

УДК 539.391+514.764.2

## ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПО ЕЕ МОМЕНТАМ

*Рошупкин С.Н.*

*Таврический национальный университет им. В.И. Вернадского, Симферополь, Украина*

*E-mail: [rsn@tnu.crimea.ua](mailto:rsn@tnu.crimea.ua)*

Рассмотрена общая теория линейного отклика. Рассмотрена эволюция корреляционной функции на коротких временах. Показано, что корреляционная функция может быть восстановлена по ее частотным моментам.

**Ключевые слова:** корреляционная функция, теория линейного отклика, частотные моменты.

### ВВЕДЕНИЕ

При исследовании динамических процессов в многочастичных системах обычно используют в качестве зонда внешнюю силу, которая лишь слегка выводит систему из равновесия, а затем измеряют зависящий от времени линейный отклик на эту силу. Большое число экспериментальных методов попадает в эту категорию: исследование формы линии экспериментальных, инфракрасных и рамановских спектров; изучение формы линии в экспериментах по дипольной или спиновой релаксации; исследование поглощения звука и кинетических характеристик и др. Во всех этих экспериментах изучаются динамические характеристики спонтанных флуктуаций относительно равновесного состояния. Для объяснения этих флуктуаций требуется гораздо меньше информации, чем содержится в микроскопическом состоянии или матрице плотности. Согласно теории линейного отклика эти флуктуации можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций: парных произведений некоторых динамических переменных  $A(t)$  и  $B(t')$ , взятых в различные моменты времени  $t$  и  $t'$  и усредненных по каноническому ансамблю:

$$S_{AB}(t, t') = \langle A(t)B(t') \rangle. \quad (1)$$

Эти функции представляют собой мощный и гибкий инструмент для теоретического исследования неравновесных характеристик. Особый интерес представляют флуктуации измеримых величин, зависящих от пространственных координат и времени и описывающих в длинноволновой области коллективное движение, характерное для многих систем. С помощью корреляционной функции плотности частиц

$$S_{nn}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \langle n(\vec{r}, t)n(\vec{r}', t') \rangle, \quad (2)$$

описывают, например, рассеяние света, рентгеновских лучей и нейтронов, скажем, в нормальной жидкости. При рассеивании электронов измеряется функция

$S_{\rho\rho}(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ , которая получается при замене в выражении (2) плотности частиц  $n(\vec{r}, t)$  плотностью заряда  $\rho(\vec{r}, t)$ . В магнитных системах при рассеянии нейтронов измеряется корреляционная функция намагниченности  $M(\vec{r}, t)$  и т.д. Важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Правила сумм представляют собой интегралы, которые можно оценить численно, если известны межчастичный потенциал и статические корреляционные функции. Сведения о статических корреляционных функциях можно получить с помощью численных расчетов. По этой причине можно считать, что частотные моменты корреляционной функции известны.

В предлагаемой вниманию работе показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

### 1. ЛИНЕЙНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТКЛИК И ПРАВИЛА СУММ

Проанализируем теперь динамический отклик системы на внешнее магнитное поле  $\delta h_b(\vec{r}, t)$ , которое некоторым заданным образом изменяется в пространстве и во времени. Подобный подход объясняется, конечно, тем, что таким образом проводится большинство экспериментов: к системе прикладывают какую либо внешнюю силу, смотрят, что происходит, и делают выводы о свойствах самой системы. Разумеется, некоторые эксперименты не укладываются в эту схему, но многие укладываются; невозможно охватить все сразу. В присутствии внешнего магнитного поля  $\delta h_b(\vec{r}, t)$  гамильтониан явно зависит от времени и определяется выражением

$$H(t) = H + \delta H_b(t) = H - \int d\vec{r} M(\vec{r}) \delta h_b(\vec{r}, t), \quad (3)$$

в представлении Шредингера, когда оператор  $M(\vec{r})$  не зависит от времени. Зависимость от времени содержится в матрице плотности  $\rho(t)$ , которая описывает состояние системы таким образом, что среднее от величины  $M(\vec{r})$  или любого другого оператора равно

$$\langle M(\vec{r}, t) \rangle = Sp \rho(t) M(\vec{r}), \quad Sp \rho(t) = 1. \quad (4)$$

Для дальнейшего нужно решить уравнение для матрицы плотности [1]

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)], \quad (5)$$

при начальном условии

$$\rho(-\infty) = \rho^0, \quad [H, \rho^0] = 0. \quad (6)$$

Начальное условие отражает тот факт, что до включения  $\delta h_b$  система стационарна; конечно, должно быть выполнено условие, что  $\delta h_b \rightarrow -\infty$ . Для дальнейших преобразований несущественно, какой вид имеет  $\rho^0$ , однако она предполагается известной. Поскольку обычно система вначале находится в равновесном состоянии, удобно выбрать в качестве  $\rho^0$  выражение, соответствующее каноническому ансамблю с фиксированным  $N$ , или большому каноническому ансамблю, или какому-либо другому стационарному состоянию. Теперь нужно найти линейный (по  $\delta h_b$ ) отклик. Но в первом приближении уравнение (5) легко «решается». А именно:  $\rho(t) = \rho^0 + \delta\rho(t)$ , где

$$\delta\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau e^{-iH(t-\tau)/\hbar} [\delta H_b(\tau), \rho^0] e^{iH(t-\tau)/\hbar}. \quad (7)$$

Теперь с помощью простых преобразований легко убедиться в том, что изменение средней намагниченности  $\delta \langle M(\vec{r}, t) \rangle = Sp \rho(t) M(\vec{r}) - Sp \rho^0 M(\vec{r})$  можно записать в виде [3]

$$\delta \langle M(\vec{r}, t) \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' \left\langle \frac{i}{\hbar} \left[ M(\vec{r}, t), M(\vec{r}', t') \right] \right\rangle_{\text{равн}} \times \delta h_b(\vec{r}', t'), \quad (8)$$

где  $\langle A \rangle_{\text{равн}} = Sp \rho^0 A$  (в дальнейшем индекс «равн» будем опускать). В формуле (8)

$M(\vec{r}, t)$  - гейзенберговские операторы для невозмущенной системы:

$$M(\vec{r}, t) = e^{iHt/\hbar} M(\vec{r}) e^{-iHt/\hbar}. \quad (9)$$

Выражение (8) является основным результатом теории линейного отклика [2]. Из него следует, что функция отклика представляет собой усредненный коммутатор, а не корреляционную функцию, как можно было бы ожидать. Однако это несущественно, так как обе функции оказываются эквивалентными [3]. Обычно определяют функцию отклика следующим образом:

$$\chi''_{MM}(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \left\langle \frac{1}{2\hbar} \left[ M(\vec{r}, t), M(\vec{r}', t') \right] \right\rangle. \quad (10)$$

Поскольку система трансляционно-инвариантна в пространстве и во времени:

$$\chi''(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = \chi''(\vec{r} - \vec{r}', t - t'),$$

Можно ввести преобразование Фурье:

$$\chi''\left(\vec{r}, t; \vec{r}', t'\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{-i\omega(t-t') + i\vec{k}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)} \chi''\left(\vec{k}, \omega\right). \quad (11)$$

Легко показать [2], что  $\chi''\left(\vec{k}, \omega\right)$ -вещественная, нечетная по  $\omega$  функция и что она зависит лишь от  $k = \left|\vec{k}\right|$ , поскольку  $\chi''$ -коммутатор эрмитовых операторов, а равновесное состояние инвариантно относительно обращения времени и отражений и пространственно изотропно. Полезной бывает комплексная функция отклика  $\chi(k, z)$ , определяемая выражением

$$\chi(k, z) = \int \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''(k, \omega)}{\omega - z}. \quad (12)$$

Эта аналитическая функция комплексной переменной  $z$  при условии, что  $\text{Im } z \neq 0$ . На вещественной оси имеет разрез. Из выражения (10) следует, что

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^n \chi''\left(\vec{r}, t; \vec{r}', t'\right) = \left\langle \frac{1}{2\hbar} \left[ \left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)^n M\left(\vec{r}, t\right), M\left(\vec{r}', t'\right) \right] \right\rangle. \quad (13)$$

При совпадающих временах  $t = t'$  это означает, что

$$\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^n \chi''(k, \omega) = \int d\left(\vec{r}-\vec{r}'\right) e^{-i\vec{k}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)} \left\langle \left(\frac{1}{\hbar}\right)^n \left[ \dots \left[ M\left(\vec{r}, t\right), H \right], \dots, H \right], M\left(\vec{r}', t\right) \right\rangle. \quad (14)$$

Таким образом, в правой части равенства (14) содержится последовательность коммутаторов, взятых в один и тот же момент времени, которую в принципе, а в некоторых случаях и фактически можно вычислить точно. Правила сумм дают коэффициенты разложения  $\chi(k, z)$  при больших  $z$ . Из определения (12) видно, что при больших  $z$

$$\chi(k, z) = - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\langle \omega^{(n)}(k) \rangle}{z^n} \chi(k), \quad (15)$$

где

$$\langle \omega^{(n)}(k) \rangle = \frac{\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^n \chi''(k, \omega)}{\int \frac{d\omega}{\pi} \chi''(k, \omega)}. \quad (16)$$

При выводе формулы (15) использовано разложение

$$\frac{1}{1 - \omega/z} = 1 + \frac{\omega}{z} + \left(\frac{\omega}{z}\right)^2 + \dots, \quad (17)$$

которое, разумеется, может быть лишь асимптотическим. Оно справедливо, когда  $|z|$  значительно больше всех частот, имеющих в системе, при этом имеются в виду все частоты  $\omega$ , для которых  $\chi''(k, \omega)$  отлична от нуля. Можно также связать правила сумм с разложением в ряд Тейлора по времени  $t$ . Выражение (15) эквивалентно равенству

$$\chi''(k, t) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} \langle \omega^{(n+1)}(k) \rangle \chi(k), \quad (18)$$

откуда ясно, что высокочастотное разложение эквивалентно разложению для коротких временных интервалов.

## 2. ПРОБЛЕМА МОМЕНТОВ

Рассмотрим момент  $n$ -ого порядка  $M_n$  функции  $\chi(\omega)$

$$M_n = \int_a^b \omega^n \chi(\omega) \rho(\omega) d\omega, \quad (19)$$

где  $\rho(\omega)$ -весовая функция. Заметим, что линейной заменой переменной можно изменить пределы интегрирования. В результате изменится область определения  $\chi(\omega)$  и новые моменты будут линейно выражаться через конечное число исходных. Например, пусть

$$x = 2\pi \frac{(\omega - a)}{(b - a)}. \quad (20)$$

Тогда

$$M_n = \frac{2\pi}{b-a} \int_0^{2\pi} \left(\frac{(b-a)x}{2\pi}\right)^n \chi\left(\frac{(b-a)}{2\pi}x - a\right) \rho\left(\frac{(b-a)}{2\pi}x - a\right) dx. \quad (21)$$

Положим

$$\chi(\omega) = \varphi(x), \quad \rho(\omega) = \omega(x), \quad (22)$$

и

$$\mu_n = \int_0^{2\pi} x^n \varphi(x) \omega(x) dx. \quad (23)$$

Тогда

$$\mu_n = \left(\frac{2\pi}{b-a}\right)^{n+1} \int_a^b (\omega - a)^n \chi(\omega) \rho(\omega) d\omega, \quad (24)$$

и следовательно

$$\mu_n = \left( \frac{2\pi}{b-a} \right)^{n+1} \sum_{k=0}^n C_n^k (-a)^{n-k} M^k. \quad (25)$$

Отсюда видно, что в силу линейности преобразования пределы интегрирования в (19) можно изменить, не прибегая к каким-либо бесконечным процессам. Обычно рассматриваются пределы  $(-\infty, \infty)$ ,  $(0, \infty)$  и  $(-1, 1)$ . Для решения проблемы моментов необходимо установить связь между моментами и коэффициентами разложения функции  $\chi$  по полиномам, ортогональным с весом  $\rho$  в промежутке  $(a, b)$ . Предположим, что интервалом интегрирования является  $(-\infty, \infty)$ , а весовой множитель равен  $\exp(-\omega^2)$ . Можно, конечно, выделить множитель  $\exp(-\omega^2)$  из функции  $\chi(\omega)$  и определить новую неизвестную функцию  $\psi(\omega)$  соотношением

$$\chi(\omega) = \exp(-\omega^2)\psi(\omega). \quad (26)$$

Соответствующими ортогональными полиномами на интервале  $(-\infty, \infty)$  будут  $H_n(\omega)$ . Разложим теперь  $\chi(\omega)$  следующим образом:

$$\chi(\omega) = \sum_n a_n H_n(\omega), \quad a_n = \frac{1}{n! 2^n \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) H_n(\omega) e^{-\omega^2} d\omega. \quad (27)$$

Так как  $H_n(\omega)$ -полиномы, то интеграл, входящий в выражение для  $a_n$ , можно непосредственно выразить через  $M_n$ . Например,  $H_0(\omega) = 1$ , так что

$$a_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(\omega) e^{-\omega^2} d\omega = \frac{M_0}{\sqrt{\pi}}. \quad (28)$$

В общем случае

$$H_n(x) = \sum_k \frac{(-1)^k n!}{k!(n-k)!} (2x)^{n-2k}, \quad (29)$$

где при четном  $n$  последним членом разложения является постоянная, а при нечетном – член с первой степенью  $x$ . Тогда

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_k \frac{(-1)^k}{k!(n-k)!} \frac{M_{n-2k}}{2^{2k}}. \quad (30)$$

При помощи (30) легко найти функцию  $\chi$ . Существует и другой подход к проблеме моментов. Покажем, что эта проблема эквивалентна интегральному уравнению первого рода. Обратимся, например, к разобранному выше случаю.

Умножим обе части уравнения (19) на  $\exp(-x^2)(2x)^n/n!$ , получим

$$\frac{(2x)^n}{n!} e^{-x^2} M_n = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(2x\omega)^n}{n!} e^{-(x^2+\omega^2)} \chi(\omega) d\omega. \quad (31)$$

Суммируя теперь в обеих частях по  $n$ , имеем

$$e^{-x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2x)^n}{n!} M_n = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x-\omega)^2} \chi(\omega) d\omega. \quad (32)$$

Предполагая, что ряд в левой части сходится, мы видим, что проблема моментов сводится к интегральному уравнению первого рода. Конечно, это уравнение можно решить, разложив  $\chi$  по полиномам Эрмита. Однако существуют приближенные методы решения интегральных уравнений которые часто могут оказаться более практичными, чем использование соотношения (30) [4]. Подобным образом можно поступать и в случае других промежутков интегрирования. Интервалу  $(0, \infty)$  соответствуют весовая функция  $e^{-\omega}$  и полиномы Лагерра. Промежутку  $(-1, 1)$  и  $\rho = 1$  соответствуют полиномы Лежандра. Если  $\rho = \sqrt{1 - \omega^2}$ , то соответствующими полиномами являются полиномы Чебышева. Весьма важно заметить, что разложение  $\chi$  по ортогональным полиномам зависит от весовой функции  $\rho$ . Действительно характер сходимости для различных весовых функций может быть совершенно различен. Однако, как указывалось выше, выделяя множитель из  $\chi(\omega)$  и рассматривая оставшийся множитель как неизвестную функцию, можно произвольным образом менять вес. Обозначим вес через  $w(\omega)$ , так что

$$M_n = \int_a^b \omega^n \rho(\omega) w(\omega) \varphi(\omega) d\omega, \quad \chi = w\varphi. \quad (33)$$

Наиболее подходящий (т.е. обеспечивающей наиболее быструю сходимость) будет также весовая функция  $w$ , которая возможно более близка к неизвестной функции  $\chi$ . Очевидно, если она в точности равна  $\chi$ , то в разложении  $\varphi$  по полиномам будет только один член, а именно  $\varphi = 1$ . Весьма выгодно использовать любую доступную информацию, чтобы построить наилучшее возможное приближение к  $\chi$ , и затем взять это приближение в качестве  $w$ .

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В предлагаемой вниманию работе показано, что спонтанные флуктуации относительно равновесного состояния можно строго описать с помощью зависящих от времени корреляционных функций. При этом важным обстоятельством является то, что некоторые сведения о поведении корреляционных функций на коротких отрезках времени легко получить с помощью их частотных моментов, которые в свою очередь удовлетворяют определенным правилам сумм. Показано, что используя частотные моменты корреляционной функции можно восстановить саму корреляционную функцию.

Список литературы

1. Каданов Л. Квантовая статистическая механика / Каданов Л., Бейм Г. – М.: Мир, 1964.
2. Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц / Мартин П., Швингер Ю. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
3. Rice S.A. The statistical mechanics of simple liquids / Rice S.A., Gray P. – N. Y., Interscience, 1965.
4. Верлань А.Ф. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы / Верлань А.Ф., Сизинев В.С. – К.: Наукова Думка, 1986.

**Рошчупкін С.М. Відновлення кореляційної функції по її моментам / Рошчупкін С.М. // Вчені записки Таврійського національного університету ім. В.І. Вернадського. Серія: Фізико-математичні науки. – 2010. – Т. 23(62), №3. – С. 117-124.**

Розглянута загальна теорія лінійного відклику. Розглянута еволюція кореляційної функції при малому часі. Показане, що кореляційна функція може бути відновлена по її частотним моментам.

**Ключові слова:** кореляційна функція, теорія лінійного відклику, частотні моменти.

**Roshchupkin S.N. The constructing correlation function from its frequency moments / Roshchupkin S.N. // Scientific Notes of Taurida National V.I. Vernadsky University. – Series: Physics and Mathematics Sciences. – 2010 – Vol. 23(62), No.3. – P. 117-124.**

General theory of linear response function was described. We consider evolution of correlation function at short time. It is shown that correlation function may be constructing from its frequency moments.

**Keywords:** correlation function, the theory of linear response, frequency moments.

*Поступила в редакцію 11.10.2010 г.*