Теор. и матем. физика, 1970, т.5, N3, р.406-416
19/х-

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 5188

Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ

1970

Р4 - 5188

Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ

1. Введение

В работах [1-4] было показано, что можно построить неравновесный статистический оператор (НСО), описывающий эволюцию системы для не слишком малых масштабов времени в одной из следующих форм:

$$\rho\,(t,0) = \exp\{-\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt'\, e^{\epsilon t'}\, U^{+}_{t'}\, S\,(t+t',0)\, U_{t'}\} =$$

$$= \exp\{\epsilon \int_{-\infty}^{0} dt'\, e^{\epsilon t'}\, U^{+}_{t'}\, \ln \rho_{\ell}\,(t+t',0)\, U_{t'}\}\ , \qquad (1a)$$

$$\rho\,(t,0) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'}\, U^{+}_{t'} \exp\{-S(t+t',0)\}\, U_{t'} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt'\, e^{\epsilon t'}\, U^{+}_{t'}\, \rho_{\ell}\,(t+t',0)\, U_{t'}\ , \qquad (1б)$$

$\epsilon \to +0$ в окончательных результатах при вычислении средних. Здесь

$$U_t = \exp\left(\frac{tH}{ih}\right), \qquad (2)$$

$$S(t,0) = \Phi(t) + \sum_n P_n F_n(t)\ ,$$

$$\Phi(t) = \ln \mathrm{Sp} \exp\{-\sum_n P_n F_n(t)\}\ ,$$

H – гамильтониан системы. Величины

$$\langle P_n\rangle^t = \mathrm{Sp}\,(P_n\, \rho\,(t,0)) = \mathrm{Sp}\,(P_n\, \rho_{\ell}\,(t,0)) = \langle P_n\rangle^t_{\ell} \qquad (3)$$

и $F_n(t)$ образуют два набора переменных, сопряженных в смысле неравновесной термодинамики:

$$\langle P_n \rangle^t = -\frac{\delta \Phi(t)}{\delta F_n(t)}, \tag{4а}$$

$$F_n(t) = \frac{\delta S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t}, \tag{4б}$$

где

$$S(t) = \langle S(t,0) \rangle^t = \Phi(t) + \sum_n \langle P_n \rangle^t F_n(t) - \tag{5}$$

энтропия системы. Величины $\langle P_n \rangle^t$ имеют смысл некоторых обобщенных термодинамических координат, а $F_n(t)$ – термодинамических сил. Набор средних $\langle P_n \rangle^t$ и параметров $F_n(t)$ должен быть достаточным для описания неравновесного состояния в пределах интересующих нас масштабов времени, чем и определяется выбор операторов P_n .

Обобщенные кинетические уравнения, описывающие эволюцию переменных $\langle P_n \rangle^t$ и $F_n(t)$ во времени, получаются усреднением уравнений движения для P_n по распределению (1а) или (1б) с учетом (3) и имеют вид

$$-\sum_m \frac{\delta^2 \Phi(t)}{\delta F_n(t)\, \delta F_m(t)} \dot{F}_m(t) = \langle \dot{P}_n \rangle^t, \tag{6а}$$

$$\sum_m \frac{\delta^2 S(t)}{\delta \langle P_n \rangle^t\, \delta \langle P_m \rangle^t} \langle \dot{P}_m \rangle^t = \dot{F}_n(t). \tag{6б}$$

Уравнения (6б) есть обращения уравнений (6а). Уравнения (4а), (6а) (или эквивалентные им (4б), (6б)) образуют полную систему уравнений, необходимых для вычисления функций $\langle P_n \rangle^t$ и $F_n(t)$. В частном случае гидродинамического режима (т.е. когда P_n есть плотности энергии, импульса из числа частиц) уравнения (6а) (или (6б)) составляют систему гидродинамических уравнений для переноса энергии, импульса и числа частиц. В другом частном случае кинетического режима (т.е. когда $< P_n >^t$ есть функция распределения по одночастичным состояниям) уравнение (6а) есть кинетическое уравнение.

Для практического решения задач по этой схеме приходится прибегать к разложениям средних величин по тому или иному малому параметру, например, по параметру близости к статистическому равновесию или по параметру малости взаимодействия в системе. Здесь мы рассмотрим системы со слабым взаимодействием, для которых полный гамильтониан можно представить в виде

$$H = H_0 + V \quad , \qquad (7)$$

где H_0 будем интерпретировать как гамильтониан невзаимодействующих подсистем, а V – как малое взаимодействие между ними. В этом случае явные выражения для НСО (1а), (1б) можно разложить в ряд по V до членов нужного порядка. При непосредственном разложении этих выражений возникают трудности, обусловленные быстрым усложнением структуры членов разложения с возрастанием их порядка, поэтому удобно перейти от явных выражений (1а), (1б) к эквивалентным им интегральным уравнениям. Решение этих уравнений итерациями по V дает, по-видимому, наиболее удобную форму теории возмущений для НСО. Аналогичная ситуация имеет место и в квантовой теории рассеяния.

Явное формальное выражение для волновой функции рассеяния Гелл-Манна и Гольдбергера /5/, в которое входит эволюция с полным гамильтонианом H, удобно заменить интегральным уравнением Липманна-Швингера /5,6/, в которое входит эволюция с невозмущенным гамильтонианом H_0. Уравнения (1а) (1б) соответствуют уравнениям Гелл-Манна-Гольдбергера, мы же хотим получить для нашей задачи уравнения, аналогичные уравнениям Липманна-Швингера для задачи рассеяния.

2. Интегральные уравнения для неравновесных статистических операторов

Рассмотрим уравнения, которым удовлетворяют НСО (1а), (1б). Вычисляя полную производную по времени от $\ln\rho(t,0)$ (1а) и $\rho(t,0)$ (1б), получим /4/

$$\frac{\partial \ln\rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\ln\rho(t,0), H] = -\epsilon(\ln\rho(t,0) - \ln\rho_\ell(t,0)), \tag{8а}$$

$$\frac{\partial \rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t,0), H] = -\epsilon(\rho(t,0) - \rho_\ell(t,0)), \tag{8б}$$

т.е. уравнения Лиувилля с источниками, исчезающими в пределе $\epsilon \to 0$. Эти источники нарушают симметрию уравнения Лиувилля относительно отражения времени и отбирают его запаздывающие решения, удовлетворяющие граничному условию $\rho(-\infty, 0) = \rho_\ell(-\infty, 0)$. Уравнение Лиувилля с бесконечно малым источником (8а) (или (8б)) можно принять за исходный пункт для построения неравновесного оператора, как это сделано в работе /4/. (Такая постановка задачи есть применение идеи о "квазисредних" /7/ в неравновесной статистической механике, бесконечно малые источники в уравнении Лиувилля (8) определяют необратимый характер изменения величин $F_n(t)$ и $\langle P_n\rangle^t$ во времени). Формальное интегрирование уравнений (8а) и (8б) приводит к НСО (1а) и (1б).

Преобразуем уравнение (8б) в эквивалентное ему интегральное уравнение. Вычитая из правой и левой части уравнения (8б) выражение

$$\frac{\partial \rho_\ell(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t,0), H_0], \tag{9}$$

приведем его к виду

$$\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho(t,0) + \frac{1}{i\hbar}[\delta\rho(t,0), H_0] + \epsilon\,\delta\rho(t,0) =$$
$$= -\left\{\frac{\partial \rho_\ell(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t,0), H_0] + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t,0), V]\right\}, \tag{10}$$

где

$$\delta\rho(t,0) = \rho(t,0) - \rho_\ell(t,0) .$$

Вводя операторы эволюции со свободным гамильтонианом H_0

$$U_t^0 = \exp\left\{\frac{tH_0}{i\hbar}\right\} , \tag{11}$$

представим левую часть уравнения (10) в виде полной производной по времени

$$\frac{d}{dt} e^{\epsilon t} \delta\rho(t,t) = -U_t^{0+} e^{\epsilon t} \left\{ \frac{\partial\rho_\ell(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t,0), H_0] + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t,0), V] \right\} U_t^0 , \tag{12}$$

где

$$\delta\rho(t,t) = U_t^{0+}\delta\rho(t,0) U_t^0 . \tag{13}$$

Интегрируя (12), получим

$$\delta\rho(t,t) = -\int_{-\infty}^{t} dt' e^{\epsilon(t'-t)} U_{t'}^{0+} \left\{ \frac{\partial\rho_\ell(t',0)}{\partial t'} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t',0), H_0] + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t',0), V] \right\} U_{t'}^0 , \tag{14}$$

(полагаем $\lim\limits_{t\to-\infty} e^{\epsilon t}\delta\rho(t,t) = 0$), или

$$\rho(t,0) =$$
$$= \rho_\ell(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} \left\{ \frac{\partial\rho_\ell(t+t',0)}{\partial t'} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t+t',0), H_0] + \frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t',0), V] \right\} U_{t'}^0 . \tag{15}$$

Это и есть искомое интегральное уравнение для НСО (1б). Подобно тому, как уравнение (1б) аналогично уравнению Гелл-Манна-Гольдбергера теории рассеяния, так уравнение (15) аналогично уравнению Липмана-Швингера. Если взаимодействие V не входит явно в выражения для операторов P_n , что мы будем предполагать ниже, в уравнении (15) первые два члена под знаком интеграла зависят от V лишь неявно, через параметры $F_n(t)$. Поэтому можно считать, что эти члены описывают термические возмущения. Третий член под знаком интеграла в (15) зависит от V явно, и можно считать, что он описывает механические возмущения. Действительно, в случае когда все $F_n(t)$ равны своим термически равновесным значениям, а возмущение V имеет характер взаимодействия с некоторым полем внешних сил, учет третьего члена под знаком интеграла в формуле (15) приводит к обычным выражениям для реакции системы на механические возмущения. В то же время первые два члена под знаком интеграла в случае малых отклонений величин $F_n(t)$ от равновесных значений дают обычные формулы линейного отклика системы на возмущения термического типа.

Уравнение (8а) легко преобразовать таким же способом, как и (8б), в интегральное уравнение

$$\ln \rho(t,0) = \ln \rho_\ell(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} \left\{ \frac{\partial \ln \rho_\ell(t+t',0)}{\partial t} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{i\hbar}[\ln \rho_\ell(t+t',0), H_0] + \frac{1}{i\hbar}[\ln \rho(t+t',0), V] \right\} U_{t'}^{0}, \tag{16}$$

аналогичное уравнению (15).

Далее мы будем рассматривать интегральное уравнение (15). Запишем его в виде

$$\rho(t,0) = \rho^0(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} \frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t',0), V] U_{t'}^{0}, \tag{17}$$

где

$$\rho^0(t,0) = \rho_\ell(t,0) - \int dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} \left\{ \frac{\partial \rho_\ell(t+t',0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t+t',0), H_0] \right\} U_{t'}^{0} =$$

$$= \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} \rho_\ell(t+t',0) U_{t'}^{0+} \tag{17a}$$

– статистический оператор, не содержащий явной зависимости от V. Согласно (17а), выражение $\rho^0(t,0)$ представляет собой квазиинвариантную часть оператора $\rho_\ell(t,0)$ по отношению к эволюции с гамильтонианом H_0. Следует отметить, однако, что $\rho^0(t,0)$ зависит от точных значений функций $F_n(t)$ (или $\langle P_n\rangle^t$), определяемых через обобщенные кинетические уравнения, включающие взаимодействие. Выражение (17а) можно представить в форме

$$\rho^0(t,0) = \rho_\ell(t,0) + \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 d\tau\, U_{t'}^{0+} e^{-\tau S(t+t',0)} \dot{S}(t+t',0)\, e^{(\tau-1)S(t+t',0)}\, U_{t'}^{0}, \tag{17б}$$

где

$$\dot{S}(t,0) = \frac{\partial S(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[S(t,0), H_0].$$

При получении (17б) мы использовали тождество Кубо

$$\frac{1}{i\hbar}[e^{-S(t,0)}, H_0] = -\int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t,0)} \frac{1}{i\hbar}[S(t,0), H_0]\, e^{(\tau-1)S(t,0)} \tag{18}$$

и правило дифференцирования операторной экспоненты

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-S(t,0)} = -\int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t,0)} \frac{\partial S(t,0)}{\partial t} e^{(\tau-1)S(t,0)}. \tag{19}$$

Делая замену

$$\begin{aligned} \rho(t,t) &= U_t^{0+} \rho(t,0)\, U_t^{0}, \\ \rho^0(t,t) &= U_t^{0+} \rho^0(t,0)\, U_t^{0}, \\ V(t) &= U_t^{0+} V\, U_t^{0}, \end{aligned} \tag{20}$$

преобразуем (17) к виду

$$\rho(t,t) = \rho^0(t,t) + \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \frac{1}{i\hbar}[V(t+t_1), \rho(t+t_1, t+t_1)]. \tag{21}$$

Итерируя интегральное уравнение (21), получим разложение НСО в виде ряда по степеням V :

$$\rho(t,0) = \rho^0(t,0) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^k} \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \int_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2} \ldots \int_{-\infty}^{0} dt_k\, e^{\epsilon t_k} \times$$

$$\times [V(t_1), [V(t_1+t_2), \ldots [V(t_1+t_2+\ldots+t_k), \rho^0(t+t_1+\ldots t_k, t_1+\ldots t_k)]\ldots]], \tag{22}$$

или в другой форме :

$$\rho(t,0) = \rho^0(t,0) + \sum_k \frac{1}{(i\hbar)^k} \int_{-\infty}^{0} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{-\infty}^{t_{k-1}} dt_k\, e^{\epsilon t_k} \times$$

$$\times [V(t_1), [V(t_2), \ldots [V(t_k), \rho^0(t+t_k, t_k)] \ldots]] . \tag{22a}$$

Это разложение очень похоже на разложение Кубо для статистического оператора в теории реакции статистических систем на механические возмущения /8/, но теперь ρ^0 не есть равновесный статистический оператор, а зависит от времени, и под интегралом в (22а) присутствует еще множитель $e^{\epsilon t_k}$.

Возможно построить и другое разложение для (16), если разлагать по степеням взаимодействия также и первые два члена под интегралом в уравнении (15). Удобно выбрать операторы P_n и H_0 так, чтобы эти члены обращались в нуль в отсутствие взаимодействия. Этого можно достичь, если, следуя /9,10/, выбрать H_0 и P_n так, чтобы

$$\frac{1}{i\hbar}[P_n, H_0] = \sum_m a_{nm} P_m , \tag{23}$$

где a_{nm} есть матрица с -чисел. Тогда оператор (9) приводится к виду

$$\frac{\partial \rho_\ell(t,0)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\rho_\ell(t,0),H_0]=-\int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t,0)}\Big\{\sum_{mn}(P_n-\langle P_n\rangle^t)\frac{\delta F_n(t)}{\delta\langle P_m\rangle^t}\dot{\langle P_m\rangle}^t+$$

$$+\sum_n \frac{1}{i\hbar}[P_n,H_0]F_n(t)\Big\}e^{(\tau-1)S(t,0)}=$$

$$=-\int_0^1 d\tau\, e^{-\tau S(t,0)}\Big\{\sum_{mn}(P_n-\langle P_n\rangle^t)\frac{\delta F_n(t)}{\delta\langle P_m\rangle^t}Sp\left(\frac{1}{i\hbar}[P_m,V]\rho(t,0)\right)+ \tag{24}$$

$$+\Big[\sum_{mn\ell}(P_n-\langle P_n\rangle^t)\frac{\delta F_n(t)}{\delta\langle P_m\rangle^t}a_{m\ell}\langle P_\ell\rangle^t+\sum_{mn}a_{nm}P_mF_n(t)\Big]\Big\}e^{(\tau-1)S(t,0)},$$

где использованы соотношения (18) и (19). Согласно /10,2/ выражение в квадратных скобках в правой части (24) равно нулю. Оставшиеся члены можно представить в виде

$$\sum_m \frac{\delta\rho_\ell(t,0)}{\delta\langle P_m'\rangle^t}Sp\left(\frac{1}{i\hbar}[P_m,V]\rho(t,0)\right). \tag{25}$$

Таким образом, интегральный член в уравнении (15) при выборе операторов P_n, удовлетворяющих свойству (23), не содержит членов нулевого порядка по V. Окончательно, интегральное уравнение (15) принимает вид

$$\rho(t,0)=\rho_\ell(t,0)-\int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'}U^{0+}_{t'}\Big\{\sum_m\frac{\delta\rho_\ell(t+t',0)}{\delta\langle P_m\rangle^{t+t'}}Sp\left(\frac{1}{i\hbar}[P_m,V]\rho(t+t',0)\right)+$$

$$+\frac{1}{i\hbar}[\rho(t+t',0),V]\Big\}U^0_{t'}, \tag{26}$$

где

$$\frac{\delta \rho_\ell(t,0)}{\delta\langle P_n\rangle^t} = -\int_0^t d\tau\, e^{-\tau S(t,0)} \sum_m (P_m - \langle P_m\rangle^t)\, \frac{\delta F_m(t)}{\delta\langle P_n\rangle^t}\, e^{\tau S(t,0)} \rho_\ell(t,0)\,, \tag{27}$$

матрица $\dfrac{\delta F_n(t)}{\delta\langle P_m\rangle^t} = \dfrac{\delta F_m(t)}{\delta\langle P_n\rangle^t}$ обратна матрице

$$-\frac{\delta\langle P_m\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \frac{\delta^2\Phi(t)}{\delta F_n(t)\,\delta F_m(t)} = (P_n, P_m)\,. \tag{28}$$

Интегральное уравнение (26) по форме близко к уравнению, полученному Пелетминским и Яценко /9/. Основное уравнение работы /9/ отличается от (26) заменой оператора $\dfrac{\delta \rho_\ell}{\delta\langle P_n\rangle^t}$ на оператор $\dfrac{\delta \rho}{\delta\langle P_n\rangle^t}$ и отсутствием эффектов памяти и, следовательно, частотной дисперсии кинетических коэффициентов.

Интегральное уравнение (26) можно представить в более компактной форме:

$$\rho(t,0) = \rho_\ell(t,0) - \int_{-\infty}^0 dt'\, e^{\epsilon t'}\, D_v(t+t', t')\, \rho(t+t', t')\,, \tag{29}$$

где $\rho(t+t', t') = U_{t'}^{0+} \rho(t+t',0)\, U_{t'}^0$, а оператор $D_v(t+t', t')$ определяется соотношениями

$$\begin{aligned} D_v(t+t', t') &= U_{t'}^{0+} D_v(t+t',0)\, U_{t'}^0\,, \\ D_v(t,0) &= i\,(1 - P(t,0))\, L_v(0,0)\,, \end{aligned} \tag{30}$$

$iL_v(0,0)$ – оператор Лиувилля:

$$iL_v(0,0)\, A = \frac{1}{i h}[A, V]\,, \tag{31}$$

A – произвольный оператор, а $P(t,0)$ – оператор "проектирования", введенный Робертсоном /11/, который при действии на оператор A дает

$$P(t,0)A = \sum_m \frac{\delta \rho_\ell(t,0)}{\delta \langle P_m\rangle^t} Sp\,(P_m A) \tag{32}$$

и обладает свойством

$$P(t,0)\,P(t',0)A = P(t,0)A .$$

Интегральное уравнение (29) позволяет записать НСО (1б) в виде ряда по степеням V :

$$\rho(t,0)=\rho_\ell(t,0)+\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\int_{-\infty}^{0}dt_2\,e^{\epsilon t_2}\ldots\int_{-\infty}^{0}dt_k\,e^{\epsilon t_k}D_v(t+t_1,t_1)\times$$

$$\times D_v(t+t_1+t_2,t_1+t_2)\ldots D_v(t+t_1+\ldots t_k,t_1+\ldots+t_k)\rho_\ell(t+t_1+\ldots+t_k,t_1+\ldots+t_k), \tag{34}$$

или в другой форме :

$$\rho(t,0)=\rho_\ell(t,0)+\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\int_{-\infty}^{0}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}dt_2\ldots\int_{-\infty}^{t_{k-1}}dt_k\,e^{\epsilon t_k}D(t+t_1,t_1)\times$$

$$\times D_v(t+t_2,t_2)\ldots D_v(t+t_k,t_k)\,\rho_\ell(t+t_k,t_k) . \tag{34a}$$

Аналогичным образом можно получить интегральное уравнение для логарифма НСО (1а):

$$\ln\rho(t,0)=\ln\rho_\ell(t,0)-\int_{-\infty}^{0}dt'\,e^{\epsilon t'}D_v'(t+t',t')\,\ln\rho(t+t',t') ,$$

$$D'_v(t,0) = i\,(1 - P'(t,0))\,L_v(0,0)\,,$$

$$P'(t,0)\,A = -\sum_m \frac{\delta S(t,0)}{\delta \langle P_m\rangle^t}\,Sp\,(P_m A)\,. \tag{35}$$

Разложение $\ln\rho(t,0)$ по степеням V можно получить из формулы (34а), если в ней заменить

$\rho(t,0)$ на $\ln\rho(t,0)$, $\rho_\ell(t,0)$ на $\ln\rho_\ell(t,0)$ и

D_v на D'_v.

§3. Обобщенные релаксационные уравнения

Разложения (34), (34а) позволяют вычислять потоки $\langle \dot{P}_n\rangle^t$, фигурирующие в обобщенных кинетических уравнениях (6) в любом приближении по V. В качестве иллюстрации мы рассмотрим случай малого отклонения системы от равновесия. Пусть равновесному состоянию системы соответствует статистический оператор ρ_0, причём $[H_0, \rho_0] = 0$. Отклонение статистических операторов $\rho(t,0)$ и $\rho_\ell(t,0)$ от ρ_0 обусловлено отклонением макроскопических параметров $F_m(t)$ и $\langle P_m\rangle^t$ от их равновесных значений F_m^0 и $\langle P_m\rangle_0$. В этой ситуации можно ограничиться рассмотрением обобщенных кинетических уравнений (16) в линейном приближении по отклонениям $\Delta F_n(t) = F_n(t) - F_n^0$, $\Delta\langle P_n\rangle^t = \langle P_n\rangle^t - \langle P_n\rangle_0$. При этом возникает линейная связь потоков с флюктуациями термодинамических переменных, а линеаризованные кинетические уравнения (16) принимают вид уравнений Блоха для $\Delta F_n(t)$ или $\Delta\langle P_n\rangle^t$.

Прежде всего отметим, что

$$\lim_{F(t)\to F^0} \rho(t,0) = \lim_{F(t)\to F^0} \rho_\ell(t,0) = \rho_0 , \tag{36}$$

тогда из (29) следует, что

$$\lim_{F(t)\to F^0} \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} D_v(t+t',t')\rho(t+t',t') = \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} D_v(0,0)\rho_0 U_{t'}^{0} = 0 , \tag{37}$$

где

$$D_v(0,0) = iL_v(0,0) - i\sum_n \left\{ \frac{\delta \rho_\ell(t,0)}{\delta \langle P_n \rangle^t} \right\}_{F(t)=F^0} Sp\,(P_n L_v(0,0) \ldots) \tag{38}$$

есть оператор $D_v(t,0)$ в нулевом приближении по $\Delta\langle P_n\rangle^t$. $D_v(0,0)$ не зависит от t, поскольку

$$\left\{ \frac{\delta \rho_\ell(t,0)}{\delta \langle P_n \rangle^t} \right\}_{F(t)=F^0} = -\int_0^1 d\tau \, \rho_0^\tau \sum_m (P_m - \langle P_m \rangle_0)\rho_0^{1-\tau} \left\{ \frac{\delta^2 S(t)}{\delta\langle P_m\rangle \delta\langle P_n\rangle} \right\}_{F(t)=F^0}. \tag{39}$$

Запишем интегральное уравнение (29) для отклонения

$$\Delta\rho(t,0) = \rho(t,0) - \rho_0 :$$

$$\Delta\rho(t,0) = \Delta\rho_\ell(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} (D_v(0,0) + \Delta D(t+t',0))(\Delta\rho(t+t',0) + \rho_0) U_{t'}^{0} =$$

$$= \Delta\rho_\ell(t,0) - \int_{-\infty}^{0} dt' e^{\epsilon t'} U_{t'}^{0+} (D_v(0,0)\Delta\rho(t+t',0) + \Delta D(t+t',0)\rho_0) U_{t'}^{0} . \tag{40}$$

Здесь

$$\Delta D(t,0) = -i\sum_{mn}\Delta\langle P_n\rangle^t\left\{\frac{\delta^2\rho_\ell(t,0)}{\delta\langle P_n\rangle^t\,\delta\langle P_m\rangle^t}\right\}_{F(t)=F^0}Sp(P_m L_v(0,0)\ldots) \qquad (41)$$

и мы пренебрегли нелинейными по $\Delta F_n(t)$, или $\Delta\langle P_n\rangle^t$, членами в (40).

Кинетические уравнения (6а) при $F_n(t) = F_n^0$ принимают, очевидно, вид

$$0 = \sum_m a_{nm}\langle P_m\rangle_0 + i\,Sp\,(L_v(0,0)\,P_n\,,\rho_0) =$$

$$= \sum_m a_{nm}\langle P_m\rangle_0 - i\,Sp\,(P_n\,L_v(0,0)\,\rho_0)\,. \qquad (42)$$

Кроме того,

$$\sum_m a_{nm}\langle P_m\rangle_0 = \frac{1}{i\hbar}Sp\,\{[P_n\,H_0]\rho_0\} = 0\,. \qquad (43)$$

Поэтому

$$Sp\,(P_n\,L_v(0,0)\,\rho_0) = 0\,. \qquad (44)$$

Отсюда следует, что член $\Delta D(t+t', 0)\,\rho_0$ в уравнении (40) тождественно обращается в нуль.

Тогда ряд теории возмущений для $\Delta\rho(t,0)$ упрощается:

$$\Delta\rho(t,0) = \Delta\rho_\ell(t,0) + \sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\ldots\int_{-\infty}^{0}dt_k\,e^{\epsilon t_k}\,D_v(0,t_1)\ldots D_v(0,t_1+\ldots+t_k)\times$$

$$\times \Delta \rho_\ell (t + t_1 + \ldots + t_k , t_1 + \ldots + t_k) =$$

$$= \Delta \rho_\ell (t,0) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_{-\infty}^{0} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{-\infty}^{t_{k-1}} dt_k \, e^{\epsilon t_k} D_v(0,t_1) \, D_v(0, t_2) \ldots \quad (45)$$

$$\ldots D_v (0, t_k) \; \Delta \rho_\ell \; (t + t_k , t_k) .$$

Учитывая то, что

$$\Delta\rho_\ell (t,0) = \sum_n \Delta < P_n >^t \left(\frac{\delta \rho_\ell (t,0)}{\delta < P_n >^t} \right)_{F(t)=F^0} = \sum_n \Delta F_n(t) \left(\frac{\delta \rho_\ell (t,0)}{\delta F_n (t)} \right)_{F(t)=F^0} \quad (46)$$

из (45) можно найти линейные по $\Delta < P_n >^t$ или $\Delta F_n (t)$ отклонения НСО от равновесного значения ρ_0 с любой точностью по V. Потоки $< \dot{P}_n >^t$ связаны теперь с отклонениями термодинамических сил $\Delta F_n (t)$ линейными соотношениями с запаздыванием:

$$i < L_v (0,0) P_n >_\omega = \sum_m L_{nm}(\omega) \, \Delta F_m (\omega) , \quad (47)$$

$$L_{nm}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (-i) \int_{-\infty}^{0} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{-\infty}^{t_{k-1}} dt_k \, e^{t_k(\epsilon+i\omega)} \, Sp\{P_n L_v(0,0) \, D_v(0,t_1) \ldots$$

$$\times D_v(0, t_k)\, U_t^{0+} \left(\frac{\delta \rho_\ell(t,0)}{\delta F_m(t)} \right)_{F(t)=F^0} U^0_{t_k} \Big\} =$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (+i) \int_{-\infty}^{0} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{-\infty}^{t_{k-1}} dt_k\, e^{t_k(\epsilon+i\omega)} (P_n L_v(0,0)\, D_v(0,t_1) \ldots D_v(0,t_k); P_m(t_k))_0, \tag{48}$$

где скобки $(A\,;\,B\,)_0$ означают квантовые корреляционные функции

$$(A; B)_0 = \int_0^1 d\tau\ Sp\,(A\,,\ \rho_0^{\tau}\ (B - \langle B\rangle_0)\, \rho_0^{1-\tau}\ )\ , \tag{49}$$

индексы ω означают фурье-образы по времени, например,

$$\Delta F_n(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\ \Delta F_n(t)\ e^{-i\omega t}\ .$$

Далее,

$$\Delta F_n(\omega) = \sum_m \left(\frac{\delta^2 S_0(t)}{\delta \langle P_n\rangle^t\, \delta \langle P_m\rangle^t} \right)_{\langle P\rangle^t = \langle P\rangle_0} \Delta \langle P_m\rangle_\omega\ . \tag{50}$$

Соотношения (47)-(50) позволяют записать обобщенные кинетические уравнения (6а) в форме уравнений Блоха с запаздыванием:

$$i\omega\,\Delta \langle P_n\rangle_\omega = \sum a_{nm} \Delta \langle P_m\rangle_\omega - \sum_m T^{-1}_{nm}(\omega)\, \Delta \langle P_m\rangle_\omega\ , \tag{51}$$

где $T^{-1}_{nm}(\omega)$ - спектральная плотность матрицы обратных времен релаксации для отклонений $\Delta \langle P_n\rangle_\omega$, имеющая вид

$$T^{-1}_{nm}(\omega) = -\sum_{n'} L_{nn'}(\omega) \left(\frac{\delta^2 S(t)}{\delta \langle P_{n'}\rangle^t\, \delta \langle P_m\rangle^t} \right)_{\langle P\rangle^t = \langle P\rangle_0}\ , \tag{52}$$

где матрица $\dfrac{\delta^2 S(t)}{\delta \langle P_n\rangle^t\ \delta \langle P_m\rangle^t}$ обратна матрице (28).

Литература

1. Д.Н. Зубарев. ДАН, 140, 92 (1961); 162, 532, 794 (1965); 164, 65, (1965).
2. Д.Н. Зубарев и В.П. Калашников. ТМФ, 1, 137 (1969); Physica, 46, no. 1 (1970).
3. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. ТМФ, 3, 1 (1970).
4. Д.Н. Зубарев. ТМФ, 3, №2 (1970).
5. M. Gell-Mann, M.L. Goldberger .Phys.Rev., 91, 398 (1953).
6. B.A. Lippmann, J. Schwinger. Phys.Rev., 79, 469 (1950).
7. Н.Н. Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ Д-788, Дубна, 1961; Physica, Suppl. 26, 1 (1960).
8. R. Kubo. J.Phys.Soc.Japan., 12, 570 (1957).
9. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327 (1967).
10. Л.А. Покровский. ДАН, 183, 806 (1968).
11. B. Robertson. Phys.Rev., 144, 151 (1966); 160, 175 (1967).

Рукопись поступила в издательский отдел

15 июня 1970 года.