ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р - 2868

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

А.В. Шелест

ОБ ЭВОЛЮЦИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ТЕРМОСТАТОМ

1966

Р - 2868

А.В. Шелест

ОБ ЭВОЛЮЦИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩЕЙ С ТЕРМОСТАТОМ

Одним из основных принципов статистической механики является положение о том, что в системе, связанной с термостатом, устанавливается статистическое равновесие.

При этом термостат Σ представляется как система с практически бесконечным числом степеней свободы, тогда как под исследуемой системой S следует понимать динамическую систему с фиксированным конечным числом степенной свободы. Связь между системой S и термостатом Σ осуществляется наличием некоторого достаточно слабого взаимодействия $H_{S\Sigma}$.

Однако ввиду принципиальных трудностей интеграции микроскопических уравнений механики для динамической системы с неаддитивным гамильтонианом указанный принцип трудно проиллюстрировать даже каким-нибудь простым примером.

Процесс установления статистического равновесия впервые был проиллюстрирован Боголюбовым /1/ на примере, где в качестве системы S был выбран классический осциллятор. Исходя из уравнений классической механики, автор этой работы показал, что плотность вероятности ρ_S, имевшая в начальный момент времени заданное значение, стремится к равновесному значению вследствие малого взаимодействия с ансамблем бесконечно большого числа таких гармонических осцилляторов.

Заметим, что известное кинетическое уравнение

$$i\frac{dU_t}{dt} = [H, U_t] \quad (1)$$

определяет лишь обратимую эволюцию квантовой плотности U_t. В отличие от него Боголюбовым были получены /2/ приближенные уравнения (во втором порядке по теории возмущения), которые описывают необратимую эволюцию матрицы плотности на основе обратимых уравнений механики. Поскольку решение этих уравнений в общем виде является чрезвычайно сложным, интересно найти решение их на каком-нибудь частном примере.

В данной работе мы выбрали в качестве такого примера модель с квадратичным гамильтонианом, которая допускает точное решение этих приближенных уравнений. Преимущество этой модели состоит еще и в том, что она позволяет найти ρ_t^s точными методами без использования указанных приближенных уравнений. Это позволит судить о степени точности этих приближенных уравнений общего вида.

Рассмотрим систему ($S + \Sigma$), полный гамильтониан которой имеет вид:

$$H = H_S + H_\Sigma + H_{S\Sigma} , \tag{2}$$

где H_S и H_Σ –свободные гамильтонианы S и Σ степени соответсвенно, $H_{S\Sigma}$ – гамильтониан взаимодействия, которой предполагается малым. Используем метод Н. Боголюбова для получения приближенного уравнения, описывающего изменение оператора плотности ρ_t^s, исходя из начальных условий без предварительного вычисления оператора квантовой плотности U_t всей системы ($S + \Sigma$). Введем такое определение оператора плотности ρ_t^s :

$$\rho_t^s = \mathop{Sp}_{(\Sigma)} U_t . \tag{3}$$

Предполагается, что исследуемая динамическая система S в данный момент времени может находиться в ряде возможных состояний по определенному вероятностному закону.

Предположим, что в начальный момент времени, который условимся считать $t = 0$, в результате соответствующих измерений найдено, что термостат Σ находится в состоянии статистического равновесия с плотностью вероятности гиббсовского канонического ансамбля, а состояние малой системы S точно фиксировано. В начальный момент времени оператор плотности имеет вид:

$$U_0 = \rho_S^0 \cdot \rho_\Sigma^0 , \tag{4}$$

$$\rho_\Sigma^0 = k\, e^{-\frac{H_\Sigma}{\theta}} , \tag{5}$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \rho_\Sigma^0 = 1 . \tag{6}$$

Возьмем $\mathop{Sp}_{(\Sigma)}$ от выражения (1) и, используя (2-3), получим

$$i\frac{d\rho_S(t)}{dt} = \mathop{Sp}_{(\Sigma)} [(H_S + H_\Sigma + H_{S\Sigma}) ; U_t] , \tag{7}$$

$$\operatorname*{Sp}_{(\Sigma)} [H_S , U_t] = [H_S \cdot \rho_t^S] ,$$

(7)

$$\operatorname*{Sp}_{(\Sigma)} [H_\Sigma , U_t] = 0$$

(вследствие перестановочности H_Σ под знаком $\operatorname*{Sp}_{(\Sigma)}$). Тогда получим:

$$i \frac{d\rho_t^S}{dt} = [H_S , \rho_t^S] + \operatorname*{Sp}_{(\Sigma)} [H_{S\Sigma}, U_t] . \qquad (8)$$

Введем обозначения:

$$\operatorname*{Sp}_{(\Sigma)} (H_{S\Sigma} \cdot \rho_\Sigma) = \bar{H}_{S\Sigma} ,$$

(9)

$$H_{S\Sigma} - \bar{H}_{S\Sigma} = \Gamma , \qquad (10)$$

$$H_S + \bar{H}_{S\Sigma} = H_S^{\bullet} . \qquad (11)$$

Тогда (8) перепишется:

$$i \frac{d\rho_t^S}{dt} = [H_S^{\bullet} ; \rho_t^S] + \operatorname*{Sp}_{(\Sigma)} [\Gamma , U_t] . \qquad (12)$$

Подчеркиваем, что мы рассматриваем только малые возбуждения, поэтому при $t \neq 0$ приближенно можно считать

$$U_t = \rho_t^S \rho_\Sigma + U_t' , \qquad (13)$$

где U_t' –малая величина, определяющая наличие связи между S – и Σ –системами. Подставляя (13) в (12), получим:

$$i\frac{d\rho_s(t)}{dt} = [H_s^\bullet , \rho_t] + \underset{(\Sigma)}{Sp}[\Gamma , U_t'] , \qquad (14)$$

так как, если принять во внимание (9) и (10),

$$\underset{(\Sigma)}{Sp}(\rho_\Sigma \Gamma) = \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\rho_\Sigma(H_{s\Sigma} - \overline{H}_{s\Sigma})\} = \overline{H}_{s\Sigma} - \overline{H}_{s\Sigma} = 0 . \qquad (15)$$

Займемся теперь нахождением величины U_t'. Для этого продифференцируем уравнение (13) по времени и подставим в полученное выражение уравнения (1) и (8):

$$[H ; U_t] = i\frac{d\rho_t}{dt} \cdot \rho_\Sigma + i\frac{dU_t'}{dt}$$

($\dot{\rho}_\Sigma$ не зависит от t , так как система Σ и после взаимодействия остается в состоянии статистического равновесия, т.е. мы пренебрегаем влиянием системы S на термостат:

$$\rho_\Sigma(t) = \rho_\Sigma(0) ,$$

$$i\frac{dU_t'}{dt} = [H_s + H_\Sigma ; U_t] + [H_{s\Sigma} ; U_t] - [H_s^\bullet , \rho_t^s]\rho_\Sigma - \qquad (16)$$

$$- \underset{(\Sigma)}{Sp}[\Gamma , U_t]\rho_\Sigma = [H_s^\bullet + H_\Sigma ; U_t] + [\Gamma ; U_t] - [H_s^\bullet ; \rho_t^s]\rho_\Sigma .$$

Уравнение (16) можно решить приближенно, пренебрегая членами, содержащими в себе произведения двух малых величин Γ и U_t'. Тогда, учитывая (13), получим:

$$i\frac{dU_t}{dt} = [H_0 ; U_t'] + [\Gamma ; \rho_t \rho_\Sigma] \qquad (17)$$

$$[H_s^\bullet + H_\Sigma ; \rho_t^s \rho_\Sigma] - Sp[\Gamma ; \rho_s \rho_\Sigma]\rho_\Sigma - [H_s^\bullet ; \rho_t^s]\rho_\Sigma =$$

$$= [H_s^\bullet ; \rho_t^s \rho_\Sigma] - [H_s^\bullet ; \rho_t^s]\rho_\Sigma + [H_\Sigma ; \rho_t^s \rho_\Sigma] = 0 .$$

Здесь $H_0 = H_s^\bullet + H_\Sigma$. (18)

Решение уравнения (17) с учетом начального условия

$$U_0^{(1)} = 0 \tag{19}$$

имеет вид:

$$U_t^{(1)} = -i\int_0^t e^{-iH_0(t-r)}[\Gamma;\rho_t\,\rho_\Sigma]e^{iH_0(t-r)}\,dr\,. \tag{20}$$

Подставляя (20) в (14) и раскрывая квантовые скобки, получим окончательно следующее уравнение для ρ_t^s :

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \frac{\overset{\bullet}{H}_s\rho_t - \rho_t\overset{\bullet}{H}_s}{i} - \underset{(\Sigma)}{Sp}\,[\Gamma;\int_0^t e^{-iH_0(t-r)}[\Gamma;\rho_r\,\rho_\Sigma]e^{iH_0(t-r)}\,dr] =$$

$$= \frac{\overset{\bullet}{H}_s\rho_t - \rho_t\overset{\bullet}{H}_s}{i} - \int_0^t\{\underset{(\Sigma)}{Sp}\,[\Gamma;e^{-iH_0(t-r)}(\Gamma\rho_t\,\rho_\Sigma - \rho_t\,\rho_\Sigma\,\Gamma)e^{iH_0(t-r)}\,dr]\}\,;$$

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \frac{\overset{\bullet}{H}_s\rho_t - \rho_t\overset{\bullet}{H}_s}{i} -$$

$$-\int_0^t\{\underset{(\Sigma)}{Sp}\,\Gamma\cdot\Gamma(t-r)\rho_\Sigma\}e^{-i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\rho_r\,e^{i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\,dr + \tag{21}$$

$$+\int_0^t\underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma e^{-i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\rho_r\,e^{i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\rho_\Sigma\Gamma(t-r)\}dr + \int_0^t\underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma(t-r)\rho_\Sigma e^{-i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\rho_r\,e^{i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\Gamma\}\,dr -$$

$$-\int_0^t e^{-\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\rho_r\,e^{i\overset{\bullet}{H}_s(t-r)}\{\underset{(\Sigma)}{Sp}\,[\Gamma(t-r)\Gamma\rho_\Sigma\}dr\,.$$

Здесь введено обозначение

$$\Gamma(t-r) = e^{-iH_0(t-r)}\,\Gamma e^{iH_0(t-r)}\,.$$

Уравнение (21) можно записать в матричной форме, в которой $\overset{\bullet}{H}_s$ диагонально.

$$\frac{d\rho_t(a,a')}{dt} = \frac{H_S^\circ(a) - H_S^\circ(a')}{i}\,\rho_t(a,a') -$$

$$- \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{a'a''}\Gamma_{a''a'''}(z)\rho_\Sigma\}\, e^{-iH_S^\circ(a''')z}\,\rho_\tau(a''',a')\, e^{iH_S^\circ(a')z}\, d\tau +$$

$$+ \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{aa''}\, e^{-iH_S^\circ(a'')z}\,\rho_\tau(a''a''')\, e^{iH_S^\circ(a''')z}\,\rho_\Sigma\Gamma_{a''',a'}(z)\}\, d\tau +$$

$$+ \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{aa''}(z)\rho_\Sigma\, e^{-iH_S^\circ(a'')z}\,\rho_\tau(a'',a''')\, e^{iH_S^\circ(a''')z}\,\Gamma_{a''',a'}\}\, d\tau -$$

$$- \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\, e^{-iH_S^\circ(a)z}\,\rho_\tau(a,a'')\, e^{iH_S^\circ(a'')z}\,\underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{a''a'''}(z)\Gamma_{a''',a'}\rho_\Sigma\}\, d\tau =$$

$$= \frac{H_S^\circ(a) - H_S^\circ(a')}{i}\,\rho_\tau(a,a') -$$

$$- \sum_{(a'',a''')} \int_0^t Sp\{\Gamma_{aa'}\Gamma_{a''a'''}(z)\rho_\Sigma\}\cdot\rho_\tau(a''',a')\cdot e^{-i\{H_S^\circ(a'')-H_S^\circ(a')\}z}\, d\tau +$$

$$+ \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{aa''}\rho_\Sigma\Gamma_{a''',a'}(z)\}\rho_\tau(a'',a''')\, e^{-i\{H_S^\circ(a')-H_S^\circ(a'')\}z}\, d\tau +$$

$$+ \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{aa''}(z)\rho_\Sigma\Gamma_{a''',a'}\}\rho_\tau(a'',a''')\, e^{-i\{H_S^\circ(a'')-H_S^\circ(a'')\}z}\, d\tau -$$

$$- \sum_{(a'',a''')} \int_0^t \underset{(\Sigma)}{Sp}\{\Gamma_{a''a'''}(z)\Gamma_{a''',a'}\rho_\Sigma\}\rho_\tau(a,a'')\, e^{-i\{H_S^\circ(a)-H_S^\circ(a')\}z}\, d\tau .$$

Потребуем теперь, чтобы в этом уравнении функции вида

$$R_{aa''a''a'''}(z) = \underset{(\Sigma)}{Sp}\,\{\Gamma_{aa''}(z)\Gamma_{a''a'''}\rho_{\Sigma}\} \to 0 \tag{22}$$

стремились к нулю при $z = (t-r) \to \infty$. Тогда в выражениях типа

$$\int_0^t R_{aa''a'a'''}(z)\rho_r(a''', a')\,e^{iA(a'''a')z}\, dr \tag{23}$$

нижний предел можно отнести на $(-\infty)$; $(t-r) = z$; $dr = -dz$;

$$(r \to -\infty) \quad \text{при} \quad z \to \infty ;$$

$$z = 0 \quad \text{при} \quad r = t ;$$

Кроме того, переходя от переменной интегрирования dr к dz, получим:

$$\int_{-\infty}^{t} R_{aa''a''a'''}(z)\rho_r(a''',a')\,e^{iA(a'''a')z}\,dr = -\int_{\infty}^{0} R_{aa''a''a'''}(z)\rho_{t-z}\,e^{iA(a'''a')z}\,dz =$$

$$= \int_0^{\infty} R_{aa''a'a'''}(z)\rho_{t-z}\,e^{iA(a'''a')z}\,dz.$$

Оценим полученное выражение при верхнем и нижнем пределе. При $z = 0$ экспонента $e^{iA(a'''a')z} = 1$. При $z \to \infty$ $R_{aa''a''a'''}(z) \to 0$, поэтому при этом пределе подинтегральную функцию можно видоизменить каким угодно образом, а именно: здесь мы можем положить $e^{iA(a''',a')z} = 1$, а ρ_{t-z} заменить на ρ_t. Таким образом, при предположении (22) выражения типа (23) можно заменить выражениями типа

$$\int_0^{\infty} R_{aa''a'''}(z)\rho_t(a''',a')\,dz. \tag{24}$$

Итак, уравнение в матричной форме перепишется следующим образом:

$$\frac{d\rho_t(aa')}{dt} = \frac{H_S^{e}(a) - H_S^{e}(a')}{i}\rho_t(a,a') -$$

$$-\sum_{(a'',a''')}\int_0^{\infty}\underset{(\Sigma)}{Sp}\,\{\Gamma_{aa''}\Gamma_{a''a'''}(z)\rho_{\Sigma}\}dz \cdot \rho_t(a''',a') -$$

$$-\sum_{(a'',a''')}\int_0^{\infty}\underset{(\Sigma)}{Sp}\,\{\Gamma_{a''a'''}(z)\Gamma_{a'''a'}\rho_{\Sigma}\}dz\,\rho_t(aa'') +$$

$$+\sum_{(a'',a''')}\int_0^\infty \mathrm{Sp}_{(\Sigma)}\{\Gamma_{aa''}\rho_\Sigma\Gamma_{a'''a'}(z)\}dz\cdot\rho_t(a'',a''')+$$

$$+\sum_{(a'',a''')}\int_0^\infty \mathrm{Sp}_{(\Sigma)}\{\Gamma_{aa''}(z)\rho_\Sigma\Gamma_{a'''a'}\}dz\,\rho_t(a'',a''') . \tag{25}$$

В результате мы получили уравнение (25) для нахождения матрицы плотности вероятности ρ малой системы S, взаимодействующей с термостатом. Это уравнение в операторной форме запишется так:

$$\frac{d\rho_t^S}{dt}=\frac{H_S^*\rho_t-\rho_t H_S^*}{i}-\int_0^\infty \mathrm{Sp}_{(\Sigma)}\{\Gamma\Gamma(z)\rho_\Sigma\}dz\cdot\rho_t- \tag{26}$$

$$-\rho_t\int_0^\infty \mathrm{Sp}_{(\Sigma)}\{\Gamma(z)\Gamma\rho_\Sigma\}dz+\int_0^\infty \mathrm{Sp}_{(\Sigma)}\{\Gamma\rho_t\,\rho_\Sigma\Gamma(z)\}dz+\int_0^\infty \mathrm{Sp}\,\{\Gamma(z)\rho_\Sigma\,\rho_t\,\Gamma\}dz.$$

2. Решение полученного уравнения в общем виде чрезвычайно сложно. Поэтому попробуем решить это уравнение для простой модели с квадратичным гамилотонианом.

Пусть малая система S представляет собой ферми-осциллятор с гамильтонианом

$$H_S=\omega a^+a , \tag{2.1}$$

а система Σ –набор бесконечно большого числа ферми-осцилляторов

$$H_\Sigma=\sum_k \omega(k)a_k^+a_k . \tag{2.2}$$

Гамильтониан взаимодействия

$$U_{S\Sigma}=\epsilon\int U(r)\{a\psi^+(r)+\psi(r)a^+\}dr ,$$

где $U(12)$ –некоторая действительная аналитическая функция, которая обеспечивает сходимость; ϵ –величина малого порядка;

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k a_k e^{i(\vec{k},\vec{r})}\;;\quad \int U(r)e^{i\vec{k}\vec{r}}d\vec{r}=A(|k|); \tag{2.3}$$

$$H_{S\Sigma}=\frac{\epsilon}{\sqrt{V}}\sum_k\{A_k(aa_k^+ +a_k a^+)\} .$$

Здесь V – объем всей системы, который в рассматриваемом случае считаем бесконечно большим, k –квазидискретный спектр, который в пределе $V\to\infty$ переходит в непрерывный.

Покажем, что при таких общих допущениях и при достаточно длительном времени взаимодействия в системе будет устанавливаться статистическое равновесие с температурой термостата T, при достаточно малом ϵ. Именно, хотя начальное состояние системы S точно известно, но вследствие взаимодействия с Σ переменные, характеризующие динамическое состояние S –системы в момент $t \neq 0$, будут уже случайными величинами, закон распределения которых можно представить с помщью некоторого гиббсовского ансамбля с плотностью $\rho_t^s = \rho(t, a(t), a^+(t))$. Оказывается, что при достаточно малом ϵ эта плотность распределения на достаточно длительном интервале времени аппроксимируется функцией $\rho_0^s = \rho_0(t, H_s(0))$, которая при увеличении t приближается к гиббсовой функции канонического распределения $e^{-\frac{H_s}{\theta}}$ для системы S.

Рассмотрим теперь уравнение (1-23) и произведем в нем некоторые упрощения. Легко показать, что

$$\overline{H_{s\Sigma}} = \underset{(\Sigma)}{Sp}(H_{s\Sigma}\rho_\Sigma) = \frac{\epsilon}{\sqrt{V}} \underset{(\Sigma)}{Sp}\{A_k(aa_k^+ + a_k a^+)\rho_\Sigma = 0, \tag{2.4}$$

так как $\underset{(\Sigma)}{Sp}\, a_k \rho_\Sigma = 0$ и $\underset{(\Sigma)}{Sp}\, a_k^+ \rho_\Sigma = 0$. Тогда

$$\Gamma = H_{s\Sigma} = \frac{\epsilon}{\sqrt{V}} \sum_{(k)} A(|k|)\{a_k a^+ + aa_k^+\}. \tag{2.5}$$

Вычислим $\Gamma(s) = e^{-iH_0 s}\Gamma e^{iH_0 s} =$

$$= \frac{\epsilon}{\sqrt{V}} e^{-i(\omega a^+ a + \sum_k \omega a_k^+ a_k)} \sum_{(k')} A(k')\{a_{k'} a^+ + aa_{k'}^+\} e^{-i(\omega a^+ a + \sum_{k''} \omega a_{k''}^+ a_{k''}}.$$

Разложим $\exp$ в ряд, тогда, используя коммутационные соотиошения для фермионов

$$[a_k^+ a_{k'}]_+ = \delta_{kk'},$$

получим

$$[a_k^+ a_{k'}^+] = [a_k a_{k'}]_+ = 0,$$

$$\Gamma(s) = \frac{\epsilon}{\sqrt{V}} \sum_{|k|} A(|k|)\{a_k a^+ e^{i(\omega_k - \omega)s} + aa_k^+ e^{-i(\omega_k - \omega)s}. \tag{2.6}$$

Для вычисления величин, стоящих под интегралами в уравнении (1-26), воспользуемся соотношениями

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} a_k a_{k'} \rho_\Sigma = 0, \quad \mathop{Sp}_{(\Sigma)} a_k a_{k'} \rho_\Sigma = 0,$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \overset{+}{a}_k a_{k'} \rho_\Sigma = \delta_{kk'} \cdot \bar{n}_k , \qquad \bar{n}_k = \frac{e^{-\frac{\omega_k}{\theta}}}{e^{-\frac{\omega_k}{\theta}} + 1},$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} a_k a_{k'} \rho_\Sigma = \sigma_{kk'} \cdot (1-\bar{n}_k),$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} a_k \rho_\Sigma \overset{+}{a}_k = \mathop{Sp}_{(\Sigma)} \rho_\Sigma \overset{+}{a}_k a_k = \bar{n}_k , \quad 1-\bar{n}_k = \frac{1}{1+e^{-\omega_k/\theta}},$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \overset{+}{a}_k \rho_\Sigma a_k = \mathop{Sp}_{(\Sigma)} \rho_\Sigma a_k \overset{+}{a}_k = 1-\bar{n}_k .$$

Итак:

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \{\Gamma\Gamma(z)\rho_\Sigma\} = \frac{\epsilon^2}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)\{a\overset{+}{a}\bar{n}_k e^{i(\omega_k-\omega)z} + \overset{+}{a} a(1-\bar{n}_k)e^{-i(\omega_k-\omega)z}\},$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \{\Gamma(z)\Gamma\rho_\Sigma\} = \frac{\epsilon^2}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)\{\overset{+}{a} a(1-\bar{n}_k)e^{i(\omega_k-\omega)z} + a\overset{+}{a}\bar{n}_k e^{-i(\omega_k-\omega)z}\}, \tag{2.7}$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \{\Gamma\rho_t^S\rho_\Sigma\Gamma(t)\} = \frac{\epsilon^2}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)\{\overset{+}{a}\rho_t^S a\bar{n}_k e^{-i(\omega_k-\omega)z} + a\rho_r^S \overset{+}{a}(1-\bar{n}_k)e^{i(\omega_k-\omega)z},$$

$$\mathop{Sp}_{(\Sigma)} \{\Gamma(z)\rho_S(t)\rho_\Sigma\Gamma\} = \frac{\epsilon^2}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)\{\overset{+}{a}\rho_t^S a\bar{n}_k e^{i(\omega_k-\omega)z} + a\rho_S(t)\overset{+}{a}(1-\bar{n}_k)e^{-i(\omega_k-\omega)z}\}.$$

Введем новые обозначения и перейдем к непрерывному спектру:

$$F(z) = \frac{1}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)e^{i(\omega_k-\omega)z} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int A^2(|k|)e^{i(\omega_k-\omega)z}\,dk, \tag{2.8}$$

$$\Phi(z) = \frac{1}{V}\sum_{(k)} A^2(|k|)\,\bar{n}_k e^{i(\omega_k-\omega)z} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int A^2(|k|)e^{i(\omega_k-\omega)z}\,\bar{n}_k\,d\vec{k}.$$

В новых обозначениях уравнения (2.7) перепишутся следующим образом:

$$\underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}}\{\Gamma\Gamma(z)\rho_\Sigma\} = \epsilon^2 aa^+\Phi(z)\{F(-z) - \Phi(-z)\},$$

$$\underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}}\{\Gamma(z)\Gamma\rho_\Sigma\} = \epsilon^2 a^+a\{F(z)-\Phi(z)\} + \epsilon^2 aa^+\Phi(-z), \qquad (2.9)$$

$$\underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}}\{\Gamma\rho_S\,\rho_\Sigma\,\Gamma(z)\} = \epsilon^2 a^+\rho_S a\Phi(-z) + \epsilon^2 a\rho_S a^+\{F(z)-\Phi(z)\},$$

$$\underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}}\{\Gamma(z)\rho_S\,\rho_\Sigma\Gamma\} = \epsilon^2 a^+\rho_S a\Phi(z) + \epsilon^2 a\rho_S a^+\{F(-z)-\Phi(-z)\}.$$

Представим теперь матрицу плотности в виде:

$$\rho_t = \rho_t(0,0)aa^+ + \rho_t(1,1)a^+a + \rho_t(0,1)a + \rho_t(1,0)a^+. \qquad (2.10)$$

Здесь

$$a = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}; \qquad a^+ = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}. \qquad \rho_S(t) = \begin{vmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{vmatrix}.$$

$$a^+a = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}; \qquad aa^+ = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

Подставим (2.9) в (2.8), тогда (1.26) перепишется следующим образом:

$$\frac{d\rho_t}{dt} = \frac{d\rho_t(0,0)}{dt}aa^+ + \frac{d\rho_t(1,1)}{dt}a^+a + \frac{d\rho_t(0,1)}{dt}a + \frac{d\rho_t(1,0)}{dt}a^+ =$$

$$= i\omega\rho_t(0,1) - i\omega\rho_t(1,0) -$$

$$-\epsilon^2 aa^+\int_0^\infty \Phi(z)\rho_t(0,0)\,dz - \epsilon^2 a^+a\int_0^\infty\{F(-z)-\Phi(-z)\}\rho_t(1,1)\,dz - \qquad (2.11)$$

$$-\epsilon^2 a\int_0^\infty \Phi(z)\rho_t(0,1)\,dz - \epsilon^2 a^+\int_0^\infty\{F(-z)-\Phi(-z)\}\rho_t(1,0)\,dz -$$

$$-\epsilon^2 aa^+\rho_t(0,0)\int_0^\infty \Phi(-z)\,dz - \epsilon^2 a^+a\,\rho_t(1,1)\int_0^\infty\{F(z)-\Phi(-z)\}dz -$$

$$- \epsilon^2 a \rho_t(0,1) \int_0^\infty \{F(z) - \Phi(z)\} dz - \epsilon^2 a^+ \int \Phi(-z) dz \cdot \rho_t(1,0) +$$

$$+ \epsilon^2 a^+ a \rho_t(0,0) \int_0^\infty \Phi(-z) dz + \epsilon^2 a a^+ \int_0^\infty \{F(z) - \Phi(z)\} dz \cdot \rho_t(1,1) +$$

$$+ \epsilon^2 a^+ a \rho_t(0,0) \int_0^\infty \Phi(z) dz + \epsilon^2 a a^+ \int_0^\infty \{F(-z) - \Phi(-z)\} dz \rho_t(1,1).$$

Итак, для матричных элементов уравнения будут следующие:

$$\frac{\partial \rho_t(0,0)}{dt} = - \epsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z) dz \cdot \rho_t(0,0) + \epsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} \{F(z) - \Phi(z)\} dz \cdot \rho_t(0,0),$$

$$\frac{\partial \rho_t(0,1)}{\partial t} = \{i\omega - \epsilon^2 \int_0^\infty F(z) dz\} \rho_t(0,1),$$

$$\frac{\partial \rho_t(1,0)}{\partial t} = \{-i\omega - \epsilon^2 \int_0^\infty F(-z) dz\} \rho_t(1,0), \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial \rho_t(1,1)}{\partial t} = -\epsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} \{F(z) - \Phi(z)\} dz \cdot \rho_t(1,1) + \epsilon^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z) dz \cdot \rho_t(0,0).$$

Займемся теперь вычислением величин $F(z)$ и $\Phi(z)$.

$$F(z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A^2(|k|) e^{i(\omega_k - \omega) z} d\vec{k} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\nu \int d\vec{k} A^2(|k|) \delta(\omega_k - \nu) e^{i(\nu - \omega) z}.$$

Положим

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int A^2(|k|) \delta(\omega_k - \nu) d\vec{k} = I(\nu). \tag{2.13}$$

Тогда

$$F(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty I(\nu)\, e^{i(\nu-\omega)z}\, d\nu \quad ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z)\, dz = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int A^2(|k|)\, e^{i(\omega_k - \omega)z}\, \bar{n}_k\, d\vec{k} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}\, A^2(|k|)\, \frac{e^{-\frac{\omega_k}{\theta}}}{1 + e^{-\omega_k/\theta}} \cdot \frac{1}{2\pi} \int e^{i(\omega_k - \omega)z}\, dz =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k}\, A^2(|k|) \frac{e^{-\frac{\omega_k}{\theta}}}{1 + e^{-\omega_k/\theta}}\, \delta(\omega_k - \omega) = I(\omega) \frac{e^{-\frac{\omega}{\theta}}}{1 + e^{-\omega/\theta}} \quad , \tag{2.14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z)\, dz = I(\omega)\, \frac{e^{-\frac{\omega}{\theta}}}{1 + e^{-\omega/\theta}} \quad ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{F(z) - \Phi(z)\}\, dz = I(\omega)\, \frac{1}{1 + e^{-\frac{\omega}{\theta}}} \,, \tag{2.15}$$

$$\int_0^\infty F(z)\, dz = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty d\nu\, I(\nu) \int_0^\infty e^{i[\nu - \omega + i\epsilon]z}\, dz =$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_0^\infty \frac{I(\nu)}{\nu - \omega + i\epsilon}\, d\nu = \frac{i}{2\pi} \int_0^\infty \frac{I(\nu)}{\nu - \omega}\, d\nu + \tfrac{1}{2} I(\omega) \,, \tag{2.16}$$

$$\int_0^\infty F(-z)\,dz = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty d\nu\, I(\nu)\int_0^\infty e^{i(\omega-\nu+i\epsilon)z}\,dz =$$

$$= \frac{i}{2\pi}\int_0^\infty \frac{I(\nu)}{\omega-\nu}\,d\nu + \tfrac{1}{2} I(\omega).$$

Здесь обозначим

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \frac{I(\nu)}{\nu-\omega}\,d\nu = J(\omega)\,.$$

Тогда (2.12) будут иметь вид:

$$\frac{\partial\rho_t(0,1)}{\partial t} = \{i(\omega-\epsilon^2 J(\omega)) - \frac{\epsilon^2}{2}\, I(\omega)\}\rho_t(0,1)\,,$$

$$\frac{\partial\rho_t(1,0)}{\partial t} = \{-i(\omega-\epsilon^2 J(\omega)) - \frac{\epsilon^2}{2} I(\omega)\}\rho_t(1,0).$$

Итак, $\rho_t(0,1)$ и $\rho_t(1,0)$ затухают как $e^{-\frac{\epsilon^2}{2}I(\omega)t}$ при $t\to\infty$.

$$\frac{\partial\rho_t(0,0)}{\partial t} = -\frac{\epsilon^2 I(\omega)}{1+e^{-\frac{\omega}{\theta}}}\{e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0,0)-\rho_t(1,1)\}\,,$$

$$\frac{\partial\rho_t(1,1)}{\partial t} = -\frac{\epsilon^2 I(\omega)}{1+e^{-\frac{\omega}{\theta}}}\{\rho_t(1,1)-e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0)\}\,,$$

$$\frac{\partial(\rho_t(1,1)-e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0,0))}{\partial t} = -\frac{\epsilon^2 I(\omega)}{1+e^{-\frac{\omega}{\theta}}}(1+e^{-\frac{\omega}{\theta}})\{\rho_t(1,1)-e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0,0)\}\,,$$

$$\rho_t(1,1)-e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0,0) = e^{-\epsilon^2 I(\omega)t}\,,$$

$$\lim_{t\to\infty}\{\rho_t(1,1)-e^{-\frac{\omega}{\theta}}\rho_t(0,0)\}\to 0\,.$$

Используем соотношение $\underset{(s)}{\mathrm{Sp}}\, \rho_t^s = \rho_t(1,1) - e^{-\frac{\omega}{\theta}} \rho_t(0,0)$.

Окончательно получим

$$\rho_t(0,0) \underset{t\to\infty}{\to} \frac{1}{1+e^{-\frac{\omega}{\theta}}}, \quad \rho_t(1,1) \underset{t\to\infty}{\to} \frac{e^{-\frac{\omega}{\theta}}}{1+e^{-\frac{\omega}{\theta}}}.$$

Таким образом, для нашей модели мы получили решения приближенного кинетического уравнения (1-26), которые описывают процесс приближения к равновесию системы, взаимодействующей с термостатом. Преимуществом этой модели является то, что она допускает точное решение без использования приближенных уравнений. Ниже мы приведем это решение и полученный результат сравним с тем, что вытекает из решения приближенных уравнений.

3. Итак, рассмотрим ту же модель с теми же начальными условиями:

$$H(t) = \omega b^+ b + \sum_k \omega_k a_k^+ a_k + \sum_k A_k (b\, a_k^+ + a_k b^+),$$

$$U(0) = \rho_0^s \cdot \rho_\Sigma .$$

Матрицу плотности ρ_t^s представляем в виде

$$\rho_S(t) = b b^+ \rho_t^s(0,0) + b^+ b \rho_t^s(1,1) + b\rho_t^s(1,0) + b^+ \rho_t^s(0,1), \tag{3.1}$$

$$\rho_t^s = \underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}} \{U(t)\}. \tag{3.2}$$

Рассмотрим матричные элементы уравнения (3.2):

$$\rho_t^s(1,0) = \langle 1 | \underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}} \{U(t)\} | 0 \rangle = \langle 0 | b(0) | 1 \rangle \langle 1 | \underset{(\Sigma)}{\mathrm{Sp}} \{U(t)\} | 0 \rangle =$$

$$= \underset{(s)}{\mathrm{Sp}} \{ b(0) \underset{\Sigma}{\mathrm{Sp}} \{U(t)\}\} = \underset{(s\Sigma)}{\mathrm{Sp}} \{ b(0) U(t)\} .$$

$$b = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{vmatrix} ; \qquad b^+ = \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} ;$$

$$\rho^{s}_{t}(0,1) = <0|\underset{(\Sigma)}{Sp}\, U(t)|1> = <1|b^{+}(0)|0><0|\underset{(\Sigma)}{Sp}\, U(t)|1> = \underset{(S\Sigma)}{Sp}\{b^{+}(0)U(t)\}.$$

$$\rho^{s}_{t}(1,1) = \underset{(s\Sigma)}{Sp}\{b^{+}(0)b(0)\cdot U(t)\}. \tag{3.3}$$

$$\rho^{s}_{t}(0,0) = \underset{(s\Sigma)}{Sp}\{b(0)b^{+}(0)\cdot U(t)\}.$$

Воспользуемся свойством операторов

$$Sp\{A(0)U(t)\} = Sp\{A(t)\cdot U(0)\}.$$

Тогда уравнения (3.3) запишутся так:

$$\rho^{s}_{10}(t) = \underset{(s\Sigma)}{Sp}\{b(t)\cdot U(0)\} = <b(t)>,$$

$$\rho^{s}_{01}(t) = \underset{(S\Sigma)}{Sp}\{b^{+}(t)\cdot U(0)\} = <b^{+}(t)>. \tag{3.4}$$

$$\rho^{s}_{11}(t) = \underset{(s\Sigma)}{Sp}\{b^{+}(t)b(t)\cdot U(0)\} = <b^{+}(t)b(t)>,$$

$$\rho^{s}_{00}(t) = \underset{(s\Sigma)}{Sp}\{b(t)b^{+}(t)\cdot U(0)\} = <b(t)b^{+}(t)>.$$

Здесь символ < > означает квантовомеханическое среднее. Операторы $b(t)$ и $b^{+}(t)$ находим из уравнения движения

$$i\frac{dA(t)}{dt}[A(t)\cdot H(t)],$$

$$i\frac{db(t)}{dt} = [b(t);\{b\ ;\{\omega b^{+}b + \sum_{k}\omega_{k}a^{+}_{k}a_{k} + \frac{\epsilon}{\sqrt{V}}\sum_{k}A_{k}(ba^{+}_{k} + b^{+}a_{k})\}]. \tag{3.5}$$

Здесь операторы $a^{(t)}_{k}$, $b(t)$ не являются полностью независимыми, так как в момент $t \neq 0$ системы S и Σ взаимодействуют. Поэтому при перестановках этих операторов необходимо учитывать коммутационные соотношения для фермионов

$$[b(t)a(t)]_{+} = 0,$$

$$b(t)a^{+}(t) + a^{+}(t)b(t) = 0,$$

$$[\overset{+}{b}(t)\,b(t)] = 1\,.$$

Тогда получим:

$$i\frac{d\,b(t)}{dt} = \omega\, b(t) + \frac{\epsilon}{\sqrt{V}}\sum_k A_k a_k(t)\,. \tag{3.6}$$

Найдем выражение для $a_k(t)$:

$$i\frac{da_k(t)}{dt} = [a_k(t)\cdot\{\omega\, b^{+}(t)\,b(t) + \sum_{k'}\omega_{k'}a^{+}_{k'}(t)a_{k'}(t) + \tag{3.7}$$

$$+ \frac{\epsilon}{\sqrt{V}}\sum_{k'}A_{k'}(b(t)a^{+}_{k'}(t) + b^{+}a_{k'}(t)) = \omega_k a_k(t) - \frac{\epsilon}{\sqrt{V}}\,b(t)A_k\,.$$

Из (3.7) найдем $a_k(t)$ и, подставив его значение в (3.6), получим:

$$i\frac{db(t)}{dt} = \omega\, b(t) + \frac{\epsilon^2}{i}\int_0^t k(t-\tau)\,b(\tau)\,d\tau + f(t)\,. \tag{3.8}$$

Здесь приняты обозначения:

$$k(t-\tau) = k(z) = \frac{1}{V}\sum_k |A_k|^2 e^{-i\omega_k z} = \frac{1}{(2\pi)^3}\iiint |A(|k|)|^2 e^{-i\omega_k z}\,d\vec{k}\,,$$

$$f(t) = \frac{\epsilon}{(2\pi)^{3/2}}\int d\vec{k}\,A_k\,a_k(0)\,e^{-i\omega_k t}\,. \tag{3.9}$$

Возьмем квантовомеханическое среднее от (3.8):

$$i\frac{d\langle b(t)\rangle}{dt} = \omega\,\langle b(t)\rangle + \frac{\epsilon^2}{i}\int_0^t k(t-\tau)\langle b(\tau)\rangle\,d\tau + \langle f(t)\rangle\,,$$

но $\langle f(t)\rangle = 0$, так как $\langle a_k(0)\rangle = \underset{(\Sigma)}{Sp}\langle a_k(0)\,\rho_\Sigma\rangle = 0$. Тогда, учитывая (3.4), получим

$$i\frac{d\rho^{s}_{10}(t)}{dt} = \omega\rho^{s}_{10}(t) + \frac{\epsilon^{2}}{i}\int_0^t k(t-\tau)\,\rho^{s}_{10}(\tau)\,d\tau . \tag{3.10}$$

Произведем преобразование Лапласа уравнения (3.10):

$$f(p) = \int_0^\infty f(t)\,e^{-pt}\,dt ,$$

$$\int_0^\infty i\frac{d\rho^{s}_{10}(t)}{dt}\,e^{-pt}\,dt = ip\rho^{s}_{10}(t) - i\rho^{s}_{10}(0) .$$

Положим, что при $z = (t-\tau) \to \infty$, $k(z) \to 0$. Тогда:

$$\int_0^\infty dt\cdot e^{-pt}\int_0^t k(t-\tau)\,\rho^{s}_{10}(\tau)\,d\tau =$$

$$= \int_0^\infty dt\,e^{-pt}\int_{-\infty}^{t} k(z)\,\rho^{s}_{10}(\tau)\,d\tau =$$

$$= -\int_0^\infty dt\,e^{-pt}\int_\infty^0 k(z)\,\rho^{s}_{10}(\tau)\,dz = \int_0^\infty \rho^{s}_{10}(t)\,e^{-pt}\int_0^\infty e^{pz}\,k(z)\,e^{-pz}\,dz =$$

$$= \int_0^\infty k(z)\,e^{-pz}\cdot\int_0^\infty \rho_{10}(\tau)\,e^{-pt}\,e^{pz}\,dt\,dz =$$

$$= \int_0^\infty k(z)\,e^{-pz}\,dz\int_0^\infty \rho^{s}_{10}(\tau)\,e^{-p\tau}\,d\tau = k(p)\cdot\rho^{s}_{10}(p) .$$

Таким образом, преобразование Лапласа уравнения (3.10) запишется следующим образом:

$$\rho^{s}_{10}(p) = \frac{\rho^{s}_{10}(0)}{p + i\omega + \epsilon^2 k(p)} .$$

Найдем $k(p)$:

$$k(p) = \int_0^\infty k(z) e^{-pz} dz = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dz \int |A_k|^2 e^{-i\omega_k z} d\vec{k} e^{-pz} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dz \int d\vec{k} |A_k|^2 e^{i(ip-\omega_k)z} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dz \int d\vec{k} |A_k|^2 .$$

$$\cdot \int_0^\infty d\nu \delta(\nu - \omega_k) e^{i(ip+\nu)z} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} |A_k|^2 \int_0^\infty d\nu \cdot \delta(\nu - \omega_k) \int_0^\infty e^{i(ip+\nu)z} dz =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} |A_k|^2 \int_0^\infty d\nu \delta(\nu - \omega_k) \int_0^\infty e^{i(-E+\nu+i\epsilon)z} dz = \tag{3.11}$$

$$= \frac{i}{2\pi} \int_0^\infty \frac{I(\nu) d\nu}{-E + \nu + i\epsilon'} = \frac{1}{i2\pi} \int_0^\infty \frac{I(\nu)}{\nu - E} d\nu + \tfrac{1}{2} \int_0^\infty I(\nu) \delta(\nu - E) d\nu =$$

$$= -iJ(E) + \tfrac{1}{2} I(E) .$$

Здесь

$$E = \mathrm{Re}(ip) \qquad (ip = -E + i\epsilon') ;$$

$$J(E) > 0 ; \quad I(E) > 0 .$$

Итак,

$$\rho^{s}_{10}(p) = \frac{\rho^{s}_{10}(0)}{p + i\omega + (\epsilon^2/2) I(E) - i\epsilon^2 J(E)} . \tag{3.12}$$

Произведем обратное преобразование Лапласа:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} f(p) e^{pt} dp ,$$

$$\rho_{10}^{s}(t) = \frac{1}{2\pi i}\,\rho_{10}^{s}(0)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{pt}}{p + i\omega + (\epsilon^2/2)I(E) - i\epsilon^2 J(E)}\,dp\ .$$

Вычисляем этот интеграл по вычетам.

Положим $p = iE + \epsilon'$,

$$\epsilon' + \epsilon^2 J(E) = \delta\ ,$$

$$\omega - \frac{\epsilon^2}{2}\,I(E) = \omega_\epsilon\ .$$

Получим:

$$\rho_{10}^{S}(t) = \rho_{10}^{S}(0)\,e^{-i\omega_\epsilon t}\,e^{-\delta t}\ .$$

Таким образом, при $t \to \infty$ $(t \gg \frac{1}{\epsilon^2})$, $\rho_{10}^{S}(t)$ затухает как $e^{-\frac{\epsilon^2}{2}I(\omega)t}$. Этот результат совпадает с тем, который был получен в разделе 2.

Для нахождения диагональных элементов матрицы плотности воспользуемся уравнениями для запаздывающих и опережающих функций Грина.

$$G_{\substack{ret\\adv}}(t-t',t') = \pm i\theta[\pm(t-t')]\langle[b(t);b^{+}(t')]\rangle = \langle\langle b(t);b^{+}(t')\rangle\rangle_{\substack{r\\a}}\ . \qquad (4.1)$$

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle b(t)b^{+}(t')\rangle\rangle = \mp\delta[+(t-t')]\langle[b(t);b^{+}(t')]\rangle = \langle\langle\frac{db(t)}{dt};b^{+}(t')\rangle\rangle\ . \qquad (4.2)$$

Подставим в это уравнение значение $\frac{db(t)}{dt}$, найденное из уравнения движения

$$i\frac{db(t)}{dt} = \omega b(t) + \frac{\epsilon^2}{i}\int_0^t k(t-\tau)b(\tau)d\tau + f(t)\ , \qquad (4.3)$$

$$i\frac{d}{dt}G_{\substack{r\\a}}(t-t',t') = \mp\delta(\pm(t-t')) + \omega G_{\substack{r\\a}}(t-t',t') + \frac{\epsilon^2}{i}\int k(t-\tau)\cdot$$
$$\cdot G_{\substack{r\\a}}(\tau-t')d\tau + \langle\langle f(t)b^{+}(t')\rangle\rangle_{\substack{r\\a}} \qquad (4.4)$$

Рассмотрим фурье-образ полученного уравнения (4.4):

$$G_{\substack{r\\a}}(t-t',t') = \int_{-\infty}^{\infty}\tilde{G}_{\substack{r\\a}}(E,t')e^{-i\tilde{E}(t-t')}d\tilde{E}\ ;$$

$$i\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} G_{\substack{r\\a}}(E,t')e^{-i\tilde{E}(t-t')}d\tilde{E} = \pm\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\tilde{E}(t-t')}dE +$$

$$+\ \omega\int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{E}G_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t')e^{-i\tilde{E}(t-t')} + \frac{\epsilon^2}{i}\int_0^t k(t-\tau)\int_{-\infty}^{\infty} G_{\substack{r\\a}}(E,t')e^{-i\tilde{E}(\tau-t')}dEd\tau\ +$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t')e^{-i\tilde{E}(t-t')}d\tilde{E}\ .$$

(4.5)

Здесь принято обозначение

$$\psi_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\langle f(t)b^{+}(t')\rangle\rangle_{\substack{r\\a}}e^{i\tilde{E}(t-t')}d(t-t'). \tag{4.6}$$

Из уравнения (4.5) получим:

$$\tilde{E}G_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t') = \frac{1}{2\pi} + \omega G_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t') + \frac{\epsilon^2}{i}G_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t')k_{\ell}(-i\tilde{E}) + \Psi_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t')\ , \tag{4.7}$$

$$G_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t') = \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi_{\substack{r\\a}}(\tilde{E},t')}{\tilde{E} - \omega + i\epsilon^2 k_{\ell}(-i\tilde{E})}\ , \tag{4.8}$$

где:

$$\tilde{E} = E \pm i\epsilon'\ ,$$

$$k_{\ell}(-i\tilde{E}) = -J(E) \pm \tfrac{i}{2}I(E).$$

Здесь E – действительно. Величина $k_{\ell}(-iE)$ находится таким же образом, как и выше (3.11). Тогда (3.8) перепишется следующим образом:

$$G(E+i\epsilon',t') = \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E+i\epsilon',t')}{E-\omega_{\epsilon} + i(\delta+\epsilon')} = \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E+i\epsilon',t')}{E-\omega_{\epsilon} + i\delta_{\epsilon}}\ ,$$

$$G(E-i\epsilon',t') = \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E-i\epsilon',t')}{E-\omega_{\epsilon} - i(\delta+\epsilon')} = \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E-i\epsilon',t')}{E-\omega_{\epsilon} - i\delta_{\epsilon}}\ ,$$

где введены обозначения:

$$\omega_\epsilon = \omega - \epsilon^2 J(E)\,, \qquad \delta_\epsilon = \frac{\epsilon^2}{2} I(E) + \epsilon' = \delta + \epsilon' .$$

Воспользуемся известной формулой, увыражающей среднее от произведения операторов через функции Грина:

$$\rho_{00}(t,t') = \langle b(t) b^+(t') \rangle = \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{G(E+i\epsilon',t') - G(E-i\epsilon',t')}{1+e^{-\beta E}}\, e^{-iE(t-t')}\, dE = \tag{4.11}$$

$$= \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iE(t-t')}}{1+e^{-\beta E}} \left\{ \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E+i\epsilon',t')}{E-\omega_\epsilon + i\delta_\epsilon} - \frac{\frac{1}{2\pi} + \psi(E-i\epsilon',t')}{E-\omega_\epsilon - i\delta_\epsilon} \right\} dE .$$

Вычислим $\psi(E + i\epsilon',t')$ и $\psi(E - i\epsilon',t')$.

$$\psi(E \pm i\epsilon',t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \langle\langle f(t), b^+(t') \rangle\rangle_{\substack{r\\a}}\, e^{i(E \pm i\epsilon')(t-t')}\, d(t-t'). \tag{4.12}$$

Здесь

$$f(t) = \frac{\epsilon}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{k}\, A_k a_k(0)\, e^{-i\omega_k t}\,, \tag{4.13}$$

$$b^+(t') = \frac{1}{2\pi i}\int_{r_0-i\infty}^{r_0+i\infty} \frac{b^+(0) + if^+(p)}{p - i\omega + \epsilon^2 k^+(p)}\, e^{pt'}\, dp\,, \tag{4.14}$$

$$f^+(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt''} \cdot \frac{\epsilon}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{k}\, A_k a_k^+(0)\, e^{i\omega_k t''}\, dt'' . \tag{4.15}$$

Учтем, что

$$\langle [a_k(0), b^+(0)] \rangle = 0\,, \qquad \langle [a_k(0), a_k^+(0)] \rangle = 1\,,$$

$$k^+(p) = -i\epsilon J(E'') + \tfrac{1}{2} I(E'')\,, \quad p = -iE'' + r_0 .$$

Тогда

$$\psi(E \pm i\epsilon', t') = \mp \frac{\epsilon^2}{(2\pi)^6} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t')\, e^{i(E+i\epsilon')(t-t')} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\pm i(t-t')r}}{r - i\epsilon''}\, dr .$$

$$\cdot \int_{-\infty}^{\infty} dE'' e^{(-iE''+r_0)t'} \cdot \frac{\int dk\,|A_k|^2 e^{-i\omega_k t} \cdot \int_0^{\infty} e^{i(\omega+E''+ir_0)t''} dt''}{E''+\omega''+i\nu'}$$

Здесь принято обозначение:

$$\omega'' = \omega + \epsilon^2 J(E'')\,,\quad \delta' = \frac{\epsilon^2}{2} I(E'') + r_0 = \delta'' + r_0\,.$$

Интегрируем (4.16) по вычетам (вычет в точке $E'' = -\omega'' - i\delta'' - ir_0$).
Получаем:

$$\psi(E \pm i\epsilon', t') = \mp i \frac{\epsilon^2}{(2\pi)^6} \int \frac{d\vec{k}\,|A_k|^2 e^{i\omega'' t'}\, e^{-i\omega_k t}}{\omega_k - \omega'' - i(\delta'' - \epsilon)} \cdot$$
$$\cdot e^{-\delta'' t'} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dr}{r - i\epsilon''} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{i(E \pm r \pm i\epsilon')z}\,. \tag{4.17}$$

$\delta'' > \epsilon$ (так как ϵ –бесконечно малая, а δ''–малая, но конечная) обозначим $\delta'' - \epsilon = \delta^0$.

Так как $t - t' = z$, то $e^{-i\omega_k t} = e^{-i\omega_k z} \cdot e^{-i\omega_k t'}$.

Таким образом,

$$\psi(E \pm i\epsilon', t') = \mp \frac{\epsilon^2}{(2\pi)^6} \int \frac{d\vec{k}\,|A_k|^2 e^{-i\omega_k t'}}{\omega_k - \omega'' - i\delta^0} \cdot e^{-\delta'' t'} \cdot e^{i\omega'' t'}\,.$$
$$\cdot 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dr}{r - i\epsilon''} \delta(E - \omega_k \pm r \pm i\epsilon') = \mp i \frac{\epsilon^2}{(2\pi)^5} \cdot e^{-\delta'' t'} \cdot e^{i\omega'' t'} \cdot \tag{4.18}$$
$$\cdot \int_0^{\infty} \frac{d\vec{k}\,|A_k|\, e^{-i\omega_k t'}}{(\omega_k - \omega'' - i\delta^0)(\pm\omega_k \mp E - i\epsilon^0)}\,.$$

Интеграл в (4.18) является сходящимся. Следовательно, при $t' \to \infty$ $\psi(E \pm i\epsilon', t')$ затухает как $e^{-\delta'' t''}$. Таким образом, в формуле (4.11) мы можем пренебречь величиной $\psi(\bar{E}, t')$. Тогда получим:

$$\rho\ (t,t') = \langle b(t)\, b\ (t')\rangle = \frac{1}{i} \int \frac{e^{-iE(t-t')}}{1 + e^{-\beta E}} \cdot \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{E - \omega_\epsilon + i\delta_\epsilon} - \frac{1}{E - \omega_\epsilon - i\delta_\epsilon} \right\} dE =$$
$$= \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iE(t-t')}}{1 + e^{-\beta E}} \cdot i\delta(E - \omega_\epsilon)\, dE\,. \tag{4.19}$$

Положим $t \to t'$, тогда получим:

$$\rho_{00}(t) \cong \frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}}\,, \tag{4.20}$$

$$\rho_{11}(t) \cong \frac{e^{-\beta\omega}}{1+e^{-\beta\omega}} .$$

Таким образом, в результате слабого взаимодействия малой системы с термостатом, который находится в состоянии термодинамического равновесия, матрица плотности малой системы стремится к своему равновесному значению при достаточно длительном времени взаимодействия. Этот результат совпадает с тем, который был получен для этой же модели путем использования приближенных уравнений общего вида.

В заключение автор выражает глубокую благодарность академику Н.Н. Боголюбову за постановку задачи и постоянное внимание к работе, а также профессору А.Н.Тавхелидзе и И. Квасникову за полезные обсуждения.

Литература

1. Н.Н. Боголюбов. О некоторых статистических методах в математической физике, Киев, АН УССР, 1945.
2. Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Крылов. Записки кафедры математической физики. т. IV, Киев, Институт строительной механики, 1939.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 августа 1966 г.