3-91

18/V-70

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 5022

Д.Н. Зубарев, А.Л. Куземский, К. Валясек

УРАВНЕНИЕ
ТИПА ШРЕДИНГЕРА
С ЗАТУХАНИЕМ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ
В ТЕРМОСТАТЕ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1970

P4 - 5022

Д.Н. Зубарев, А.Л. Кузeмский, К. Валясек

УРАВНЕНИЕ ТИПА ШРЕДИНГЕРА С ЗАТУХАНИЕМ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ В ТЕРМОСТАТЕ

Направлено в журнал
"Теоретическая и математическая физика"

1. Введение

В настоящей работе рассматривается поведение малой динамической системы, взаимодействующей с термостатом, т.е. с системой с практически бесконечным числом степеней свободы. Примерами таких систем являются: атомная (или молекулярная) система, взаимодействующая с собственным электромагнитным полем как с термостатом; система ядерных спинов, взаимодействующих с решеткой, экситонная или электронная системы, взаимодействующие с фононным полем и т.п. Аналогичная задача рассматривалась в квантовой теории поля /1/, когда получали уравнение Дирака с радиационными поправками для неквантованной волновой функции из вторично квантованной.

Цель работы – получение уравнения типа Шредингера с затуханием для средних амплитуд вторично квантованного поля бозе- или ферми-частиц, слабо связанных с термостатом. Предполагаем, что рассматриваемая система частиц далека от равновесия с термостатом и, вообще говоря, не характеризуется температурой. При взаимодействии с термостатом такая система будет приобретать, в некотором смысле, черты статистической системы, сохраняя, однако, в основном механический характер. Основная идея решения состоит в исключении влияния термостата, которое после этого проявляется как эффект трения частиц в среде. Наличие трения будет приводить к диссипации и, таким образом, к необратимым процессам. Поэтому мы воспользуемся общим методом описания необратимых процессов с помощью построения неравновесного статистического оператора /2-4/.

Основная идея этого метода состоит в том, что если для описания неравновесного состояния системы достаточно набора средних значений некоторых операторов P_m или сопряженных им параметров $F_m(t)$, то можно найти такое частное решение уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\rho(t,0), H] = 0,$$

которое зависит от времени лишь через $F_m(t)$. Первый аргумент у неравновесного статистического оператора $\rho(t,0)$ указывает на эту неявную зависимость его от времени, а второй – через представление Гейзенберга.

Граничные условия к уравнению Лиувилля для статистического оператора $\rho(t,0)$ можно формулировать с помощью введения бесконечно малого источника, нарушающего симметрию отражения времени. Аналогичные граничные условия с помощью введения бесконечно малых источников, нарушающих симметрию отражения времени, используются в формальной теории рассеяния в форме Геллмана-Гольдбергера /5/. Введем бесконечно малый источник в уравнение Лиувилля для $\ln \rho(t,0)$ следующим образом: /4/:

$$\frac{\partial \ln \rho(t,0)}{\partial t} + \frac{1}{ih}[\ln \rho(t,0), H] = -\epsilon(\ln \rho(t,0) - \ln \rho_q(t,0)), \tag{1}$$

где

$$\rho_q(t,0) = \exp\{-\Phi - \sum_m F_m(t) P_m(0)\} \equiv \exp\{-S(t,0)\} - \tag{2}$$

– квазиравновесный статистический оператор, а

$$\Phi = \ln \mathrm{Sp} \exp \{ -\sum_m P_m F_m (t) \} . \qquad (3)$$

Оператор $S(t,0)$ можно назвать оператором энтропии, так как $S = \langle S(t,0) \rangle_q$ есть энтропия. Здесь $\langle \ldots \rangle_q = \mathrm{Sp}(\rho_q \ldots \ldots)$. Величина $\epsilon \to +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних.

Легко видеть, что источник в правой части уравнения (1) действительно нарушает симметрию уравнения Лиувилля относительно отражения времени и стремится к нулю при $\epsilon \to +0$. Интегрируя уравнение (1) в пределах от $-\infty$ до 0, получим неравновесный статистический оператор в виде

$$\rho(t,0) = \exp \{ \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 \, e^{\epsilon t_1} \ln \rho_q (t+t_1, t_1) \} \equiv \exp \{ -\widetilde{S(t,0)} \} . \qquad (4)$$

Волнистая черта сверху обозначает операцию взятия квазиинвариантной части относительно эволюции с полным гамильтонианом H. Среднее значение любой динамической переменной A равно

$$\langle A \rangle = \lim_{\epsilon \to +0} \mathrm{Sp} (A \rho (t,0)) , \qquad (5)$$

то есть фактически является квазисредним по терминологии Н.Н. Боголюбова [6,7].

2. Усредненные уравнения для амплитуд вторично квантованного поля

Рассмотрим поведение малой подсистемы с гамильтонианом H_1, взаимодействующей с термостатом, который описывается гамильтонианом

H_2. Гамильтониан полной системы имеет вид

$$H = H_1 + H_2 + V, \tag{6}$$

где V – гамильтониан взаимодействия.

Для простоты рассмотрим систему невзаимодействующих бозе- или ферми-частиц с гамильтонианом

$$H_1 = \sum_\alpha E_\alpha a^+_\alpha a_\alpha . \tag{7}$$

Гамильтониан взаимодействия возьмем в следующей форме:

$$V = \sum_{\alpha\beta} \phi_{\alpha\beta} a^+_\alpha a_\beta , \quad \phi^+_{\beta\alpha} = \phi_{\alpha\beta} , \tag{8}$$

где $\phi_{\alpha\beta}$ – операторы, действующие только на переменные среды, т.е. термостата, гамильтониан которого мы явно не выписываем.

В качестве операторов P_m, определяющих неравновесное состояние малой подсистемы, выберем операторы a_α, a^+_α и $n_\alpha = a^+_\alpha a_\alpha$. Термостат будем описывать его гамильтонианом H_2. Выбор только операторов n_α и H_2 привел бы к кинетическим уравнениям для системы в термостате /8/. Включение в набор операторов P_m, операторов a_α и a^+_α связано с тем, что мы интересуемся динамическим описанием системы.

Квазиравновесный статистический оператор (2) определяется из экстремума информационной энтропии

$$S = - Sp\,(\rho \ln \rho) \tag{9}$$

при дополнительных условиях, что при вариации фиксированы

$$\mathrm{Sp}\,(\rho\, a_\alpha) = \langle a_\alpha \rangle \; ; \; \mathrm{Sp}\,(\rho\, a_\alpha^+) = \langle a_\alpha^+ \rangle \; ; \; \mathrm{Sp}\,(\rho\, n_\alpha) = \langle n_\alpha \rangle \tag{10}$$

и сохраняется нормировка $\mathrm{Sp}\,\rho = 1$. Он имеет вид

$$\rho_q = \exp\{-\Phi - \sum_\alpha (f_\alpha(t)\, a_\alpha + f_\alpha^*(t)\, a_\alpha^+ + F_\alpha(t)\, n_\alpha) - \beta H_2\} \equiv \exp\{-S(t,0)\}\,, \tag{11}$$

где

$$\Phi = \ln \mathrm{Sp} \exp\{-\sum_\alpha (f_\alpha(t)\, a_\alpha + f_\alpha^*(t)\, a_\alpha^+ + F_\alpha(t)\, n_\alpha) - \beta H_2\}.$$

Здесь f_α, f_α^* и F_α – лагранжевы множители, определяемые из условий (10). Они являются параметрами, сопряженными с $\langle a_\alpha \rangle_q$, $\langle a_\alpha^+ \rangle_q$ и $\langle n_\alpha \rangle_q$:

$$\langle a_\alpha \rangle_q = -\frac{\delta \Phi}{\delta f_\alpha(t)}\,; \quad \langle n_\alpha \rangle_q = -\frac{\delta \Phi}{\delta F_\alpha(t)}\,;$$

$$f_\alpha(t) = \frac{\delta S}{\delta \langle a_\alpha \rangle_q}\,; \quad F_\alpha(t) = \frac{\delta S}{\delta \langle n_\alpha \rangle_q}\,. \tag{12}$$

Для дальнейшего удобно переписать квазиравновесный статистический оператор (11) в форме

$$\rho_q = \rho_1 \cdot \rho_2\,, \tag{13}$$

где

$$\rho_1 = Q_1^{-1} \exp\{-\sum_\alpha (f_\alpha(t)\, a_\alpha + f_\alpha^*(t)\, a_\alpha^+ + F_\alpha(t)\, n_\alpha)\}\,,$$

$$Q_1 = \mathrm{Sp} \exp\{-\sum_\alpha (f_\alpha(t)\, a_\alpha + f_\alpha^*(t)\, a_\alpha^+ + F_\alpha(t)\, n_\alpha\}\,, \tag{13a}$$

$$\rho_2 = Q_2^{-1} \exp\{-\beta H_2\}; \quad Q_2 = \mathrm{Sp}\,\exp\{-\beta H_2\}. \tag{13б}$$

Запишем теперь неравновесный статистический оператор (4) в явном виде:

$$\rho = \exp\{-\widetilde{S(t,0)}\}, \tag{14}$$

где

$$\widetilde{S(t,0)} = \tilde{\tilde{\Phi}} + \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \{ \sum_{\alpha} (f_\alpha(t+t_1) a_\alpha(t_1) + f^*_\alpha(t+t_1) a^+_\alpha(t_1) +$$

$$+ n_\alpha(t_1) F_\alpha(t+t_1)) + \beta H_2(t_1)\},$$

$\tilde{\tilde{\Phi}} = \epsilon \int_{-\infty}^{0} \Phi(t+t_1) e^{\epsilon t_1} dt_1$ и $\exp\{-\tilde{\tilde{\Phi}}\}$ – нормирующий множитель. Нормировка сохраняется после взятия квазиинвариантной части, если мы потребуем выполнения условий /2-4/

$$\langle a_\alpha \rangle_q = \langle a_\alpha \rangle, \quad \langle a^+_\alpha \rangle_q = \langle a^+_\alpha \rangle, \quad \langle n_\alpha \rangle_q = \langle n_\alpha \rangle. \tag{15}$$

Будем исходить из уравнений движения для операторов, усредненных с неравновесным статистическим оператором (14):

$$i h \frac{d \langle a_\alpha \rangle}{dt} = \langle [a_\alpha, H] \rangle = \langle [a_\alpha, H_1] \rangle + \langle [a_\alpha, V] \rangle, \tag{16}$$

$$i h \frac{d \langle n_\alpha \rangle}{dt} = \langle [n_\alpha, H] \rangle = \langle [n_\alpha, H_1] \rangle + \langle [n_\alpha, V] \rangle. \tag{17}$$

Уравнение для $\langle a^+_\alpha \rangle$ получается операцией сопряжения из (16). Используем неравновесный статистический оператор (14) для вычисления правых частей уравнений (16) и (17). Ограничиваясь вторым порядком по взаимодействию V, получим аналогично тому, как это было сделано в работе /8/, следующие уравнения:

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} \langle [[a_\alpha, V]V(t_1)]\rangle_q e^{\epsilon t_1} dt_1 , \qquad (18)$$

$$i\hbar \frac{d\langle n_\alpha\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} \langle [[n_\alpha, V]V(t_1)]\rangle_q e^{\epsilon t_1} dt_1 . \qquad (19)$$

Здесь $V(t_1)$ обозначает представление взаимодействия оператора V.

Раскрывая двойной коммутатор в уравнении (18), получим

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha\rangle + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \Big\{ \sum_{\alpha_1,\beta_1,\beta} (\langle \phi_{\alpha\beta} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta_1}(t_1)\rangle_q \langle a_\beta a^+_{\alpha_1} a_{\beta_1}\rangle_q -$$

$$- \langle \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta_1}(t_1)\phi_{\alpha\beta}\rangle_q \langle a^+_{\alpha_1} a_{\beta_1} a_\beta\rangle_q \Big\} , \qquad (20)$$

где введено обозначение

$$\tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha\beta}(t) = \phi_{\alpha\beta}(t)\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t} .$$

Преобразуем уравнение (20) к виду

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha\rangle + \frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1,\beta}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle \phi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q \langle a_\beta\rangle +$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1,\beta_1,\beta}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle [\phi_{\alpha\beta_1}, \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta_1}(t_1)]\rangle_q \langle a^+_{\alpha_1} a_{\beta_1} a_\beta\rangle_q . \qquad (20a)$$

Будем предполагать, что в (20а) можно ограничиться только линейными членами (ниже мы сформулируем условия, когда это можно сделать). Тогда получим

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha_1,\beta} \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \langle \phi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta \rangle . \quad (21)$$

Вид линейного уравнения (21) одинаков для бозе- и ферми-статистики. Введем спектральные интенсивности корреляционных функций среды по формулам

$$\langle \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1)\, \phi_{\alpha\alpha_1} \rangle_q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{\alpha_1\beta,\alpha\alpha_1}(\omega)\, e^{i\left(\omega + \frac{E_{\alpha_1} - E_\beta}{\hbar}\right) t_1} d\omega ,$$

$$\langle \phi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1) \rangle_q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} J_{\alpha\alpha_1,\alpha_1\beta}(\omega)\, e^{-i\left(\omega + \frac{E_\beta - E_{\alpha_1}}{\hbar}\right) t_1} d\omega \quad (22)$$

и преобразуем уравнение (21), с использованием (22), к виду

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \sum_\beta K_{\alpha\beta} \langle a_\beta \rangle , \quad (23)$$

где

$$K_{\alpha\beta} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha_1} \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \langle \phi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1) \rangle_q =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{J_{\alpha\alpha_1,\alpha_1\beta}(\omega)}{\hbar\omega + E_\beta - E_{\alpha_1} + i\epsilon} . \quad (24)$$

Таким образом, мы получили для $\langle a_\alpha \rangle$ уравнение (23) типа Шредингера, которое описывает сдвиг энергии и затухание из-за взаимодействия частиц со средой.

В заключение этого раздела покажем, как в случае статистики Бозе можно учесть нелинейные члены, которые приводят к связанной системе уравнений для $\langle a_\alpha \rangle$ и $\langle n_\alpha \rangle$. Рассмотрим величину $\langle a^+_{\alpha_1} a_{\beta_1} a_\beta \rangle_q$. После канонического преобразования

$$a_\alpha = b_\alpha + \langle a_\alpha \rangle \;;\; a^+_\alpha = b^+_\alpha + \langle a^+_\alpha \rangle$$

ρ_1 (13a) будет иметь вид

$$\rho_1 = Q_1^{-1} \exp\{ -\sum_\alpha F_\alpha b^+_\alpha b_\alpha \}, \langle a_\alpha \rangle = -\frac{f^*_\alpha}{F_\alpha}. \qquad (25)$$

Заметим, что Q_1 в (25), вообще говоря, не равно Q_1 в (13a). Применяя для операторов b_α и b^+_α теорему Вика и возвращаясь к исходным операторам a_α и a^+_α, получим

$$\langle a^+_{\alpha_1} a_{\beta_1} a_\beta \rangle_q = (\langle n_{\alpha_1} \rangle - |\langle a_{\alpha_1} \rangle|^2) \langle a_{\beta_1} \rangle \delta_{\alpha_1 \beta} + (\langle n_{\alpha_1} \rangle - |\langle a_{\alpha_1} \rangle|^2) \langle a_\beta \rangle \delta_{\alpha_1 \beta} \qquad (26)$$

С использованием (26) уравнение (20a) перепишется в виде

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha_1,\beta} \int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1} \langle \phi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1 \beta}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta \rangle +$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha_1 \beta} \int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1} \{ \langle [\phi_{\alpha\alpha_1}, \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1 \beta}(t_1)] \rangle_q + \langle [\phi_{\alpha\beta}, \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1 \alpha_1}(t_1)] \rangle_q \} \times$$

$$\times (\langle n_{\alpha_1} \rangle - |\langle a_{\alpha_1} \rangle|^2) \langle a_\beta \rangle .$$

Рассмотрим теперь уравнение (19). Раскроем двойной коммутатор и аналогично тому, как при получении уравнения (21) мы отбрасывали тройные члены, отбросим четверные члены в (19) (см. также [8]). Тогда получим

$$\frac{d\langle n_\alpha\rangle}{dt} = \sum_\beta W_{\beta\to\alpha}\,(\langle n_\beta\rangle-|\langle a_\beta\rangle|^2) - \sum_\beta W_{\alpha\to\beta}\,(\langle n_\alpha\rangle-|\langle a_\alpha\rangle|^2) +$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\sum_\beta K_{\alpha\beta}\langle a^+_\alpha\rangle\langle a_\beta\rangle + \frac{1}{i\hbar}\sum_\beta K^*_{\alpha\beta}\langle a_\alpha\rangle\langle a^+_\beta\rangle + \qquad (27)$$

$$+\sum_{\alpha_1\beta_1} R_{\alpha\alpha,\alpha_1\beta_1}\langle a^+_{\alpha_1}\rangle\langle a_{\beta_1}\rangle,$$

где введены обозначения

$$W_{\beta\to\alpha} = \frac{1}{\hbar^2} J_{\beta\alpha,\alpha\beta}\left(\frac{E_\alpha - E_\beta}{\hbar}\right),$$

$$W_{\alpha\to\beta} = \frac{1}{\hbar^2} J_{\alpha\beta,\beta\alpha}\left(\frac{E_\beta - E_\alpha}{\hbar}\right)$$

для вероятностей переходов, выраженных в терминах спектральных интенсивностей корреляционных функций операторов среды.

$$R_{\alpha\alpha,\alpha_1\beta_1} = \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{0}\{\langle \phi_{\alpha_1\alpha}\,\tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha\beta_1}(t_1)\rangle_q + \langle \tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\alpha}(t_1)\,\phi_{\alpha\beta_1}\rangle_q\}\, e^{\epsilon t_1}\, dt_1 .$$

Заметим, что

$$R_{\alpha\alpha,\beta\beta} = W_{\beta\to\alpha} \text{ и } \frac{1}{i\hbar}(K_{\alpha\alpha}+K^*_{\alpha\alpha}) = \sum_\beta W_{\alpha\to\beta} .$$

Таким образом, мы видим, что в общем случае уравнения (18) и (19) образуют связанную систему нелинейных уравнений шредингеровского и кинетического типов. Нелинейное уравнение (20а) типа Шредингера является вспомогательным и вместе с уравнением кинетического типа (27) определяет параметры неравновесного статистического оператора, поскольку в случае статистики Бозе

$$\langle a_a \rangle = -\frac{f^*_a(t)}{F_a(t)} ; \langle n_a \rangle = (e^{F_a(t)} - 1)^{-1} + \frac{|f_a(t)|^2}{F_a(t)^2} .$$

Поэтому линейное уравнение Шредингера является достаточно хорошим приближением, если выполнено условие

$$\langle n_a \rangle - |\langle a_a \rangle|^2 = (e^{F_a(t)} - 1)^{-1} \ll 1 ,$$

что по существу соответствует условию $\langle b_a^+ b_a \rangle \ll 1$. Это отвечает учету только слабовозбужденных состояний в системе квазичастиц, соответствующих операторам b_a и b_a^+.

В случае статистики Ферми нельзя исключить линейные члены сдвигом операторов на c -число, так как это преобразование не является каноническим. В квантовой теории поля /9/ источники, линейные по ферми-операторам, вводятся с помощью классических, антикоммутирующих как друг с другом, так и с первичными полями спинорных полей. Этот более сложный случай нами не рассматривается.

3. Уравнение типа Шредингера с затуханием

В предыдущем разделе мы получили уравнение для средних амплитуд в виде (23). Удобно перейти теперь к координатному представлению

$$\psi(\vec{r}) = \sum_a \chi_a(\vec{r}) \langle a_a \rangle , \tag{28}$$

где $\{\chi_a(\vec{r})\}$ – полная, ортонормированная система одночастичных функций оператора $\{-\hbar^2/2m\, \nabla^2 + v(\vec{r})\}$, где $v(\vec{r})$ – потенциальная энергия и

$$\{-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+v(\vec r)\}\chi_a(\vec r)=E_a\chi_a(\vec r).$$

Величина $\psi(\vec r)$ играет, в некотором смысле, роль волновой функции шредингеровского классического поля. С использованием (28) преобразуем уравнение (23) к виду

$$ih\frac{\partial\psi(\vec r)}{\partial t}=\{-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+v(\vec r)\}\psi(\vec r)+\int K(\vec r,\vec r\,')\psi(\vec r\,')d\vec r\,'. \tag{29}$$

Ядро $K(\vec r,\vec r\,')$ интегрального уравнения (29) имеет вид

$$K(\vec r,\vec r\,')=\sum_{\alpha\beta}K_{\alpha\beta}\chi_\alpha(\vec r)\chi^*_\beta(\vec r\,')=$$

$$=\frac{1}{ih}\sum_{\alpha,\beta,\alpha_1}\int_{-\infty}^{0}dt_1 e^{\epsilon t_1}<\phi_{\alpha\alpha_1}\tilde{\tilde{\phi}}_{\alpha_1\beta}(t_1)>_q\chi_\alpha(\vec r)\chi^*_\beta(\vec r\,'). \tag{30}$$

Полученное уравнение (29) можно назвать уравнением типа Шредингера с затуханием для динамической системы в термостате. Интересно отметить, что подобные уравнения Шредингера с нелокальным взаимодействием применяются в теории рассеяния /10/ для описания взаимодействия со многими рассеивающими центрами.

Для дальнейшего исследования уравнения (29) удобно ввести оператор смещения $e^{\frac{i}{h}\vec r_1\vec p}$, где $\vec r_1=\vec r\,'-\vec r$; $\vec p=-ih\vec\nabla_r$. Перепишем уравнение (29) в виде

$$ih\frac{\partial\psi(\vec r)}{\partial t}=\{-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+v(\vec r)\}\psi(\vec r)+D(\vec r,\vec p)\psi(\vec r). \tag{31}$$

Здесь

$$D(\vec{r},\vec{p}) = \int d^3\vec{r}_1\, K(\vec{r},\vec{r}+\vec{r}_1)\, e^{-\frac{i}{h}\vec{r}_1\vec{p}} . \tag{32}$$

Предположим, что $\psi(\vec{r})$ мало меняется на корреляционной длине, характерной для ядра $K(\vec{r},\vec{r}\,')$. Тогда, разлагая $\exp\{\frac{i}{h}\vec{r}_1\vec{p}\}$ в ряд, в нулевом порядке получим

$$ih\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial t} = \{-\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + v(\vec{r}) + \mathrm{Re}\,U(\vec{r})\}\psi(\vec{r}) + i\,\mathrm{Im}\,U(\vec{r})\,\psi(\vec{r}), \tag{33}$$

где мы ввели обозначение

$$U(\vec{r}) = \mathrm{Re}\,U(\vec{r}) + i\,\mathrm{Im}\,U(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}_1\, K(\vec{r},\vec{r}+\vec{r}_1).$$

Выражение (33) имеет вид уравнения Шредингера с комплексным потенциалом. Уравнения подобного вида известны в теории столкновений /10/, когда вводится взаимодействие, описывающее поглощение $(\mathrm{Im}\,U(\vec{r}) < 0)$. Далее, разлагая $\exp\{\frac{i}{h}\vec{r}_1\vec{p}\}$ в ряд вплоть до второго порядка, представим уравнение (29) в виде (см. также /10/)

$$ih\frac{\partial\psi(\vec{r})}{\partial t} = \{(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + v(\vec{r})) + U(\vec{r}) - \frac{1}{ih}\int d^3\vec{r}_1 K(\vec{r}_1,\vec{r}+\vec{r}_1)\vec{r}_1\vec{p} +$$

$$+\frac{1}{2}\int d^3\vec{r}_1 K(\vec{r},\vec{r}+\vec{r}_1)\sum_{i,k=1}^{3} r_1^i r_1^k \nabla_i\nabla_k\}\psi(\vec{r}). \tag{34}$$

Если ввести функцию

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{mc}{ihe}\int d^3\vec{r}_1\, K(\vec{r},\vec{r}+\vec{r}_1)\vec{r}_1 , \tag{35}$$

аналогичную, в некотором смысле, комплексному векторному потенциалу электромагнитного поля, и тензор обратных эффективных масс

$$\left\{\frac{1}{M(\vec r)}\right\}_{ik} = \frac{1}{m}\,\delta_{ik} - \int d^3\vec r_1\, \mathrm{Re}\,K(\vec r, \vec r+\vec r_1)\, r_k^i\, r_1^k, \tag{36}$$

то можно записать уравнение (34) в следующей форме:

$$ih\frac{\partial\psi(\vec r)}{\partial t} = \left\{-\frac{h^2}{2}\sum_{ik}\left(\frac{1}{M(\vec r)}\right)_{ik}\nabla_i\nabla_k + v(\vec r) + U(\vec r) + \frac{ieh}{mc}\,\Lambda(\vec r)\vec\nabla + iT(\vec r)\right\}\psi(\vec r), \tag{37}$$

где

$$T(\vec r) = \frac{1}{2}\int d^3\vec r_1\; \mathrm{Im}\,K(\vec r, \vec r+\vec r_1)\sum_{ik} r_1^i\, r_1^k\, \nabla_i\, \nabla_k\ .$$

В изотропной среде тензор $\left\{\frac{1}{M(\vec r)}\right\}_{ik}$ –диагонален и $\vec\Lambda(\vec r) = 0$.

В заключение отметим, что введение $\psi(\vec r)$ не означает, что состояние малой динамической подсистемы является чистым. Оно остается смешанным, так как описывается статистическим оператором (14), эволюция параметров которого $f_a(t)$, $f_a^*(t)$ и $F_a(t)$ определяется связанной системой уравнений шредингеровского и кинетического типов.

4. Примеры. Взаимодействие экситонов (или электронов) с фононным полем

В настоящем разделе в качестве примеров, иллюстрирующих общий метод, мы рассмотрим систему экситонов (или электронов), взаимодействующих с фононами решетки, и покажем, как получаются затухание и сдвиг энергии для подобных систем.

Рассмотрим сначала систему экситонов в решетке, описывающуюся гамильтонианом /11/

$$H=\sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}} + \sum_{\sigma,\vec{q}} \hbar\omega_{\sigma,\vec{q}} a^+_{\sigma,\vec{q}} a_{\sigma,\vec{q}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k},\sigma} G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1) Q_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1} b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}_1} \tag{38}$$

Здесь $\hbar\omega_{\sigma,\vec{q}}$ – энергия фонона; $b^+_{\vec{k}}$, $b_{\vec{k}}$; $a^+_{\sigma\vec{q}}, a_{\sigma\vec{q}}$ – бозе-операторы порождения и уничтожения экситонов и фононов соответственно; функция $G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1)$ определяет связь экситонов с фононной средой /11/ $(G^*_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1) = G_\sigma(\vec{k}_1,\vec{k}))$;

$$Q_{\sigma,\vec{q}} = \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\sigma,\vec{q}}}\right)^{1/2} (a_{\sigma,\vec{q}} + a^+_{\sigma,-\vec{q}}) \; -$$

– оператор нормальных координат фононной системы; N – число молекул в кристалле. Согласно (8) запишем гамильтониан взаимодействия как

$$V = \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}} \phi(\vec{k},\vec{k}_1) b^+_{\vec{k}} b_{\vec{k}_1}, \tag{39}$$

где

$$\phi(\vec{k},\vec{k}_1) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\sigma G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1) \left(\frac{\hbar}{2\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}}\right)^{1/2} \times (a_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1} + a^+_{\sigma,\vec{k}_1-\vec{k}}). \tag{40}$$

Запишем уравнение типа Шредингера (23) для $\langle b_{\vec{k}} \rangle$ с использованием (38)-(40) в виде

$$i\hbar \frac{d\langle b_{\vec{k}} \rangle}{dt} = E(\vec{k}) \langle b_{\vec{k}} \rangle + \sum_{\vec{k}_1} K(\vec{k},\vec{k}_1) \langle b_{\vec{k}_1} \rangle, \tag{41}$$

где

$$K(\vec{k},\vec{k}_1) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\vec{k}_2} \int_{-\infty}^{0} dt_1 \, e^{\epsilon t_1} \langle \phi(\vec{k},\vec{k}_2) \tilde{\phi}(\vec{k}_2,\vec{k}_1,t_1) \rangle_a =$$

$$
= \delta(\vec{k}-\vec{k}_1)\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}_2\sum_\sigma \frac{h|G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_2)|^2}{2\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_2}}\left\{\frac{\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_2}\rangle}{E(\vec{k})-E(\vec{k}_2)+h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_2}+i\epsilon}+\right.
$$

$$
\left.+\frac{\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_2}\rangle+1}{E(\vec{k})-E(\vec{k}_2)-h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_2}+i\epsilon}\right\}. \qquad (42)
$$

Интегрирование ведется по первой зоне Бриллуэна, Ω – объем элементарной ячейки и

$$
\langle n_{\sigma,\vec{q}}\rangle = (e^{\beta\omega_{\sigma,\vec{q}}}-1)^{-1}.
$$

Выделяя в (42) действительную и мнимую части, будем иметь

$$
ih\frac{d\langle b_{\vec{k}}\rangle}{dt} = E(\vec{k})\langle b_{\vec{k}}\rangle+\Delta E(\vec{k})\langle b_{\vec{k}}\rangle-\frac{ih}{2}\Gamma(\vec{k})\langle b_{\vec{k}}\rangle,
$$

где

$$
\Delta E(\vec{k}) = -\frac{\Omega}{(2\pi)^3}P\int d^3\vec{k}_1\sum_\sigma\frac{h|G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1)|^2}{2\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}}\times
$$

$$
\times\left\{\frac{\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}\rangle}{E(\vec{k})-E(\vec{k}_1)-h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}}+\right. \qquad (43)
$$

$$
\left.+\frac{(\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}\rangle+1)}{E(\vec{k}_1)-E(\vec{k})+h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}}\right\}-
$$

– сдвиг энергии экситона,

$$
\Gamma(\vec{k}) = \frac{2\pi}{h}\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}_1\sum_\sigma\frac{h|G_\sigma(\vec{k},\vec{k}_1)|^2}{2\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}}\times
$$

$$
\times\{\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}\rangle\delta[E(\vec{k})-E(\vec{k}_1)+h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}]+ \qquad (44)
$$

$$
+(\langle n_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}\rangle+1)\delta[E(\vec{k})-E(\vec{k}_1)-h\omega_{\sigma,\vec{k}-\vec{k}_1}]\}
$$

– затухание экситона.

Как видно из уравнений (43), (44), мы пришли к хорошо известным результатам /11/, и поэтому на обсуждении их не будем останавливаться.

В качестве второго примера кратко рассмотрим систему электронов в решетке, описывающуюся гамильтонианом /12/

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} T(\vec{k}) a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{q}} h\omega_{\vec{q}} b^{+}_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\sigma} A(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \times$$

$$\times a^{+}_{\vec{k}_1\sigma} a_{\vec{k}_2\sigma} (b_{\vec{k}_1-\vec{k}_2} + b^{+}_{\vec{k}_2-\vec{k}_1}),$$

где $h\omega_{\vec{q}}$ – энергия фонона, $a^{+}_{\vec{k}\sigma}$, $a_{\vec{k}\sigma}$; $b^{+}_{\vec{q}}$, $b_{\vec{q}}$ – операторы порождения и уничтожения электронов и фононов соответственно, $T(\vec{k}) = \frac{h^2 k^2}{2m} - \mu$; $A(\vec{q})$ определяет связь электронов с фононами

$$A(\vec{q}) = g(\vec{q}) \left(\frac{\omega_{\vec{q}}}{2} \right)^{1/2}.$$

Как и в примере с экситонами, уравнение типа Шредингера для $\langle a_{\vec{k},\sigma} \rangle$ можно представить в виде

$$ih \frac{d\langle a_{\vec{k},\sigma} \rangle}{dt} = (T(\vec{k}) + \Delta E(\vec{k})) \langle a_{\vec{k},\sigma} \rangle - \frac{ih}{2} \Gamma(\vec{k}) \langle a_{\vec{k},\sigma} \rangle,$$

где

$$\Delta E(\vec{k}) = P \sum_{\vec{k}_1} | A(\vec{k} - \vec{k}_1) |^2 \left\{ \frac{\langle n_{\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle + 1}{T(\vec{k}) - T(\vec{k}_1) - h\omega_{\vec{k}-\vec{k}_1}} + \right.$$

$$\left. + \frac{\langle n_{\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle}{T(\vec{k}) - T(\vec{k}_1) + h\omega_{\vec{k}-\vec{k}_1}} \right\} -$$

– сдвиг энергий электрона,

$$\Gamma(\vec{k}) = \frac{2\pi}{h} \sum_{\vec{k}_1} | A(\vec{k} - \vec{k}_1) |^2 \{ (\langle n_{\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle + 1) \delta (T(\vec{k}) - T(\vec{k}_1) - h\omega_{\vec{k}-\vec{k}_1}) +$$

$$+ \langle n_{\vec{k}-\vec{k}_1} \rangle \delta (T(\vec{k}) - T(\vec{k}_1) + h\omega_{\vec{k}-\vec{k}_1}) \} \tag{45}$$

– величина затухания электрона. Выражения (45), (46) совпадают с полученными методом функций Грина /12/, если в последних положить $\langle a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} \rangle \approx 0$. Это естественно, поскольку линейное уравнение типа Шредингера получено в приближении малости чисел заполнения.

Заметим, что уравнение для одночастичных уравнений Грина очень похоже на уравнение типа Шредингера, но содержит неоднородность в правой части /13-14/.

В заключение выражаем благодарность Н.М. Плакиде и Ю.А. Церковникову за полезные обсуждения.

Литература

1. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Ширков. Введение в теорию квантованных полей, §38, Гостехиздат, 1957.
2. Д.Н. Зубарев. ДАН, 140, 92 (1961); 162, 532 (1965); ДАН, 162, 1794 (1965); ДАН, 164, 537 (1965); препринт ИТФ-69-6, Киев, 1969.
3. Д.Н. Зубарев, В.П. Калашников. Теоретическая и математическая физика, 1, 137 (1969).
4. Д.Н. Зубарев. Препринт ОИЯИ, Р4-4886, Дубна, 1970; Препринт ОИЯИ, Р4-4920, Дубна, 1970; Теоретическая и математическая физика, 3, №1, 1970.
5. M. Gell-Mann, M.L. Goldberger. Phys.Rev., 91, 398 (1953).
6. Н.Н. Боголюбов. Препринт ОИЯИ,Д-788, Дубна, 1961.
7. Н.Н. Боголюбов. Physica Suppl., 26, 1 (1960).
8. K. Walasek, A.L. Kuzemsky. Preprint, E4-4862, Dubna, 1970.
9. Н.Н. Боголюбов, Д.В. Ширков. Введение в теорию квантованных полей, §36, Гостехиздат, 1957.
10. Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений, гл. 8, Мир, 1969.
11. Р. Нокс. Теория экситонов. Мир, 1966.
12. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71 (1960).
13. J. Schwinger. Proc.Nat.Acad.Sci., 37, 452, 455 (1951).
14. В.Л. Бонч-Бруевич, С.В. Тябликов. Метод функций Грина в статистической механике. Физматгиз, 1961.

Рукопись поступила в издательский отдел
31 марта 1970 года.