



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-15-15U

І.М. Мриглод, В.М. Купоров

ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ У ЗАДАЧАХ НЕРІВНОВАЖНОЇ
СТАТИСТИЧНОЇ ФІЗИКИ: МАТРИЧНЕ ФОРМУЛЮВАННЯ

УДК: 53.01; 532.5; 538.9

PACS: 61.20.Gy, 61.20.Lc, 61.20.Ne, 47.10.-g

Теорія збурень у задачах нерівноважної статистичної фізики: матричне формулювання

І.М. Мриглод, В.М. Купоров

Анотація. В рамках стандартної схеми побудови нерівноважної статистичної теорії динамічних систем розвинуто теорію збурень для часових кореляційних функцій (ЧКФ) у матричній формі. Побудовано в загальному випадку розклад теорії збурень для кінетичної матриці, виходячи з знайдено поправки теорії збурень до колективних мод та їхніх амплітуд в ЧКФ. Докладно розглянуто випадок малих недіагональних перехресних кореляцій і отримано для цього випадку вирази для ЧКФ. Показано, що для недіагональних ЧКФ в першому порядку теорії збурень виконується правило сум нульового порядку.

Perturbation theory in problems of non-equilibrium statistical physics: matrix formulation

I. Mryglod, V. Kuporov

Abstract. Within the frame of a standard scheme of the non-equilibrium statistical theory the perturbation theory for time correlation function (TCF) in matrix form is developed. In general from the series of perturbation theory for the kinetic matrix are found, and the correlations to collective modes to TCFs are calculated. The case of small off-diagonal cross-correlations is studied in details and TCF for this case are received. It is shown that the sum rules of null order for off-diagonal TCFs are satisfied in the first order of the perturbation theory developed.

**Подається в Український фізичний журнал
Submitted to Ukrainian Journal of Physics**

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Ігор Миронович Мриглод
В'ячеслав Михайлович Купоров

ТЕОРІЯ ЗБУРЕНЬ У ЗАДАЧАХ НЕРІВНОВАЖНОЇ СТАТИСТИЧНОЇ
ФІЗИКИ: МАТРИЧНЕ ФОРМУЛЮВАННЯ

Роботу отримано 28 грудня 2015 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу квантово-статистичної
теорії процесів каталізу

Виготовлено при ІФКС НАН України
© Усі права застережені

При вивченні динаміки слабо нерівноважних багаточастинкових систем, як наприклад багатокомпонентні рідини, важливо мати рецепт для розрахунку часових кореляційних функцій (ЧКФ), що означені на деяких динамічних змінних. Ці ЧКФ з допомогою перетворення Фур'є можуть бути пов'язаними з динамічними структурними факторами, які можна визначити із експериментів з розсіювання, а отже по-перше обчислення ЧКФ є важливим для встановлення зв'язку теорії з експериментом. По-друге, завдяки флуктуаційно-дисипативній теоремі, ЧКФ дають можливість отримати функції відгуку динамічної системи. Завдяки формулам Гріна-Кубо із поточкових ЧКФ можна отримати також отримати коефіцієнти переносу. Із ЧКФ маємо змогу знайти спектр колективних збуджень системи, а отже зрозуміти основні механізми її колективної поведінки.

Для вивчення динаміки системи на першому етапі визначається певний набір динамічних змінних, флуктуації яких потрібно вивчати. В найпростішому випадку вивчення простих рідин такими змінними вважаються, як правило, повільні гідродинамічні змінні. Але в загальному випадку довільних систем базові набори змінних можуть бути різними. Як показують дослідження, для більш повного точного і адекватного опису динаміки таких систем варто використовувати розширені базові набори динамічних змінних, що включають і вищі похідні по часу або потокові змінні. Для обчислення ЧКФ в такому випадку можна використовувати підхід узагальнених колективних мод (УКМ) [1, 2], що зводить проблему до задачі на власні значення і власні вектори так званої узагальненої гідродинамічної або кінетичної матриці. В рамках такого підходу розглядається розширений набір динамічних змінних з похідними до певного порядку, в якому для функцій пам'яті найвищого порядку робиться марківське наближення. Чим ширший набір динамічних змінних і на вищому порядку робиться марківське наближення, тим точніше буде описуватися динаміка системи. Але у випадку розширених наборів змінних, що враховують кореляції між різними можливими динамічними процесами, задача на власні значення і власні вектори інколи стає складною для аналітичного розв'язку. В першу чергу це пов'язано з великою розмірністю узагальненої гідродинамічної або кінетичної матриці. Для таких випадків можна завжди використовувати комп'ютерні методи, але інколи важливо проаналізувати на характер динаміки системи з точки зору аналітичних результатів.

Аналітичні розв'язки часто можливо отримати для спрощених динамічних моделей, які добре працюють лише в певних невеликих просторово-часових масштабах, тобто в певних діапазонах хвильо-

вих чисел k та кореляційних часів. Тоді ці аналітичні результати можна брати за нульове наближення, а відхилення від нього шукати аналітично з допомогою теорії збурень по певних розкладах статичних та динамічних кореляцій, які можна вважати малими. Один з відомих шляхів до побудови теорії збурень саме в рамках підходу УКМ є розклад в гідродинамічній границі (див. наприкл. [3]). Інший шлях – розбиття широкого базису динамічних змінних на менші, які в тих чи інших просторово-часових діапазонах можна розглядати незалежно і вважати хорошим нульовим наближенням, а недіагональні перехресні кореляції між ними вважати малими і будувати за ними теорію збурень. Якщо задача в нульовому наближенні може бути успішно розв’язана, то поправки викликані слабкими кореляціями можна спробувати шукати з допомогою теорії збурень. Для цього в усіх малих елементах кінетичної матриці варто виділити формально деякий спільний малий параметр ϵ , а саму кінетичну матрицю \mathbf{T} подати у вигляді суми

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 + \delta\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 + \epsilon\mathbf{T}_1, \quad (1)$$

де \mathbf{T}_0 – кінетична матриця в нульовому наближенні, а $\delta\mathbf{T}$ – деяка матриця малих поправок, ненульові елементи якої малі в порівнянні з ненульовими елементами матриці \mathbf{T}_0 . Така схема є добре відомою в математиці та фізиці, наприклад у квантовій механіці будується добре відома стаціонарна теорія збурень, так і у вивченні недіагонального безладу в динамічних системах. Однак, особливістю для слабо нерівноважних систем є те, що кінетична матриця є неермітовою і несиметричною водночас. Водночас приклад побудови матричної теорії збурень для несиметричної матриці можна побачити у вивченні молекулярних вібрацій [4].

Ідея такої теорії збурень за недіагональними перехресними кореляціями в рамках підходу УКМ не є новою [5, 6]. Для власних значення кінетичної матриці вона була розвинута і протестована на деяких відомих динамічних моделях рідин [6]. Дальшим застосуванням такої теоретичної схеми може бути вивчення певних нетривіальних моделей повздожньої та поперечної багатокомпонентних плиннів. Відомо, що як для бінарних [7, 8], так і потрійних [9] сумішей при малих та при великих хвильових числах k добре працюють різні розділені базиси динамічних змінних, які можуть служити хорошим нульовим наближенням теорії збурень: якщо в короткохвильовій границі слабо взаємодіючим виступають парціальні змінні, що описують динаміку різних компонент суміші, то в довгохвильовій границі при малих k добре працює “когерентна” динаміка, що пов’язана з повною та мас-

концентраційними густинами в суміші, які описують кооперативний та взаємний рух компонент суміші.

Таким чином, актуальним завданням видається побудувати теорію збурень у загальному випадку для довільної динамічної системи: стартуючи з матриць статичних і динамічних кореляцій, з яких будується кінетична матриця. Далі наше завдання полягає в тому, щоб отримати формули для поправок до колективних мод системи та відповідних амплітуд, з яких можна побудувати аналітичні вирази для ЧКФ. Для верифікації результатів важливо також перевірити, чи виконуються для ЧКФ правила сум у відповідних порядках теорії збурень, якщо вони виконуються на повному базисі динамічних змінних.

1. Підхід УКМ і теорія збурень для кінетичної матриці

1.1. Теоретична схема підходу УКМ

В рамках підходу УКМ часові кореляційні функції для деякого набору динамічних змінних $\mathbf{P}_j = \{P_{j,\mathbf{k}}\}$ шукаються у вигляді

$$F_{jl}(k, t) \equiv \langle P_{j,\mathbf{k}} e^{-iL_N t} P_{l,\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\alpha} G_{jl}^{\alpha}(k) e^{-z_{\alpha}(k)t}, \quad (2)$$

де $z_{\alpha}(k)$ є власними значеннями кінетичної матриці

$$\mathbf{T}(k) = \mathbf{F}(k, 0) [\tilde{\mathbf{F}}(k, 0)]^{-1}, \quad (3)$$

і формують спектр колективних мод системи $\{z_{\alpha}(k)\}$, що описують основні типи колективної динаміки у ній. В загальному випадку власні значення $z_{\alpha}(k)$ комплекснозначними функціями від хвильового числа k , тобто $z_{\alpha}(k) = \sigma_{\alpha}(k) + i\omega_{\alpha}(k)$, причому $\sigma_{\alpha}(k) = \text{Re}z_{\alpha}(k) > 0$. У разі чисто дійсних значень це будуть релаксаційні процеси затухання, а коли $\text{Im}z_{\alpha}(k) \neq 0$, то відповідні моди асоціюються з осциляційними пропагаторними внесками у ЧКФ.

Кінетична матриця (3) визначається двома складовими: матрицею статичних кореляцій $\mathbf{F}(k, 0)$ з елементами $F_{jl}(k, 0) = f_{jl}(k)$ і матрицею динамічних кореляцій $\tilde{\mathbf{F}}(k, 0)$, що в найпростішому марківському наближенні будується з перетворень Лапласа ЧКФ при $z = 0$, тобто $\tilde{F}_{jl}(k, 0) = \int_0^{\infty} F_{jl}(k, t) dt$, і задається фактично набором

кореляційних часів системи

$$\tau_{jl}(k) = [f_{ll}(k)]^{-1} \tilde{F}_{jl}(k, 0) = [f_{ll}(k)]^{-1} \int_0^{\infty} F_{jl}(k, t) dt,$$

які задають основні часові масштаби в системі.

Амплітуди

$$G_{jl}^{\alpha}(k) = \sum_s x_{j,\alpha}(k) y_{\alpha,s}(k) F_{sl}(k, 0), \quad (4)$$

виражаються через елементи власних векторів матриці $\mathbf{T}(k)$, що зводить проблему до задачі на власні значення та власні вектори

$$\mathbf{T}(k) \mathbf{x}_{\alpha}(k) = z_{\alpha}(k) \mathbf{x}_{\alpha}(k), \quad \mathbf{y}_{\alpha}(k) \mathbf{T}(k) = z_{\alpha}(k) \mathbf{y}_{\alpha}(k). \quad (5)$$

Тут праві власні вектори $\mathbf{x}_{\alpha}(k)$ є стовпцями, а ліві $\mathbf{y}_{\alpha}(k)$ – рядками, причому для несиметричної матриці $\mathbf{T}(k)$ $\mathbf{y}_{\alpha}(k) \neq \mathbf{x}_{\alpha}^T(k)$. Для матриць власних векторів:

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_{\nu}), \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \dots \\ \mathbf{y}_{\nu} \end{pmatrix} \quad (6)$$

виконується

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}^{-1}, \quad \mathbf{Y} \mathbf{T} \mathbf{X} = \mathbf{Z}, \quad (7)$$

де \mathbf{Z} – діагональна матриця із власних значень z_{α} матриці \mathbf{T} .

Критерієм правильності побудови виразів для ЧКФ можуть служити так звані правила сум. Умову самоузгодженості теорії забезпечує правило сум нульового порядку

$$F_{jl}(k, 0) = \sum_{\alpha} G_{jl}^{\alpha}(k) = f_{jl}(k), \quad (8)$$

яке фактично гарантує правильне значення для ЧКФ при $t = 0$. Якщо в базис динамічних змінних включені також вищі часові порядки, то будуть виконуватися і вищі правила сум, зокрема першого порядку

$$\frac{dF_{jl}(k, t=0)}{dt} = \sum_{\alpha} z_{\alpha}(k) G_{jl}^{\alpha}(k) = 0. \quad (9)$$

Вираз (9) фактично відображає умову часової симетрії змінних, що відповідає умові $\langle P_{j,\mathbf{k}} \dot{P}_{l,\mathbf{k}} \rangle = \langle P_{j,\mathbf{k}} iL_N P_{l,\mathbf{k}} \rangle = 0$, де iL_N – оператор Ліувілля.

1.2. Кінетична матриця і теорія збурень

Розглянемо деякий набір динамічних змінних, для якого певні статичні кореляційні функції $f_{jl}(k)$ є малими в порівнянні з іншими. Тобто певні елементи матриці $\mathbf{F}(k, 0)$ статичних кореляційних функцій є малими, і її формально можна подати у вигляді суми

$$\mathbf{F}(k, 0) = \mathbf{F}_0(k, 0) + \varepsilon \mathbf{F}_1(k, 0),$$

де \mathbf{F}_0 – матриця статичних кореляцій в нульовому наближенні, в якій малі елементи покладені рівними нулю, а $\varepsilon \mathbf{F}_1$ – матриця-збурення побудована з малих кореляцій з виділеним для зручності формальним малим параметром ε , всі інші елементи якої рівні нулю. Тоді також можна записати для динамічних кореляцій матриць Лаплас образі при

$$\tilde{\mathbf{F}}(k, 0) = \tilde{\mathbf{F}}_0(k, 0) + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1(k, 0).$$

де $\varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1(k, 0)$ – внесок терорії збурень за малими кореляціями.

Нас в першу чергу цікавить випадок малих недиагональних кореляцій, коли базис динамічних змінних в нульовому наближенні можна розбити на два незалежні, вважаючи перехресні недиагональні кореляції малими і шукаючи їх з допомогою теорії збурень, а саме набір

$$\{\mathbf{A}, \mathbf{D}\} = \{A_1, A_2, \dots, A_n, D_1, D_2, \dots, D_m\}, \quad (10)$$

з двох груп A (n змінних) і D (m змінних), що в нульовому наближенні можуть розглядатися як два незалежні базиси $\{\mathbf{A}\}$ і $\{\mathbf{D}\}$. В такому разі матриці статичних кореляцій можна подати у блочному вигляді

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} A & \varepsilon B \\ \varepsilon C & D \end{pmatrix}, \quad (11)$$

відповідно

$$\mathbf{F}_0 = \begin{pmatrix} A & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \end{pmatrix}, \quad \varepsilon \mathbf{F}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \varepsilon B \\ \varepsilon C & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

де діагональні блоки A , D квадратні з розмірностями $n \times n$ і $m \times m$ відповідно виражають діагональні кореляції між групами змінних A і D . Недіагональні блоки є прямокутними з розмірностями $B(n \times m)$ і $C(m \times n)$ описують малі перехресні кореляції між вказаними групами змінних, $\mathbf{0}$ – нульові блоки потрібних відповідних розмірностей. (Тут і далі для спрощення запису будемо опускати залежність від (k) ,

але слід її розуміти.) Для динамічних кореляцій у блочному вигляді можна записати подібну структуру

$$\tilde{\mathbf{F}}_0 = \begin{pmatrix} \tilde{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{D} \end{pmatrix}, \quad \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \varepsilon \tilde{B} \\ \varepsilon \tilde{C} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

В першу чергу постає завдання представити кінетичну матрицю (3) у вигляді суми розкладу теорії збурень:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 + \delta \mathbf{T} = [\mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1][\tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1]^{-1}. \quad (12)$$

Звісно, обернену матрицю суми $[\tilde{\mathbf{F}}]^{-1} = [\tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1]^{-1}$ можна завжди рахувати в лоб, після чого здійснити множення $[\mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1][\tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1]^{-1}$ і далі вже виділити внески у \mathbf{T} , які $\sim \varepsilon$, $\sim \varepsilon^2$. Але в загальному випадку це може привести до громіздких обчислень. Тому задля спрощення ситуації виникає ідея застосувати теорію збурень вже на цьому етапі. Адже відомо, що для скалярних величин $\varepsilon \ll a$ з допомогою розкладу в ряд Тейлора можна отримати наближено

$$\frac{1}{a + \varepsilon} \approx \frac{1}{a} - \frac{1}{a^2} \varepsilon + \frac{1}{a^3} \varepsilon^2 - \dots$$

Для обернення суми матриць з подальшим розкладом ситуація є складнішою, що пов'язано з некомутативністю множення матриць. Але тут може стати у пригоді відома з теорії матриць тотожність Вудбурі (див. наприкл. [10]), для випадку точного представлення оберненої матриці суми двох матриць

$$(F_0 + F_1)^{-1} = F_0^{-1} - F_0^{-1} F_1 (F_1 + F_1 F_0^{-1} F_1)^{-1} F_1 F_0^{-1}, \quad (13)$$

де F_0 і F_1 є довільними квадратними матрицями однакової розмірності, і F_0 – невироджена.

Якщо $F_1 \rightarrow \varepsilon F_1$ є малою, то у виразі в дужках можна знехтувати внеском $\sim \varepsilon^2$, $\varepsilon F_1 + \varepsilon^2 F_1 F_0^{-1} F_1 \simeq \varepsilon F_1$, звідки $F_1 (F_1 + F_1 F_0^{-1} F_1)^{-1} F_1 \simeq F_1 F_1^{-1} F_1 = F_1$, що навіть у випадку виродженої матриці F_1 справедливо, бо F_1^{-1} можна розуміти як псевдообернену матрицю. Отже, в результаті таких міркувань можна записати для оберненої суми

$$(F_0 + \varepsilon F_1)^{-1} \simeq F_0^{-1} - \varepsilon F_0^{-1} F_1 F_0^{-1}.$$

Якщо потрібно продовжити розклад до розклад до ε^2 , то наступним кроком достатньо застосувати тотожність Вудбурі ще раз і виконати наближення для виразу

$$(\varepsilon F_1 + \varepsilon^2 F_1 F_0^{-1} F_1)^{-1} \simeq (\varepsilon F_1)^{-1} - F_0^{-1}.$$

Процес можна продовжувати крок за кроком далі можна отримувати наступні внески розкладу по εF_1 .

Таким чином для кінетичної матриці маємо

$$\begin{aligned} \mathbf{T} = [\mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1][\tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1]^{-1} &\simeq (\mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1)(\tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}) = \\ &\mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \varepsilon (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}) - \\ &\varepsilon^2 (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}), \end{aligned} \quad (14)$$

тобто отримуємо розклад виду

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 + \varepsilon \mathbf{T}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{T}_2 + \dots, \quad (15)$$

де

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_0 &= \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}, \quad \varepsilon \mathbf{T}_1 = \varepsilon (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}), \\ \varepsilon^2 \mathbf{T}_2 &= -\varepsilon^2 (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}). \end{aligned}$$

У більш загальному випадку, коли кореляції задані у вигляді ряду теорії збурень з урахуванням квадратичних внесків

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 + \varepsilon \mathbf{F}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{F}_2 + \dots, \quad \tilde{\mathbf{F}} = \tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1 + \varepsilon^2 \tilde{\mathbf{F}}_2 + \dots$$

кінетична матриця може бути записана як

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \varepsilon (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \mathbf{F}_0 Q_1) + \\ &\varepsilon^2 (\mathbf{F}_0 Q_2 + \mathbf{F}_2 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \mathbf{F}_1 Q_1) + \dots, \end{aligned} \quad (16)$$

де

$$Q_1 = -\tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}, \quad Q_2 = \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_2 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}$$

– коефіцієнти розкладу

$$\tilde{\mathbf{F}}^{-1} = (\tilde{\mathbf{F}}_0 + \varepsilon \tilde{\mathbf{F}}_1 + \varepsilon^2 \tilde{\mathbf{F}}_2 + \dots)^{-1} = \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \varepsilon Q_1 + \varepsilon^2 Q_2 + \dots$$

Варто відмітити, що навіть при $\mathbf{F}_2 = 0$, $\tilde{\mathbf{F}}_2 = 0$ квадратичний внесок у $\tilde{\mathbf{F}}^{-1}$ відмінний від нуля, $Q_2 \neq 0$, а (16) переходить у (14). Далі обмежимося розглядом такої ситуації в контексті випадку малих недиагональних кореляцій і блочного вигляду (11).

Тоді незбурена частина кінетичної матриці

$$\mathbf{T}_0 = \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} = \begin{pmatrix} A & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{D}^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \tilde{A}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D \tilde{D}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Це фактично дає можливість розбити кінетичну матрицю на дві незалежні меншої розмірності $\mathbf{T}_A = A \tilde{A}^{-1}$ і $\mathbf{T}_D = D \tilde{D}^{-1}$, а задачу в

нульовому наближенні розділити на дві незалежні простіші задачі на незалежних розділених базисах змінних \mathbf{A} і \mathbf{D} . В такому випадку в нульовому наближенні можна окремо шукати моди системи незалежно $z_j^{A(0)}(k)$ та $z_j^{D(0)}(k)$ з їх власними векторами $\mathbf{x}_j^{A(0)}$, $\mathbf{y}_j^{A(0)}$ та $\mathbf{x}_j^{D(0)}$, $\mathbf{y}_j^{D(0)}$, що визначають амплітуди (4), і далі нульове наближення для ЧКФ $F_{jl}^{AA(0)}(k, t)$ та $F_{jl}^{DD(0)}(k, t)$.

Внески теорії збурень у (15) згідно (14) будуть

$$\varepsilon \mathbf{T}_1 = \varepsilon (\mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} - \mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \varepsilon (B \tilde{D}^{-1} - A \tilde{A}^{-1} \tilde{B} \tilde{D}^{-1}) \\ \varepsilon (C \tilde{A}^{-1} - D \tilde{D}^{-1} \tilde{C} \tilde{A}^{-1}) & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (18)$$

і

$$\varepsilon^2 \mathbf{T}_2 = -\varepsilon^2 (\mathbf{F}_0 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} + \mathbf{F}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1} \tilde{\mathbf{F}}_1 \tilde{\mathbf{F}}_0^{-1}) = \begin{pmatrix} \varepsilon^2 A^{(2)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \varepsilon^2 D^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

де

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 A^{(2)} &= -\varepsilon^2 (B \tilde{A}^{-1} \tilde{B} \tilde{D}^{-1} - A \tilde{A}^{-1} \tilde{B} \tilde{D}^{-1} \tilde{B} \tilde{D}^{-1}), \\ \varepsilon^2 D^{(2)} &= -\varepsilon^2 (C \tilde{D}^{-1} \tilde{C} \tilde{A}^{-1} - D \tilde{D}^{-1} \tilde{C} \tilde{A}^{-1} \tilde{C} \tilde{A}^{-1}). \end{aligned}$$

Варто звернути увагу на те, поправки першого порядку $\varepsilon \mathbf{T}_1$ будуть блочно-недіагональними, а другого порядку $\varepsilon^2 \mathbf{T}_2$ навпаки – блочно-діагональними.

1.3. Поправки до власних значень та власних векторів

Поправки до власних значень та власних векторів шукаються із рівнянь (5) згідно зі схемою стаціонарної теорії збурень у квантовій механіці з точністю до ε^2 . При цьому треба правильно враховувати значення матричних елементів $(\mathbf{y}_j^{A(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{A(0)})$, $(\mathbf{y}_j^{D(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{D(0)})$ і $(\mathbf{y}_j^{A(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{D(0)})$, $(\mathbf{y}_j^{D(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{A(0)})$ з врахуванням, що $\delta \mathbf{T} = \varepsilon \mathbf{T}_1 + \varepsilon^2 \mathbf{T}_2$, де перший доданок буде блочно-недіагональний, а другий – блочно-діагональний.

Так, поправки до мод першого порядку малості $\delta z_j^{A(1)}(k) = \varepsilon (\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) = 0$, $\delta z_j^{D(1)}(k) = \varepsilon (\mathbf{y}_j^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{D(0)}) = 0$ як діагональні елементи матриці, а першими нетривіальними будуть поправки другого порядку $\sim \varepsilon^2$:

$$\delta z_j^{A(2)} = \varepsilon^2 \sum_l \frac{(\mathbf{y}_l^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) (\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{D(0)})}{z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)}} +$$

$$\varepsilon^2 (\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_2 \mathbf{x}_j^{A(0)}), \quad (20)$$

$$\delta z_j^{D(2)} = \varepsilon^2 \sum_l \frac{(\mathbf{y}_l^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{D(0)}) (\mathbf{y}_j^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{A(0)})}{z_j^{D(0)} - z_l^{A(0)}} + \varepsilon^2 (\mathbf{y}_j^{D(0)} \mathbf{T}_2 \mathbf{x}_j^{D(0)}). \quad (21)$$

Якщо перші доданки відображають внески другого порядку теорії збурень, то другі формально відповідають першому порядку, діагональному внеску $(\mathbf{y}_j^{A(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{A(0)})$, $(\mathbf{y}_j^{D(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{D(0)})$, але внаслідок того, що діагональні внески у $\delta \mathbf{T}$ будуть лише від $\varepsilon^2 \mathbf{T}_2$, вони будуть квадратичні по малому параметру, тобто фактично увійдуть у квадратичні внески.

Для власних векторів будуть відмінні від нуля вже перші поправки:

$$\delta \mathbf{x}_j^{A(1)} = \varepsilon \sum_l \frac{(\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{D(0)})}{z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)}} \mathbf{x}_l^{D(0)} \quad (22)$$

$$\delta \mathbf{y}_j^{A(1)} = \varepsilon \sum_l \frac{(\mathbf{y}_l^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)})}{z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)}} \mathbf{y}_l^{D(0)} \quad (23)$$

і аналогічні вирази будуються для $\delta \mathbf{x}_j^{D(1)}$ і $\delta \mathbf{y}_j^{D(1)}$. Ситуацію спрощує те, що у поправки до власних векторів входять лише недіагональні матричні елементи $(\mathbf{y}_j^{A(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{D(0)})$, $(\mathbf{y}_j^{D(0)} \delta \mathbf{T} \mathbf{x}_j^{A(0)})$, отже квадратичних внесків від $\varepsilon^2 \mathbf{T}_2$ вони не міститимуть.

Адже власні вектори усі будуть з розмірністю $n+m$, але для даної задачі з малими недіагональними кореляціями між блоками A і D матимуть специфічну структуру: $\mathbf{x}_j^{A(0)}$, $\mathbf{y}_j^{A(0)}$ міститимуть ненульові елементи на перших n позиціях відповідних блоку A , а решта m нулі, а в $\mathbf{x}_j^{D(0)}$, $\mathbf{y}_j^{D(0)}$ на перших n позиціях відповідних блоку A будуть нулі, а на m позиціях відповідних блоку D – елементи відмінні від нуля, тобто

$$\mathbf{x}_j^{A(0)} = (x_{A1}^{Aj(0)}, x_{A2}^{Aj(0)}, \dots, x_{An}^{Aj(0)}, 0, \dots, 0)$$

$$\mathbf{x}_j^{D(0)} = (0, \dots, 0, x_{D1}^{Dj(0)}, x_{D2}^{Dj(0)}, \dots, x_{Dm}^{Dj(0)})$$

і аналогічно вектори-рядки $\mathbf{y}_j^{A(0)}$, $\mathbf{y}_j^{D(0)}$. Тут верхні індекси відповідають за приналежність вектора до моди, нижні – за позицію компоненти вектора, відповідні позиції певної змінної із набору (10), тобто

наприклад x_{Al}^{Aj} є компонентом вектора \mathbf{x}_j^A відповідного моді z_j^A на позиції Al , що відповідає позиції змінної A_l .

А от що стосується поправок першого порядку, визначених виразами (22), відмінні від нуля компоненти будуть лише на перехресних позиціях: для $\delta \mathbf{x}_j^{A(1)}, \delta \mathbf{y}_j^{A(1)}$ відмінні від нуля елементи будуть на позиціях D , а для $\delta \mathbf{x}_j^{D(1)}, \delta \mathbf{y}_j^{D(1)}$ – на позиціях A , а саме $\delta x_{Dj}^{A\alpha(1)}, \delta x_{Aj}^{D\alpha(1)} \neq 0$, а $\delta x_{Aj}^{A\alpha(1)} = \delta x_{Dj}^{D\alpha(1)} = 0$. Це впливатиме на вигляд поправок до амплітуд, визначених формулою (4).

Можна отримати і поправки другого порядку теорії збурень, які нам будуть корисними для побудови власних векторів. Згідно стандартної схеми стаціонарної теорії збурень з квантової механіки вони виглядатимуть так

$$\delta \mathbf{x}_j^{A(2)} = -\frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{Dl} \frac{(\mathbf{y}_l^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) (\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{D(0)})}{(z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)})^2} \mathbf{x}_j^{A(0)} + \varepsilon^2 \sum_{Dl} \sum_{Dm \neq Dl} \frac{(\mathbf{y}_m^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) (\mathbf{y}_l^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_m^{D(0)})}{(z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)})(z_j^{A(0)} - z_m^{D(0)})} \mathbf{x}_l^{D(0)}, \quad (24)$$

$$\delta \mathbf{y}_j^{A(2)} = -\frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{Dl} \frac{(\mathbf{y}_l^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) (\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{D(0)})}{(z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)})^2} \mathbf{y}_j^{A(0)} + \varepsilon^2 \sum_{Dl} \sum_{Dm \neq Dl} \frac{(\mathbf{y}_m^{D(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_j^{A(0)}) (\mathbf{y}_l^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_m^{D(0)})}{(z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)})(z_j^{A(0)} - z_m^{D(0)})} \mathbf{y}_l^{D(0)}. \quad (25)$$

Неважко зрозуміти, що поправки другого порядку (24) будуть відмінними від нуля як на діагональних позиціях своїх мод $\delta x_{Aj}^{A\alpha(2)}, \delta x_{Dj}^{D\alpha(2)} \neq 0$ (внесок перших доданків), так і на недіагональних $\delta x_{Aj}^{D\alpha(2)}, \delta x_{Dj}^{A\alpha(2)} \neq 0$ (внесок других доданків).

Очевидно, така теорія збурень має межі застосування, які важливо встановити. Перш за все, формули (20) і (22) є коректними лише при відмінному від нуля знаменнику, тобто коли моди $z_j^{A(0)}(k) \neq z_l^{D(0)}(k)$, які, варто пам'ятати, є функціями хвильового числа k . Для коректності теорії збурень формально мають виконуватись нерівності типу $\varepsilon |(\mathbf{y}_j^{A(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}_l^{D(0)})| \ll |z_j^{A(0)} - z_l^{D(0)}|$, і теорія збурень є справедливою лише в тих діапазонах хвильових чисел k , де ці нерівності виконуються.

Що стосується фізики, то колективні моди $z_j^{A(0)}(k)$ описують колективні процеси типу “A”, а $z_j^{D(0)}(k)$ – типу “D”. Поправки $\delta z_j^{A(2)}$

описують слабкий вплив на колективні процеси типу “A” колективних процесів типу “D”, $\delta z_j^{D(2)}$ – навпаки вплив на процеси типу “D” процесів типу “A”, що викликаний слабкими кореляціями між двома типами колективних процесів. Якщо у певних діапазонах хвильових чисел виявляється, що $z_j^{A(0)}(k)$ і $z_l^{D(0)}(k)$ близькі, то це означає що колективні динамічні процеси типу “A” і типу “D” перекриваються і сильно впливають одні на одні, і тоді некоректно говорити про слабкі кореляції між ними і про можливість застосування теорії збурень і з точки зору фізики. Тобто хороше нульове наближення на розділених базисах $\{\mathbf{A}\}$ і $\{\mathbf{D}\}$ з подальшою побудовою теорії збурень можливе лише в тих просторових та часових масштабах, де моди розділені і не перекриваються.

2. Амплітуди і ЧКФ з врахуванням поправок теорії збурень. Правила сум

Перейдемо до визначення амплітуд, що визначають внески в ЧКФ мод, та виразів для самих ЧКФ. Амплітуди, відповідні модам $z_\alpha^{A(0)}, z_\alpha^{D(0)}$ в нульовому наближенні згідно (4) визначаються як

$$G_{AjAl}^{A\alpha(0)} = x_j^{A\alpha(0)} \sum_q y_q^{A\alpha(0)} f_{ql}^{AA},$$

$$G_{DjDl}^{D\alpha(0)} = x_j^{D\alpha(0)} \sum_q y_q^{D\alpha(0)} f_{ql}^{DD}.$$

І відповідні ЧКФ в нульовому наближенні, що фактично відповідають незалежним розділеним базисам $\{\mathbf{A}\}$ і $\{\mathbf{D}\}$:

$$F_{jl}^{AA(0)}(k, t) = \sum_\alpha G_{AjAl}^{A\alpha(0)}(k) e^{-z_\alpha^{A(0)}(k)t}, \quad (26)$$

$$F_{jl}^{DD(0)}(k, t) = \sum_\alpha G_{DjDl}^{D\alpha(0)}(k) e^{-z_\alpha^{D(0)}(k)t}. \quad (27)$$

Для верифікації результатів цікаво подивитися на правила сум для ЧКФ. Для загального випадку базису змінних (10) є сенс вести мову про правила сум лише нульового порядку (8), виконання якого є безумовним. В нульовому наближенні це будуть правила сум для розділених базисів і незалежно для (26) і (27). При врахуванні виразів для амплітуд вони приведуть до співвідношень

$$\sum_q f_{ql}^{AA} \sum_\alpha x_j^{A\alpha(0)} y_q^{A\alpha(0)} = f_{jl}^{AA}, \quad (28)$$

$$\sum_q f_{ql}^{DD} \sum_\alpha x_j^{D\alpha(0)} y_q^{D\alpha(0)} = f_{jl}^{DD}, \quad (29)$$

що справедливі при виконанні умов

$$\sum_\alpha x_j^{A\alpha(0)} y_q^{A\alpha(0)} = \sum_\alpha x_j^{D\alpha(0)} y_q^{D\alpha(0)} = \delta_{qj}, \quad (30)$$

яка випливають з (7). Отже в нульовому наближенні теорії збурень правила сум виконуються.

Щоб побудувати ЧКФ з поправками теорії збурень, потрібно врахувати поправки до мод та амплітуд визначаються виразами (20)-(22).

Визначимо спочатку недіагональні амплітуди та побудуємо відповідні недіагональні ЧКФ, які описують кореляції між змінними A_i, D_j , в першому нетривіальному порядку теорії збурень. Вони будуть відмінні від нуля вже в першому порядку теорії збурень

$$G_{AiDj}^{A\alpha} = \delta G_{AiDj}^{A\alpha(1)} = \sum_{X=A} x_{Ai}^{A\alpha(0)} y_X^{A\alpha(0)} f_{XDj} + \sum_{X=D} x_{Ai}^{A\alpha(0)} \delta y_X^{A\alpha} f_{XDj} \quad (31)$$

$$G_{AiDj}^{D\alpha} = \delta G_{AiDj}^{D\alpha(1)} = \sum_{X=D} \delta x_{Ai}^{D\alpha} y_X^{D\alpha(0)} f_{XDj} \quad (32)$$

будуть лінійними по ε . В першому доданку для $G_{AiDj}^{A\alpha}$ малими за теорією збурень будуть статичні кореляційні функції $f_{AiDj} \sim \varepsilon$, а в усіх інших внесках – поправки першого порядку до векторів $\delta x_{Ai}^{D\alpha}, \delta y_X^{A\alpha} \sim \varepsilon$, що визначаються виразами (22). У (31) закладено основний внесок $f_{AiDj} \sim \varepsilon$. В результаті недіагональні ЧКФ

$$F_{AiDj}(t) = \sum_{A\alpha} G_{AiDj}^{A\alpha} e^{-z_\alpha^A t} + \sum_{D\alpha} G_{AiDj}^{D\alpha} e^{-z_\alpha^D t} \quad (33)$$

також $\sim \varepsilon$, де $z_\alpha^X = z_\alpha^{X(0)} + \delta z_\alpha^{X(2)}$, $X = A, D$, $z_\alpha^{X(2)}$ задаються (20).

Для випадку отриманих недіагональних ЧКФ в першому порядку теорії збурень можна перекопати у виконанні нульового правила сум

$$F_{AiDj}(0) = \sum_{A\alpha} \sum_{X=A} x_{Ai}^{A\alpha(0)} y_X^{A\alpha(0)} f_{XDj} + \sum_{A\alpha} \sum_{X=D} x_{Ai}^{A\alpha(0)} \delta y_X^{A\alpha} f_{XDj} + \sum_{D\alpha} \delta x_{Ai}^{D\alpha(1)} \sum_{X=D} y_X^{D\alpha(0)} f_{XDj} = f_{AiDj}, \quad (34)$$

де перший доданок згортається завдяки (30), а другий і третій доданок знищується при врахуванні виразів (22), внаслідок зведенню і взаємознищенню пар подібних доданків типу

$$\frac{(\mathbf{y}^{A\alpha(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}^{D\alpha(0)}) x_j^{A\alpha(0)} y_l^{D\alpha(0)}}{z_\alpha^{A(0)} - z_\alpha^{D(0)}}, \quad \frac{(\mathbf{y}^{A\alpha(0)} \mathbf{T}_1 \mathbf{x}^{D\alpha(0)}) x_j^{A\alpha(0)} y_l^{D\alpha(0)}}{z_\alpha^{D(0)} - z_\alpha^{A(0)}},$$

що відрізняються лише знаками знаменників.

Що стосується “діагональних” ЧКФ по групах змінних \mathbf{A} чи \mathbf{D} , то для них з врахуванням нетривіальних поправок теорії збурень

$$F_{AiAj}(t) = \sum_{A\alpha} (G_{AiAj}^{A\alpha(0)} + \delta G_{AiAj}^{A\alpha(2)}) e^{-z_\alpha^A t} + \sum_{D\alpha} \delta G_{AiAj}^{D\alpha(2)} e^{-z_\alpha^D t}, \quad (35)$$

де $\delta G_{AiAj}^{A\alpha(2)}, G_{AiAj}^{D\alpha(2)} \sim \varepsilon^2$ і виражаються як

$$\delta G_{AiAj}^{A\alpha(2)} = \sum_{X=A} (x_{Ai}^{A\alpha(0)} \delta y_X^{A\alpha(2)} + \delta x_{Ai}^{A\alpha(2)} y_X^{A\alpha(0)}) f_{XAj} \quad (36)$$

$$\delta G_{AiAj}^{D\alpha(2)} = \sum_{X=A} \delta x_{Ai}^{D\alpha(1)} \delta y_X^{D\alpha(1)} f_{XAj}, \quad (37)$$

де поправки до власних векторів другого порядку визначаються з (24). Особливе місце серед них посідають автокореляційні функції з $i = j$, $F_{AiAi}(t)$. Варто відмітити, що якщо в нульовому наближенні діагональні ЧКФ містять внесок лише від “своїх” мод, тобто $F_{AiAj}^{(0)}(t)$ – внесок мод z_α^A , то для повного базису за розкладом теорії збурень в ЧКФ $F_{AiAj}(t)$ окрім квадратичних поправок до “своїх” амплітуд $G_{AiAj}^{A\alpha} = G_{AiAj}^{A\alpha(0)} + \delta G_{AiAj}^{A\alpha(2)}$, $\delta G_{AiAj}^{A\alpha(2)} \sim \varepsilon^2$, маємо ще внески від мод z_α^D , також квадратичні за теорією збурень з амплітудами $G_{AiAj}^{D\alpha} = \delta G_{AiAj}^{D\alpha(2)} \sim \varepsilon^2$.

3. Висновки

Таким чином, нами було побудовано теорію збурень у матричній формі для ЧКФ в рамках підходу УКМ в загальному випадку. Перш за все, виходячи із розкладів матриць статичних та динамічних кореляцій, отримано розклад для кінетичної матриці по малих кореляціях в загальному випадку. Докладно розглянуто випадок малих недіагональних перехресних кореляцій і отримано розклад кінетичної матриці, з якого отримано вирази для поправок теорії збурень

для мод і відповідних їм власних векторів. Виявляється, що поправки теорії збурень першого порядку за малим параметром увійдуть лише в недіагональні блоки кінетичної матриці, а другого порядку – лише у діагональні. Нетривіальні поправки до мод системи системи будуть квадратичного порядку по малому параметру і міститимуть як діагональні так і недіагональні внески, а власні вектори, які беруть участь у побудові амплітуд внесків мод у ЧКФ, міститимуть лише недіагональні внески в кінетичну матрицю.

Далі нами було отримано аналітичні вирази для ЧКФ з урахуванням поправок теорії збурень по малих недіагональних кореляціях. Отримані перехресні недіагональні ЧКФ, побудовані з різних піднаборів динамічних змінних, як виявляється будуть нетривіальними вже в першому порядку теорії збурень, $\sim \varepsilon$, і містять внески від усіх мод з обох піднаборів змінних. Діагональні ЧКФ, побудовані на змінних з одного піднабору, містять нетривіальні внески лише другого порядку теорії збурень, $\sim \varepsilon^2$, причому містять як поправки до внесків від мод зі свого піднабору змінних, так і перехресні внески від мод іншого піднабору.

Показано, що для отриманих в першому порядку теорії збурень недіагональних ЧКФ справедливе правило сум нульового порядку.

Література

1. de Schepper, I.M., Cohen, E.G.D., Bruin, C., van Rijs, J.C., Montrooij, W., and Graaf, L.A. Phys. Rev. A., 1988, **38**, No. 1, p. 271-287.
2. I. Mryglod, Cond. Matt. Phys, **1(4(16))**, p. 753, (1998)
3. O.F.Batsevych, I.M.Mryglod, Yu.K.Rudavskii, M.V.Tokarchuk, Cond. Matt. Phys, **2(26)**, p. 349-360, (2001)
4. R. A. Marcus, J. Phys. Chem. A **105**, (2001), 2612-2616
5. Т. Bryk, I Mryglod, Cond. Matt. Phys. 2008 **11 (1(53))** p. 139-154
6. I.M. Мриглод, В.М. Купоров, УФЖ, 2010 **55(11)**, с. 1172-1181
7. Т. Bryk, I. Mryglod, J. Phys.: Condens. Matter **12**, (2000), 6063
8. Т. Bryk, I. Mryglod, Physics Letters A **261**, (1999), 349-356
9. Т. Bryk, I. Mryglod, Cond. Matt. Phys, **10(4(52))**, (2007), 481-494
10. Ф. Р. Гантмахер, III, Теория матриц, вид. друге, Москва: Наука, (1967), 576 с.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. **Condensed Matter Physics** is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN: Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences; ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services; INSPEC; "Referatyvnyj Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlady, *Ljubljana*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>