Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 5 — 1962

Н. Н. БОГОЛЮБОВ (мл.), Б. И. САДОВНИКОВ

# ФУНКЦИИ ГРИНА В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКЕ КЛАССИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ИХ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Вводятся двухвременные опережающие и запаздывающие функции Грина в статистической механике классических систем. Исходя из классической механики устанавливаются спектральные представления для них, а также выводится классический аналог квантово-механической теоремы о вариации среднего значения динамической величины.

## § 1

В настоящее время функции Грина и их спектральные представления получили большое значение для исследований в области статистической механики квантовых систем [1, 2, 3].

Целью настоящей работы является введение понятия двухвременных функций Грина в статистической механике классических систем и установления для них спектральных представлений [4].

Для этого мы сначала возьмем соответствующие квантово-механические выражения и совершим в них предельный переход при $\hbar \to 0$ к классической механике.

Рассмотрим квантово-механические функции Грина

$$\begin{aligned} G_r(t, t') &= \theta(t-t') \langle [A(t); B(t')] \rangle, \\ G_a(t, t') &= -\theta(t'-t) \langle [A(t); B(t')] \rangle, \end{aligned} \tag{1}$$

где $[A; B]$ — квантовые скобки Пуассона

и
$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

Здесь $A(t)$ и $B(t')$* — динамические величины (операторы) в гейзенберговском представлении, символ $<\ldots\ldots>$ обозначает статистическое усреднение по гиббсовскому ансамблю. Рассматривая формулы (1), для классического случая можем определить запаздывающие и опережающие функции Грина опять с помощью формулы (1) в которой $[A; B]$ будем понимать как классическую скобку Пуассона.

* Шредингеровское представление этих операторов не зависит явно от времени.

Вместо операторов $A$; $B$ мы, естественно, будем рассматривать функции динамического состояния изучаемой системы

$$\begin{aligned} A(t) &= A(q_1(t), \dots, q_N(t); \quad p_1(t), \dots, p_N(t)), \\ B(t') &= B(q_1(t'), \dots, q_N(t'); \quad p_1(t'), \dots, p_N(t')). \end{aligned} \tag{2}$$

Координаты и импульсы в момент времени $t$

$$\begin{gathered} q_i(t) = Q_i(t, q_1 \dots q_N; \quad p_1 \dots p_N), \\ p_i(t) = P_i(t, q_1 \dots q_N; \quad p_1 \dots p_N) \\ (i = 1, 2, \dots N) \end{gathered}$$

определяются уравнениями движения и начальными значениями

$$q_i(0) = q_i, \qquad p_i(0) = p_i.$$

Усреднение $\langle \dots\dots \rangle$ выполняется с помощью интегрирования по переменным $q_1, \dots, q_N$; $p_1, \dots, p_N$ с соответствующей весовой функцией.

Таким образом, мы вводим двухвременные запаздывающие и опережающие функции Грина для статистической механики классических систем.

В квантово-механическом случае кроме запаздывающих и опережающих функций рассматривают также «причинные» или «каузальные» функции Грина, например:

$$G_c(t, t') = -i \langle T(A(t) B(t')) \rangle = -i \langle B(t') A(t) \rangle + \\ + \hbar \langle [A(t); B(t')] \rangle \theta(t - t').$$

Эта функция для классического случая вырождается просто в среднее от произведения

$$-i \langle A(t) B(t') \rangle = -i \langle B(t') A(t) \rangle,$$

поскольку в этом случае умножение динамических величин коммутативно. Если же мы определим $G_c$ как

$$G_c = \frac{\langle T(A(t) B(t')) \rangle}{i\hbar},$$

то вообще нельзя будет перейти к пределу $\hbar \to 0$.

Итак, для классической механики естественно вводить лишь запаздывающие и опережающие функции Грина.

## § 2

Перейдем к вопросу о спектральных представлениях.

Будем рассматривать в квантовом случае состояние статистического равновесия, когда усреднение в (1) понимается как усреднение по гиббсовскому ансамблю

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = \frac{\mathrm{Sp}\,\mathfrak{A} e^{-\frac{H}{\theta}}}{\mathrm{Sp}\, e^{-\frac{H}{\theta}}}, \tag{3}$$

где $H$ — полный гамильтониан системы, независящий явно от времени.

В таком случае $\langle B(t') A(t) \rangle$ будет зависеть от $t$ только через посредство разности $(t - t')$.

Рассмотрим представление Фурье

$$\langle B(t') A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \tag{4}$$

Обобщая известные рассуждения для случая системы единиц, в которой $\hbar \neq 1$, найдем

$$\langle A(t) B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) e^{\frac{\omega\hbar}{\theta} - i\omega(t-t')} d\omega$$

и

$$\langle [A(t) B(t')] \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}} - 1}{i\hbar} e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \tag{5}$$

Введем Фурье-представления для функций (1)

$$G_{r,a}(t, t') = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iE(t-t')} \ll A, B \gg_E^{\text{ret},adv} dE. \tag{6}$$

При этом для функций Грина $\ll A; B \gg$ в $E$-представлении получим ввиду (1), (5)

$$\begin{aligned} \ll A, B \gg_E^{\text{ret}} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}} - 1}{\hbar} \frac{d\omega}{E + i\varepsilon - \omega}, \\ \ll A, B \gg_E^{adv} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \frac{e^{\frac{\omega\hbar}{\theta}} - 1}{\hbar} \frac{d\omega}{E - i\varepsilon - \omega}. \end{aligned} \tag{7}$$

Как известно, эти соотношения имеют место, когда усреднение ведется по большому ансамблю Гиббса; но если рассматривать такие операторы $A$, $B$, которые сохраняют число частиц (коммутируют с $N$), то усреднение можно вести по обычному ансамблю Гиббса.

Совершим в формулах (5), (7) формальный переход к классической механике $h \to 0$.

Среднее будет вычисляться вместо (3) по классическому ансамблю

$$\langle \mathfrak{A} \rangle = \frac{\int \mathfrak{A} e^{-\frac{H}{\theta}} dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N}{\int e^{-\frac{H}{\theta}} dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N}. \tag{8}$$

Вводим спектральную интенсивность $I(\omega)$ опять с помощью Фурье-представления (4).

Учитывая (5) и (7), получим

$$\langle [A(t); B(t')] \rangle = -\frac{i}{\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \omega e^{-i\omega(t-t')} d\omega,$$

$$\begin{aligned} \ll A, B \gg_E^{\text{ret}} &= \frac{1}{2\pi\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \omega \frac{d\omega}{E + i\varepsilon - \omega}, \\ \ll A, B \gg_E^{adv} &= \frac{1}{2\pi\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega) \omega \frac{d\omega}{E - i\varepsilon - \omega}. \end{aligned} \tag{9}$$

Это и есть искомые спектральные представления. Следует подчеркнуть, что спектральные представления (9) для статистической механики классических систем мы получили, взяв соответствующие представления для квантовых систем и совершив предельный переход к классической механике. Но так как (9) верны для классических систем, мы можем доказать их, не выходя за рамки классической механики. Этим мы и займемся.

Рассмотрим выражение $\langle A(t)B(t')\rangle = \langle B(t')A(t)\rangle$, в котором $A(t)$, $B(t')$ являются динамическими величинами типа (2) и где среднее $\langle \dots \rangle$ берется по формуле (8) с независящим явно от времени гамильтонианом $H$. Совершим далее преобразование $q_i \to q_i(-t')$, $p_i \to p_i(-t')$, так что

$$q_i(t') \to q_i, \qquad q_i(t) \to q_i(t-t'),$$

$$p_i(t') \to p_i, \qquad p_i(t) \to p_i(t-t').$$

Ввиду инвариантности гамильтониана $H$ и фазового объема Лиувиля по отношению к такому преобразованию получим

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \langle A(t-t')B(0)\rangle = \varphi(t-t').$$

Будем исходить из представления Фурье

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} I(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}d\omega \tag{10}$$

и определим среднее $\langle [A(t);\ B(t')]\rangle$, где

$$[A(t);\ B(t')] = \sum_{1\leqslant j\leqslant N} \left\{\frac{\partial}{\partial p_j}\left(B(t')\frac{\partial A(t)}{\partial q_j}\right) - \frac{\partial}{\partial q_j}\left(B(t')\frac{\partial A(t)}{\partial p_j}\right)\right\}.$$

С учетом (8) получаем

$$\langle [A(t);\ B(t')]\rangle = Q^{-1}\sum_{1\leqslant j\leqslant N}\int\left\{-B(t')\frac{\partial A(t)}{\partial q_j}\frac{\partial e^{-\frac{H}{\theta}}}{\partial p_j} + \right.$$

$$\left. + B(t')\frac{\partial A(t)}{\partial p_j}\frac{\partial e^{-\frac{H}{\theta}}}{\partial q_j}\right\} dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N = Q^{-1}\frac{1}{\theta}\int B(t')[A(t);H] \times$$

$$\times e^{-\frac{H}{\theta}} dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N = \frac{1}{\theta}\langle B(t')[A(t);\ H]\rangle,$$

где

$$Q = \int e^{-\frac{H}{\theta}} dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N,$$

но, с другой стороны,

$$[A(t);\ H] = \frac{dA(t)}{dt}.$$

Поэтому принимая во внимание (10), имеем

$$\langle [A(t);\ B(t')\rangle = \frac{1}{\theta}\left\langle \frac{dA(t)}{dt}B(t')\right\rangle =$$

$$= \frac{1}{\theta}\frac{d}{dt}\langle A(t)B(t')\rangle = -\frac{i}{\theta}\int_{-\infty}^{+\infty}\omega\, I(\omega)\, e^{-i\omega(t-t')}d\omega.$$

Отсюда на основании (1), (6) получим для функций Грина в E-представлении выражения (9). Итак, эти соотношения полностью доказаны.

Целесообразно ввести в рассмотрение функцию Грина

$$f(E)=\langle\langle A,B\rangle\rangle_E=\frac{1}{2\pi\theta}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\omega I(\omega)\frac{d\omega}{E-\omega}.$$

Эта функция для комплексного значения $E$ полностью определяется везде на комплексной плоскости $E$ за исключением вещественной оси, которая является линией разреза. Выражения (9) будут соответственно предельным нижним и предельным верхним значениями этой функции на вещественной оси (за исключением точек вещественной оси). При этом

$$f(\omega+i\varepsilon)-f(\omega-i\varepsilon)=-\frac{i\omega}{\theta}I(\omega).$$

Выведем классический аналог известной теоремы квантовой статистики [5] о вариации среднего значения динамической переменной при воздействии адиабатического бесконечно малого приращения гамильтониана.

Пусть при $t=-\infty$ наша система находится в состоянии статистического равновесия и ее гамильтонианом будет $H$.

Включим бесконечно малое приращение гамильтониана

$$H\to H+\delta H(t),$$

$$\delta H=\sum_{\Omega}e^{-iEt}\delta U_\Omega(q_1\dots q_N;\ p_1\dots p_N), \tag{11}$$

$$(E=i\varepsilon+\Omega;\ \varepsilon>0).$$

Рассмотрим динамическую переменную $A$ вида

$$A(t)=A(q_1(t),\dots,q_N(t);\ p_1(t),\dots,p_N(t))$$

и попытаемся вычислить приращение $\delta\langle A(t)\rangle$, обусловленное вариацией гамильтониана (11).

Среднее значение $A$

$$\langle A(t)\rangle=\int A(q_1\dots q_N;\ p_1\dots p_N)\rho(t,q_1\dots q_N;\ p_1\dots p_N)\,dq_1dp_1\dots dq_Ndp_N,$$

где $\rho(t,q_1\dots q_N;\ p_1\dots p_N)$ удовлетворяет уравнению движения

$$\frac{\partial\rho(t,q,p)}{\partial t}=\left[H(q,p)+\sum_{\Omega}e^{-i\Omega t+\varepsilon t}\delta U_\Omega(q,p);\ \rho(t,q,p)\right] \tag{12}$$

и начальному условию

$$\rho(t)=\rho=Q^{-1}e^{-\frac{H}{\theta}}$$

при $t=-\infty$.

Для удобства обозначений $q_1\dots q_N\sim q$; $\quad p_1\dots p_N\sim p$.

Полагая в (12) $\rho(t)=\rho+\delta\rho(t)$, получим

$$\frac{\partial\delta\rho(t)}{\partial t}=[H;\ \delta\rho(t)]+\sum_{\Omega}e^{-i\Omega t+\varepsilon t}[\delta U_\Omega;\ \rho]$$

при

$$\delta\rho(t) = 0, \qquad t = -\infty,$$

или

$$\frac{\partial U_t}{\partial t} = [H;\ U_t] + \sum_{\Omega} e^{-i\Omega t + \varepsilon t} f_{\Omega}$$

решение этого уравнения [6]

$$U_t = \sum_{\Omega} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\Omega\tau + \varepsilon\tau} S_{-(t-\tau)} f_{\Omega}(q,\ p)\, d\tau,$$

где $S_z$ — оператор сдвига, который заменяет начальные значения координат и импульсов $q(0)$, $p(0)$ их значениями через момент времени $z\,q(z)$, $p(z)$, которые определяются с помощью канонических уравнений

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

где $H$ — неварьированный гамильтониан.

Таким образом, для произвольной функции $F(q,\ p)$ динамических состояний можно написать

$$S_z F\{q(0),\ p(0)\} = F\{q(z),\ p(z)\} = F\{z,\ q(0),\ p(0)\},$$

$$S_{-z} F\{z,\ q(0),\ p(0)\} = F\{0,\ q(-z),\ p(-z)\} = F\{q(-z),\ p(-z)\},$$

поэтому

$$\delta\rho(t) = \sum_{\Omega} \int_{-\infty}^{t} e^{-i\Omega\tau + \varepsilon\tau} S_{-(t-\tau)} [\delta U_{\Omega}(q,\ p);\ \rho]\, d\tau. \tag{13}$$

Используя инвариантность скобок Пуассона относительно канонического преобразования, свойство мультипликативности оператора $S_{-(t-\tau)} = S_{-t} \cdot S_{\tau}$, а также закон сохранения энергии $S_{-z} H = H$ и плотности $S_{-z}\rho = \rho$, имеем

$$\delta\rho(t) = \sum_{\Omega} \int_{-\infty}^{t} e^{-i\Omega\tau + \varepsilon\tau} S_{-t} [S_{\tau}(\delta U_{\Omega}(q,\ p));\ \rho]\, d\tau.$$

Искомую величину $\delta \langle A(t) \rangle$ мы определим с помощью выражения (13). Вариацию среднего динамической величины $A(t)$ запишем в виде

$$\delta \langle A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A\delta\rho(t)\, dq\, dp. \tag{14}$$

Поставим (13) в (14)

$$\delta \langle A(t) \rangle = \sum_{\Omega} \int_{-\infty}^{t} e^{-i\Omega\tau + \varepsilon\tau} \int A(q, p)\, S_{-t} [S_{\tau}(\delta U_{\Omega}(q,\ p));\ \rho]\, dq\, dp\, d\tau =$$

$$= \sum_{\Omega} \int_{-\infty}^{t} e^{-i\Omega\tau + \varepsilon\tau} \left\{ \int A(q(t),\ p(t))\, [\delta U_{\Omega}(q(\tau),\ p(\tau));\ \rho]\, dq\, dp \right\} d\tau.$$

Преобразуем выражение в фигурных скобках. Интегрируя по частям, получим

$$\int A(t)\,[B(\tau);\ \rho]\,dq\,dp = \sum_j \int A(t) \left\{ \frac{\partial B(\tau)}{\partial q_j} \frac{\partial \rho}{\partial p_j} - \frac{\partial B(\tau)}{\partial p_j} \frac{\partial \rho}{\partial q_j} \right\} dq_j\,dp_j =$$

$$= -\sum_j \int \rho \left\{ \frac{\partial \left( A \frac{\partial B}{\partial q_j} \right)}{\partial p_j} - \frac{\partial \left( A \frac{\partial B}{\partial p_j} \right)}{\partial q_j} \right\} dq_j\,dp_j =$$

$$= \int \rho\,[A(t);\ B(\tau)]\,dq\,dp = \langle\ [A(t);\ B(\tau)]\ \rangle .$$

Вводя разрывную функцию

$$\theta(t-\tau) = \begin{cases} 1, & t > \tau \\ 0 & t < \tau \end{cases},$$

запишем соотношение для $\delta \langle A(t) \rangle$

$$\delta \langle A(t) \rangle = \sum_\Omega e^{-i\Omega t + \varepsilon t} \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t-\tau)\, e^{+i\Omega(t-\tau) - \varepsilon(t-\tau)} \langle [A(t);\ B_\Omega(\tau)] \rangle\, d\tau,$$

$$B_\Omega = \delta U_\Omega .$$

Вспоминая выражение для Фурье образов ret, adv, получим

$$\delta \langle A(t) \rangle = 2\pi \sum_\Omega e^{-i\Omega t + \varepsilon t} \ll A, \delta U_\Omega \gg_\Omega^{\text{ret}} .$$

Нетрудно показать, что если при $t = +\infty$ наша система находится в состоянии статистического равновесия, то при включении бесконечно малого возмущения вида

$$\delta H = \sum_\Omega e^{-i\Omega t - \varepsilon t} \delta U_\Omega (q,\ p)$$

изменение среднего значения $A(t)$ будет

$$\delta \langle A(t) \rangle = 2\pi \sum_\Omega e^{-i\Omega t - \varepsilon t} \ll A,\ \delta U_\Omega \gg_\Omega^{\text{ret}} .$$

Объединяя полученные результаты, найдем

$$\delta \langle A(t) \rangle = 2\pi \sum_\Omega e^{-iEt} \ll A, \delta U_\Omega \gg_\Omega ,$$

где

$$E = \Omega + \varepsilon i, \quad \text{ret}\,arded,$$

$$E = \Omega - \varepsilon i, \quad \text{adv}\,anced.$$

Заметим также, что для практических приложений удобно будет брать два первых члена в сумме для $\delta H$

$$\delta H = e^{-iEt} B \delta\xi + e^{+iEt} \overset{*}{B} \delta \overset{*}{\xi},$$

а изменение среднего значения оператора $A$ под влиянием этого возмущения будет

$$\delta \langle A \rangle = 2\pi \ll A,\ B \gg_E e^{-iEt} \delta\xi + 2\pi \ll A,\ \overset{*}{B} \gg_{-E} e^{iEt} \delta \overset{*}{\xi}. \tag{15}$$

Полученные результаты будут использованы нами в следующей работе при получении уравнений для функций Грина исходя из цепочки уравнений для корреляционных функций распределения.

Пользуясь случаем, выражаем свою признательность доктору С. В. Тябликову, И. П. Базарову, Д. Н. Зубареву, И. А. Квасникову за обсуждение работы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. Физматгиз, М., 1961.
2. Зубарев Д. Н. ЖЭТФ, **25**, 548, 1953.
3. Бонч-Бруевич В. Л. ЖЭТФ, **31**, 522, 1956.
4. Kubo R., Tomito K. Phys. Rev., **78**, 572, 1950.
5. Зубарев Д. Н. УФН, **71**, 71, 1960.
6. Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. Гостехиздат, М., 1946.

Поступила в редакцию
19. 1 1962 г.

Кафедра
статистической физики и механики