.20)$$

где $\omega[n, n']$ определяется соотношением (4.9). Аналогично получаем связь $\bar{\omega}(n, n')$ из уравнения (3.36) с $\bar{\omega}[n, n']$.

С помощью соотношений (4.18) и (4.19) мы можем также получить формулы, связывающие $A(n)$ с $A[n]$ и $B^+(n')$ с $B^+[n']$ (см. (3.8), (3.9), (4.1) и (4.2)),

$$A(n) = A[n] + \chi(n | \bar{n}') \bar{\nu}(\bar{n}' | \overline{n-1}') \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] A[\overline{n-1}], \quad (4.21)$$

$$B^+(n') = B^+[n'] + B^+[\overline{n-1}'] \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] \nu(\overline{n-1} | \bar{n}) \chi(\bar{n} | n') \quad (4.22)$$

и связь (с учетом формулы (4.5)) усредненных коммутаторов $\eta(n | n')$ (3.20) с $\eta[n | n']$ (4.3):

$$\eta(n | n') = \eta[n | n'] + \chi(n | \bar{n}') \bar{\nu}(\bar{n}' | \overline{n-1}') \eta^{-1}[\overline{n-1}' | \overline{n-1}] \times \\ \times \nu(\overline{n-1} | \bar{n}) \chi(\bar{n} | n'). \quad (4.23)$$

Подставляя $\omega(n, n')$ и $\eta(n | n')$ в (3.44), снова приходим к уравнению (4.16).

Заметим, что величины $\omega(n, n')$, $\omega[n, n']$, как и $\eta(n | n')$, $\eta[n | n']$, отличаются друг от друга членами второго порядка по “параметру взаимодействия” ν .

Цепочки уравнений (3.35), (3.44) и (4.8) в совокупности с уравнениями (4.16), (4.20) (если последовательности операторов $a(n)$ и $b^+(n')$, определяемые уравнениями движения (3.4), (3.5), допускают одновременное существование обратных матриц $\chi^{-1}(n | n')$ и $\eta^{-1}[n | n']$) представляют собой замкнутую систему уравнений для вычисления как диагональных релаксационных функций Грина (3.22), так и (благодаря соотношениям (3.31)–(3.34), (3.39)–(3.41)) недиагональных функций, связанных с малыми возмущениями равновесного состояния формулой (2.12).

Обычные средние от произведений операторов, входящие в коэффициенты уравнений (4.8), (4.16), (4.20), могут быть вычислены исходя из цепочки уравнений для коммутаторных (или антикоммутаторных) функций.

Как уже отмечалось в предыдущем разделе (после формулы (3.38)), решения цепочки уравнений близки по структуре к ветвящейся цепной дроби, что позволяет выйти за рамки обычной теории возмущений по взаимодействию. Приближение по взаимодействию заменяется приближением по степени учета высших корреляций. Так, заменив в n -м уравнении цепочки $G_E(n+1 | n+1')$ на $G_E^{(0)}(n+1 | n+1')$ (см. (3.35), (3.37)), остальные функции $G_E(n | n')$ при $n \geq 1$ находим, решая уравнения точно. Это, в частности, позволяет находить результаты, получаемые в обычной теории возмущений путем суммирования бесконечного класса выделенных (“главных”) диаграмм.

В последующих статьях, которые явятся продолжением данной работы, на примере квантовой системы с парным взаимодействием будет выявлен ряд особенностей применения предложенной методики при решении конкретных задач статистической механики.

Список литературы

- [1] Н. Н. Боголюбов, С. В. Тябликов. ДАН СССР. 1959. Т. 126. С. 53.
- [2] Д. Н. Zubarev. УФН. 1960. Т. 71. С. 71.
- [3] H. Mori. Progr. Theor. Phys. 1965. V. 33. P. 423; V. 34. P. 399.
- [4] Д. Форстер. Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции. М.: Атомиздат, 1980.
- [5] Ю. А. Церковников. ДАН СССР. 1962. Т. 143. С. 832.
- [6] Ю. А. Церковников. ТМФ. 1981. Т. 49. С. 219.
- [7] Ю. А. Церковников. ТМФ. 1990. Т. 85. С. 124; С. 258.
- [8] Ю. А. Церковников. ТМФ. 1992. Т. 93. С. 412.
- [9] Н. М. Плакида. Метод двумерных функций Грина в теории ангармонических кристаллов. В сб.: Статистическая физика и квантовая теория поля. Ред. Н. Н. Боголюбов. М.: Наука, 1973. С. 205.
- [10] J. P. Voop, S. Yip. Molecular Hydrodynamics. N. Y.: Mc Graw-Hill Inc., 1980.
- [11] Ю. А. Церковников. ТМФ. 1995. Т. 105. С. 77.
- [12] R. Kubo. J. Phys. Soc. Japan. 1957. V. 12. № 6. P. 570.
- [13] J. S. Ramos, A. A. Gomes. Nuovo Cimento. A. 1971. V. 3. P. 441.
- [14] M. Suzuki. Physica. 1971. V. 51. P. 277.
- [15] В. Я. Скоробогатько. Теория ветвящихся цепных дробей и ее применение в вычислительной математике. М.: Наука, 1983.

Поступила в редакцию 11.VI.1998 г.