第31卷 第11期 物理学报 Vol. 31, No. 11
1982年11月 ACTA PHYSICA SINICA Nov., 1982

闭路格林函数和非线性响应理论(I)

王维镛 林中衡 苏肇冰 郝柏林
(复旦大学) (中国科学院理论物理研究所)

1981年12月5日收到

提要

本文是关于非线性响应理论的文章的前半部分[1)]. 由闭路格林函数的生成泛函的展开式及闭路格林函数的变换关系导出非线性响应的一般表示式. 从代数关系、KMS 条件、时间反演不变性和谱表示等四个方面,提出寻求多点函数间关系的一般考虑.

一、引 言

以输运系数对称原理[1]和涨落耗散定理[2]为两大支柱的线性响应理论，是非平衡统计中最成功的篇章之一. 二十多年来它的发展主要沿着两个方向. 一是把它从平衡态附近推广到有细致平衡条件成立的非平衡定常态附近(参看文献[4]及其引文). 二是在平衡态附近发展非线性响应理论.

虽然早在文献[3]中就写出过非线性响应的表示式，之后不断有人发展一些形式理论[5—9],非线性响应在很长一段时期内还没有形成为很活跃的研究领域. 主要原因有三:

第一、对线性响应理论的批评,其中最尖锐者如文献[10],在更大程度上也是针对着非线性响应理论. 而非线性响应理论本身还有一些原则困难. 线性响应反映物理系统的内秉性质,不依赖于边界条件. 计入外场的非线性项时出现热效应,为使系统处于定常态就须加边界条件. 因此一般说来非线性响应不仅决定于物理系统本身的性质，还和边界条件有关,所以不能期望建立非常普遍的理论.

第二、除了非线性光学中的一些情形,实验上对非线性响应理论的要求不很迫切. 四点关联函数的详细研究近几年才受到较大重视[11],多点函数的测量还基本上未提上日程.

第三、非线性响应理论的表述很繁琐，缺少一套系统而又简明有效的运算规则和记号. 如将线性的涨落耗散定理向非线性情形推广就是靠相当琐碎的办法一点一点前进的(参看文献[5, 7, 8]等),很难看出各种关系的普遍形式,不易判断关系是否写全了.

然而对上述三个问题都应有所分析. 首先可以相当普遍地设想一些物理系统，实际上迴避掉第一点提到的原则困难. 如浸在液氦中的二维系统靠液氦的良好热传导性而避免升温,可望成为测量非线性响应的良好对象. 换言之,可以研究某些类型的边界条件下的非线性响应.

其次微微秒技术的发展和多道信号时间序列的分析会使得多点响应函数的测量变得

1) 本部分的若干结果将用英文发表于 Physica A.

现实可行，只要物理系统的非线性比较显著，对非线性响应的测量应能提供更多的知识．对于多点函数间的关系，应有较深刻的理论分析．

最后，闭路格林函数(以下简称 CTPGF)的技术的进展为发展非线性响应理论提供了恰当的工具．最先由 Schwinger[12] 引入的 CTPGF 是统一处理平衡和非平衡统计物理问题的有力工具(参看文献[13]及其引文)．特别是三套 CTPGF 的变换关系[14] 自然地给出了多点推迟、超前和关联函数的统一定义，自动保证因果性要求在推导中步步成立．它与生成泛函技术结合，各种物理量及涨落平均值的微扰展开就直接给出非线性响应的一般公式．文献[13—15]中详细讨论过的 CTPGF 的各种性质，加上恰当的物理条件就能得出想要的各种非线性的关系式．给出非线性响应问题的形式理论框架，至少在目前已是现实的．

当然对线性响应理论的若干原则批评，如对在 $t=-\infty$ 时切断热库、引入外场这种非物理操作的责难，在非线性情形下由于发热问题而更趋严重．考虑到线性响应理论的成功，正确的作法自然不是回避非线性问题，而是尽可能得到可与实验比较的非线性关系，暴露其中的矛盾．

二、非线性响应的表达式

非线性响应一般表示式的推导是三套 CTPGF 变换关系的简单应用．本文要经常采用与文献 [15, 16] 一致的简化记法，只在有必要明确时间依赖关系时才写明自变量 t.

设系统在 $t_0=-\infty$ 时处于由哈密顿量 $\mathscr{H}_0$ 和密度矩阵

$$\rho_0=\frac{1}{z}e^{-\beta\mathscr{H}_0}\quad (z=\mathrm{Tr}\,e^{-\beta\mathscr{H}_0}) \tag{1}$$

描述的平衡态．此后绝热地引入与时间有关的实外场 $J(t)$，使系统偏离平衡．外场 J 与系统的动力学量 Q 耦合，总哈密顿量为

$$\mathscr{H}(t)=\mathscr{H}_0-JQ, \tag{2}$$

Q 为薛定谔表象中的算子．以 $Q^{\mathrm{H}}(t)$ 和 $Q^{\mathrm{I}}(t)$ 记海森堡表象及相互作用表象中的算子．对于海森堡表象中的算子，记

$$\mathrm{Tr}(\cdots\rho_0)=\langle\cdots\rangle_0. \tag{3}$$

我们暂不讨论非线性耦合，也先不讨论热扰动问题．

经典统计的基本精神是统计平均只对初始分布进行，而系统的演化遵从与统计无关的动力学方程．如果对系统的一套动力学量 $\{Q_i;\ i=1,2,\cdots,n\}$ 求得各种平均值和关联函数

$$\langle Q_i(t)\rangle,\quad \langle Q_i(t_1)Q_j(t_2)\rangle,\quad \langle Q_i(t_1)Q_j(t_2)Q_k(t_3)\rangle,\quad \cdots\cdots, \tag{4}$$

则对于物理系统的非平衡性质就有了一套愈益细致的统计描述．

量子情形下，按狄拉克的表述[17]，当算子 1) 是厄米的，2) 有完备的本征态，3) 满足若干物理附加条件，才对应可测量的物理量．我们可以不失普遍性地认为所有 Q_i 是厄米的．对完备性问题不便作一般分析．但取算子乘积组合为厄米的，这仍可作为一种指导原则．

在 $\hbar=0$ 极限下，算子的任意乘积，包括部分或完全对称化的乘积都给出相同的平

均值．但计入高阶量子修正后不同排序的乘积的平均值不同．据我们理解，这涉及目前并未完全解决的量子经典对应的排序问题，须有补充的物理考虑才能作出判断．我们提出基本假定：在量子情形，对应(4)式中 n 个算子乘积平均值的量，就是第三套 CTPGF 中下标全部等于 2 的那个分量．两点情形下 G_{22} 就是完全对称化的关联函数，G_{222}, G_{2222}, $\cdots$ 等只是部分对称化的．于是，我们认为 $G_2 = \langle Q\rangle$, G_{22}, G_{222}, $\cdots$ 等作为外场 J 的泛函原则上都是可观测量．为了给出非线性响应的一般表示式，先把外场 J 扩充到正负时间轴上，最后再令 $J_+ = J_-$，把与外场 J 有关的各阶 CTPGF：

$$
\begin{aligned}
G_p(1) &= \langle Q^{\mathrm{H}}(t)\rangle_0 = \langle \mathrm{T}_p(Q^{\mathrm{I}}(t)S_p)\rangle_0 \\
G_p(12) &= -i\langle \mathrm{T}_p(Q^{\mathrm{H}}(t_1)Q^{\mathrm{H}}(t_2))\rangle_0 = -i\langle \mathrm{T}_p(Q^{\mathrm{I}}(t_1)Q^{\mathrm{I}}(t_2)S_p)\rangle_0 \\
G_p(123) &= (-i)^2\langle \mathrm{T}_p(Q^{\mathrm{H}}(t_1)Q^{\mathrm{H}}(t_2)Q^{\mathrm{H}}(t_3))\rangle_0 \\
&= (-i)^2\langle \mathrm{T}_p(Q^{\mathrm{I}}(t_1)Q^{\mathrm{I}}(t_2)Q^{\mathrm{I}}(t_3)S_p)\rangle_0\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{5}
$$

展开成幂级数．(5)式中的时间均取在闭路 p 上，T_p 和 S_p 已在文献[13—15]中定义过．这里具体为

$$S_p = \mathrm{T}_p \exp\left(-i\int_p JQ^{\mathrm{I}}dx\right).$$

因此为了得到(5)式对 J 的展开式，形式上可直接利用“自由场”的生成泛函．

$$W[J] = i\ln Z[J], \quad Z[J] = \langle S_p\rangle. \tag{6}$$

和它们作为解析泛函的展开，

$$W[J] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\Delta_p(1,2,\cdots,n)J(1)J(2)\cdots J(n). \tag{7}$$

此处相互作用表象中的“自由场”算子 Q^{I} 只是与外场 J 无关，原则上还包含了系统内在的相互作用．Δ_p 为相连格林函数

$$\Delta_p(1,2,\cdots,n) = \left.\frac{\delta^n W[J]}{\delta J(1)\delta J(2)\cdots\delta J(n)}\right|_{J_+=J_-=0}. \tag{8}$$

由此立即得

$$
\begin{aligned}
G_p(1) &= \Delta_p(1) + \Delta_p(12)J(2) + \frac{1}{2!}\Delta_p(123)J(2)J(3) + \cdots, \\
G_p(12) &= \frac{\delta G_p(1)}{\delta J(2)} = \Delta_p(12) + \Delta_p(123)J(3) \\
&\quad + \frac{1}{2!}\Delta_p(1234)J(3)J(4) + \cdots, \\
G_p(123) &= \frac{\delta G_p(12)}{\delta J(3)} = \Delta_p(123) + \Delta_p(1234)J(4) + \cdots, \\
&\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{9}
$$

通常取 $\Delta_p(1) = 0$．由(9)式变换到第三套 CTPGF，只须插入泡里矩阵 σ_1[14]：

$$
\begin{aligned}
\tilde{G}(1) &= \tilde{\Delta}(12)(\sigma_1 J)(2) + \frac{1}{2!}\tilde{\Delta}(123)(\sigma_1 J)(2)(\sigma_1 J)(3) + \cdots, \\
\tilde{G}(12) &= \tilde{\Delta}(12) + \tilde{\Delta}(123)(\sigma_1 J)(3) + \frac{1}{2!}\tilde{\Delta}(1234)(\sigma_1 J)(3)(\sigma_1 J)(4) + \cdots, \\
\tilde{G}(123) &= \tilde{\Delta}(123) + \tilde{\Delta}(1234)(\sigma_1 J)(4) + \cdots, \\
&\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{10}
$$

由前面的讨论，只须写出(10)式中各式的最后一个即下标全为 2 的分量，并令

$$J_+ = J_- = J,$$

就得到非线性响应的一般表示式

$$\begin{aligned}
G_2(1) &= \langle Q^{\mathrm{H}}(t)\rangle_0 = \Delta_{21}(12)J(2) + \frac{1}{2!}\Delta_{211}(123)J(2)J(3) + \cdots,\\
G_{22}(12) &= \Delta_{22}(12) + \Delta_{221}(123)J(3)\\
&\quad + \frac{1}{2!}\Delta_{2211}(1234)J(3)J(4) + \cdots,\\
G_{222}(123) &= \Delta_{222}(123) + \Delta_{2221}(1234)J(4) + \cdots,\\
&\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{11}$$

这些式子中 $J(t)$ 已取在普通时间轴上．以上推导过程和结果自动满足因果性的要求．实际上从另一角度看，由于 $\widetilde{G}$ 分量之间有关系

$$\begin{gathered}
G_{i_1 i_2\cdots i_n}(1, 2, \cdots, n)G_{j_1 j_2\cdots j_n}(1, 2, \cdots, n) = 0\\
(i_{m_1} = i_{m_2} = \cdots = i_{m_r} = 2,\ \text{其余的 } i \text{ 为 } 1;\\
j_{m_1} = j_{m_2} = \cdots = j_{m_r} = 1,\ \text{其余的 } j \text{ 任意})
\end{gathered} \tag{12}$$

成立，推导过程中不会出现违反因果性要求的项．从文献[15]中的(2.40)式出发易证不相连的和相连的 CTPGF 都满足(12)式．

如何由(10)式写出高阶项和高阶关联函数的展开式是显而易见的．(11)式的前两个式子包含了前人[5]比较烦琐的推导的结果．使用 CTPGF 后，一般项的结构很清楚，全部可观测量都在(11)式中出现．

按文献[5—9]中的习惯，$\Delta_{21}, \Delta_{211}, \Delta_{2111}, \cdots$ 等应称为力学量平均值对外场的各阶响应函数，与 LSZ 场论[16]中的 r-函数相当，它们对时间变量的傅里叶变换是各阶导纳函数．$G_{22}, G_{222}, \cdots$ 和 $\Delta_{22}, \Delta_{222}, \cdots$ 等分别称为各阶“非平衡涨落”和“平衡涨落”函数．而 $\Delta_{221}, \Delta_{2211}; \Delta_{2221}, \cdots$ 等则是各阶涨落对外场的响应函数．

(11)式中的另一些分量，如非平衡的推迟函数

$$G_{21}(12) = \Delta_{21}(12) + \Delta_{211}(123)J(3) + \frac{1}{2!}\Delta_{2111}(1234)J(3)J(4) + \cdots \tag{13}$$

正可叫做非线性的响应函数．它就是线性响应的定义

$$\Delta_{21}(12) = \left.\frac{\delta\langle Q^{\mathrm{H}}(1)\rangle_0}{\delta J(2)}\right|_{J=0} \tag{14}$$

推广到不令 J 为零

$$G_{21}(12) = \frac{\delta\langle Q^{\mathrm{H}}(1)\rangle_0}{\delta J(2)}. \tag{15}$$

此式中变分导数的意义为

$$\delta\langle Q^{\mathrm{H}}(1)\rangle_0 = \int G_{21}(12)\delta J(2)dz. \tag{16}$$

事实上对 J 积分(13)式就得到(11)式第一式，因此 G_{21} 中并不包含更多的信息．从(10)式变换到(11)式时由于令 $J_+ = J_-$ 而消失的项也没有包含更多的信息．一般有

$$\Delta_{\underbrace{22\cdots2}_{k\text{个}}\underbrace{11\cdots1}_{l\text{个}}}(1, 2, \cdots, n) = \left.\frac{\delta^l G_{22\cdots2}(1, 2, \cdots, k)}{\delta J^l}\right|_{J=0}. \tag{17}$$

原则上可直接测量的独立量是列在表 1 中的各项以及可以顺次写出的各高阶项.

表　1

	平 均 值	两点关联	三点关联	四点关联
无外场时的值	可取 $\Delta_2=0$	Δ_{22}	Δ_{222}	Δ_{2222}
对外场的线性响应	Δ_{21}	Δ_{221}	Δ_{2221}	Δ_{22221}
对外场的二次响应	Δ_{211}	Δ_{2211}	Δ_{22211}	Δ_{222211}
对外场的三次响应	Δ_{2111}	Δ_{22111}	Δ_{222111}	$\Delta_{2222111}$

表 1 中从左下往右上的每一斜行中，是同一个 $\tilde{G}$ 函数的各个分量，出现在文献 [5，7，8] 中的一些关系看起来就很自然了. 其中，Δ_{21} 和 Δ_{22} 之间有线性的涨落耗散定理.

三、关于多点函数关系的一般考虑

本文和文献[18]将基于下述四个方面的考虑推导多点函数关系，包括将涨落耗散定理推广到非线性情形.

1. *准确的代数关系*　对易子、反对易子都满足一些代数关系. θ-函数有归一公式、求和公式及“正交”关系[14]. 特别是 CTPGF 的基本性质

$$G_{11\cdots 11}(1,2,\cdots,n)=0 \tag{18}$$

有许多等价形式. 这些都是准确的代数关系.

按文献[15]的 (B. 4-5) 式，注意到

$$\xi_\alpha=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha^2)\quad \alpha=\pm,$$

$$\eta_\alpha=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha)\quad \alpha=\pm,$$

有展开定理

$$G_{i_1i_2\cdots i_n}(1,2,\cdots,n)=\frac{1}{2}\sum_{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n=\pm}(\alpha_1)^{i_1}(\alpha_2)^{i_2}\cdots(\alpha_n)^{i_n}G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}(1,2,\cdots,n), \tag{19}$$

$$G_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}(1,2,\cdots,n)=2^{1-n}\sum_{i_1,i_2,\cdots,i_n=1,2}(\alpha_1)^{i_1}(\alpha_2)^{i_2}\cdots(\alpha_n)^{i_n}G_{i_1i_2\cdots i_n}(1,2,\cdots,n). \tag{20}$$

用矩阵表示就是

$$\tilde{G}_n=M_n\hat{G}_n,\quad \hat{G}_n=M_n^{-1}\tilde{G}_n, \tag{21}$$

M_n 为 $2^n\times 2^n$ 矩阵，这里不明显写出.

文献[7]曾用相当烦琐的方法和记号推出

$$\frac{1}{2}(G_{211}+G_{121}+G_{221})=G_{+++}-G_{++-} \tag{22}$$

和

$$\frac{1}{2}(G_{2111}+G_{1211}+G_{2211})=G_{++++}+G_{++--}-G_{+++-}-G_{++-+} \tag{23}$$

两式，并进而用这两式推导多点关系，而未意识到这不过是(18)式的直接后果. 其实由

(19),(20)式或(21)式作简单的加减运算立即可得(22),(23)式，此外还立即得到另一种类型的式子

$$\frac{1}{2}(G_{112}+G_{122}+G_{212}+G_{222})=G_{+++}+G_{++-}, \tag{24}$$

$$\frac{1}{2}(G_{2222}+G_{1222}+G_{2122}+G_{1122})=G_{++++}+G_{++--}+G_{+++-}+G_{++-+}. \tag{25}$$

(22),(23)式是一种“推迟”组合而(24),(25)式是相应的“关联”型组合.

前节(12)式也是准确的代数关系.

2. KMS 条件[3,19] 响应理论中总是假定 $t_0=-\infty$ 时系统处于由密度矩阵(1)式描述的热平衡态. 引入外场后，相互作用表象中的算子 $Q^{\rm I}(t)$ 的平均值满足(取 $\hbar=1$)

$$\langle Q_j^{\rm I}(t)Q_i^{\rm I}(t_1)\rangle_0=\langle Q_i^{\rm I}(t_1)Q_j^{\rm I}(t+i\beta)\rangle_0=e^{i\beta\frac{\partial}{\partial t}}\langle Q_i^{\rm I}(t_1)Q_j^{\rm I}(t)\rangle_0. \tag{26}$$

由于平衡态的时间平移不变性，上式可写为

$$\langle Q_j^{\rm I}(t)Q_i^{\rm I}(0)\rangle_0=e^{i\beta\frac{\partial}{\partial t}}\langle Q_i^{\rm I}(0)Q_j^{\rm I}(t)\rangle_0. \tag{27}$$

作傅氏变换

$$Q_j^{\rm I}(t)=\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega t}Q_j^{\rm I}(\omega)$$

而有

$$\langle Q_j^{\rm I}(\omega)Q_i^{\rm I}(0)\rangle_0=e^{\beta\omega}\langle Q_i^{\rm I}(0)Q_j^{\rm I}(\omega)\rangle_0. \tag{28}$$

对于有无穷多自由度的系统，即使不能很好地定义密度矩阵，只要态上的算子平均值满足(28)式，就可保证系统处于平衡态. 因此(28)式比(1)式应用范围更广. 通常称(28)式为 KMS 条件(参看文献[20]).

于是有

$$\langle\{Q_j^{\rm I}(\omega),Q_i^{\rm I}\}\rangle_0={\rm cth}\left(\frac{\beta\omega}{2}\right)\langle[Q_j^{\rm I}(\omega),Q_i^{\rm I}]\rangle_0. \tag{29}$$

准到数值因子，左端平均值是 $G_c(\omega)$，而右端平均值是 $G_R(\omega)-G_A(\omega)$，这就是两点情形的涨落耗散定理.

我们关心的是多点函数所满足的 KMS 条件和涨落耗散定理. 首先，对任意满足时间平移不变的 n 点函数

$$F(t_1,t_2,\cdots,t_n)=F(t_1-t_n,t_2-t_n,\cdots,0), \tag{30}$$

两端对时间求导得

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}F=0,$$

作傅氏变换后可象征性地写为

$$\sum_{i=1}^{n}\omega_i=0. \tag{31}$$

再考虑 n 个算子的乘积平均值，用推导(26)式的办法把最左面的算子移到右面去，顺次得

$$\begin{aligned}\langle Q_1(t_1)Q_2(t_2)\cdots Q_n(t_n)\rangle_0&=e^{i\beta\frac{\partial}{\partial t_1}}\langle Q_2(t_2)Q_3(t_3)\cdots Q_n(t_n)Q_1(t_1)\rangle_0\\&=e^{i\beta\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_2}\right)}\langle Q_3(t_3)Q_4(t_4)\cdots Q_n(t_n)Q_1(t_1)Q_2(t_2)\rangle_0=\cdots\cdots\end{aligned}$$

$$= e^{i\beta\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\partial}{\partial t_i}}\langle Q_n(t_n)Q_1(t_1)\cdots Q_{n-1}(t_{n-1})\rangle_0$$

$$= e^{-i\beta\frac{\partial}{\partial t_n}}\langle Q_n(t_n)Q_1(t_1)\cdots Q_{n-1}(t_{n-1})\rangle_0.$$

运算可在任意一步停下来，同时引入两个函数

$$F^{(-)}(t_1,\cdots,t_i;t_{i+1},\cdots,t_n) = \langle Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i)Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n)\rangle_0,$$
$$F^{(+)}(t_1,\cdots,t_i;t_{i+1},\cdots,t_n) = \langle Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n)Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i)\rangle_0, \quad (32)$$

写成

$$F^{(-)}(t_1,\cdots,t_i;t_{i+1},\cdots,t_n) = e^{i\beta\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\cdots+\frac{\partial}{\partial t_i}\right)}F^{(+)}(t_1,\cdots,t_i;t_{i+1},\cdots,t_n) \quad (33)$$

或完成傅氏变换后有广义的 KMS 条件

$$\bar{F}^{(-)}(\omega_1,\cdots,\omega_n) = e^{\beta(\omega_1+\cdots+\omega_i)}\bar{F}^{(+)}(\omega_1,\cdots,\omega_n). \quad (34)$$

可以再引入两个函数

$$F^{(c)} = F^{(-)} + F^{(+)} = \langle\{Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i),\ Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n)\}\rangle_0,$$
$$F^{(a)} = F^{(-)} - F^{(+)} = \langle[Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i),\ Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n)]\rangle_0, \quad (35)$$

写出与(31)式类似的关系

$$\bar{F}^{(c)}(\omega_1,\cdots,\omega_i;\omega_{i+1},\cdots,\omega_n) = \mathrm{cth}\,\frac{\beta(\omega_1+\cdots+\omega_i)}{2} \times \bar{F}^{(a)}(\omega_1,\cdots,\omega_i;\omega_{i+1},\cdots,\omega_n). \quad (36)$$

实际上对更一般的函数

$$F^{(-)} = \langle P(Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i))P'(Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n))\rangle_0,$$
$$F^{(+)} = \langle P'(Q_{i+1}(t_{i+1})\cdots Q_n(t_n))P(Q_1(t_1)\cdots Q_i(t_i))\rangle_0, \quad (37)$$

(36)式也成立．其中 P 和 P' 可以是编时乘积 T，反编时乘积 $\tilde{T}$，对称化乘积 Sym，正规乘积 N 或普通乘积（即 $P = P' = 1$）．对 $n \geq 3$ 的函数，KMS 条件所联系的只是同一个分量的某种对称和反对称部分．为求多点情形的涨落耗散定理还须对系统附加其它物理条件，如要求它满足时间反演不变性．

3. 时间反演不变性　时间反演的后果往往包含在较高的对称群中．只对于低对称系统如没有对称中心的多原子分子或晶体，时间反演对称的考虑才导致新的物理后果．时间反演不变性对于宏观系统则是一个很强的物理要求，它导致细致平衡条件的成立和“位势”的存在（参看文献[4]及其所引文献）．

宏观系统的初始状态可能依赖于一些外界参量 λ_i，而其动力学即哈密顿量依赖于外场 J_i．在时间反演下，经典量 λ_i，J_i 的变化为

$$\lambda_i \to \varepsilon_i\lambda_i,\quad J_j \to \varepsilon_j J_j\ (\varepsilon_i,\ \varepsilon_j = \pm 1). \quad (38)$$

量子力学中时间反演由反么正算子 $\hat{R}$ 描述，薛定谔表象中的算子与 t 无关，在时间反演下只出现符号差别

2）初始状态波函数满足

$$\psi_{t_0}(\lambda) \to \hat{R}\psi_{t_0}(\lambda) = \psi_{t_0}(\varepsilon\lambda) \tag{41}$$

或将此条件加在初始密度矩阵上

$$\rho_{t_0}(\lambda) \to \hat{R}\rho_{t_0}(\lambda)\hat{R}^{+} = \rho_{t_0}(\varepsilon\lambda), \tag{42}$$

$\hat{R}^{+}$ 是 $\hat{R}$ 的反厄米共轭算符．我们只考虑满足（40)—(42）式的系统．对不满足（40)—(42）式的系统目前所知甚少．基于以上讨论易证[4]，对海森堡表象中的算子乘积平均值有

$$\begin{aligned} F_{i_1 i_2 \cdots i_n}(t_1, t_2, \cdots, t_n; J, \lambda) &= \varepsilon_{i_1}\varepsilon_{i_2}\cdots\varepsilon_{i_n} F_{i_n \cdots i_2 i_1}(-t_n, \cdots, -t_2, -t_1; \varepsilon J, \varepsilon\lambda) \\ &= \varepsilon_{i_1}\varepsilon_{i_2}\cdots\varepsilon_{i_n} F^{*}_{i_1 i_2 \cdots i_n}(-t_1, -t_2, \cdots, -t_n; \varepsilon J, \varepsilon\lambda). \end{aligned} \tag{43}$$

CTPGF 的各分量都是算子平均值的线性组合，对于有时间反演不变性的系统，可由(43)式写出它们的时间反演性质，例如

$$\langle 3T(12)\rangle = \varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3\langle T(-1-2)-3\rangle, \quad \langle T(12)3\rangle = \varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3\langle -3T(-1-2)\rangle. \tag{44}$$

此处及以后不再在有关的 CTPGF 中标明对 $\varepsilon\lambda$, εJ 的依赖关系．将三点函数 $G_{++-}(123)$ 分成两部分

$$G_{++-}(123) = G^{S}_{++-}(123) + G^{A}_{++-}(123), \tag{45}$$

其中

$$\begin{aligned} G^{S}_{++-}(123) &= G^{S}_{++-}(-1-2-3) \\ &= -\frac{1}{2}[\langle 3T(12)\rangle + \varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3\langle T(12)3\rangle], \\ G^{A}_{++-}(123) &= -G^{A}_{++-}(-1-2-3) \\ &= -\frac{1}{2}[\langle 3T(12)\rangle - \varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3\langle T(12)3\rangle]. \end{aligned} \tag{46}$$

这是不同于(35)式的又一种划分“对称”和“反对称”部分的方式．再引用 KMS 条件得到

$$G^{S}_{++-}(\omega_1\omega_2\omega_3) = \frac{1-\varepsilon_3 e^{\beta\omega_3}}{1+\varepsilon_3 e^{\beta\omega_3}} G^{A}_{++-}(\omega_1\omega_2\omega_3) \tag{47}$$

等关系．这里及以后记 $\varepsilon_n = \varepsilon_1\varepsilon_2\cdots\varepsilon_n$.

4. **傅里叶变换和谱表示** 傅氏变换不给出新的关系，但便于应用物理条件．CTPGF 中常含有 θ-函数和 n 点函数 F 的乘积，将其对时间变量作傅氏变换就得到相应于CTPGF 分量的某一项的谱表示．

一般地，具有时间平移不变性的 n 点函数的傅氏变换可记作

$$F(\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n) = 2\pi\delta(\omega_1+\omega_2+\cdots+\omega_n)\bar{F}_1(\omega_1, \cdots, t_k=0, \cdots, \omega_n). \tag{48}$$

这里明确标出有一个 $t_k=0$ 的变量未作变换，k 取 1 到 n 的任何一个数，视计算方便而定．这意味着 n 点函数的傅氏积分可写为

$$F(t_1, t_2, \cdots, t_n) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int d\omega_1\cdots d\omega_n e^{-i(\omega_1 t_1+\omega_2 t_2+\cdots+\omega_n t_n)}\bar{F}(\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n) \tag{49}$$

（尚未明显示出时间平移不变性）或者

先以 $F_R(t_1, t_2, t_3, t_4) = (-i)^3\theta(4132)F(t_1, t_2, t_3, t_4)$ 为例，以后不难从中看出推广到一般情形的规则. 将 θ-函数写成乘积

$$\theta(4132) = \theta(t_4 - t_1)\theta(t_1 - t_3)\theta(t_3 - t_2),$$

利用 $\theta(t)$ 的表示

$$\theta(t) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\Omega}{\Omega + i\varepsilon}e^{-i\Omega t}, \tag{51}$$

并且注意到 $\theta(4132)$ 中最后一个时刻为 t_2，而采用 $\bar{F}_1(\omega_1, t_2 = 0, \omega_3, \omega_4)$ 为 F 的傅氏分量

$$\bar{F}_{1R}(\omega_1, t_2, \omega_3, \omega_4) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_3}{(\Omega_1 + i\varepsilon)(\Omega_2 + i\varepsilon)(\Omega_3 + i\varepsilon)} \times \bar{F}_1(\omega_1 + \Omega_1 - \Omega_2, t_2 = 0, \omega_3 + \Omega_2 - \Omega_3, \omega_4 - \Omega_1),$$

顺序作变量代换后可将对 $\omega_1, \omega_3, \omega_4$ 的依赖性全部转入频率分母中

$$\bar{F}_{1R}(\omega_1, t_2 = 0, \omega_3, \omega_4) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_3 \bar{F}_1(\Omega_2 - \Omega_1, t_2 = 0, \Omega_3 - \Omega_2, \Omega_1)}{(\omega_4 - \Omega_1 + i\varepsilon)(\omega_4 + \omega_1 - \Omega_2 + i\varepsilon)(\omega_4 + \omega_1 + \omega_3 - \Omega_3 + i\varepsilon)}. \tag{52}$$

容易从(52)式“读”出一般情形下写谱表示的规则. 例如对于六点函数

$$F_R(t_1, t_2, \cdots, t_6) = (-i)^5\theta(261345)F(t_1, t_2, \cdots, t_6),$$

按 θ-函数中各时刻出现的顺序，在谱函数 $\bar{F}_1$ 的

第 2 分量处写 Ω_1　　对应分母　$\omega_2 - \Omega_1$;

第 6 分量处写 $\Omega_2 - \Omega_1$　对应分母　$\omega_2 + \omega_6 - \Omega_2$;

第 1 分量处写 $\Omega_3 - \Omega_2$　对应分母　$\omega_2 + \omega_6 + \omega_1 - \Omega_3$;

第 3 分量处写 $\Omega_4 - \Omega_3$　对应分母　$\omega_2 + \omega_6 + \omega_1 + \omega_3 - \Omega_4$;

第 4 分量处写 $\Omega_5 - \Omega_4$　对应分母　$\omega_2 + \omega_6 + \omega_1 + \omega_3 + \omega_4 - \Omega_5$;

第 5 分量处写 $t_5 = 0$　　　ω_5 不出现在 $\bar{F}_{1R}$ 中.

当然可以采用 $\bar{F}_1$ 的别的形式即令另一个 t_k 为零，同时要稍稍改变一下以上规则.

我们将在文献[18]中利用上述考虑推导 $\tilde{G}$ 分量间的多点函数关系，包括涨落耗散定理的可能的推广.

参　考　文　献

[1] L. Onsager, *Phys. Rev.*, **37**(1931), 405; 38(1931), 2265.

[2] H. B. Callen, T. A. Welton, *Phys. Rev.*, **83**(1951), 34.

[3] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **12**(1957), 570.

[4] 周光召、苏肇冰，物理学报，**30**(1981), 164; 401.

[5] W. Bernard, H. B. Callen, *Rev. Mod. Phys.*, **31**(1959), 1017.

[6] R. L. Peterson, *Rev Mod. Phys.*, **39**(1967), 69.

[7] Г. Ф. Ефремов, *ЖЭТФ*, **55**(1968), 2322.

[8] Р. Л. Стратонович, *ЖЭТФ*, **58**(1970), 1612.

[9] Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев, *ЖЭТФ*, **72**(1977), 238.

[10] N. G. van Kampen, *Physica Norvegica*, **5**(1971), 279.

[11] J. W. Halley *ed.*, Correlation Functions and Quasiparticle Interactions in Condensed Matter, Plenum, (1978).

[12] J. Schwinger, *J. Math. Phys.*, **2**(1961), 407.

[13] 周光召、苏肇冰，闭路格林函数和它在非平衡统计物理中的应用，《统计物理进展》，第五章，科学出版社.

[14] 周光召、于渌、郝柏林，物理学报，**29**(1980)，878.
[15] Guang-zhao Zhou, Zhao-bin Su, Bai-lin Hao, Lu Yu, *Phys. Rev. B*, **22**(1980), 3385.
[16] 郝柏林，统计微扰论的生成泛函，《统计物理进展》，第一章，科学出版社，1981.
[17] P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, 4th ed., §§ 10, 77, Clarendon, (1958).
[18] 王维镛、林中衡、苏肇冰、郝柏林，本刊本期.
[19] P. C. Martin, J. Schwinger, *Phys. Rev.*, **115**(1959), 1342.
[20] G. C. Emch, Algebraic Methods in Statistical Mechanics and Quantum Field Theory, (1972).

THE CLOSED TIME PATH GREEN'S FUNCTIONS AND THE THEORY OF NONLINEAR RESPONSE (I)

WANG WAI-YONG LIN ZHONG-HENG
(Fudan University)

SU ZHAO-BIN HAO BAI-LIN
(Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

By using the generating functional and the transformations for different forms of the closed time path Green's functions, the general equations on nonlinear response are derived. On the basis of the algebraic identities, KMS condition, time reversal invariance and spectral representation, the general considerations for seeking the relations among many-point functions are suggested.