Правила сумм в статистич. физике. Основой вывода и применения П. с. в этом случае являются спектральные представления двухвременны́х корреляц. ф-ций (см. *Грина функция* в статистич. физике)

$$\langle[A(t),B(t')]\rangle\equiv\langle A(t)B(t')-\eta B(t')A(t)\rangle=$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}I_{BA}(\omega)[\exp(\beta\omega\hbar)-\eta]\exp[-i\omega(t-t')]d\omega. \quad (7)$$

Здесь $A(t)$, $B(t')$ — операторы в *Гейзенберга представлении*, $\eta=\pm1$, $\beta=1/kT$, $\langle\ldots\rangle$ — обозначает усреднение по *большому каноническому распределению Гиббса*, $\langle A\rangle=\mathrm{Sp}(\rho A)/\mathrm{Sp}\rho$, $\rho=\exp[-\beta(H-\mu N)]$ — статистич. оператор (Sp — символ суммы диагональных матричных элементов оператора), H — оператор Гамильтона, μ — хим. потенциал, N — оператор числа частиц. *Спектральная плотность*

$$I_{BA}(\omega)=\sum_{l,m}\langle m|B|l\rangle\langle l|A|m\rangle\delta(\hbar\omega-\mathscr{E}_m-\mathscr{E}_l) \quad (8)$$

обобщает соотношение (2) при получении П. с. для произвольной пары операторов динамич. переменных [$\mathscr{E}_m$, $\mathscr{E}_l$ — собств. значения гамильтониана H, соответствующие векторам состояния $|m\rangle$ и $|l\rangle$, $\delta(\hbar\omega-\mathscr{E}_m-\mathscr{E}_l)$ — дельта-функция].

Простейшие П. с. получаются из (7) при $t'=t$:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}I_{BA}(\omega)\{\exp(\beta\omega\hbar)-\eta\}d\omega=\langle[A,B]\rangle.$$

Дифференцируя n раз по t (или t') и полагая $t=t'$, можно получить бесконечный набор П. с.

$$\frac{(-i\hbar)^n}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega^n I_{BA}(\omega)\{\exp(\beta\omega\hbar)-\eta\}d\omega=$$

$$=\left\langle\left[\frac{\partial^n A(t)}{\partial t^n},\,B(t')\right]\Big|_{t=t'}\right\rangle, \quad (9)$$

выражающих моменты спектральной плотности через одновремен. корреляц. ф-ции. Правые части этих соотношений вычисляются точно, т. к. $\partial A/\partial t=-i\hbar^{-1}[A,H]$, где $\eta=1$, тогда $\partial^n A(t)/\partial t^n$ представляет собой n-кратный коммутатор. Выражение (9) используется для практич. построения спектральной плотности $I_{BA}(\omega)$ в виде разложения по моментам, а также проверки корректности аппроксимаций $I_{BA}(\omega)$. П. с. эффективно служит для описания свойств обобщённой восприимчивости системы $\chi_{BA}(k,\omega)$, для к-рой справедливо спектральное представление

$$\chi_{BA}(k,Z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{I_{BA}(k,\omega')\{\exp(\beta\omega'\hbar)-1\}d\omega'}{\omega'-Z}, \quad (10)$$

где $Z=\omega+i\varepsilon$, $\varepsilon\to0$ в соответствии с принципом причинности. Ф-ция (10) описывает линейную реакцию системы на обобщённое внеш. поле, зависящее от координаты r и времени t и характеризующееся частотой ω и волновым вектором $\mathbf{k}$. Применение асимптотич. разложения $(1-\omega/Z)^{-1}=1+\sum_{n=1}^{\infty}\omega^n/Z^n$ даёт выражение для ВЧ-восприимчивости

$$\chi_{BA}(k,Z)=\sum_{n=1}^{\infty}Z^{-n}\chi^{n-1}_{BA}(k),$$

где для моментов $\chi^{n-1}_{BA}(k)$ существуют П. с., аналогичные (9):

$$\chi^{n-1}_{BA}(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\omega^{n-1}I_{BA}(k,\omega)\{\exp(\beta\omega\hbar)-1\}d\omega.$$

Из спектрального представления (10) следует формулировка флуктуационно-диссипативной теоремы, являющейся обобщением *Крамерса — Кронига соотношений* на случай конечных темп-р и связывающей действительную χ' и мнимую χ'' части обобщённой восприимчивости:

$$\chi'_{BA}(k,\omega)=\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}I_{BA}(k,\omega')\{\exp(\beta\omega'\hbar)-1\}(\omega'-\omega)^{-1}d\omega';$$

$$\chi''_{BA}(k,\omega)=\pi I_{BA}(k,\omega)\{\exp(\beta\omega\hbar)-1\},$$

где P — символ гл. значения интеграла, поэтому

$$\chi'_{BA}(k,\omega)=\pi^{-1}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\chi''_{BA}(k,\omega)(\omega'-\omega)^{-1}d\omega'.$$

Статич. предел ($\omega=0$) даёт П. с. для неоднородной восприимчивости $\chi'_{BA}(k)$:

$$\chi'_{BA}(k)=\pi^{-1}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\chi''_{BA}(k,\omega)\omega^{-1}d\omega. \quad (11)$$

В однородном пределе ($k=0$, $\omega=0$) могут быть получены **термодинамические** П. с. При $k\to0$, $\omega\to0$ величина χ'_{BA} является измеряемой на опыте адиабатической (при пост. энтропии S) восприимчивостью χ^{S}_{BA} (*реакции функция*), характеризующей изменение (реакцию) физ. величины (или оператора) A на действие постоянного и однородного внеш. поля, термодинамически сопряжённого внутр. параметру B. Для большинства эргодических физ. величин (см. *Эргодическая гипотеза*) χ^{S}_{BA} совпадает с изотермич. восприимчивостью χ^{T}_{BA}. Величина χ^{T}_{BA}, пропорц. корреляционной ф-ции флуктуаций A и B, совпадает со второй производной свободной энергии F по обобщённым полям, термодинамически сопряжённым A и B. Для эргодических систем согласование между динамич. и термодинамич. свойствами обеспечивается П. с.

$$\chi^{S}_{BA}=\chi^{T}_{BA}=\lim_{k\to0}\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}I_{BA}(k,\omega)\{\exp(\beta\omega\hbar)-1\}\omega^{-1}d\omega. \quad (12)$$

Наиб. распространённые примеры применения этого П. с.: магн. системы, где $A=M_\alpha$, $B=M_\beta$ — проекции вектора намагниченности на оси координат, $\chi^{T}_{BA}=\chi_{\alpha\beta}$ — тензор магн. восприимчивости; проводники, где $A=J_\alpha$, $B=J_\beta$ — проекции вектора плотности тока, $\chi^{T}_{BA}=\chi_{\alpha\beta}$ — тензор электропроводности; изотропные газы и жидкости, где $A=B=\varkappa$ — плотность частиц, внеш. поле — давление, $\chi^{T}_{BA}=\chi_{\varkappa\varkappa}$ — сжимаемость, определяемая флуктуациями числа частиц; любые физ. системы, где $A=B=\mathscr{E}$ — энергия системы, роль внеш. поля играет обратная темп-ра, $\chi^{T}_{BA}=\chi_{\mathscr{E}\mathscr{E}}$ — теплоёмкость, определяемая флуктуациями энергии.

В случае, когда один или оба локальных оператора $A(r,t)$, $B(r,t)$ являются плотностями интегралов движения [напр., $\int B(r,t)dr=\mathrm{const}$], П. с. (12) принимает простой вид:

$$\chi_{B_0A_0}=\beta\lim_{k\to0}\int_{-\infty}^{\infty}I_{B_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{k}}}(\omega)d\omega,$$

где $B_{\mathbf{k}}$, $A_{\mathbf{k}}$ — фурье-компоненты B и A, причём

$$\lim_{k\to0}\int B(r,t)\exp(-i\mathbf{k}r)dr=\lim_{k\to0}B_{\mathbf{k}}(t)=B_0=\mathrm{const}.$$