ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 5, № 2
ноябрь
1970

УРАВНЕНИЕ ТИПА ШРЕДИНГЕРА С ЗАТУХАНИЕМ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ В ТЕРМОСТАТЕ

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

Для динамической системы, слабо взаимодействующей с термостатом, с помощью метода неравновесного статистического оператора устанавливаются уравнения типа Шредингера с затуханием. Для случая статистики Бозе получается система связанных нелинейных уравнений шредингеровского и кинетического типов.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей статье рассматривается поведение малой динамической системы, взаимодействующей с термостатом, т. е. с системой, имеющей практически бесконечное число 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

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

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

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 Гелл-Манна — Гольдбергера [5]. Введем бесконечно малый источник в уравнение Лиувилля для $\ln\rho(t, 0)$ следующим образом [4]:

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

где

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

— квазиравновесный статистический оператор, а

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

Оператор $S(t, 0)$ можно назвать оператором энтропии, так как $S = \langle S(t, 0)\rangle_q$ есть энтропия. Здесь $\langle\ldots\rangle_q = \mathrm{Sp}\,(\rho_q\ldots)$. Величина $\varepsilon \to +0$ 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 $\varepsilon \to +0$. Интегрируя уравнение (1) в пределах от $-\infty$ до 0, получим неравновесный статистический оператор в виде

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

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

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

т. е. фактически является квазисредним в смысле Н. Н. Боголюбова [6, 7].

2. УСРЕДНЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ АМПЛИТУД ВТОРИЧНО КВАНТОВАННОГО ПОЛЯ

Рассмотрим поведение малой подсистемы с гамильтонианом H_1, взаимодействующей с термостатом с 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:

$$V = \sum_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta, \qquad \varphi_{\beta\alpha}^+ = \varphi_{\alpha\beta}, \tag{8}$$

где $\varphi_{\alpha\beta}$ — 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^+ соответствует тому, что мы интересуемся динамическим описанием системы.

Квазиравновесный статистический оператор (2) определяется из экстремума информационной энтропии

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

при дополнительных условиях, что при вариации фиксированы

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

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

$$\rho_q = \exp\left\{-\Phi - \sum_\alpha (f_\alpha(t) a_\alpha + f_\alpha^*(t) a_\alpha^+ + F_\alpha(t) n_\alpha) - \beta H_2\right\} \equiv$$

$$\equiv \exp\{-S(t, 0)\}, \tag{11}$$

где

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

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 $\langle n_\alpha \rangle_q$:

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

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

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

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

где

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

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

и

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

Запишем теперь неравновесный статистический оператор (4) в явном виде

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

где

$$\widetilde{S(t, 0)} = \widetilde{\Phi} + \varepsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \Big\{ \sum_{\alpha} (f_\alpha(t + t_1) a_\alpha(t_1) +$$

$$+ f_\alpha^* (t + t_1) \overset{+}{a}_\alpha (t_1) + n_\alpha(t_1) F_\alpha(t + t_1)) + \beta H_2(t_1) \Big\},$$

$\widetilde{\Phi} = \varepsilon \int_{-\infty}^{0} \Phi(t + t_1) e^{\varepsilon t_1} dt_1$ и $\exp\{-\widetilde{\Phi}\}$ — нормирующий множитель. Нормировка сохраняется после взятия квазиинвариантной части, если мы потребуем выполнения условий [2—4]:

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

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

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

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

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 работе [8] следующие уравнения:

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

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

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

Раскрывая двойной коммутатор в уравнении (18), получим

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

$$- \langle \widetilde{\varphi}_{\alpha_1\beta_1}(t_1) \varphi_{\alpha\beta} \rangle_q \langle \overset{+}{a}_{\alpha_1} a_{\beta_1} a_\beta \rangle_q \Big\}, \tag{20}$$

где введено обозначение

$$\widetilde{\varphi}_{\alpha\beta}(t) = \varphi_{\alpha\beta}(t) \, e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta) t}.$$

Преобразуем уравнение (20) к виду

$$i\hbar\frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt}=E_\alpha\langle a_\alpha\rangle+\frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1,\beta}\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}\langle\varphi_{\alpha\alpha_1}\tilde\varphi_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q\langle a_\beta\rangle+$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1,\beta_1,\beta}\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}\langle[\varphi_{\alpha\beta_1},\tilde\varphi_{\alpha_1\beta_1}(t_1)]\rangle_q\langle\overset{+}{a}_{\alpha_1}a_{\beta_1}a_\beta\rangle_q. \tag{20a}$$

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

$$i\hbar\frac{d\langle a_\alpha\rangle}{dt}=E_\alpha\langle a_\alpha\rangle+\frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1,\beta}\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}\langle\varphi_{\alpha\alpha_1}\tilde\varphi_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q\langle a_\beta\rangle. \tag{21}$$

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

$$\begin{aligned}\langle\tilde\varphi_{\alpha_1\beta}(t_1)\varphi_{\alpha\alpha_1}\rangle_q&=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}J_{\alpha_1\beta,\,\alpha\alpha_1}(\omega)\,e^{i\left(\omega+\frac{E_{\alpha_1}-E_\beta}{\hbar}\right)t_1}d\omega,\\ \langle\varphi_{\alpha\alpha_1}\tilde\varphi_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q&=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}J_{\alpha\alpha_1,\,\alpha_1\beta}(\omega)\,e^{-i\left(\omega+\frac{E_\beta-E_{\alpha_1}}{\hbar}\right)t_1}d\omega\end{aligned} \tag{22}$$

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

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

где

$$K_{\alpha\beta}=\frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha_1}\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}\langle\varphi_{\alpha\alpha_1}\tilde\varphi_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q=$$

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

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

$$a_\alpha=b_\alpha+\langle a_\alpha\rangle;\quad a_\alpha{}^{+}=b_\alpha{}^{+}+\langle a_\alpha{}^{+}\rangle$$

ρ_1 (13а) запишется в виде

$$\rho_1=Q_1^{-1}\exp\left\{-\sum_\alpha F_\alpha\overset{+}{b}_\alpha b_\alpha\right\},\qquad\langle a_\alpha\rangle=-f_\alpha^{*}/F_\alpha. \tag{25}$$

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

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

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

$$i\hbar \frac{d\langle a_\alpha \rangle}{dt} = E_\alpha \langle a_\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha_1\beta} \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \varphi_{\alpha\alpha_1} \tilde{\varphi}_{\alpha_1\beta}(t_1) \rangle_q \langle a_\beta \rangle + \\ + i\hbar \sum_{\alpha_1\beta} \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \{ \langle [\varphi_{\alpha\alpha_1}, \tilde{\varphi}_{\alpha_1\beta}(t_1)] \rangle_q + \langle [\varphi_{\alpha\beta}, \tilde{\varphi}_{\alpha_1\alpha_1}(t_1)] \rangle_q \} \times \\ \times (\langle n_{\alpha_1} \rangle + |\langle a_{\alpha_1} \rangle|^2) \langle a_\beta \rangle.$$

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

$$\frac{d\langle n_\alpha \rangle}{dt} = \sum_\beta W_{\beta\to\alpha} (\langle n_\beta \rangle - |\langle a_\beta \rangle|^2) - \sum_\beta W_{\alpha\to\beta} (\langle n_\alpha \rangle - |\langle a_\alpha \rangle|^2) + \\ + \frac{1}{i\hbar} \sum_\beta K_{\alpha\beta} \langle \overset{+}{a_\alpha} \rangle \langle a_\beta \rangle + \frac{1}{i\hbar} \sum_\beta K^*_{\alpha\beta} \langle a_\alpha \rangle \langle \overset{+}{a_\beta} \rangle + \sum_{\alpha_1\beta_1} R_{\alpha\alpha,\,\alpha_1\beta_1} \langle \overset{+}{a_{\alpha_1}} \rangle \langle a_{\beta_1} \rangle, \qquad (27)$$

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,

$$R_{\alpha\alpha,\alpha_1\beta_1} = \frac{1}{\hbar^2} \int\limits_{-\infty}^{0} \{ \langle \varphi_{\alpha_1\alpha} \tilde{\varphi}_{\alpha\beta_1}(t_1) \rangle_q + \langle \tilde{\varphi}_{\alpha_1\alpha}(t_1) \varphi_{\alpha\beta_1} \rangle_q \} e^{\varepsilon t_1} dt_1.$$

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

$$\langle a_\alpha\rangle = -\frac{f_\alpha^*(t)}{F_\alpha(t)}; \qquad \langle n_\alpha\rangle = (e^{F_\alpha(t)}-1)^{-1} + \frac{|f_\alpha(t)|^2}{F_\alpha(t)^2}.$$

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

$$\langle n_\alpha\rangle - |\langle a_\alpha\rangle|^2 = (e^{F_\alpha(t)}-1)^{-1} \ll 1.$$

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

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

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \chi_\alpha(\mathbf{r})\langle a_\alpha\rangle, \tag{28}$$

где $\{\chi_\alpha(\mathbf{r})\}$ — полная, ортонормированная система одночастичных функций оператора $\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\}$, где $v(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия, и

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right\}\chi_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\chi_\alpha(\mathbf{r}).$$

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t} = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r}) + \int K(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\,d\mathbf{r}'. \tag{29}$$

Ядро $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ интегрального уравнения (29) имеет вид

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

$$= \frac{1}{i\hbar}\sum_{\alpha,\beta,\alpha_1}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}\langle\varphi_{\alpha\alpha_1}\tilde{\varphi}_{\alpha_1\beta}(t_1)\rangle_q \chi_\alpha(\mathbf{r})\chi_\beta^*(\mathbf{r}'). \tag{30}$$

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 $e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}_1\mathbf{p}}$, где $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}'-\mathbf{r}$; $\mathbf{p}=-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$. Перепишем уравнение (29) в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+v(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r})+D(\mathbf{r},\mathbf{p})\psi(\mathbf{r}). \tag{31}$$

Здесь

$$D(\mathbf{r},\mathbf{p})=\int d^3r_1K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{r}_1\mathbf{p}}. \tag{32}$$

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+v(\mathbf{r})+\operatorname{Re}U(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r})+i\operatorname{Im}U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \tag{33}$$

где мы ввели обозначение

$$U(\mathbf{r})=\operatorname{Re}U(\mathbf{r})+i\operatorname{Im}U(\mathbf{r})=\int d^3r_1K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1).$$

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t}=\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+v(\mathbf{r})\right)+U(\mathbf{r})-\frac{1}{i\hbar}\int d^3r_1K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)\mathbf{r}_1\mathbf{p}+\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\int d^3r_1K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)\sum_{i,k=1}^{3}r_1^ir_1^k\nabla_i\nabla_k\right\}\psi(\mathbf{r}). \tag{34}$$

Если ввести функцию

$$A(\mathbf{r})=\frac{mc}{i\hbar e}\int d^3r_1K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)\mathbf{r}_1, \tag{35}$$

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

$$\left\{\frac{1}{M(\mathbf{r})}\right\}_{ik}=\frac{1}{m}\delta_{ik}-\int d^3r_1\operatorname{Re}K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)r_1^ir_1^k, \tag{36}$$

то можно записать уравнение (34) в следующей форме:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{ik}\left(\frac{1}{M(\mathbf{r})}\right)_{ik}\nabla_i\nabla_k+v(\mathbf{r})+U(\mathbf{r})+\right.$$
$$\left.+\frac{ie\hbar}{mc}A(\mathbf{r})\nabla+iT(\mathbf{r})\right\}\psi(\mathbf{r}), \tag{37}$$

где

$$T(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\int d^3r_1\,\mathrm{Im}\,K(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{r}_1)\sum_{ik}r_1^i r_1^k\nabla_i\nabla_k.$$

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

В заключение отметим, что введение $\psi(\mathbf{r})$ не означает, что состояние малой динамической подсистемы является чистым. Оно остается смешанным, так как описывается статистическим оператором (14), эволюция параметров которого $f_\alpha(t)$, $f_\alpha^*(t)$ и $F_\alpha(t)$ 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]:

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

где $\hbar\omega_{\sigma,\mathbf{q}}$ — энергия фонона, $b_{\mathbf{k}}^+$, $b_{\mathbf{k}}$; $a_{\sigma\mathbf{q}}^+$, $a_{\sigma\mathbf{q}}$ — бозе-операторы порождения и уничтожения экситонов и фононов, соответственно. Функция $G_\sigma(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)$ определяет связь экситонов с фононной средой [11] $G_\sigma^*(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)=G_\sigma(\mathbf{k}_1,\mathbf{k})$

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

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

$$V=\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}}\varphi(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)b_{\mathbf{k}}^+b_{\mathbf{k}_1}, \tag{39}$$

где

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

Запишем уравнение типа Шредингера (23) для $\langle b_k\rangle$ с использованием (38) — (40) в виде

$$i\hbar\frac{d\langle b_{\mathbf{k}}\rangle}{dt}=E(\mathbf{k})\langle b_{\mathbf{k}}\rangle+\sum_{k_1}K(\mathbf{k},\mathbf{k}_1)\langle b_{\mathbf{k}_1}\rangle, \tag{41}$$

где

$$K(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}_2} \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle \varphi(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \bar{\varphi}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, t_1) \rangle_q =$$

$$= \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1) \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k_2 \sum_{\sigma} \frac{\hbar |G_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2)|^2}{2\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_2}} \left\{ \frac{\langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_2} \rangle}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_2) + \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_2} + i\varepsilon} + \right.$$

$$\left. + \frac{\langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_2} \rangle + 1}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_2) - \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_2} + i\varepsilon} \right\}. \tag{42}$$

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

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

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

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

где

$$\Delta E(\mathbf{k}) = -\frac{\Omega}{(2\pi)^3} P \int d^3k_1 \sum_{\sigma} \frac{\hbar |G_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)|^2}{2\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \rangle}{E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_1) - \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}} + \frac{(\langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \rangle + 1)}{E(\mathbf{k}_1) - E(\mathbf{k}) + \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}} \right\} \tag{43}$$

— сдвиг энергии экситона,

$$\Gamma(\mathbf{k}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3k_1 \sum_{\sigma} \frac{\hbar |G_\sigma(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1)|^2}{2\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}} \times$$

$$\times \{ \langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \rangle \delta[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_1) + \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}] +$$

$$+ (\langle n_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1} \rangle + 1) \delta[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_1) - \hbar\omega_{\sigma, \mathbf{k}-\mathbf{k}_1}] \} \tag{44}$$

— 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]

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

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

где $\hbar\omega_\mathbf{q}$ — энергия фонона, $a_{\mathbf{k}\sigma}^+$, $a_{\mathbf{k}\sigma}$; $b_\mathbf{q}^+$; $b_\mathbf{q}$ — операторы порождения и уничтожения электронов и фононов, соответственно, $T(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$;

$A(\mathbf{q})$ определяет связь электронов с фононами

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

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

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

где

$$\Delta E(\mathbf{k}) = P\sum_{k_1} |A(\mathbf{k}-\mathbf{k}_1)|^2 \left\{\frac{\langle n_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}\rangle + 1}{T(\mathbf{k}) - T(\mathbf{k}_1) - \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}} + \right.$$

$$\left. + \frac{\langle n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\rangle}{T(\mathbf{k}) - T(\mathbf{k}_1) + \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}}\right\} \tag{45}$$

— сдвиг энергий электрона,

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

$$+ \langle n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1}\rangle \delta(T(\mathbf{k}) - T(\mathbf{k}_1) + \hbar\omega_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1})\} \tag{46}$$

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

Заметим, что уравнение для одночастичных функций 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.

Объединенный институт ядерных исследований

Поступила в редакцию 10 апреля 1970 г.

Литература

[1] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков. Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат, 1957, § 38.
[2] Д. Н. Зубарев. ДАН СССР, **140**, 92, 1961; **162**, 532, 1965; **162**, 1794, 1965, **164**, 537, 1965; Препринт ИТФ—69—6, Киев, 1969.
[3] Д. Н. Зубарев, В. П. Калашников. ТМФ, **1**, 137, 1969.
[4] Д. Н. Зубарев. Препринт Р4—4886, ОИЯИ, 1970; Р4—4920, ОИЯИ, 1970; ТМФ, **3**, 126, 1970.
[5] M. Gell-Mann, M. L. Goldberger. Phys. Rev., **91**, 398, 1953.
[6] Н. Н. Боголюбов. Препринт Д—788, ОИЯИ, 1961.
[7] Н. Н. Боголюбов. Physica, Suppl., **26**, 1, 1960.
[8] K. Walasek, A. L. Kuzemsky. Preprint E4—4862, JINR, 1970.
[9] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков. Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат, 1957, § 36.
[10] Н. Мотт, Г. Месси. Теория атомных столкновений, «Мир», 1969, гл. 8.
[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.

DERIVATION OF A SCHRÖDINGER TYPE EQUATION WITH DAMPING FOR THE DYNAMICAL SYSTEM WEAKLY COUPLED TO A THERMAL BATH

K. Walasek, D. N. Zubarev, A. L. Kuzemsky

Schrödinger type equation with damping is derived for a dynamical system weakly coupled to a thermal bath on the basis of the method of the non-equilibrium statistical operator. The system of coupled Schrödinger and kinetic type non-linear equations are obtained for the case of Bose statistics.
