МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С. П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

Е.К. БАШКИРОВ, В.В. СЕМИН

МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» в качестве учебного пособия для обучающихся по основной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 03.03.02 Физика

САМАРА
Издательство Самарского университета
2023

УДК 53:519.2(075)
ББК 22.317я7
Б334

Рецензенты: канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник
В. И. Платонов,
канд. техн. наук, доцент Н. С. Миронов

Башкиров Евгений Константинович

Б334 **Методы статистической физики:** учебное пособие / *Е.К. Башкиров, В.В. Семин.* - Самара: Издательство Самарского университета, 2023. - 68 с.

ISBN 978-5-7883-1852-3

Рассмотрены основы современного метода квантовой неравновесной статистической физики - метода проекционного оператора. Показаны возможности метода при описании различных нелинейных неравновесных процессов в области физики магнитных явлений, квантовой оптики и квантовой информатики.

Предназначено для обучающихся по основной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 03.03.02 Физика.

Подготовлено на кафедре общей и теоретической физики.

УДК 53:519.2(075)
ББК 22.317я7

ISBN 978-5-7883-1852-3

Содержание

Введение 4

1. Основное кинетическое уравнение Цванцига 6

2. Кинетическое уравнение без временной свертки 10

3. Уравнение Паули 13

4. Энтропия неравновесного состояния 21

5. Обобщенное кинетическое уравнение для релаксационных процессов 24

6. Сверхизлучение Дикке 33

7. Динамика моды квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе 41

8. Спиновая релаксация 48

9. Немарковская релаксация кубита 59

Заключение 63

Библиографический список 65

Введение

Статистическая теория неравновесных процессов интенсивно развивается, начиная с 50-х годов, хотя некоторые важнейшие проблемы неравновесных состояний обсуждались и ранее, в частности, проблема необратимости впервые была осознана около ста лет назад, когда Людвиг Больцман попытался обосновать статистическое описание временной эволюции систем, состоящих из большого числа частиц. Несмотря на значительные усилия проблема так и осталась нерешенной. Ее суть состоит в следующем: как на основе обратимых уравнений движения (классического или квантового уравнений Лиувилля) вывести необратимые во времени кинетические уравнения или уравнения неравновесной термодинамики и на их основе объяснить наблюдаемую необратимость процессов. Первой идеей решения этой проблемы в рамках кинетической теории газа стала H-теорема Больцмана [1]. Попытки ее решения делались также Гиббсом [2], который обсуждал возможность возрастания энтропии в связи с перемешиванием в фазовом пространстве, и Эренфестом (см. [3]), который предлагал в качестве возможного решения парадокса описание неравновесных процессов с помощью крупноструктурной функции распределения, усредненной по малой ячейке фазового пространства.

Принципиально новое осмысление проблем необратимости было сделано Н.Н. Боголюбовым [4] (см. также [5]), который понял, что для перехода от обратимого уравнения Лиувилля к необратимым кинетическим уравнениям необходимо отказаться от полноты описания, заложенной в функции распределения или статистическом операторе и перейти к сокращенному описанию. Н.Н. Боголюбовым было введено важнейшее понятие об иерархии релаксационных процессов в статистических системах и возможности введения для их описания последовательности временных шкал и масштабов ("иерархии времен"). Им было также показано, что для случая газа малой плотности сокращенное описание на кинетическом этапе эволюции может быть реализовано на основе одночастичной функции распределения, замкнутое уравнение для которой получается из цепочки уравнений Боголюбова.

Все современные теории неравновесных процессов используют общий подход Н.Н. Боголюбова, основанный на сокращенном описании неравновесного состояния, причем переход к сокращенному описанию осуществляется путем усреднения функций распределения по времени или фазовым переменным с использованием тех или иных предположений, эквивалентных условиям ослабления корреляций. Однако хотя основные идеи, заложенные в разных теориях, близки, конкретные методы и подходы, используемые в них, весьма разнообразны, что свидетельствует о незавершенности неравновесной статистической физики (в отличие от равновесной теории, идейно подчиненной авторитету гиббсовской статистики).

Среди наиболее разработанных подходов к теории неравновесных состояний отметим метод проекционного оператора [6, 7], метод функций Грина [3, 5, 8-12], метод статистического оператора [3, 7], метод Мори [13, 15]), метод неравновесных функций Грина [14], метод исключения бозонных переменных [16-18] и др.

В пособии рассматривается метод проекционного оператора Цванцига, который выражает идею сокращенного описания в наиболее общей форме и поэтому позволяет наиболее наглядно продемонстрировать основные идеи теории необратимых процессов [19-21].

Пособие имеет следующую структуру. Во введении обсуждаются общие проблемы описания неравновесных состояний макроскопических систем. В первом разделе изложены основы метода проекционного оператора и получено обобщенное кинетическое уравнение Цванцига для релевантной части статистического оператора. Во втором разделе получено кинетическое уравнение без временной свертки. В следующем разделе показано, что обобщенное кинетическое уравнение с точностью до членов второго порядка по взаимодействию и в марковском приближении совпадает с уравнением Паули. В четвертом разделе обсуждается проблема введения энтропии для неравновесного состояния. В пятом разделе пособия из уравнения Цванцига получено обобщенное кинетическое уравнение, описывающее линейный отклик системы, находящейся в термостате, на внешнее возмущение. В последующих четырех разделах рассмотрены примеры применения метода проекционного оператора. На основе полученных ранее уравнений исследован сверхизлучательный процесс, динамика моды квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе, релаксация системы спинов, находящихся во внешнем однородном магнитном поле и взаимодействующих с термостатом и немарковская релаксация кубита.

1. Основное кинетическое уравнение Цванцига

В статистической термодинамике неравновесных процессов различают два типа возмущений: механические и термические. Механическими возмущениями называются возмущения, представляющие действие внешних полей, которые можно полностью описать добавлением к гамильтониану соответствующей энергии взаимодействия системы с полем. Возмущения, которые не допускают такого представления, называются термическими. Причиной таких возмущений может быть совершаемая над системой работа через изменение ее объема, или взаимодействие с другими ансамблями (обладающими другой температурой или химическим потенциалом). В этом случае изменение внешних параметров влияет на функцию распределения или статистический оператор не прямым, а косвенным образом; оно создает статистически неравновесное состояние, которое затем стремится к равновесному, если нет препятствующих этому воздействий. Лишь в случае, когда возмущение вызвано внешними полями, оно непосредственно влияет на функцию распределения, с чем и связана относительная простота изучения механических возмущений.

В настоящем пособии мы ограничимся изучением систем, испытывающих механические возмущения. Причем возмущения изучаемой системы будем считать малыми. Описание термических возмущений представляет собой более сложную задачу. Один из вариантов такого описания представлен в монографии [3]. Рассмотрим квантовомеханическую систему со слабым взаимодействием с гамильтонианом вида

$$H = H_0 + H_1,$$

где H_1 - слабое возмущение. Диагональные элементы оператора ρ в представлении по собственным функциям H_0 изменяются со временем медленно по сравнению с его недиагональными элементами

$$i\hbar\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle n|\rho(t)|n\right\rangle = \left\langle n|[H,\rho]|n\right\rangle =$$

$$= \left\langle n|[H_0 + H_1,\rho]|n\right\rangle = \left\langle n|[H_1,\rho]|n\right\rangle ,$$

$$i\hbar\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle n|\rho(t)|m\right\rangle = \left\langle n|[H,\rho]|n\right\rangle .$$

Поскольку H_1 мало, то выполняется соотношение

$$\left|\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t}\right| \gg \left|\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t}\right|.$$

Таким образом разделение оператора ρ на диагональную и недиагональную части есть разделение его на медленно- и быстроменяющиеся части. Можно считать, что ограничение диагональной частью статистического оператора есть переход к сокращенному описанию.

Если выделение диагональной части рассматривать как оператор, то очевидно, что это проекционный оператор, так как квадрат его равен самому оператору:

$$P\rho = \rho_1,$$

$$P^2\rho = P\rho_1 = \rho_1.$$

и следовательно

$$P^2 = P.$$

Таким образом, с помощью оператора проектирования мы можем выделить медленноменяющуюся часть статистического оператора, соответствующую сокращенному описанию.

Следуя Цванцигу, введем теперь проекционный оператор P, который выделяет медленноменяющуюся (или релевантную) часть статистического оператора, соответствующую сокращенному описанию

$$\rho_1 = P\rho,$$

где

$$P^2 = P.$$

Полный статистический оператор можно представить в виде суммы двух слагаемых

$$\rho = \rho_1 + \rho_2,$$

где $\rho_2 = (1-P)\rho$ - быстроменяющаяся (нерелевантная) или корреляционная часть статистического оператора.

Предположим, что P - линейный, не зависящий от времени оператор, коммутирующий с $\frac{\partial}{\partial t}$ (явный вид оператора необходимо конкретизировать в каждой конкретной модели, причем конкретизация этого оператора представляет собой во многих случаях нетривиальную задачу). В частности, оператор P может означать выделение диагональной части.

Статистический оператор ρ удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = [H, \rho].$$

Перепишем уравнение Лиувилля в более удобной форме

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + iL\rho = 0. \tag{1}$$

Здесь L - оператор Лиувилля, определяемый как $L\rho = [H, \rho]/\hbar$.

Будем искать формальное решение уравнения Лиувилля (1) с начальным условием отсутствия корреляций при $t = 0$

$$\rho(t)|_{t=0} = \rho_1(0) = P\rho(0),$$

или $\rho_2(0) = 0$.

Подействуем на уравнение Лиувилля (1) слева операторами P и $(1 - P)$. В результате получим систему замкнутых уравнений для ρ_1 и ρ_2:

$$\frac{\partial\rho_1}{\partial t} + iPL(\rho_1 + \rho_2) = 0 \tag{2}$$

и

$$\frac{\partial\rho_2}{\partial t} + i(1 - P)L(\rho_1 + \rho_2) = 0 \tag{3}$$

с начальным условием

$$\rho_2(0) = 0. \tag{4}$$

Формальное решение уравнения (3) с учетом начального условия (4) можно представить в виде

$$\rho_2(t) = -\int_0^t \exp[(t_1 - t)(1 - P)iL](1 - P)iL\rho_1(t_1)dt_1. \tag{5}$$

Тогда искомый статистический оператор равен

$$\rho(t) = \rho_1(t) - \int_0^t \exp[(t_1 - t)(1 - P)iL](1 - P)iL\rho_1(t_1)dt_1.$$

Подставляя решение (5) в уравнение (2), получим замкнутое уравнение для оператора $\rho_1(t)$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + iPL\rho_1 =$$

$$= -\int_0^t PL\exp[(t_1 - t)(1-P)iL](1-P)L\rho_1(t_1)dt_1 =$$

$$= -\int_0^t PL\exp\left[-is(1-P)L\right](1-P)L\rho_1(t-s)ds. \tag{6}$$

Уравнение (6) называется основным кинетическим уравнением Цванцига.

Формально основное кинетическое уравнение (6) справедливо при любом t и для любого взаимодействия, поскольку при его выводе не делалось никаких приближений. На самом деле оно справедливо лишь при достаточно больших t, значительно больших времени восстановления корреляций, так как мы исходили из начального условия отсутствия их при $t = 0$.

Основное кинетическое уравнение имеет немарковский характер, т.е. обладает памятью, так как интегрирование совершается по прошедшему времени.

2. Кинетическое уравнение без временной свертки

Основное кинетическое уравнение Цванцига представляет собой сложное интегродифференциальное уравнение, изучение которого даже в самых простых случаях сопряжено с большими трудностями. По этой причине было предложено кинетическое уравнение без временной свертки, которое является таким же общим, как и уравнение Цванцига, но имеет более простую форму дифференциального уравнения.

Для получения данного уравнения запишем формальное решение точного уравнения Лиувилля (2) в виде

$$\rho(t) = \exp(-iL(t-t_1))\rho(t_1). \tag{7}$$

Данное выражение может быть формально обращено

$$\rho(t_1) = \exp(iL(t-t_1))\rho(t) = \exp(iL(t-t_1))(\rho_1(t)+\rho_2(t)). \tag{8}$$

Домножая обе части уравнения на проекционный оператор P и подставляя результат в правую часть уравнения (5) получим следующее выражение:

$$\rho_2(t) = -\int_0^t \exp[(t_1-t)(1-P)iL](1-P)iLP\exp(iL(t-t_1))dt_1 \times$$

$$\times(\rho_1(t)+\rho_2(t)), \tag{9}$$

которое может быть переписано в следующем виде

$$(1-\Xi(t))\rho_2(t) = \Xi(t)\rho_1(t), \tag{10}$$

где

$$\Xi(t) = -\int_0^t \exp[(t_1-t)(1-P)iL](1-P)iLP\exp(iL(t-t_1))dt_1.$$

Теперь, формально решив уравнение (10) и подставив результат в уравнение (2), мы придем к кинетическому уравнению без временной свертки

$$\frac{\partial\rho_1(t)}{\partial t} = -iPL(1-\Xi(t))^{-1}\rho_1(t). \tag{11}$$

Как видно, кинетическое уравнение без временной свертки (11) локальное во времени, однако оно также как и уравнение Цванцига, немарковское, поскольку вся память содержится в нетривиальной структуре коэффициентов. Изучение уравнения (11) в общем виде сильно затруднено, поскольку обращение супероператора в правой части является нетривиальной задачей. Более того, в принципе обратный супероператор может и не существовать глобально для произвольного момента времени. Тем не менее заметим, что уравнение (11) очень удобно для изучения релевантной динамики квантовой системы по теории возмущений, кроме того, можно показать, что обращение супероператора возможно для коротких времен или для случая, если оператор возмущения мал.

Рассмотрим теорию возмущений для кинетического уравнения без временной свертки. Поскольку структура супероператора в правой части нетривиальна, изучение уравнения по теории возмущений требует некоторой сноровки. В данном параграфе покажем несколько первых членов ряда теории возмущения для уравнения без временной свертки. Для начала заметим, что обратный оператор в правой части может быть разложен в геометрический ряд

$$(1 - \Xi(t))^{-1} = \sum_n (\Xi(t))^n. \tag{12}$$

Далее предполагается, что оператор $\Xi(t)$ может быть разложен в ряд теории возмущений

$$\Xi(t) = \sum_k \Xi_k(t), \tag{13}$$

где k указывает порядок разложения оператора по теории возмущений. Таким образом имеем

$$-iPL(1 - \Xi(t))^{-1} = -iL \sum_{k,n} (\Xi_k(t))^n = \sum_i K_i(t). \tag{14}$$

Раскладывая двойную сумму и собирая члены одного порядка получим

$$K_1(t) = -iPL(t)P, \tag{15}$$

$$K_2(t) = -\int_0^t dt_1 PL(t)(1-P)L(t_1)P, \tag{16}$$

$$K_3(t) = i\int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 PL(t)\left((1-P)L(t_1)(1-P)L(t_2)- \right.$$
$$\left. - (1-P)L(t_2)PL(t_1)\right)P. \tag{17}$$

Как видно, сложность слагаемых очень быстро возрастает, и их изучение становится затруднительным. На практике очень часто оказывается, что нечетные порядки теории возмущений обращаются в 0. Таким образом, наиболее используемой на практике формой кинетического уравнения без временной свертки оказывается следующая:

$$\frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = -\int_0^t dt_1 PL(t)L(t_1)\rho_1(t). \tag{18}$$

3. Уравнение Паули

Покажем в этом разделе, что из обобщенного уравнения Цванцига можно получить уравнение Паули (master equation). Пусть для рассматриваемой системы в начальный момент времени матрица плотности диагональна $\rho(0) = \rho_1(0)$. Такой выбор начального условия эквивалентен введению оператора проектирования P

$$P\rho = \rho_1$$

или

$$(P\rho)_{nm} = \rho_{nn}\delta_{nm}.$$

Уравнение Лиувилля в матричной форме

$$i\hbar\frac{\partial\rho_{nm}}{\partial t} = \sum_l (H_{nl}\rho_{lm} - \rho_{nl}H_{lm}) \tag{19}$$

удобно записать, используя так называемое тетрадное представление. Супероператоры или тетрады были введены в 1958 году Накадзимой [12]. Сопоставление некоторого оператора другому оператору можно рассматривать как отображение. Оператор тогда будет представляться матричными элементами с двумя индексами, а линейное преобразование операторов - матрицей с четырьмя индексами, т.е. супероператором или тетрадой (тетрадиком). Задаваемое тетрадой отображение действует уже не в пространстве состояний, а в пространстве операторов. Алгебра тетрад изоморфна алгебре матриц.

Примером супероператора может служить оператор выделения диагональной части

$$P\rho = \rho_1$$

или

$$\sum_{m'n'} P_{mnm'n'}\rho_{m'n'} = \rho_{nn}\delta_{mn},$$

где
$$P_{mnm'n'}\rho_{m'n'} = \delta_{nn'}\delta_{mm'}\delta_{nm}.$$

Другой пример супероператора - оператор Лиувилля (матричный элемент для этого оператора приведен ниже).

Единичная матрица в тетрадном представлении равна

$$(1)_{mnm'n'} = \delta_{mm'}\delta_{nn'}.$$

Уравнение Лиувилля

$$i\frac{\partial\rho}{\partial t} = L\rho$$

в матричной тетрадной форме имеет вид

$$i\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \sum_{m'n'} L_{mnm'n'}\rho_{m'n'}, \tag{20}$$

где $L_{mnm'n'}$ - матрица с удвоенными индексами или тетрада. Сравнивая (19) с (20), найдем, что

$$L_{mnm'n'} = H_{mm'}\delta_{nn'} - H_{n'n}\delta_{mm'}. \tag{21}$$

Для сокращения записей будем везде в дальнейшем полагать $\hbar = 1$.

Основное кинетическое уравнение в тетрадной форме примет вид

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} + i(PL\rho_1)_{mm} = \int_0^t \left[\mathcal{H}(s)\rho_1(t-s)\right]_{mm} ds, \tag{22}$$

где

$$\mathcal{H}(s) = -PLe^{-is(1-P)L}(1-P)L \tag{23}$$

и $\rho_{mm} = (\rho_1)_{mm}$. Нетрудно показать, что второе слагаемое в левой части уравнения (22) равно нулю. Для этого достаточно убедиться, что $PLP = 0$.

Действительно, в тетрадном представлении имеем

$$(PLP)_{mm'nn'} = (LP)_{mmnn'}\,\delta_{mm'},$$

$$(LP)_{mmnn'} = L_{mmnn}\delta_{nn'}.$$

В результате получаем

$$(PLP)_{mm'nn'} = L_{mmnn}\delta_{nn'}\delta_{mm'}.$$

Учитывая, что

$$L_{mmnn} = H_{mm}\delta_{mn} - H_{nm}\delta_{mn} = 0,$$

получаем необходимое соотношение.

В результате уравнение (22) примет вид

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int_0^t \left[\mathcal{H}(s)\rho_1(t-s)\right]_{mm} ds. \tag{24}$$

Учитывая, что оператор ρ_1 диагонален, запишем уравнение (24) в виде

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int_0^t \sum_n \mathcal{H}_{mmnn}(s)\rho_{nn}(t-s)ds, \tag{25}$$

где

$$\mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\left[PLe^{-is(1-P)L}(1-P)L\right]_{mmnn} =$$

$$= -\left[Le^{-is(1-P)L}(1-P)L\right]_{mmnn}$$

(где мы учли, что $(PL)_{mmlp} = L_{mmlp}$). Ядро интегрального уравнения (25) удовлетворяет правилу сумм

$$\sum_n \mathcal{H}_{mmnn}(s) = 0. \tag{26}$$

Для доказательства соотношения (26) распишем его в явном виде

$$\sum_n \mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\sum_n \left[Le^{-is(1-P)L}(1-P)L\right]_{mmnn} =$$

$$= -\sum_n \sum_{abcd} L_{mmab}\left[e^{-is(1-P)L}\right]_{abcd}\left[(1-P)L\right]_{cdnn} =$$

$$= -\sum_n \sum_{abcd(c\neq d)} L_{mmab}\left[e^{-is(1-P)L}\right]_{abcd} L_{cdnn}.$$

Оператор P выделяет диагональную часть, а $(1-P)$ - недиагональную часть любого оператора.

Теперь, выполняя суммирование по n, имеем

$$\sum_n L_{cdnn} = \sum_n H_{cn}\delta_{dn} - \sum_n H_{nd}\delta_{nc} =$$

$$= H_{cd} - H_{cd} = 0.$$

Используя правило сумм (26), получаем

$$\sum_{n\neq m} \mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\mathcal{H}_{mmmm}(s). \tag{27}$$

Соотношение (27) позволяет записать основное кинетическое уравнение (25) в следующем виде

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int_0^t \sum_{n\neq m} \mathcal{H}_{mmnn}(s)\left[\rho_{nn}(t-s) - \rho_{mm}(t-s)\right] ds. \tag{28}$$

Уравнение (28) представляет собой точное уравнение. Уравнение Паули можно получить из (28), если ограничиться в интегральном ядре членами второго порядка малости по взаимодействию. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид $H = H_0 + H_1$, где H_1 - малое возмущение. Тогда и оператор Лиувилля можно представить в аналогичном виде

$$L = L_0 + L_1.$$

Теперь ядро уравнения (28) мы можем представить как

$$\mathcal{H}_{mmnn}(s) = -[(L_0 + L_1)e^{-is(1-P)(L_0+L_1)}(1-P)(L_0+L_1)]_{mmnn} \quad (29)$$

Учитывая явный вид оператора L_0, формулу (29) можно упростить. Имеем

$$\begin{aligned}(L_0)_{mmm'n'} &= (H_0)_{mm'}\,\delta_{mn'} - (H_0)_{nm'}\,\delta_{mm'} = \\ &= E_m\delta_{mm'}\delta_{mn'} - E_m\delta_{mn'}\delta_{mm'} = 0,\end{aligned} \quad (30)$$

где E_m - собственные значения невозмущенного гамильтониана:

$$H_0\,|m\rangle = E_m\,|m\rangle\,.$$

Аналогично показывается, что

$$(L_0)_{mm'nn} = 0.$$

Тогда ядро $\mathcal{H}_{mmnn}(s)$ примет вид

$$\mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\left[L_1 e^{-is(1-P)(L_0+L_1)}(1-P)L_1\right]_{mmnn}. \quad (31)$$

Поскольку ядро (31) уже содержит множители второго порядка по взаимодействию, в операторе

$$T(s) = e^{-is(1-P)(L_0+L_1)}$$

можно пренебречь взаимодействием в экспоненте, положив его равным

$$T^0(s) = e^{-is(1-P)\,L_0}. \quad (32)$$

Кроме того, нетрудно доказать следующее соотношение

$$PL_0 = L_0 P = 0.$$

В тетрадном представлении произвольный матричный элемент оператора PL_0 можно записать как

$$(PL_0)_{mnm'n'} = (L_0)_{mmm'n'} = 0$$

в соответствии с формулой (31). Аналогично показывается, что и $L_0 P = 0$.

Теперь оператор $T^0(s)$ примет вид

$$T^0(s) = e^{-isL_0}. \tag{33}$$

Как обычно, операторное выражение (33) понимается в смысле разложения в ряд Тейлора

$$T^0(s) = e^{-isL_0} = 1 - isL_0 - \frac{(sL_0)^2}{2!} + \ldots \qquad .$$

Принимая во внимание соотношения

$$(L_0)_{mnm'n'} = (E_m - E_n)\delta_{mm'}\delta_{nn'},$$

$$(L_0)^2_{mnm'n'} = \sum_{ab} L_{0mnab} L_{0abm'n'} =$$

$$= \sum_{ab} (E_m - E_n)\delta_{ma}\delta_{nb}(E_a - E_b)\delta_{m'a}\delta_{n'b} = (E_m - E_n)^2 \delta_{mm'}\delta_{nn'},$$

$$. \quad . \quad . \qquad ,$$

можно записать произвольный матричный элемент оператора $T^0(s)$ в тетрадном представлении

$$\left(T^0\right)_{mnm'n'} = e^{-is\,\omega_{mn}} \delta_{mm'}\delta_{nn'}, \tag{34}$$

где $\omega_{mn} = E_m - E_n$.

Тогда ядро интегрального уравнения (28) во втором порядке по взаимодействию принимает вид

$$\mathcal{H}^0_{mmnn} = -\left[L_1 T^0(s)(1-P)L_1\right]_{mmnn} =$$

$$= -\sum_{abcd} (L_1)_{mmab} \left(T^0\right)_{abcd} [(1-P)L_1]_{cdnn} =$$

$$= -\sum_{abcd(c \neq d)} (L_1)_{mmab} \left(T^0\right)_{abcd} (L_1)_{cdnn} =$$

$$= -\sum_{abcd\,(c \neq d)} \left(H^1_{ma}\delta_{mb} - H^1_{bm}\delta_{ma}\right) e^{-is\,\omega_{ab}} \delta_{ac}\delta_{bd} \left(H^1_{cn}\delta_{dn} - H^1_{nd}\delta_{cn}\right) =$$

$$= -\sum_{ab\,(a \neq b)} \left(H^1_{ma}\delta_{mb} - H^1_{bm}\delta_{ma}\right) e^{-is\,\omega_{ab}} \left(H^1_{an}\delta_{bn} - H^1_{nb}\delta_{an}\right). \tag{35}$$

В правой части уравнения (28) суммирование производится при условии $m \neq n$. В этом случае для ядра интегрального уравнения $\mathcal{H}^0_{mmnn}$ из (32) получаем

$$\mathcal{H}^0_{mmnn} = \left|H^1_{mn}\right|^2 \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) \qquad (p \quad m \neq n). \tag{36}$$

В результате основное кинетическое уравнение приводится к следующему

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \sum_{n \neq m} \int_0^t \left|H^1_{mn}\right|^2 \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) \times$$
$$\times \left\{\rho_{nn}(t-s) - \rho_{mm}(t-s)\right\} ds. \tag{37}$$

При $n = m$ в правой части уравнения (37) выражение в фигурных скобках равно нулю, поэтому мы можем без всякого ущерба при суммировании по n включить в сумму слагаемое с $n = m$.

Работая во втором приближении по взаимодействию, мы можем заменить в подинтегральном выражении в правой части уравнения (37) диагональные элементы матрицы плотности медленно меняющимися амплитудами:

$$\rho_{nn}(t-s) \cong \rho_{nn}(t), \qquad \rho_{mm}(t-s) \cong \rho_{mm}(t).$$

С учетом сделанных упрощений для уравнения (37) получаем

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \sum_{n} \left|H^1_{mn}\right|^2 \left\{\rho_{nn}(t) - \rho_{mm}(t)\right\} \times$$
$$\times \int_0^t \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) ds. \tag{38}$$

Теперь интеграл по времени в правой части уравнения (38) легко вычисляется

$$\int_0^t \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) ds = -\int_{-t}^t e^{-is\,\omega_{mn}} ds = \frac{\sin \omega_{mn} t}{\omega_{mn}}.$$

Введем вероятность перехода в единицу времени

$$\Gamma_{mn}(t) = \left|H^1_{mn}\right|^2 \frac{2 \sin \omega_{mn} t}{\omega_{mn}}.$$

При $t \to \infty$ вероятность перехода становится не зависящей от времени, принимая вид

$$\Gamma_{mn}(t) = 2\pi \left| H^1_{mn} \right|^2 \delta(E_m - E_n),$$

или с учетом постоянной Планка

$$\Gamma_{mn}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| H^1_{mn} \right|^2 \delta\left(\frac{E_m - E_n}{\hbar} \right).$$

Теперь уравнение (38) окончательно принимает вид уравнения Паули

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \sum_n \Gamma_{mn} \left(\rho_{nn}(t) - \rho_{mm}(t) \right). \tag{39}$$

В качестве иллюстрации решения уравнения Паули рассмотрим два простых примера.

1. Спиновая релаксация.

Пусть в фиксированных точках находятся N электронов, для которых допускаются оба спиновых состояния: $\uparrow$ и $\downarrow$. Пусть $N_\uparrow$ - число электронов со спином $\uparrow$, а $N_\downarrow$ - число электронов со спином $\downarrow$. Допустим, что в момент времени $t = 0$ на систему накладывается сильное магнитное поле, так что все спины ориентируются в одном направлении:

$$N_\uparrow(0)/N = p_\uparrow(0) = 1, \qquad N_\downarrow(0)/N = p_\downarrow(0) = 0.$$

После выключения магнитного поля происходит переориентация спинов, причем частоты переходов $\Gamma_{\uparrow\downarrow} = \Gamma_{\downarrow\uparrow} = w$ определяются микроскопическими характеристиками. Например спин-решеточным взаимодействием. Из уравнения Паули

$$\frac{\partial p_\uparrow(t)}{\partial t} = w\, p_\downarrow(t) - w\, p_\uparrow(t), \qquad \frac{\partial p_\downarrow(t)}{\partial t} = w\, p_\uparrow(t) - w\, p_\downarrow(t)$$

следуют уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t}(p_\uparrow + p_\downarrow) = 0, \qquad \frac{\partial}{\partial t}(p_\uparrow - p_\downarrow) = -2\, w\, (p_\uparrow - p_\downarrow),$$

из которых получаем

$$p_\uparrow(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\, e^{-2\, w\, t}, \qquad p_\downarrow(t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\, e^{-2\, w\, t}.$$

Конечное состояние соответствует равновесному распределению

$$p_\uparrow(\infty) = p_\downarrow(\infty) = 1/2,$$

при котором намагниченность обращается в нуль. Время релаксации равно $1/2w$.

2. Двухуровневая система, находящаяся в контакте с термостатом.

Частоты переходов Γ_{12} и Γ_{21} между двумя уровнями, разделенными энергетическим интервалом ε, пропорциональны числу имеющихся конечных состояний, причем конечное состояние определяется микросостоянием полной системы, состоящей из рассматриваемой двухуровневой системы и термостата. Число состояний термостата задается статистическим весом $\Omega(E)$. При переходе энергия термостата меняется на ε (от E_0 до $E_0 - \varepsilon$). Считая, что $\varepsilon \ll E_0$, получаем с учетом формулы Планка для энтропии $S = k\,ln\,\Omega$

$$ln\frac{\Gamma_{12}}{\Gamma_{21}} = ln\frac{\Omega(E_0)}{\Omega(E_0-\varepsilon)} = ln\,\Omega(E_0) - ln\,\Omega(E_0) + \varepsilon)\,\frac{\partial}{\partial E} ln\,\Omega(E)|_{E_0} =$$

$$= \varepsilon\,\frac{\partial}{\partial E}\left(\frac{S}{k}\right)_{E_0} = \frac{\varepsilon}{k\,T}, \qquad \frac{\Gamma_{12}}{\Gamma_{21}} = e^{\varepsilon\,/k\,T}.$$

Частоты переходов не равны, поскольку учитываются степени свободы термостата.

Равновесие $(dp_1/dt = -dp_2/dt = 0)$ имеет место, когда

$$\Gamma_{12}\,p_2^0 - \Gamma_{21}\,p_1^0 = 0,$$

$$\frac{p_1^0}{p_2^0} = \frac{\Gamma_{12}}{\Gamma_{21}} = e^{\varepsilon\,/k\,T}$$

(каноническое распределение),

$$p_1^0 = \left[e^{-\varepsilon\,/k\,T} + 1\right]^{-1}, \qquad p_2^0 = \left[e^{\varepsilon\,/k\,T} + 1\right]^{-1}.$$

При $\varepsilon \gg k\,T$ приближение к равновесию $(\Gamma_{12} = \Gamma_{21} = w)$ описывается экспоненциальной функцией

$$p_1(t) - p_2(t) = p_1^0 - p_2^0 + \Delta p(t),$$

$$\Delta p(t) = \Delta p(0)\,e^{-2\,w\,t}.$$

4. Энтропия неравновесного состояния

Переход к сокращенному описанию неравновесных состояний позволяет ввести соответствующую им энтропию. Полный статистический оператор ρ не может быть использован для определения энтропии (как это принято в теории равновесного состояния

$$S = - \langle k \ln \rho \rangle \,,$$

т.к. среднее значение логарифма полного статистического оператора $\langle \ln \rho \rangle$ не будет изменяться со временем.

Действительно, если гамильтониан H_t системы явно зависит от времени, то уравнение Лиувилля допускает формальное интегрирование с помощью оператора эволюции $U(t,0)$ - унитарного оператора, удовлетворяющего уравнению

$$i\hbar \frac{\partial U(t,0)}{\partial t} = H_t \, U(t,0),$$

где $U^{+}(t_1,t_2) = U^{-1}(t_1,t_2)$,
и начальному условию

$$U(0,0) = 1.$$

Полный статистический оператор в момент времени t имеет вид

$$\rho(t) = U(t,0)\, \rho(0)\, U^{-1}(t,0).$$

Тогда для энтропии имеем

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

$$= -Sp\left\{\, U(t,0)\, \rho(0)\, U^{-1}(t,0)\; U(t,0)\; \ln\left(\rho(0)\, U^{-1}(t,0)\right)\right\},$$

так как

$$\ln\left(\, U(t,0)\, \rho(0)\, U^{-1}(t,0)\right) = \, U(t,0)\, \ln(\, \rho(0)\,)\, U^{-1}(t,0),$$

что справедливо вообще для любой функции от оператора и может быть доказано разложением в ряд Тейлора. Учитывая, что

$$U(t,0)\, U(t,0)^{-1} = 1$$

и что операторы под знаком шпура допускают циклические перестановки, получим

$$S(t) = -sp\,\{\, \rho(0)\, \ln \rho(0)\,\} = S(0).$$

Однако, если принять за энтропию неравновесного состояния среднее значение логарифма его медленноменяющейся или релевантной части $P\rho(t)$, представляющей сокращенное описание

$$S(t) = -\langle \ln \rho_1(t) \rangle = -\langle \ln P\rho(t) \rangle,$$

то такая энтропия уже может возрастать, поскольку ρ_1 удовлетворяет обобщенному кинетическому уравнению, а не уравнению Лиувилля.

В частном случае, когда проектирование означает взятие диагонального элемента в представлении гамильтониана без взаимодействия, энтропия равна

$$S(t) = -\langle \ln P\rho(t) \rangle = -sp\, \rho(t) \ln P\rho(t) = -\sum_n \rho_{nn}(t) \ln \rho_{nn}(t), \quad (40)$$

$$sp\, \rho(t) = \sum_n \rho_{nn}(t) = 1. \quad (41)$$

Покажем, что если ρ_{nn} удовлетворяет уравнению Паули, то энтропия (40) может только возрастать, и лишь в случае равновесия оставаться постоянной.

Продифференциируем (40) по времени

$$\dot{S} = -\sum_n (\ln \rho_{nn} + 1)\, \dot{\rho}_{nn} = -\sum_n \ln \rho_{nn}\, \dot{\rho}_{nn}, \quad (42)$$

так как второй член обращается в нуль вследствие условия нормировки (29).

Подставляя в (42) ρ_{nn} из уравнения Паули (39), получим

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{mn} \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| H^1_{nm} \right|^2 \delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} \right) \ln \rho_{nn}\, (\rho_{mm} - \rho_{nn}). \quad (43)$$

Используя симметрию коэффициентов под знаком суммы и переставляя индексы суммирования, запишем (43) в виде

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{mn} \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| H^1_{nm} \right|^2 \delta\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} \right) (\ln \rho_{nn} - \ln \rho_{mm})\, (\rho_{mm} - \rho_{nn}).$$

Каждое из слагаемых этой суммы положительно или равно нулю (т.к. $\ln(x/y)(x-y) \geq 0$).

Таким образом

$$\frac{dS}{dt} \geq 0,$$

т.е. энтропия возрастает (или остается постоянной).

Сделаем также еще одно замечание. Введенный нами ранее проекционный оператор P соответствует разбиению ρ на сумму двух членов, один из которых изменяется медленно, а другой - быстро. Можно также разбить ρ на произведение двух множителей, один из которых ρ_1 изменяется медленно, а другой ρ_2 - быстро:

$$\rho = \rho_1 \, \rho_2, \tag{44}$$

где ρ_1 представляет сокращенное описание неравновесного состояния, а ρ_2 содержит остальную несущественную информацию, т.е. описывает корреляции (аналогично в нелинейной механике колебание разбивается на произведение медленноменяющейся амплитуды и быстроменяющегося фазового множителя).

Разбиение (44) означает, что

$$\ln \rho = \ln \rho_1 + \ln \rho_2.$$

Если ввести не зависящий от времени проекционный оператор $\mathcal{P}$, то

$$\ln \rho_1 = \mathcal{P} \ln \rho, \quad \ln \rho_2 = (1 - \mathcal{P}) \ln \rho,$$

и

$$\ln \rho = \mathcal{P} \ln \rho + (1 - \mathcal{P}) \ln \rho.$$

Поскольку логарифм статистического оператора удовлетворяет тому же уравнению Лиувилля, что и сам ρ, нетрудно для $\mathcal{P} \ln \rho$, соответствующего сокращенному описанию, получить точно такое же обобщенное кинетическое уравнение Цванцига как и для $\rho_1 = P\rho$.

5. Обобщенное кинетическое уравнение для релаксационных процессов

При описании релаксационных явлений в макроскопических конденсированных средах удобно представить обобщенное кинетическое уравнение Цванцига (6) в несколько ином виде. Рассмотрим квантовую систему, состоящую из двух взаимодействующих частей: подсистемы S (это может быть, например, система спинов во внешнем магнитном поле) и термостата T. Гамильтониан такой системы можно записать в виде

$$H = H_S + H_T + gH_{ST}.$$

Здесь H_S, H_T и gH_{ST} - соответственно гамильтонианы системы S, термостата и взаимодействия, а g - параметр этого взаимодействия. Мы будем интересоваться линейным откликом системы на малое внешнее возмущение, описываемое гамильтонианом H'.

Оператор Лиувилля, соответствующий гамильтониану H также распадается на три слагаемых:

$$L = L_S + L_T + gL_{ST}. \tag{45}$$

Введем для подсистемы S редуцированный статистический оператор

$$\rho_S(t) = sp_T\ \rho(t),$$

где $\rho(t)$ - статистический оператор полной системы и операция sp_T производится по переменным термостата.

Для среднего значения любого оператора подсистемы S имеем

$$\langle X_S(t)\rangle = sp_{S,T}\ \{X_S\,\rho(t)\} = sp_S\ \{X_S\ sp_T\,[\rho(t)]\} = sp_S\ \{X_S\,\rho_S(t)\}\,.$$

В состоянии термодинамического равновесия статистический оператор системы описывается каноническим распределением Гиббса

$$\rho_\beta = Q_\beta^{-1} e^{-\beta H}, \qquad Q_\beta = sp\left\{e^{-\beta H}\right\},$$

где $\beta = 1/kT$ - обратная температура термостата. Соответствующий равновесный редуцированный статистический оператор

$$\rho_{S\beta} = Q_\beta^{-1} sp_T\ e^{-\beta H}.$$

Если равновесное состояние возмущено внешними силами, которые постоянны во времени и связаны только с подсистемой S, система будет релаксировать к новому стационарному состоянию вида

$$\rho_{st} = \frac{e^{-\beta(H+H_S')}}{sp\, e^{-\beta(H+H_S')}}, \tag{46}$$

где H_S' описывает взаимодействие с внешними силами.

Для слабого внешнего возмущения с точностью до членов первого порядка по внешнему возмущению

$$\rho_{st} = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\alpha\, Q_\beta^{-1} e^{-\alpha H}\left[1 - \beta H_S' + \beta\left\langle H_S'\right\rangle_\beta\right] e^{-(\beta-\alpha)H}, \tag{47}$$

где

$$\left\langle H_S'\right\rangle_\beta = sp\left\{\rho_\beta\, H_S'\right\}.$$

При записи формулы (47) мы воспользовались математическим тождеством

$$[A, e^B] = \int_0^1 d\varphi\, e^{\phi\, B}\,[A, B]\, e^{(1-\varphi)B},$$

которое доказывается следующим образом:

$$A\, e^B - e^B\, A = C(0) - C(1) = -\int_0^1 d\varphi\, \frac{dC(\varphi)}{d\varphi},$$

где

$$C(\varphi) = e^{\varphi\, B}\, A\, e^{\,(1-\varphi)\, B}.$$

Подставляя

$$\frac{dC(\varphi)}{d\varphi} = -e^{\varphi\, B}\,[A, B]\, e^{\,(1-\varphi)\, B},$$

получим требуемое тождество.

Поставим теперь перед собой задачу исследовать релаксацию системы с гамильтонианом H из начального неравновесного состояния вида (47). Для этих целей введем релевантный статистический оператор

$$\rho_1(t) = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\alpha\, Q_\beta^{-1} e^{-\alpha H}\, D_S\, e^{-(\beta-\alpha)H}, \tag{48}$$

где оператор D_S, действующий только на переменные S-подсистемы, определяется условием

$$sp_T\,\left\{\rho_1(t)\right\} = sp_T\,\left\{\rho(t)\right\} = \rho_S(t). \tag{49}$$

Следовательно, при рассмотрении состояния подсистемы S релевантный оператор ρ_1 эквивалентен полному статистическому оператору. (Если мы рассматриваем релаксацию из начального состояния типа (46) в случае, когда возмущение H'_S не является малым, релевантный статистический оператор можно выбрать в виде $\rho_1(t) = \exp\{-\beta[H - \mu_S(t)]\}$, где $\mu_S(t)$ определяется условием $sp_T\ \{\rho_1(t)\} = \rho_S(t)$). Определим преобразование Σ:

$$\Sigma\, X = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\alpha\, Q_\beta^{-1} e^{-\alpha H}\, X\, e^{-(\beta-\alpha)H}, \tag{50}$$

где X - произвольный оператор, действующий на переменные полной системы.

Тогда релевантный статистический оператор можно записать

$$\rho_1(t) = \Sigma\, D_S(t). \tag{51}$$

Введем также преобразование Σ_S, которое действует на операторы подсистемы S:

$$\Sigma_S\, X_S = sp_T\ \{\Sigma\, X_S\}\,. \tag{52}$$

Тогда условие (49) можно записать как

$$\Sigma_S\, D_S(t) = \rho_S(t) = sp_T\, \{\rho(t)\}\,. \tag{53}$$

Учитывая соотношения (51) и (53), релевантный статистический оператор можно записать в стандартном виде

$$\rho_1(t) = P\rho(t),$$

где

$$P\, X = \Sigma \Sigma_S^{-1}\, sp_T\ \{X\}\,. \tag{54}$$

Здесь P - проекционный оператор, удовлетворяющий соотношению $P^2 = P$. Транспонированное преобразование P^T, определяемое соотношением

$$sp\ \{X\, P\, Y\} = sp\ \left\{Y\, P^T\, X\right\},$$

имеет вид

$$P^T\, X = \Sigma_S^{-1}\, sp_T\ \{\Sigma\, X\}\,. \tag{55}$$

С использованием (54) и (55) находим, что

$$P^T\, \Sigma = \Sigma\, P. \tag{56}$$

Редуцированный оператор S-подсистемы и релевантный оператор связаны соотношениями

$$\rho_S(t) = \Sigma_S \, \Sigma^{-1} \, \rho_1(t), \qquad \rho_1(t) = \Sigma \Sigma_S^{-1} \, \rho_S(t). \tag{57}$$

Теперь основное кинетическое уравнение Цванцига (6) можно представить в виде

$$\frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} + i\Sigma \, \Sigma_S^{-1} \, sp_T \, L \, P\rho(t) =$$

$$= -\int_0^t \Sigma \, \Sigma_S^{-1} sp_T \, \{L \exp\left[-is(1-P)L\right]](1-P)L \, P\rho(t-s)\} \, ds. \tag{58}$$

Учитывая связь между релевантным и редуцированным статистическими операторами (57), уравнение (58) можно записать

$$\dot{\rho}_S(t) = \Omega_S \rho_S(t) + \int_0^t ds \mathcal{H}_S(s) \rho_S(t-s), \tag{59}$$

где мы ввели операторы

$$\Omega_S \, X_S = -i \, sp_T \, L \, \Sigma \, \Sigma_S^{-1} \, X_S, \tag{60}$$

и

$$\mathcal{H}(s)_S \, X_S = - \, sp_T \, \left\{ L \exp\left[-is(1-P)L\right] (1-P)L \, \Sigma \, \Sigma_S^{-1} \right\}. \tag{61}$$

Операторы Ω_S и $\mathcal{H}_S$ действуют в пространстве статистических операторов подсистемы S. Уравнение (59) представляет собой обобщенное кинетическое уравнение, которое описывает эволюцию редуцированного статистического оператора $\rho_S(t)$ в линейном режиме вблизи равновесия. Это ограничение обусловлено тем, что начальное состояние $\rho(0)$ выбирается в виде (47), которое получено из более общего выражения (46) в линейном приближении по внешнему возмущению H'_S (нетрудно заметить, что при таком выборе начального состояния $\rho(0) = \rho_1(0)$). В этом уравнении переменные термостата исключены всюду, кроме члена с памятью $\mathcal{H}(s)$.

Введем оператор $\mu_S(t)$, действующий в пространстве S-переменных

$$\mu_S(t) = \frac{1}{\beta} \, \{D_S(t) - 1\}, \tag{62}$$

где оператор $D_S(t)$ был введен в (48). Используя (53), получаем

$$\mu_S(t) = \frac{1}{\beta} \, \left\{ \Sigma_S^{-1} \, \rho_S(t) - 1 \right\}. \tag{63}$$

Из формул (50), (52) имеем

$$\Sigma\, 1 = \rho_\beta, \qquad \Sigma_S\, 1 = \rho_{S\beta}.$$

Тогда

$$\mu_S(t) = \frac{1}{\beta}\, \Sigma_S^{-1}\, [\rho_S(t) - \rho_{S\beta}]. \tag{64}$$

Таким образом, $\mu_S(t)$ характеризует отклонение системы от равновесия. Можно показать [14], что в термодинамическом смысле эта величина может рассматриваться как обобщенная сила, сопряженная редуцированному статистическому оператору

$$\mu_S(t) = \delta F^*(t)/\delta\rho_S(t),$$

где F^* – крупноструктурная свободная энергия.

Теперь, используя соотношения (60), (61), (64) и

$$\Sigma\, \Sigma_S^{-1}\, \rho_{S\beta} = \rho_\beta, \qquad L\, \rho_\beta = 0,$$

обобщенное кинетическое уравнение можно записать в виде транспортного уравнения

$$\dot\rho_S(t) = -V_S\, \mu_S(t) - \int_0^t ds\, R_S(s)\, \mu_S(t-s), \tag{65}$$

где мы ввели операторы

$$V_S\, X_S = i\, \beta\, sp_T\, \{L\, \Sigma\, X_S\} \tag{66}$$

и

$$R_S(t)\, X_S = \beta\, sp_T\, \left\{ L\, e^{-i\,(1-P)\, L\, t}\, (1-P)\, L\, \Sigma\, X_S \right\}, \tag{67}$$

которые связаны с операторами Ω_S и $\mathcal{H}_S$ следующими соотношениями

$$\Omega_S = -\frac{1}{\beta}\, V_S\, \Sigma_S^{-1}, \qquad \mathcal{H}_S(t) = -\frac{1}{\beta}\, R_S(t)\, \Sigma_S^{-1}. \tag{68}$$

Воспользовавшись тождеством

$$[A, e^B] = \int_0^1 d\phi\, e^{\phi\, B}\, [A, B]\, e^{(1-\phi)B} \tag{69}$$

и определением (50) получаем

$$[X, \rho_\beta] = -\int_0^\beta d\alpha\, e^{-\alpha\, H}\, [X, H]\, e^{-(\beta-\alpha)\, H} = \hbar\, \beta\, \Sigma\, L\, X. \tag{70}$$

При записи формулы (70) мы учли определение оператора Лиувилля

$$L\,X = [H, X]/\hbar.$$

Теперь мы имеем

$$L\,\Sigma = \Sigma\,L. \tag{71}$$

Используя это соотношение, выражение для V_S можно преобразовать к виду

$$V_S\,X_S = \frac{i}{\hbar}\,sp_T\,\left\{[X_S, \rho_\beta]\right\} = -\frac{i}{\hbar}\,[\rho_{S\beta}, X_S]. \tag{72}$$

Полученные формулы позволяют определить эволюцию как статистического оператора $\rho_S(t)$, так и временных корреляционных функций динамической подсистемы S

$$\langle X_S(t+s)\,Y_S(s)\rangle = \langle X_S(t)\,Y_S(0)\rangle =$$

$$= sp\,\left\{X_S\,e^{-i\,L\,t}\,\Sigma\,Y_S\right\} = sp_S\,\left\{X_S\,G_S(t)\,Y_S\right\}, \tag{73}$$

где

$$G_S(t)\,X_S = sp_T\,\left\{e^{-i\,L\,t}\,\Sigma\,X_S\right\}.$$

Нетрудно показать, что $G_S(t)$ удовлетворяет обобщенному уравнению (47) с начальным условием $G_S(0) = \Sigma_S$.

Рассмотрим теперь обобщенное кинетическое уравнение для редуцированного статистического оператора $\rho_S(t)$ (59) в предположениии о слабом взаимодействии между подсистемой S и термостатом T. Для этой цели получим предварительно ряд полезных соотношений. Легко видеть, что для оператора Лиувилля вида (45)

$$sp_T\,\left\{L_S\,X\right\} = L_S\,sp_T\left\{X\right\} \tag{74}$$

и

$$sp_T\,\left\{L_T\,X\right\} = 0. \tag{75}$$

Тогда для оператора Ω_S имеем

$$\Omega_S\,X_S = -i\,L_S\,X_S - i\,g\,sp_T\,\left\{L_{ST}\,\Sigma\Sigma_S^{-1}\,X_S\right\}. \tag{76}$$

Из (54) и (60) получаем

$$-i\,sp_T\,\left\{L\,P\,X\right\} = -i\,sp_T\,\left\{L\,\Sigma\,\Sigma_S^{-1}\,sp_T\,[X]\right\} = \tag{77}$$

$$= \Omega_S\,sp_T\,\left\{X\right\} = sp_T\,\left\{\Omega_S\,X\right\}.$$

Далее с учетом (55) находим

$$\Omega_S^T X_S = i\,\Sigma_S^{-1}\, sp_T\ \{\Sigma\, L\, X_S\} = i\, P\, L\, X_S, \tag{78}$$

где Ω_S^T - транспонированное преобразование, удовлетворяющее условию

$$sp\ \left\{X\,\Omega_S^T\,Y\right\} = sp\ \{Y\,\Omega_S\,Y\}\,.$$

Соотношение (74) совместно с (56) и (71) дает

$$i\,(1-P)\,\Sigma\,X_S = i\,\Sigma\,(1-P)\,L\,X_S = \Sigma\,(i\,L - \Omega_S^T)\,X_S. \tag{79}$$

Используя (78) и (79), выражение (67) для оператора R_S запишем как

$$R_S(t)\,X_S = \beta\, sp_T\ \left\{(-i\,L - \Omega_S)\,e^{-i\,(1-P)\,L\,t}\,\Sigma\,(i\,L - \Omega_S^T)\,X_S\right\}. \tag{80}$$

Все полученные выше соотношения точные. Теперь воспользуемся малостью взаимодействия и представим полученные величины в виде разложения по малому параметру g.

Имеем

$$\Sigma\,X = \tilde{\Sigma}\,X + O(g), \tag{81}$$

где

$$\tilde{\Sigma}\,X = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\alpha\,\frac{1}{sp\left\{e^{-\beta\,H_0}\right\}}\ e^{-\alpha\,H_0}\ X\ e^{-(\beta-\alpha)\,H_0}$$

и $H_0 = H_S + H_T$.

С учетом (52) и (81) получаем

$$\Sigma_S\,X_S = \tilde{\Sigma}_S\,X_S + O(g), \tag{82}$$

где

$$\tilde{\Sigma}_S\,X_S = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\alpha\,\frac{1}{sp\left\{e^{-\beta\,H_S}\right\}}\ e^{-\alpha\,H_S}\ X_S\ e^{-(\beta-\alpha)\,H_0}$$

и

$$\tilde{\Sigma}\,X_S = \tilde{\rho}_{T\beta}\,\tilde{\Sigma}_S\,X_S. \tag{83}$$

Здесь

$$\tilde{\rho}_{T\beta} = \frac{e^{-\beta\,H_T}}{sp_T\ \left\{e^{-\beta\,H_T}\right\}}.$$

Теперь из (54) мы имеем, что

$$P = \tilde{P}\ +\ O(g), \tag{84}$$

где

$$\tilde{P}\, X = \tilde{\rho}_{T\beta}\, sp_T\, \left\{ X \right\}.$$

Введем теперь оператор Лиувилля L_0 для несвязанных подсистем S и T

$$L_0 = L_S + L_T. \tag{85}$$

Используя (74), (75) и условие $L_T\, \tilde{\rho}_{T\beta} = 0$, находим, что

$$L_0\, \tilde{P} = \tilde{P}\, L_0.$$

В пределе $g \to 0$ стационарное решение $\rho_{S\beta}$ точного обобщенного кинетического уравнения есть

$$\tilde{\rho}_{S\beta} = \frac{e^{\beta\, H_S}}{sp_S\, \left\{ e^{-\beta\, H_S} \right\}}, \tag{86}$$

где β - обратная температура термостата. Взаимодействие с термостатом приводит к отклонению $\rho_{S\beta}$ от канонической формы (86). Однако мы пренебрежем этим отклонением. Тогда оператор Σ_S будет аппроксимироваться величиной $\tilde{\Sigma}_S$.

Заменяя $\rho_{S\beta}$ на $\tilde{\rho}_{S\beta}$, для оператора V_S получаем

$$\tilde{V}_S\, X_S = -\frac{i}{\hbar}\, [\tilde{\rho}_{S\beta}, X_S] = i\, \beta\, \tilde{\Sigma}_S\, L_S\, X_S.$$

Так как

$$\tilde{\Sigma}_S\, L_S = L_S\, \tilde{\Sigma}_S,$$

то имеем

$$\tilde{\Omega}_S = -\frac{1}{\beta}\, \tilde{V}_S\, \tilde{\Sigma}_S^{-1} = i\, L_S. \tag{87}$$

Таким образом, обратимая часть в обобщенном кинетическом уравнении сводится в пределе $g \to 0$ к свободному движению подсистемы S.

Теперь нам осталось найти разложение второго слагаемого в правой части обобщенного кинетического уравнения (65), определяемого оператором $R_S(t)$. Из соотношения (76) учетом (81), (82) и (83) получаем

$$\Omega_S\, X_S = i\, L_S\, X_S - i\, g\, sp_T\, \left\{ L_{ST}\, \tilde{\rho}_{T\beta}\, X_S \right\} \,+\, O(g^2) =$$

$$= -i\, L_S\, X_S - \frac{i\, g}{\hbar}\, \left[sp_T\, \left\{ \tilde{\rho}_{T\beta}\, H_{ST} \right\}, X_S \right] \,+\, O(g^2).$$

Наконец, для оператора R_S разложение по g принимает вид

$$R_S(t)\, X_S = g^2\, \beta\, sp_T\, \left\{ \delta L_{ST}\; e^{-i\, L_0\, t}\; \tilde{\Sigma}\;\; \delta L_{ST}\;\, X_S \right\} + O(g^3), \qquad (88)$$

где

$$\delta L_{ST}\, X = \frac{1}{\hbar}\, [\delta H_{ST}\, ,\; X]$$

и

$$\delta H_{ST} = H_{ST} - sp_T\, \left\{ \rho_{T\beta}\, H_{ST} \right\}.$$

Хотя $R_S(t)$ имеет второй порядок по g, отбросить его нельзя, т.к. он определяет эффекты памяти в изучаемой системе.

Полученные выше формулы будут использованы в разделе 7 для описания линейной релаксации спиновой системы в термостате.

6. Сверхизлучение Дикке

В последнее время заметно возрос интерес к исследованию кооперативных когерентных процессов в системах атомов и молекул, взаимодействующих с электромагнитными полями. Это связано, в первую очередь, с существенным прогрессом в технике оптического эксперимента. Появление лазеров с перестраиваемой частотой в наносекундном, пикосекундном и фемтосекундном диапазоне длительности импульсов, способных создавать ультракороткие импульсы достаточной мощности (до терраватт), позволило экспериментально исследовать нелинейные коллективные когерентные эффекты в макроскопических средах, такие как сверхизлучение, фотонное эхо, самоиндуцированная прозрачность и др. Сверхизлучение, предсказанное в 1954 г. американским физиком Робертом Дикке [23], является одним из наиболее важных когерентных оптических явлений. Основной особенностью сверхизлучения является спонтанный самопроизвольный переход системы первоначально нескоррелированных излучателей в процессе эволюции в коллективное коррелированное излучательное состояние с интенсивностью, пропорциональной квадрату числа излучателей. Процесс генерации когерентного излучения в сверхизлучательном лазере не связан, в отличие от обычного лазера, с наличием резонатора. Когерентность здесь возникает не за счет многократного прохождения фотонами рабочего вещества, а на одном проходе в результате взаимодействия излучателей через общее поле излучения. С практической точки зрения интерес к сверхизлучению обусловлен, в первую очередь, перспективой использования эффекта для создания лазеров в диапазонах, где стандартные схемы генерации когерентного излучения неосуществимы из-за отсутствия зеркал (рентгеновский и гамма-диапазоны). В последнее время повышенный интерес к исследованию сверхизлучения связан также с тем, что данный эффект играет важную роль в оптическом поведении низкотемпературных плотных сред, таких как бозе-эйнштейновские конденсаты.

Рассмотрим макроскопическую систему двухуровневых атомов, взаимодействующих с квантовым электромагнитным полем. Ограничимся рассмотрением случая, когда длина волны излучения двухуровневых атомов значительно превосходит размеры образца, в котором находятся излучатели (так называемая точечная модель Дикке). Рассмотрение упрощенной модели позволит не принимать во внимание эффекты распостранения излучения по образцу, а также интерференции и дифракции излучения отдельных атомов. Учет указанных эффектов принципиально не изменяет самого процесса коллективного спонтанного излучения или сверхизлучения, а для образцов типа "карандаш у которых поперечные размеры гораздо меньше длины (а именно такие образцы использовались и в многочисленных экспериментах), может быть сведен, как было показано Ресауэром и Таллетом (см. [23]), к эффективному уменьшению числа излучателей. Гамильтониан рассматриваемой модели можно записать в виде [23,24]

$$H = H_A + H_F + H_{AF}. \tag{89}$$

Гамильтониан системы свободных двухуровневых атомов (без учета кинетической энергии центров масс излучателей)

$$H_A = \hbar\Omega \sum_f R_f^z,$$

гамильтониан свободного электромагнитного поля

$$H_F = \sum_k \hbar\omega_k a_k^+ a_k,$$

- гамильтониан взаимодействия излучателей с квантовым электромагнитным полем в дипольном приближении

$$H_{AF} = \sum_{k,f} g_k (a_k R_f^+ + a_k^+ R_f^-).$$

Здесь $R_f^z = 1/2\sigma_f^z$ и $R^{\pm} = 1/2(\sigma_f^x \pm \sigma_f^y)$ - квазиспиновые операторы для f-го атома, выражающиеся через матрицы Паули и удовлетворяющие коммутационным соотношениям паулевского типа

$$[R_f^{\pm}, R_{f'}^{\mp}] = \pm\delta_{ff'} 2R_f^z,$$

$$[R_f^{\pm}, R_{f'}^z] = \mp\delta_{ff'} R_f^{\pm};$$

$a_k^+(a_k)$ - операторы рождения (уничтожения) фотона моды k (с волновым вектором $\vec{k}$ и поляризацией λ); g_k - константа диполь-фотонного взаимодействия.

Пусть ρ - статистический оператор всей системы, удовлетворяющий уравнению Лиувилля (1) с гамильтонианом (89). Введем редуцированные статистические операторы атомной подсистемы и электромагнитного поля $\rho_A = sp_F\, \rho, \quad \rho_F = sp_A\, \rho$. Ограничимся рассмотрением проблемы спонтанного излучения системы при отсутствии в начальный момент времени макроскопической поляризации в атомной подсистеме. Тогда начальное состояние можно выбрать в следующем виде

$$\rho(0) = \rho_A(0) \otimes \rho_F(0),$$

где $\rho_F(0) = |0\rangle\langle 0|$. Перейдем к представлению взаимодействия с помощью унитарного преобразования

$$U = \exp[-i(H_A + H_F)t/\hbar].$$

В представлении взаимодействия уравнение Лиувилля имеет вид

$$\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + i\tilde{L}(t)\tilde{\rho} = 0,$$

где $$\tilde{L}(t)\tilde{\rho} = [\tilde{H}_{A,F}, \tilde{\rho}]/\hbar \quad \text{и}$$

$$\tilde{H}_{AF} = \sum_{k,f} g_k (a_k(t) R_f^+(t) e^{i\kappa_k^- t} + a_k^+(t) R_f^-(t) e^{i\kappa_k^+ t}), \qquad (90)$$

где $\kappa_k^{\pm} = \Omega \pm \omega_k$ и введено обозначение $\tilde{X}(t) = U^{-1}(t)\, X\, U(t)$ для операторов в представлении взаимодействия.

При записи формулы (90) мы учли, что

$$e^{i\,\hbar\,\omega_k\, a_k^+ a_k} \;\; a_k^+ \; e^{-i\,\hbar\,\omega_k\, a_k^+ a_k} = e^{i\,\hbar\,\omega_k} \;\; a_k^+ \; ,$$

$$e^{i\,\hbar\,\Omega\, R_f^z} \;\; R_f^+ \; e^{-i\,\hbar\,\Omega\, R_f^z} = e^{i\,\hbar\,\Omega} \;\; R_f^+ \; .$$

Вводя проекционный оператор P, мы можем переписать обобщенное уравнение Цванцига (6) в представлении взаимодействия

$$\frac{\partial (P\tilde{\rho})}{\partial t} = -iP\tilde{L}(t)P\tilde{\rho} -$$

$$-P\tilde{L}(t)\int_0^t ds \exp\left[i(1-P)\int_{t-s}^t \tilde{L}(t')dt'\right](1-P)\tilde{L}(t-s)P\tilde{\rho}(t-s). \quad (91)$$

Выберем проекционный оператор в виде $P = |0\rangle\langle 0|\, Sp_F$. Нетрудно заметить, что этот оператор действительно является проекционным оператором, т.е. $P^2 = P$. При вычислении операции Sp_F по полевым переменным от статистического оператора полной системы мы получаем редуцированный статистический оператор атомной подсистемы ρ_A

$$\rho_A = Sp_F\, \rho,$$

который позволяет вычислять средние значения для операторов, действующих на переменные атомной подсистемы

$$\langle X_A(t)\rangle = Sp_{A,F}\, X_A\, \rho(t) = Sp_A\, X_A\, Sp_F\, \rho(t) =$$

$$= Sp_F\, X_A\, \rho_A(t) = Sp_F\, \tilde{X}_A(t)\, \tilde{\rho}_A(t).$$

Нетрудно показать, что $P\tilde{L}(t)P = 0$. Тогда обобщенное кинетическое уравнение в представлении взаимодействия примет вид

$$|0\rangle\langle 0| \frac{\partial \tilde{\rho}_A}{\partial t} =$$

$$= -|0\rangle\langle 0| \int_0^t ds Sp_F\, \tilde{L}(t) \exp\left[i(1-P)\int_{t-s}^{t} \tilde{L}(t')dt'\right] \tilde{L}(t-s)\times \tag{92}$$

$$\times |0\rangle\langle 0|\, \tilde{\rho}_A(t-s).$$

Будем искать решение уравнения (92) с точностью до членов второго порядка малости по взаимодействию. Подинтегральное выражение уже содержит в качестве множителей операторы $\tilde{L}(t)$ и $\tilde{L}(t-s)$, пропорциональные малой константе взаимодействия. Поэтому в разложении $\exp\left[i(1-P)\int_{t-s}^{t}\tilde{L}(t')dt'\right]$ по малой константе взаимодействия мы оставим только первое слагаемое, т.е. 1.

Теперь мы можем вычислить подинтегральное выражение в правой части уравнения (92). Имеем

$$\tilde{L}(t-s)\,|0\rangle\langle 0|\,\tilde{\rho}_A(t-s) = [\tilde{H}_{A,F}(t-s), |0\rangle\langle 0|\,\tilde{\rho}_A(t-s)]/\hbar =$$

$$= \left\{\tilde{H}_{A,F}(t-s)\,|0\rangle\langle 0|\,\tilde{\rho}_A(t-s) - \tilde{\rho}_A(t-s)\,|0\rangle\langle 0|\,\tilde{H}_{A,F}(t-s)\right\}/\hbar$$

(мы учли, что редуцированный статистический оператор $\tilde{\rho}_A(t-s)$ коммутирует с оператором $|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|$, действующим лишь на переменные поля).

Учитывая известные свойства операторов рождения и уничтожения фотонов

$$a_k^+\,|\,0\,\rangle = |\,1_k\,\rangle\,, \qquad a_k\,|\,0\,\rangle = 0,$$

где $|\,1_k\,\rangle$ - состояние электромагнитного поля с одним фотоном в моде , получаем

$$\tilde{L}(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,\tilde{\rho}_A(t-s) = \sum_k g_k/\hbar\Big\{e^{-i\kappa_k(t-s)}R^-\,|\,1_k\,\rangle\,\langle\,0\,|\,\tilde{\rho}_A(t-s) -$$

$$- e^{i\kappa_k(t-s)}\tilde{\rho}_A(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,1_k\,|\,R^+\Big\}\,. \qquad (93)$$

Здесь мы ввели коллективные атомные операторы

$$R^{\pm} = \sum_f R_f^{\pm}, \qquad R^z = \sum_f R_f^z.$$

Подействуем теперь на выражение (93) оператором $\tilde{L}(t)$

$$\tilde{L}(t)\tilde{L}(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,\tilde{\rho}_A(t-s) =$$

$$= \sum_{kk'} g_k\, g_{k'}/\hbar^2\{e^{i\kappa_k t}\, e^{-i\kappa_{k'}(t-s)}\,|0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,R^+R^-\tilde{\rho}_A(t-s)\,\delta_{kk'} +$$

$$+ e^{i\kappa_k t}\; e^{-i\kappa_{k'}(t-s)}\; R^-\,R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)[\quad |\,2_k\,\rangle\,\langle\,0\,|\;\delta_{kk'} +$$

$$+\;\; |\ldots,1_k,\ldots,1_{k'},\ldots\rangle\,\langle\,0\,|\;(1-\delta_{kk'})\quad] -$$

$$-\;\, e^{-i\kappa_k t}\; e^{i\kappa_{k'}(t-s)}\; R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\;|\,1_k\,\rangle\,\langle\,1_{k'}\,|\delta_{kk'} -$$

$$-\;\, e^{i\kappa_k t}\; e^{-i\kappa_{k'}(t-s)}\; R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+|\,1_{k'}\,\rangle\,\langle\,1_k\,|\;\delta_{kk'} +$$

$$+\;\, e^{i\kappa_k t}\; e^{-i\kappa_{k'}(t-s)}\;\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\,R^-[\quad |\,0\,\rangle\,\langle\,2_k\,|\;\delta_{kk'} +$$

$$+\;\; |\,0\,\rangle\,\langle\ldots,1_k,\ldots,1_{k'},\ldots|\;(1-\delta_{kk'})\quad] +$$

$$+\;\, e^{-i\kappa_k t}\; e^{i\kappa_{k'}(t-s)}\;\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\,R^-\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\;\delta_{kk'}\}. \qquad (94)$$

При вычислении операции Sp_F по переменным поля отличный от нуля вклад дадут лишь слагаемые, содержащие диагональные проекторы $|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|$ и $|\,1_k\,\rangle\,\langle\,1_k\,|$.

В результате имеем

$$Sp_A\,\tilde{L}(t)\tilde{L}(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,\tilde{\rho}_A(t-s) =$$

$$= \sum_k g_k^2/\hbar^2\,\big\{e^{i\kappa_k s}\,R^+\,R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s) - e^{-i\kappa_k s}\,R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\; +$$

$$+ e^{-i\kappa_k s}\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\,R^-\,e^{i\kappa_k s}\,R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,R^+\big\} =$$

$$= D^+(s)\,\big[\,R^+, R^-\,\tilde{\rho}_A(t-s)\,\big]\; +\; D^-(s)\,\big[\,\tilde{\rho}_A(t-s), R^+\,R^-\,\big]\,,$$

где
$$D^{\pm}(s) = \sum_k g_k^2/\hbar^2 e^{\pm i\kappa_k\, s}.$$

Тогда обобщенное кинетическое уравнение для редуцированного статистического оператора примет вид

$$\frac{\partial\tilde{\rho}_A(t)}{\partial t} = \int_0^t ds \left\{ D^{+}(s) \left[\, R^{+}, R^{-}\, \tilde{\rho}_A(t-s) \,\right] + \right.$$
$$\left. + D^{-}(s) \left[\, \tilde{\rho}_A(t-s), R^{+}\, R^{-} \,\right] \right\}. \qquad (95)$$

Для вычисления в явном виде интеграла по времени в правой части уравнения (95) во втором порядке по взаимодействию воспользуемся марковским приближением

$$\tilde{\rho}_A(t-s) \approx \tilde{\rho}_A(t),$$

т.е. заменим статистический оператор на его медленноменяющуюся амплитуду.

В марковском приближении уравнение (95) есть

$$\frac{\partial\tilde{\rho}_A(t)}{\partial t} = \Gamma/2 \left[\, R^{+}, R^{-}\, \tilde{\rho}_A(t) \,\right] \,+\, \Gamma/2 \left[\, \tilde{\rho}_A(t), R^{+}\, R^{-} \,\right], \qquad (96)$$

где
$$\Gamma = 2\int_0^{\infty} D^{\pm}(s) ds = \sum_k g_k^2/\hbar^2 \delta(\omega_k - \Omega)$$

(для времен $t \gg 1/\Omega$, для которых только и справедливо обобщенное уравнение Цванцига, верхний предел в интеграле по s можно заменить на ∞). Коэффициент $\Gamma = 1/\tau_0$ совпадает с вероятностью спонтанного излучения изолированного двухуровневого атома [16] (τ_0 - время спонтанного излучения изолированного атома).

Перейдем в уравнении (96) к представлению Шредингера. Воспользовавшись очевидными соотношениями

$$\frac{\partial\rho_A(t)}{\partial t} \;=\; \frac{\partial}{\partial t}\left\{ e^{-i\, H_A\, t/\hbar}\, \tilde{\rho}(t) e^{i\, H_A\, t/\hbar} \right\} \;=$$

$$=\; i/\hbar \left[\, H_A, \rho_A(t) \,\right] \quad + \quad e^{i\, H_A\, t/\hbar}\, \frac{\partial\tilde{\rho}_A(t)}{\partial t}\, e^{i\, H_A\, t/\hbar},$$

получаем

$$\frac{\partial\rho_A(t)}{\partial t} = i\,\Omega\, \left[\, R^{z}, \rho_A(t) \,\right] + \Gamma/2 \left[\, R^{+}, R^{-}\, \rho_A(t) \,\right] + \Gamma/2 \left[\, \rho_A(t), R^{+}\, R^{-} \,\right]. \qquad (97)$$

Исследуем теперь с помощью уравнения (97) кинетику атомной подсистемы. Вычислим среднюю полуразность населенностей $< R^z(t) >$,

$$< \dot{R}^z(t) >= Sp_A\ \{R^z\,\dot{\rho}_A(t)\} = -\,\Gamma\,Sp_A\ \left\{R^+\,R^-\,\dot{\rho}_A(t)\right\} =$$

$$= -\,\Gamma\,Sp_A\ \left\{R^+(t)\,R^-(t)\,\rho_A(0)\right\} = -\,\Gamma\ < R^+(t)\,R^-(t) >=$$

$$= -\,\Gamma\ \left(\frac{N}{2} + R^z(t)\right) - \Gamma\,S(t), \qquad (98)$$

где

$$< ... >= Sp\,(...\rho_A(0)), \qquad S(t) = \sum_{f\neq f'}\ < R_f^+(t)\,R_{f'}^-(t) > .$$

Уравнение для $< R^z(t) >$ получилось незамкнутым. Для коррелятора второго порядка из (97) можно получить следующее уравнение

$$\dot{S}(t) = 2\,\Gamma \sum_{f,f',f''(f\neq f')} < R_f^z(t)\,R_{f'}^+(t)\,R_{f''}^-(t) > .$$

Для тройного коррелятора с использованием (97) можно получить новое уравнение и т.д. Обычно в теории сверхизлучения используют расцепления корреляторов второго порядка вида

$$< R_f^z\,R_{f'}^+\,R_{f''}^- >=< R_f^z >< R_{f'}^+\,R_{f''}^- > . \qquad (99)$$

В рамках расцепления (99) для корреляторов первого и второго порядка получаем замкнутую систему уравнений

$$< \dot{R}^z(t) >= -\,\Gamma\ \left(\frac{N}{2}+ < R^z(t) >\right) - \Gamma\,S(t),$$

$$\dot{S}(t) = 2\,\Gamma\,S. \qquad (100)$$

Найдем приближенное решение системы уравнений (100). Предположим, что в начальном состоянии все атомы возбуждены

$$(< R^z(0) >= N/2),$$

но макроскопическая поляризация отсутствует, т.е. дипольные моменты атомов нескоррелированы ($S(0) = 0$). В этом случае второе слагаемое будет давать вклад в уравнение (98) только на достаточно больших временах $t \sim t_D$, где t_D - называется временем задержки. Коррелятор S на временах порядка времени задержки пропорционален квадрату числа излучателей N^2, в то время как $< R^z >$ пропорционально N. Тогда для времен $t \sim t_D$ система уравнений (100) принимает вид

$$< \dot{R}^z > \approx \; - \Gamma \, S, \qquad \dot{S} = 2 \, \Gamma \, S.$$

Откуда $< R^z >^2 + S = const = N^2/4$ и $S = N^2/4 - < R^z >^2$. Тогда для $< R^z >$ кинетическое уравнение (98) превращается в замкнутое уравнение

$$< \dot{R}^z > = - \, \Gamma \, (N^2 + < R^z >) - \Gamma \, (N^2/4 - < R^z >^2). \tag{101}$$

Решение уравнения (101) есть

$$< R^z(t) > = N/2 \, [1/N - (1 + 1/N) \; \tanh \{(t - t_D)/2 \, \tau_R\}] \, . \tag{102}$$

где $\tau_R = 1/\Gamma \, (1{+}N)$ - время коллективного излучения (сверхизлучения) сверхизлучательного импульса. Имея решение (102), нетрудно вычислить интенсивность сверхизлучательного импульса $I(t)$. Действительно, из закона сохранения энергии полной системы (атомы + фотоны):

$$I(t) = \frac{d}{dt} \sum_k \hbar \, \omega_k \; < a_k^+ \, a_k > = -\hbar \, \Omega \; < \dot{R}^z(t) > =$$

$$= \frac{\hbar \Omega}{4 \, \tau_R} \, (N^2 + 1)^2 \; sech^2 \; \frac{t - t_D}{2 \, \tau_R}.$$

Главной особенностью интенсивности является то, что на временах $t \sim t_D$ она пропорциональна не числу излучателей N (как при обычном спонтанном излучении), а квадрату числа излучателей N^2, что свидетельствует о коллективном когерентном характере излучения. Такое явление получило название сверхизлучения Дикке.

7. Динамика моды квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе

Рассмотрим теперь квантовую систему, которая состоит из подсистемы с небольшим числом степеней свободы (статистический оператор ρ_S) и термостата в состоянии термодинамического равновесия с чрезвычайно большим числом степеней свободы (статистический оператор ρ_T). Между подсистемами существует слабое взаимодействие. Если такая система выведена из положения равновесия, то можно считать, что в процессе эволюции состояние термостата не изменяется, т.е.

$$\rho_T(t) = \rho_T(0).$$

В качестве примера указанной системы можно рассмотреть моду квантового (лазерного) электромагнитного излучения в неидеальном резонаторе, который выступает в качестве термостата. Гамильтониан такой модели имеет вид

$$H = H_S + H_T + H_{ST}. \tag{103}$$

Здесь $H_S = \hbar\Omega\, a^+ \, a$ - гамильтониан моды поля в резонаторе с собственной частотой Ω, $a^+(a)$ - оператор рождения (уничтожения) фотона моды поля.
H_B - гамильтониан термостата (резонатора), явный вид которого знать нет необходимости (вид гамильтониана будет определять значение константы затухания в кинетическом уравнении для статистического оператора поля).

Пусть известны собственные значения гамильтониана H_B

$$H_B \,|\, n\,\rangle = E_n \,|\, n\,\rangle$$

и пусть статистический оператор термостата в равновесном состоянии соответствует каноническому распределению Гиббса

$$\rho_T = Q^{-1} e^{-H_B/kT}, \tag{104}$$

где статистическая сумма

$$Q = Sp_T\, e^{-H_B/kT} = \sum_n e^{-E_n/kT}.$$

Слабое взаимодействие между подсистемой и термостатом выберем в виде

$$H_{ST} = \lambda(a^{+} + a)\, B,$$

где B - оператор, действующий только на переменные термостата и коммутирующий с операторами a^{+} и a, а λ - малая константа взаимодействия.

Введем для подсистемы S редуцированный статистический оператор

$$\rho_S(t) = Sp_T\, \rho(t),$$

где операция Sp_T берется по переменным термостата. Статистический оператор $\rho_S(t)$ позволяет вычислить среднее значение для любого оператора, зависящего от переменных подсистемы S

$$\langle X_S \rangle = Sp_{S,T}\, X_S\, \rho(t) = Sp_S\, X_S\, \rho_S(t).$$

Начальное состояние рассматриваемой системы описывается статистическим оператором $\rho(0)$

$$\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_T,$$

где ρ_T имеет вид (104).

Перейдем для описания динамики системы как и в предыдущем примере к представлению взаимодействия, вводя унитарный оператор $U(t)$

$$U(t) = exp[-i\,(H_S + H_T)t].$$

В представлении взаимодействия гамильтониан системы (103) примет вид

$$\tilde{H}_{ST} = \lambda \left(e^{i\,\Omega\, t}\, a^{+} + e^{-i\,\Omega\, t}\, a \right)\, \tilde{B}(t). \tag{105}$$

Здесь мы учли, что

$$e^{i\,\hbar\,\Omega\, a^{+} a}\;\, a^{+}\, e^{-i\,\hbar\,\Omega\, a^{+} a} = e^{i\,\hbar\,\Omega}\;\, a^{+}$$

и ввели обозначение

$$\tilde{B}(t) = e^{i\, H_T/\hbar\, t}\; B\, e^{-i\, H_T/\hbar\, t}.$$

Матричные элементы оператора $\tilde{B}(t)$ имеют вид

$$\tilde{B}(t)_{mn} = e^{i\,\omega_{mn}\, t}\; B_{mn}, \tag{106}$$

где $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$.

Обобщенное кинетическое уравнение для рассматриваемой системы в представлении взаимодействия можно записать в виде (91). Выберем проекционный оператор

$$P = \rho_T \, Sp_T = Q^{-1} \exp(-H_T/kT) \, Sp_T .$$

Тогда уравнение (91) во втором порядке по взаимодействию для рассматриваемой модели примет вид

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_S}{\partial t} = - \int_0^t ds \, Sp_T \, \tilde{L}(t) \, \tilde{L}(t-s) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t-s) =$$

$$= - \int_0^t dt_1 \, Sp_T \, \tilde{L}(t) \, \tilde{L}(t_1) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t_1). \tag{107}$$

где $\tilde{L}(t) = \left[\tilde{H}_{ST}, ... \right] / \hbar$ - оператор Лиувилля в представлении взаимодействия.

Для $\rho(t)$ мы имеем задачу Коши с начальным условием при $t_0 = 0$ следующего вида $\rho(t_0) = \rho_1(t_0)$. При такой постановке задачи выделяется некоторый начальный момент времени t_0 для которого отсутствуют корреляции. От такого произвольно выделенного начального момента времени можно избавиться, переходя к пределу $t_0 \to -\infty$. Предполагается, что в этом пределе влияние начального момента времени t_0, а именно влияние специального выбора $\rho(t)$ в момент t_0 ($\rho(t_0) = \rho_1(t_0)$), на статистический оператор исключается.

Если нижеследующие пределы существуют, справедливо соотношение

$$\lim_{t_0 \to -\infty} f(t_0) = \lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon \, t'} f(t') \, dt' = f(0) - \lim_{\varepsilon \to +0} \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon \, t'} f'(t') \, dt'$$

или более слабое соотношение

$$\lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int\limits_{-T}^{0} f(t) \, dt = \lim_{\varepsilon \to +0} \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t'} f'(t') dt' = f(0) - \lim_{\varepsilon \to +0} \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t'} f''(t') dt'$$

(теорема Абеля). Переходя в обобщенном кинетическом уравнении (95) к пределу $t_0 \to -\infty$ с учетом этих соотношений, получаем

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_S}{\partial t} = \lim_{\varepsilon \to +0} \int_{-\infty}^{t} dt_1 \, e^{\varepsilon \,(t_1 - t)} \, Sp_T \, \tilde{L}(t) \, \tilde{L}(t_1) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t_1) =$$

$$= - \lim_{\varepsilon \to +0} \int_{0}^{\infty} ds \, e^{-\varepsilon \, s} \, Sp_T \, \tilde{L}(t) \, \tilde{L}(t-s) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t-s). \qquad (108)$$

Теперь вычислим подинтегральное выражение в правой части уравнения (108). Имеем

$$\tilde{L}(t) \, \tilde{L}(t-s) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t-s) = \Big\{ \tilde{H}_S(t) \, \tilde{H}_{S,F}(t-s) \, \rho_S \, \tilde{\rho}_S(t-s) -$$

$$- \tilde{H}_{S,T}(t-s) \, \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t-s) \, \tilde{H}_{S,T} - \tilde{H}_{S,T}(t) \, \tilde{\rho}_T \, \tilde{\rho}_A(t-s) \tilde{H}_{S,T}(t-s) +$$

$$+ \rho_T \, \tilde{\rho}_S(t-s) \, \tilde{H}_{S,T}(t-s) \, \tilde{H}_{S,T}(t) \Big\} \, / \, \hbar^2. \qquad (109)$$

Подставляя в формулу (109) явный вид гамильтониана взаимодействия (105), мы получим в результирующем выражении два типа слагаемых, содержащих произведения бозевских операторов $a^+ \, a$ $(a \, a^+)$ и $a \, a$ $(a^+ \, a^+)$. Слагаемые, содержащие произведения типа $a^+ \, a^+$ или $a \, a$ являются быстроосциллирующими во времени и называются нерезонансными членами, а слагаемые типа $a^+ \, a$ или $a \, a^+$ являются медленноменяющимися функциями времени и называются резонансными членами. В этом свойстве резонансных и нерезонансных членов легко можно убедиться, если использовать представление Гейзенберга. В этом представлении операторы являются функциями времени, а статистические операторы от времени не зависят. В нулевом по взаимодействию приближении операторы a^+ и a осциллируют на частоте Ω:

$$a(t) = a(0) e^{-i\Omega \, t}, \qquad a^+(t) = a^+(0) e^{i\Omega \, t}.$$

Тогда в нулевом приближении произведения $a^+ \, a$ и $a \, a^+$ вообще от времени не зависят, а произведения $a^+ \, a^+$ и $a \, a$ - осциллируют на удвоенной частоте $2 \, \Omega$. При учете взаимодействия резонансные члены будут медленноменяющимися функциями времени, а нерезонансные по прежнему останутся ыстроменяющимися функциями времени.

Вычисление интеграла в правой части уравнения (108) производится по временам большим времени осцилляций моды $\sim 1/\Omega$ и поэтому вклад в интеграл нерезонансных слагаемых будет равен нулю.

Оставляя в (109) лишь резонансные слагаемые, получаем

$$\tilde{L}(t)\,\tilde{L}(t-s)\,\rho_T\,\tilde{\rho}_S(t-s) =$$

$$= \frac{\lambda^2}{\hbar^2}\Big\{\tilde{B}(t)\,\tilde{B}(t-s)\,\rho_T\left[e^{i\,\Omega\,s}\,a^+\,a + e^{-i\,\Omega\,s}\,a\,a^+\right]\tilde{\rho}_S(t-s) -$$

$$-\tilde{B}(t-s)\,\rho_T\,\tilde{B}(t)\,\left[e^{-i\,\Omega\,s}\,a^+\tilde{\rho}_S(t-s)\,a + e^{i\,\Omega\,s}\,a\,\tilde{\rho}_S(t-s)\,a^+\right] -$$

$$-\tilde{B}(t)\,\rho_T\,\tilde{B}(t-s)\,\left[e^{i\,\Omega\,s}\,a^+\tilde{\rho}_S(t-s)\,a + e^{-i\,\Omega\,s}\,a\,\tilde{\rho}_S(t-s)\,a^+\right] +$$

$$+\rho_T\,\tilde{B}(t-s)\,\tilde{B}(t)\,\tilde{\rho}_S(t-s)\,\left[e^{-i\,\Omega\,s}\,a^+\,a + e^{i\,\Omega\,s}\,a\,a^+\right]\Big\}. \qquad (110)$$

Вычислим теперь Sp по переменным термостата от выражения (110). Принимая во внимание формулу (106) для матричных элементов оператора B, получим

$$Sp_T\,\tilde{B}(t)\,\tilde{B}(t-s)\,\rho_T = Sp_T\,\tilde{B}(t-s)\,\rho_T\,\tilde{B}(t)\,=$$

$$= \sum_{mn}|B_{nm}|^2\;e^{i\,\omega_{mn}\,s}\,Q^{-1}\,e^{-E_n/kT},$$

$$Sp_T\,\rho_T\,\tilde{B}(t-s)\,\tilde{B}(t)\,= Sp_T\,\tilde{B}(t)\,\rho_T\,\tilde{B}(t-s)\,=$$

$$= \sum_{mn}|B_{nm}|^2\;e^{-i\,\omega_{mn}\,s}\,Q^{-1}\,e^{-E_n/kT}.$$

Тогда

$$Sp_T\,\tilde{L}(t)\,\tilde{L}(t-s)\,\rho_T\,\tilde{\rho}_S(t-s) =$$

$$= \sum_{mn}\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\,|B_{nm}|^2\;Q^{-1}\,e^{-E_n/kT}\,\Big\{e^{-i\,(\omega_{mn}+\Omega)\,s}\,[a^+, a\,\tilde{\rho}_S(t-s)] +$$

$$+e^{i\,(\omega_{mn}-\Omega)\,s}[a, a^+\,\tilde{\rho}_S(t-s)] + e^{-i\,(\omega_{mn}-\Omega)\,s}[\tilde{\rho}_S(t-s)\,a, a^+] +$$

$$+e^{-i\,(\omega_{mn}+\Omega)\,s}[\tilde{\rho}_S(t-s)\,a^+, a]\Big\}.$$

Подставляя полученное выражение в кинетическое уравнение (108) получим окончательно с учетом формулы Сохоцкого

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\int_0^\infty ds\,e^{-\varepsilon\,s}\,e^{-i\,(\omega_{mn}+\Omega)\,s} = i\,\mathcal{P}\frac{1}{\omega_{mn}+\Omega} + \pi\,\delta(\omega_{mn}+\Omega)$$

в представлении Шредингера (переход от представления взаимодействия выполняется аналогично (97)) кинетическое уравнение вида

$$\frac{\partial \rho_S}{\partial t} - \frac{1}{i\,\hbar}\,[\,H_S, \rho_S\,] = -\nu\,[\rho_S\, a^+,\, a] - \nu\,[a^+,\, a\,\rho_S] -$$

$$-\delta\,[\rho_S\, a,\, a^+] - \delta\,[a,\, a^+\,\rho_S]. \qquad (111)$$

При вычислении коэффициентов ν и δ в уравнении (111) суммирование по n, m можно провести путем перехода к интегрированию с использованием плотности состояний термостата $D(E)$:

$$\sum_{mn} (...) = \int_0^\infty dE_n\, D(E_n) \int_0^\infty dE_m\, D(E_m)\,(...) =$$

$$= \int_0^\infty d(\hbar\,\omega) \int_{\hbar\,\omega/2}^\infty dE\, D(E + \hbar\,\omega/2)\, d(E - \hbar\omega/2)\,(...) +$$

$$+ \int_{-\infty}^0 d(\hbar\,\omega) \int_{-\hbar\,\omega/2}^\infty dE\, D(E + \hbar\,\omega/2)\, d(E - \hbar\omega/2)\,(...).$$

С учетом того, что

$$\mathcal{P} \int_0^\infty d\omega\, \omega\, C(\omega)\, \frac{e^{-\hbar\,\omega/k\,T}}{\omega^2 - \Omega^2}\, 2\,\hbar\, \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 /Q \;\approx\; 0,$$

где

$$C(\omega) = e^{\hbar\,\omega/2\,k\,T} \int_{\hbar\,\omega/2}^\infty dE\, D(E + \hbar\,\omega/2)\, d(E - \hbar\omega/2) \times$$

$$\times\, |B(E + \hbar\,\omega/2, E - \hbar\,\omega/2)|^2\, e^{-E/k\,T},$$

получаются следующие выражения для коэффициентов ν и δ

$$\nu = Q^{-1}\, \pi\, \hbar\, \left(\frac{\lambda}{\hbar}\right)^2 C(\Omega),$$

$$\delta = e^{-\hbar\,\Omega/k\,T}\, \nu.$$

Правую часть уравнения (111) для ρ_S, которая называется диссcипативным членом, нельзя представить в форме $[H,\, \rho_S]$, так что влияние термостата не может быть выражено через некоторый эффективный гамильтониан. Из-за наличия диссипативного члена уравнение для ρ_S оказывается неинвариантным относительно обращения времени и, следовательно, описывает необратимый процесс.

Исследуем на основе уравнения (111) кинетику средних

$$< a^+(t) >= Sp_S \, \left\{\rho_S(t)\, a^+\right\}$$

и

$$< n(t) >= Sp_S \, \left\{\rho_S(t)\, a^+ \, a\right\},$$

где $n = a^+ \, a$ - оператор числа фотонов в моде квантового поля . Уравнения для этих величин легко получаются из (111)

$$\frac{d < a^+(t) >}{dt} = (\, i\,\Omega - (\nu - \delta)) \, < a^+(t) >,$$

$$\frac{d < n(t) >}{dt} = 2\,\delta - 2\,(\nu - \delta)) \, < n(t) > . \qquad (112)$$

Решения уравнений (112) есть

$$< a^+(t) >=< a^+(0) > \, e^{\,i\,\Omega\,t-(\nu-\delta)\,t},$$

$$< n(t) >=< n(0) > \, e^{\,-2\,(\nu-\delta)\,t} + \frac{\delta}{\nu - \delta} \, \left(1 - e^{\,-2\,(\nu-\delta)\,t}\right).$$

Постоянные, характеризующие влияние термостата, можно интерпретировать следующим образом. Величина $\nu - \delta$ соответствует коэффициенту поглощения фотонов, а функция

$$\frac{\nu}{\nu - \delta} = \left[e^{\,\hbar\,\Omega/k\,T} - 1\right]^{-1} = n_B(T)$$

представляет собой распределение Бозе.

8. Спиновая релаксация

Применим полученные в разделе 6 общие формулы для исследования релаксационных процессов в системе спинов, взаимодействующих с термостатом. В качестве подсистемы S мы, таким образом, выберем систему N идентичных молекул со спином $1/2$, находящуюся во внешнем однородном магнитном поле. Отметим сразу, что в настоящем разделе мы не ставим перед собой задачу подробного описания особенностей спиновой релаксации в реальных магнетиках, а лишь покажем, как на основе метода проекционного оператора могут быть выведены известные кинетические уравнения. Обозначим спиновой момент f-ой молекулы через $\vec{s}_f$. Компоненты спинового оператора s_f^α удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям

$$[s_f^\alpha,\, s_{f'}^\beta] = i \sum_\lambda e^{\alpha\,\beta\,\lambda}\ \delta_{f\,f'}\, s_f^\lambda, \qquad\qquad (\vec{s}_f)^2 = \frac{3}{4}.$$

Определим также операторы переворота спина

$$s_f^\pm = s_f^x \pm s_f^y,$$

аналогичные по свойствам операторам перехода $R_f^\pm$ в двухуровневом атоме (см. раздел 7). Для описания макроскопических свойств системы введем коллективный или макроскопический спин

$$\vec{R} = \sum_f \vec{s}_f, \tag{113}$$

который определяет макроскопическую намагниченность

$$\vec{M} = \gamma\,\hbar\,\vec{R},$$

где γ - гиромагнитное соотношение. Компоненты макроскопического спина удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[R^\alpha,\, R^\beta] = i \sum_\lambda e^{\alpha\,\beta\,\lambda}\ \delta_{f\,f'}\, R^\lambda.$$

Удобно ввести также макроскопические спиновые повышающие и понижающие операторы $R^\pm$ и квадрат макроскопического спина R^2

$$R^\pm = \sum_f s_f^\pm,$$

$$R^2 = R^+ R^- + R^z (R^z - 1) = R^- R^+ + R^z (R^z + 1), \qquad (114)$$

удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[R^+, R^-] = 2 R^z, \qquad [R^z, R^\pm] = \pm R^\pm, \qquad [R^2, R^z] = [R^2, R^\pm] = 0.$$

Операторы s_f^2 и s_f^z для разных молекул коммутируют и их собственые функции определяют полный базис в спиновом гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. С другой стороны, существует базис собственных состояний макроскопических спиновых операторов R^2 и R^z

$$R^2 \, |r, m, \alpha\rangle = r\,(r+1) \, |r, m, \alpha\rangle \,,$$

$$R^z \, |r, m, \alpha\rangle = m \, |r, m, \alpha\rangle \,,$$

где $r = N/2,\ N/2-1, \ldots, 1/2$ или 0; $\quad m = -r,\ -r+1, \ldots, +r$, и где индекс вырождения α пробегает $d(r)$ значений с

$$d(r) = \frac{N!\,(2\,r+1)}{(\frac{N}{2}+r+1)!\,(\frac{N}{2}-r)!}.$$

Индекс α может быть выбран таким образом, чтобы для $m < r$

$$|r, m, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{r(r+1) - m(m+1)}} \; R^+ \; |r, m, \alpha\rangle$$

с тем же самым α. Нормировочный фактор следует из (113).

Микроскопические спиновые степени свободы могут быть исключены с помощью крупноструктурного оператора

$$CX = \sum_{r,m,m',\alpha} |r, m, \alpha\rangle \left(\frac{\sum\limits_{\alpha'} \langle r, m, \alpha' | X | r, m', \alpha' \rangle}{d(r)} \right) \langle r, m', \alpha |, \qquad (115)$$

который удовлетворяет условию

$$C^2 = C.$$

Крупноструктурный оператор C можно использовать для описания макроскопического состояния системы, которому соответствует крупноструктурный редуцированный статистический оператор

$$\rho_C(t) = C \, Sp_T \left\{ \rho(t) \right\},$$

где операция шпур вычисляется по переменным термостата. Теперь для любой динамической переменной F, представляющей собой комбинацию операторов макроскопического спина, имеем

$$Sp\,\{F\,\rho(t)\} = Sp_S\,\{F\,\rho_C(t)\}\,,$$

где Sp_S берется по полному базису спиновой системы $\mathcal{H}$. Крупноструктурный оператор ρ_C характеризует макроскопическое состояние системы, в котором микроскопические спиновые степени свободы исключены, поэтому он не совпадает по свойствам с редуцированным статистическим оператором $\rho_S(t)$, введенным в разделе 6 $(\rho_C(t) = C\rho_S(t)\ )$.

Для того чтобы получить кинетическое уравнение для крупноструктурного статистического оператора $\rho_C(t)$, нам придется обобщить формулы, выведенные ранее для $\rho_S(t)$.

Введем преобразование

$$Z_C\,X_C = C\,Sp_T\,\,\{\Sigma\,C\,X_C\}\,. \tag{116}$$

Оператор Z_C действует в пространстве спиновых операторов X_C крупноструктурного вида (114).

Исходя из определения (116) легко показать, что оператор Z_C и, следовательно, Z_C^{-1} коммутируют с C. Тогда релевантный статистический оператор удобно ввести следующим образом

$$\rho_1(t) = P\,\rho(t),$$

где P - проекционный оператор

$$P\,X = \Sigma\,Z_C^{-1}\,C\,Sp_T\,\{X\}\,, \tag{117}$$

удовлетворяющий соотношениям

$$P^2 = P,$$

$$C\,Sp_T\,\,\{\rho_1(t)\} = C\,Sp_T\,\,\{\rho(t)\} = \rho_C(t). \tag{118}$$

Действительно, учитывая, что $C^2 = C$

$$P^2\,X = \Sigma\,Z_C^{-1}\,C\,Sp_T\,\,\left\{\Sigma\,Z_C^{-1}\,\,CSp_T\,(X)\right\} =$$

$$= \Sigma\,Z_C^{-1}\,C\,Sp_T\,(\Sigma)\,Z_C^{-1}\,{}^2Sp_T\,(X) =$$

$$= \Sigma\,Z_C^{-1}\,C\,Sp_T\,(\Sigma)CZ_C^{-1}CSp_T\,(X) = \Sigma\,Z_C^{-1}ZZ_C^{-1}\,\,CSp_T\,(X) = PX.$$

Аналогично доказывается и второе соотношение в (118).

Обобщенное кинетическое уравнение для крупноструктурного статистического оператора $\rho_C(t)$ аналогично уравнению (59) и легко может быть получено из (6) с учетом нового определения проекционного оператора

$$\dot{\rho}_C(t) = \Omega_C\,\rho_C(t) + \int_0^t ds\mathcal{H}(s)\,\rho_C(t-s), \tag{119}$$

$$\Omega_C\,X_C = -i\,C\,Sp_T\left\{\,L\,\Sigma\,Z_C^{-1}\,X_C\right\}, \tag{120}$$

$$\mathcal{H}_C\,X_C = -C\,Sp_T\left\{L\,e^{-i\,(1-P)\,L\,t}\,(1-P)\,L\,\Sigma\,Z_C^{-1}\,X_C\right\}. \tag{121}$$

Обобщенное кинетическое уравнение (119) имеет стационарное решение

$$\rho_{C\beta} = C\,Sp_T\left\{\rho_\beta\right\}, \tag{122}$$

где ρ_β - канонический статистический оператор всей системы, введенный в разделе 6.

Аналогично формуле (64) определим оператор термодинамической силы $\mu_C(t)$, сопряженный $\rho_C(t)$

$$\mu_C(t) = \frac{1}{\beta}\,Z_C^{-1}\,(\rho_C(t) - \rho_{C\beta}).$$

Учитывая, что

$$\Sigma\,Z_C^{-1}\,\rho_{C\beta} = \Sigma\,Z_C^{-1}\,C\ Sp_T\ \{\rho_\beta\} = P\rho_\beta = \rho_{1\beta}$$

и что для рассматриваемых состояний выполняется условие вида $\rho_{1\beta} = \rho_\beta$, обобщенное кинетическое уравнение (119) можно переписать в виде

$$\dot{\rho}_C(t) = -V_C\,\mu_C(t) - \int_0^t ds\,R_C(s)\,\mu_C(t-s), \tag{123}$$

где операторы

$$V_C\,X_C = i\,\beta\,C\,Sp_T\,(L\,\Sigma\,X_C) \tag{124}$$

и

$$R_C(t)\,X_C = \beta\,C\,Sp_T\ \left\{L\,e^{-i(1-P)\,L\,t}\,(1-P)\,L\,\Sigma\,X_C\right\}. \tag{125}$$

Уравнение вида (123) удобно для изучения линейного отклика системы на внешнее магнитное поле. Это слабое возмущение мы будем описывать дополнительным слагаемым в гамильтониане

$$H'(t) = -\gamma\,\hbar\,\vec{R}\,\vec{h}_1(t),$$

где $\vec{h}_1(t)$ - напряженность возмущающего магнитного поля. Используя соотношения (70), (71) и (122), оператор V_C можно переписать

$$V_C\,X_C = -\frac{i}{\hbar}\,[\rho_{C\beta}, X_C]. \tag{126}$$

Если определить крупноструктурный гамильтониан H_C с помощью соотношения

$$\rho_{C\beta} = e^{-\beta\,H_C}, \tag{127}$$

то выражение (126) примет вид

$$V_C\,X_C = i\,\beta\,L_C\,\Sigma_C\,X_C, \tag{128}$$

где

$$L_C\,X_C = [H_C, X_C]/\hbar$$

и

$$\Sigma_C\,X_C = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\alpha\,e^{-\alpha\,H_C}\;X_C\;e^{\alpha\,H_C}\;\rho_{C\beta}. \tag{129}$$

Оператор $\Omega_C = (-1/\beta)\,V_C\,Z_C^{-1}$ можно тогда записать

$$\Omega_C = -i\text{Ł}_C\,\Sigma_C\,Z_C^{-1}. \tag{130}$$

Из соотношений (117) и (124) имеем

$$P\,L\,\Sigma\,X_C = \frac{1}{i\beta}\,\Sigma\,Z_C^{-1}\,V_C\,X_C,$$

что дает с учетом (116) и (118)

$$P\,L\,\Sigma\,X_C = -i\,\Sigma\,\Omega_C^T\,X_C,$$

где Ω_C^T - транспонированный оператор, удовлетворяющий соотношению

$$Sp\,(X\,\Omega_C^T\,Y) = Sp\,(Y\,\Omega_C\,X).$$

Тогда для оператора R_C имеем:

$$R_C(t)\,X_C = \beta C Sp_T\left\{(-i\,L - \Omega_C)\,e^{-i\,(1-P)Lt}\Sigma(iL - \Omega_C^T)X_C\right\}. \tag{131}$$

Для дальнейших вычислений конкретизируем явный вид гамильтониана системы

$$H = H_S + H_T + g\, H_{ST}. \tag{132}$$

Здесь $H_S = \hbar\, \omega_0\, R^z$ - гамильтониан свободной спиновой подсистемы в постоянном магнитном поле $\vec{h}_0$, $\omega_0 = \gamma\, h_0$ - ларморовская частота в магнитном поле $\vec{h}_0 = (0, 0, -h_0)$ напряженности h_0, приложенном вдоль отрицательного направления оси z. Гамильтониан термостата мы конкретизировать не будет. Он будет определять константы затухания в уравнениях релаксации, которые обычно задаются феноменологически. $g\, H_{ST}$ - гамильтониан взаимодействия спинов с термостатом.

Для наиболее интересных типов взаимодействия

$$\langle H_{ST} \rangle_T = \frac{Sp_T \left\{ e^{-\beta\, H_T}\; H_{ST} \right\}}{Sp_T\; \left\{ e^{-\beta\, H_T} \right\}} = 0. \tag{133}$$

Считая взаимодействие малым, разложим величины, входящие в обобщенное кинетическое уравнение в ряд по степеням константы взаимодействия. Будем при этом пользоваться соображениями, приведенными в разделе 6 при анализе общих выражений для релаксационных явлений.

Учитывая соотношение (133), получаем из (122) и (127)

$$H_C = H_S\; +\; O(g^2). \tag{134}$$

Отсюда с учетом (116) и (129) находим

$$Z_C = \Sigma_C\; +\; O(g^2). \tag{135}$$

Используя выражения (130) и (131), для Ω_C и R_C тогда получаем

$$\Omega_C = -i\, L_C\; +\; O(g^2) = -i\, L_S\; +\; O(g^2), \tag{136}$$

$$R_C(t)\, X_C = g^2\, \beta\, C\, Sp_T \left\{ L_{ST}\, e^{-i\,(L_S + L_T)\, t}\;\; \tilde{\Sigma}\, L_{ST}\, X_C \right\} + O(g^3), \tag{137}$$

где $\tilde{\Sigma}$ есть Σ при малом g.

В простейшем случае взаимодействие спиновой системы с термостатом можно выбрать в виде

$$H_{ST} = g \sum_f \vec{\Gamma}_f\, \vec{s}_f, \tag{138}$$

где оператор $\vec{\Gamma}_f$ зависит от молекулярных степеней свободы термостата и коммутирует со спиновыми операторами. Предположим, что переменные Γ_f^ν ведут себя квазиклассически со средними значениями

$$\left\langle \Gamma_f^\nu(t) \right\rangle = 0$$

и корреляционными функциями

$$\left\langle \Gamma_f^\nu(t)\, \Gamma_{f'}^\mu(s) \right\rangle = \delta_{ff'}\, \delta_{\mu\nu}\, \varphi_T(|t-s|).$$

Гамильтониан взаимодействия $g\, H_{ST}$ может быть записан

$$g\, H_{ST} = g \sum_f \left(\Gamma_f^z\, s_f^z + \Gamma_f^+\, s_f^- + \Gamma_f^-\, s_f^+ \right), \tag{139}$$

где

$$\Gamma_f^\pm = \frac{1}{2}(\, \Gamma_f^x + i\, \Gamma_f^y\,).$$

Корреляционные функции для новых операторов принимают вид

$$\left\langle \Gamma_f^z(t)\, \Gamma_{f'}^\pm(s) \right\rangle = \left\langle \Gamma_f^+(t)\, \Gamma_{f'}^+(s) \right\rangle = \left\langle \Gamma_f^-(t)\, \Gamma_{f'}^-(s) \right\rangle = 0,$$

$$\left\langle \Gamma_f^z(t)\, \Gamma_{f'}^z(s) \right\rangle = 2 \left\langle \Gamma_f^+(t)\, \Gamma_{f'}^-(s) \right\rangle = \delta_{ff'}\ \varphi_T(|t-s|). \tag{140}$$

Используя формулы (139), (140) и

$$L_S\, s_f^z = 0, \qquad L_S\, s_f^\pm = \pm\, \omega_0\, s_f^\pm,$$

из (125) можно получить

$$R_C(t)\, e^{i\, L_S\, t}\, X_C \ = \ \frac{g^2\, \beta}{\hbar^2}\, \varphi_T(t)\, C \sum_f \ \Big\{ \, [s_f^z,\, \Sigma_S\, [s_f^z, X_C]] +$$

$$+\frac{1}{2}\, e^{i\, \omega_0\, t}\, [s_f^+,\, \Sigma_S\, [s_f^-, X_C]] + \frac{1}{2}\, e^{-i\, \omega_0\, t}\, [s_f^-,\, \Sigma_S\, [s_f^+, X_C]] \Big\} + \tag{141}$$

$$+O(g^3).$$

Как и в двух предыдущих задачах (см. разделы 6 и 7), ограничимся учетом в кинетических уравнениях слагаемых не выше второго порядка по константе взаимодействия. В этом приближении статистический оператор ρ_C или сопряженный ему оператор μ_C можно заменить медленноменяющимися амплитудами

$$\rho_C(t-s) \approx \rho_C(t), \qquad \mu_C(t-s) \approx \mu_C(t). \tag{142}$$

Используя соотношение $\mathcal{H}_C(t) = (1/\beta)\, R_C(t)\, Z_C^{-1}$ и формулы (135), (136), (141), кинетическое уравнение для крупноструктурного статистического оператора в марковском приближении (142) можно записать в виде

$$\dot\rho_C(t) = -\, i\, L_S\, \rho_C(t) \;+\; \Lambda_C\, \rho_C(t), \tag{143}$$

где

$$\begin{aligned}\Lambda_C\, X_C = -\, C \sum_f \; \Big\{ &\kappa_0\, [s_f^z,\, \Sigma_S\, [s_f^z,\, \Sigma_S^{-1}\, X_C]] + \\ &+ \frac{1}{2}\,(\kappa' + i\,\kappa'')\, [s_f^+,\, \Sigma_S\, [s_f^-,\, \Sigma_S^{-1}\, X_C]] + \\ &+ \frac{1}{2}\,(\kappa' - i\,\kappa'')\, [s_f^-,\, \Sigma_S\, [s_f^+,\, \Sigma_S^{-1}\, X_C]] \Big\}. \end{aligned} \tag{144}$$

и

$$\kappa_0 = \frac{g^2}{\hbar^2} \int_0^\infty ds\, \varphi_L(s),$$

$$\kappa' + i\,\kappa'' = \frac{g^2}{\hbar} \int_0^\infty ds\, e^{\,i\,\omega_0\, s}\, \varphi_L(s).$$

Кинетическое уравнение (143) можно использовать для того, чтобы найти релаксационные уравнения для средних значений макроскопичекого спина $< \vec{R}(t) >$. Учитывая, что

$$L_S\, R^Z = 0, \qquad\qquad L_S\, R^z = \pm\, \omega_0\, R^z$$

и

$$Sp_S\, \left\{ \vec{R}\, C\, X_S \right\} = Sp_S\, \left\{ \vec{R}\, X_S \right\},$$

получаем из (131) и (132)

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\, \langle R^z(t) \rangle = -\sum_f \; \Big\{ &\frac{1}{2}\,(\kappa' + i\,\kappa'')\, [R^z,\, s_f^+]\, \Sigma_S\, [s_f^-,\, \Sigma_S^{-1}\, \rho_C(t)]] + \\ &+ \frac{1}{2}\,(\kappa' - i\,\kappa'')\, [R^z,\, s_f^-]\, \Sigma_S\, [s_f^+, \Sigma_S^{-1}\, \rho_C(t)]] \Big\}, \end{aligned} \tag{145}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle R^+(t)\right\rangle = i\,\omega_0\ < R^+(t) > - \sum_f \Big\{ \kappa_0\,[R^+,\, s_f^+]\,\Sigma_S\,[s_f^z,\, \Sigma_S^{-1}\,\rho_C(t)]]+$$

$$+\frac{1}{2}\,(\kappa' - i\,\kappa'')\,[R^+,\, s_f^-]\,\Sigma_S\,[s_f^+, \Sigma_S^{-1}\,\rho_C(t)]]\Big\}\,, \qquad (146)$$

Уравнение для $< R^- >$ является сопряженным для (145).

Используя коммутационные соотношения для спиновых операторов

$$[s_f^z,\, s_{f'}^{\pm}] = \pm\,\delta_{f\,f'}\,s_f^{\pm}, \qquad [s_f^+,\, s_{f'}^-] = 2\,\delta_{f\,f'}\,s_f^z, \qquad (147)$$

$$s_f^+\,s_f^+ = s_f^-\,s_f^- = 0, \qquad s_f^z\,s_f^z = \frac{1}{4}, \qquad s_f^{\pm}\,s_f^z + s_f^z\,s_f^{\pm} = 0,$$

можно получить, что

$$\Sigma_S^{-1}\,[s_f^z,\, \Sigma_S\,s_f^{\pm}] = \pm\,s_f^{\pm},$$

$$\Sigma_S^{-1}\,[s_f^{\pm},\, \Sigma_S\,s_f^z] \;=\; \pm\,\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\,\coth\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\right)\,s_f^{\pm}, \qquad (148)$$

$$\Sigma_S^{-1}\,[s_f^+,\, \Sigma_S\,s_f^-] \;=\; -\Sigma_S^{-1}\,[s_f^-,\, \Sigma_S\,s_f^+] \;=$$

$$=\; 2\,\frac{2\,k\,T}{\hbar\,\omega_0}\,\sinh\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{k\,T}\right)\,\left[s_f^z + \frac{1}{2}\,\tanh\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\right)\right].$$

Учитывая (113), (148) и $\Sigma_S^T = \Sigma_S$, правые части релаксационных уравнений можно преобразовать так, что

$$\frac{\partial}{\partial t} < R^z(t) >= -\frac{1}{T_1}\,(< R^z(t) > - < R^z >_\beta)\,,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle R^{\pm}(t)\right\rangle = \pm\,i\,(\omega_0 + \Delta\omega)\ < R^{\pm}(t) > -\frac{1}{T_2}\ < R^{\pm} >, \qquad (149)$$

где

$$< R^z >_\beta = -\frac{N}{2}\,\tanh\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\right)$$

- равновесное значение R^z,

$$\frac{1}{T_1} \;=\; 2\,\kappa'\,\frac{k\,T}{\hbar\,\omega_0}\,\sinh\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{k\,T}\right),$$

$$\frac{1}{T_2} \;= \kappa_0 + \kappa''\,\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\,\coth\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\right)$$

- времена релакации, и

$$\Delta\omega = \kappa''\,\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\,\coth\left(\frac{\hbar\,\omega_0}{2\,k\,T}\right)$$

- сдвиг частоты. Уравнения (149) обычно называются уравнениями Блоха.

При описании большинства релаксационных процессов можно использовать высокотемпературное приближение, справедливое когда $\hbar\,\omega_0 \ll k\,T$. Выберем также простейшую экспоненциальную аппроксимацию для корреляционых функций

$$\frac{g^2}{\hbar^2}\,\varphi_L(t) = A\,e^{-|t|/\tau_c},$$

где τ_c - время корреляции.

В рассматриваемом приближении

$$\kappa_0 = A\,\tau_c \qquad \kappa' = \frac{A\,\tau_c}{1+\omega_0^2\,\tau_c^2}, \qquad \kappa'' = \frac{A\,\omega_0\,\tau_c^2}{1+\omega_0^2\,\tau_c^2},$$

$$\frac{1}{T_1} = \frac{2\,A\,\tau_c}{1+\omega_0^2\,\tau_c^2}, \qquad \frac{1}{T_2} = A\,\tau_c\left(1+\frac{1}{1+\omega_0^2\,\tau_c^2}\right),$$

$$\Delta\omega = \frac{A\,\omega_0\,\tau_c^2}{1+\omega_0^2\,\tau_c^2}.$$

Отметим, что кинетическое уравнение (143) и уравнения Блоха справедливы только при условии $\tau_c << T_1, T_2$.

Уравнения Блоха можно использовать для определения временных корреляционных функций

$$C^{\nu\,\mu}(t) =< \delta R^\nu(t)\,\delta R^\mu >$$

для макроскопического спина. Пренебрегая сдвигом частоты, находим

$$\begin{aligned} C^{zz}(t) &= \sigma_\parallel\,e^{-|t|/T_1}, \\ C^{xx}(t) = C^{yy}(t) &= \sigma_\perp\,e^{-|t|/T_2}\,\cos(\omega_0\,t), \\ C^{yx}(t) = C^{xy}(t) &= \sigma_\perp\,e^{-|t|/T_2}\,\sin(\omega_0\,t), \end{aligned} \tag{150}$$

Предположим, что на систему действует внешнее поле $\vec{h}_1(t)$, так что гамильтониан возмущения имеет вид

$$H' = -\gamma\,\hbar\,\vec{R}\,\vec{h}_1(t) = -\vec{M}\,\vec{h}_1(t) \tag{151}$$

(мы учли, что $\vec{M} = \gamma\, \hbar\, \vec{R}$).

Исследуем линейный отклик макроскопического спина на это возмущение. Используя определение макроскопического спина, формулу (151) и флуктуационно-диссипационную теорему первого рода [15], можно показать, что

$$\Delta < M^\mu(t) >= \int_0^t da \sum_\mu \chi^{\nu\mu}(t-s)\ h_1^\mu(s),$$

где функция отклика

$$\chi^{\nu\mu}(t) = -\Theta(t)\, \frac{\gamma^2\, \hbar^2}{k\, T}\ \dot{C}^{\mu\,\nu}$$

и

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{t} > 0; \\ 0 & \text{t} < 0. \end{cases}$$

В частности, отклик на магнитное поле

$$\vec{h}_1(t) = (h_1, 0, 0)\ e^{i\,\omega\,t},$$

приложенное вдоль оси x, определяется выражением

$$\Delta < M^+(t) > = \ \Delta < M^x(t) > + i\, \Delta < M^y(t) > \approx \ \chi_\perp(\omega)\, h_1\, e^{i\,\omega\,t}.$$

Здесь комплексная восприимчивость

$$\chi_\perp(\omega) = \chi_\perp\ \frac{1 - i\,\omega_0\, T_2}{1 - i\,(\omega_0 - \omega)\, T_2},$$

где

$$\chi_\perp = \frac{\gamma^2\, \hbar^2}{k\, T}\, \sigma_\perp$$

- статическая поперечная восприимчивость.

9. Немарковская релаксация кубита

В этом разделе изучим динамику кубита при нулевой температуре термостата. Такая система допускает точное описание, которое может служить для проверки работоспособности приближенных уравнений, описанных в предыдущих главах. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \frac{\omega_0}{2}\sigma_z + \sum_j \omega_j b_j b_j^\dagger + \sum_k (g_k \sigma_+ b_k + g_k^* \sigma_- b_k^\dagger), \tag{152}$$

где σ_p - матрицы Паули, ω_0 - частота перехода между состояниями кубита, $b_j^\dagger, b_j$ - операторы рождения и уничтожения фотона в j-й моде поля термостата с частотой ω_j и g_k - константа взаимодействия кубита с k-й модой поля в термостате. Для дальнейшего удобства перейдем в представление взаимодействия

$$H_I = \sigma_+ B(t) + \sigma_- B \dagger (t), \tag{153}$$

где мы обозначили

$$B(t) = \sum_k g_k b_k \exp(i(\omega_0 - \omega_k)t).$$

Далее заметим, что гамильтониан (152) коммутирует с оператором полного числа частиц

$$N = \sigma_+ \sigma_- + \sum_j b_j^\dagger b_j, \tag{154}$$

а это значит, что оба оператора имеют одинаковые наборы собственных векторов. Отсюда следует, что любое начальное состояние вида

$$\phi = c_0 \psi_0 + c_1(0)\psi_1 + \sum_k c_k(0)\psi_k \tag{155}$$

перейдет в состояние

$$\phi(t) = c_0 \psi_0 + c_1(t)\psi_1 + \sum_k c_k(t)\psi_k. \tag{156}$$

В формулах (154)-(155) мы ввели следующие вектора

$$\begin{aligned} \psi_0 &= |0\rangle_S |0\rangle_b, \\ \psi_1 &= |1\rangle_S |0\rangle_b, \\ \psi_k &= |0\rangle_S |k\rangle_b, \end{aligned} \tag{157}$$

где $|0\rangle_S, |1\rangle_S$ - основное и возбуженное состояние кубита, $|k\rangle_b = b_k^\dagger|0\rangle_B$ - состояние отдельного фотона в моде k. Динамика полной системы описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H_I\psi. \tag{158}$$

Нетрудно понять, что коэффициент c_0 не изменяется со временем, поскольку

$$H_I\psi_0 = 0.$$

Таким образом, подстановка разложения (156) в уравнение (158) приводит к системе уравнений

$$\dot{c}_1 = -i\sum_k g_k \exp(i(\omega_0 - \omega_k)t)c_k, \tag{159}$$

$$\dot{c}_k = -ig_k^* \exp(-i(\omega_0 - \omega_k)t)c_1. \tag{160}$$

Для дальнейшего удобства мы перешли в естественную систему единиц в которой

$$k_B = c = \hbar = 1.$$

Полагая $c_k(0) = 0$, что означает отсутствие фотонов в начальный момент времени, и подставляя решение уравнения (160) в уравнение (159) мы получаем замкнутое интегродифференциальное уравнение

$$\dot{c}_1 = -\int_0^t dt_1 f(t-t_1)c_1(t_1), \tag{161}$$

где интегральное ядро определяется как

$$f(t-t_1) = tr(B(t)B^\dagger(t_1\rho_B)$$

и ρ_B - есть вакуумное состояние термостата.

С помощью точного уравнения для амплитуды (161) мы можем построить точное кинетическое уравнение для редуцированной матрицы плотности

$$\rho_s(t) = tr_B|\phi\rangle\langle\phi|. \tag{162}$$

После подстановки явного вида ϕ и дифференцирования по времени получившегося выражения с использованием (161) получаем следующее точное операторно-кинетическое уравнение

$$\dot{\rho}_s = -\frac{i}{2}[\sigma_+\sigma_-, \rho_s(t)] +$$
$$+\gamma(t)\left(\sigma_-\rho_s(t)\sigma_+ - \frac{1}{2}\sigma_+\sigma_-\rho_s(t) - \frac{1}{2}\rho_s(t)\sigma_+\sigma_-\right). \qquad (163)$$

Коэффициенты определяются следующими соотношениями:

$$S(t) = -2Im\frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)}, \gamma(t) = -2Re\frac{\dot{c}_1(t)}{c_1(t)}. \qquad (164)$$

Как видно, точное уравнение (163) имеет вид уравнения без временной свертки (11), более того, можно показать, что любой порядок теории возмущений также сохраняет структуру точного уравнения [25]. Более того, разложение в ряд теории возмущений соответствует сохранению соответствующего порядка в разложении коэффициентов в ряд Маклорена. Таким образом, показана обоснованность использования разложения уравнения в ряд кинетического уравнения без временной свертки.

В качестве более конккретного примера рассмотрим интегральное ядро в уравнении (161) вида

$$f(t) = \frac{1}{2}\gamma_0\lambda\exp(-\lambda|t|), \qquad (165)$$

которое соответствует лоренцевскому спектру термостата. Параметры λ и γ_0 - обратные времена релаксации резервуара и кубита соответственно.

Далее решение уравнениея (161) может быть найдено с помощью метода преобразования Лапласа, из которого можно восстановить редуцированную матрицу плотности. Результирующее выражение для вероятности нахождения кубита в возбужденном состоянии имеет следующий вид [25]:

$$\rho_{11}(t) = \rho_{11}(0)e^{-\lambda t}\left(\mathrm{ch}\left(\frac{dt}{2}\right) + \frac{\lambda}{d}\mathrm{sh}\left(\frac{dt}{2}\right)\right)^2, \qquad (166)$$

где

$$d = \sqrt{\lambda^2 - 2\gamma_0\lambda}.$$

В дополнение рассмотрим второй порядок разложения уравнения Цванцига для данной модели. После несложных преобразований можно получить следующее выражение:

$$\dot{\rho}_s = \gamma_0\lambda\int_0^t dse^{-\lambda(t-s)}\left(\sigma_-\rho_s\sigma_+ - \frac{1}{2}\sigma_+\sigma_-\rho_s - \frac{1}{2}\rho_s\sigma_+\sigma_-\right). \quad (167)$$

Решение уравнения (167) приводит к следующей вероятности заселенностей возбужденного состояния кубита

$$\rho_{11}(t) = \rho_{11}(0)e^{-\lambda t/2}\left(\mathrm{ch}\left(\frac{d't}{2}\right) + \frac{\lambda}{d'}\mathrm{sh}\left(\frac{d't}{2}\right)\right), \qquad (168)$$

где

$$d' = \sqrt{\lambda^2 - 4\gamma_0\lambda}.$$

Как нетрудно заметить, структура решений точного и приближенного уравнений схожи, однако есть небольшие различия, которые, тем не менее, несущественны для небольших времен. Таким образом, мы видим, что приближенные методы, описанные в данном пособии, действительно воспроизводят точную динамику с некоторой точностью.

Заключение

Метод проекционного оператора, как показано в пособии, представляет собой эффективный способ описания неравновесных состояний в квантовых системах. На его основе удается успешно решать различные задачи неравновесной статистической механики, квантовой оптики и др. В настоящем пособии рассмотрен достаточно широкий круг проблем, касающихся как основ, так и конкретной техники применения метода проекционного оператора в различных задачах. Вместе с тем, в силу ограниченности объема пособия, остались почти незатронутыми некоторые важные вопросы, в частности, проблема выбора начальных условий для обобщенного кинетического уравнения. В рассмотренном подходе основное кинетическое уравнение было получено как формальное решение задачи Коши с заданным начальным условием отсутствия корреляций при $t = 0$. В действительности для реальных систем корреляции должны всегда присутствовать, и момент $t = 0$ никак не выделен. Из этого положения есть несколько выходов. Наиболее последовательным представляется подход, в котором отбор решений уравнения Лиувилля, соответствующих сокращенному описанию, производится с помощью усреднения по начальным моментам времени формального решения задачи Коши. Указанная проблема кратко обсуждалась в разделе 7 при выводе кинетического уравнения для фотонной моды. Сделаем еще ряд замечаний, касающихся данного вопроса (см.[3]).

Решение уравнения Лиувилля, удовлетворяющее начальному условию отсутствия корреляций

$$\rho(t)|_{t=t_0} = P\,\rho(t_0)$$

имеет вид

$$\rho(t, t_0) = e^{-i\,L\,(t-t_0)}\,P\rho(t_0), \tag{169}$$

однако оно содержит нефизическую зависимость от начального времени t_0. Поэтому решение (140) имеет разумный физический смысл лишь когда $t \gg t_0$, когда становятся несущественными детали начального состояния.

Разумно предположить, что выполняется принцип равной вероятности начальных состояний, т.е. эволюция с равной вероятностью может начинаться из любого начального состояния $P\,\rho(t)$ в интервале от t_0 до t, который будем считать достаточно большим и усредним (169) по начальным моментам времени в этом промежутке, т.е.

$$\rho(t) = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^{t} e^{-i\,L\,(t-t_0)}\; P\rho(t_0)\,dt_0, \tag{170}$$

при $t-t_0 \to \infty$. На самом деле время $t-t_0$ должно быть лишь достаточно велико для затухания начальных нефизических особенностей и формирования необходимых корреляций.

Таким образом, состояние $\rho(t)$, наблюдаемое в момент t, равно среднему по начальным моментам времени t_0 от решения начальной задачи для статистического оператора или функции распределения $\rho(t, t_0)$ за достаточно большой промежуток времени $t - t_0$, необходимый для затухания корреляций. Условие (170) определяет неравновесный статистический ансамбль. Заметим, что в (170) усреднение ведется не по интервалу времени наблюдения, начиная с момента времени t (которое используется при крупноструктурном усреднении функции распределения), а по времени начальных состояний, предшествующих моменту наблюдения.

Усредненный статистический оператор (170) удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} + i\,L\,\rho(t) = \frac{\rho(t) - P\,\rho(t)}{t - t_0}$$

с правой частью, которую можно назвать источником и которая стремится к нулю при $t - t_0 \to \infty$ (при этом, как всегда, предельный переход следует производить лишь после термодинамического предельного перехода при вычислении средних любой динамической переменной). Бесконечно малый источник, нарушая симметрию уравнения Лиувилля относительно обращения времени, определяет граничные условия к уравнению и отбирает требуемые запаздывающие решения. Из уравнения Лиувилля с источником легко вывести основное кинетическое уравнение, подобно тому, как это делалось в разделе 2.

Подробное обсуждение проблемы выбора начальных условий и вывода основного кинетического уравнения можно найти в обзоре Д.Н. Зубарева [3].

Не рассматривался нами и вопрос о связи метода проекционного оператора с другими подходами, используемыми при описании неравновесных процессов. Обсуждению указанного вопроса будет посвящена вторая часть пособия.

Библиографический список

1. Больцман, Л. Лекции по теории газов / Л. Больцман. – М.: Гос. издательство технико-теоретической литературы, 1953. – 554 с.
2. Гиббс, Дж. Основные принципы статистической механики. В кн.: Термодинамика. Статистическая физика / Дж. Гиббс. – М.: Наука, 1982. – 584 с.
3. Зубарев, Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев. – М.: Наука, 1971. – 415 с.
4. Боголюбов, Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. Избранные труды. Т. 2 / Н.Н. Боголюбов. – Киев: Наукова Думка, 1970. – 522 с.
5. Боголюбов, Н.Н. Введение в квантовую статистическую механику / Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.). – М.: Наука, 1984. –384 с.
6. Zwanzig, R. Ensamble Method in the Theory of Irreversibility / R. Zwanzig // Journ. Chem. Phys. – 1960. – V. 33. – № 5. – P. 1338–1341.
7. Зубарев, Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов / Д.Н. Зубарев / Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. – Т. 15. – М.: ВИНИТИ, 1980. – 131 с.
8. Зубарев Д.Н. Двухвременные температурные функции Грина в статистической физике / Д.Н. Зубарев // УФН. – 1960. – Т. 71. – С. 71–140.
9. Тябликов, С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. – М.: Наука, 1975. – 546 с.
10. Kubo, R. Statistical Mechanical Theory of Irreversible Processes. General Theory and Simple Application to Magnetic and Conduction Problems / R. Kubo // J. Phys. Soc. Jap. – 1957. – V. 12. – № 6. – P. 570–586.
11. Каданов, Л. Квантовая статистическая механика / Л. Каданов, Г. Бейм. – М.: Мир,1964. – 255 с.
12. Лифшиц, Е.М., Статистическая физика. Ч. II. Теория конденсированного состояния / Е.М. Лифшиц, П.П. Питаевский. – М.: Наука. 1978. – 448 с.
13. Mori H. Transport, Collective Motion and Brownian Motion // Progr. Theor. Phys. – 1965. – V. 33. – № 3. – P. 423–455.
14. Лифшиц, Е.М. Физическая кинетика / Е.М. Лифшиц, П.П. Питаевский. – М.: Наука, 1979. – 528 с.
15. Репке, Г. Неравновесная статистическая механика / Г. Репке. – М.: Мир, 1990. – 320 с.
16. Боголюбов, Н.Н. Кинетические уравнения для динамической системы, взаимодействующей с фононным полем / Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов (мл.) // ЭЧАЯ. – 1980. – Т. – С. 245–300.

17. Боголюбов Н.Н. (мл.), Шумовский А.С. Сверхизлучение / Н.Н. Боголюбов (мл.), А.С. Шумовский. – Дубна: ОИЯИ, 1987. – 185 с.
18. Башкиров, Е.К. Метод исключения бозонных переменных в теории сверхизлучения / Е.К. Башкиров. – Самара: СамГУ, 1992. – 24 с.
19. Grabert, H. Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics / H. Grabert. – Springer Tracts in Modern Physics. Berlin / Heidelberg / New York : Springer – Verlag, 1982. – 518 p.
20. Haake, F. Statistical Treatment of Open Systems by Generalized Master Equation / F. Haake. – Springer Tracts in Modern Physics. Berlin / Heidelberg / New York : Springer – Verlag, 1973. – V. 66. – 311 p.
21. Haken, H. Cooperative Phenomena in System Far from Thermal Equilibrium and Nonphysical systems / H. Haken // Rev. Mod. Phys. – 1975. – V. 47. – P. 67–121.
22. Nakajima, S. On Quantum Theory of TranSport Phenomena // Progr. Theor. Phys. – 1958. – V. 20. – P. 948–959.
23. Андреев, А.В. Кооперативные явления в оптике / А.В. Андреев, В.И. Емельянов, Ю.А. Ильинский. – М.: Наука, 1988. – 288 с.
24. Аллен, Л. Оптический резонанс и двухуровневые атомы / Л. Аллен, Дж. Эберли. – М.: Наука. 1978. – 222 с.
25. Бройер, Х.-П. Теория открытых квантовых систем / Х.П. Бройер, Ф. Петруччионе. – М.: РХД, 2010. – 824 с.

Учебное издание

Башкиров Евгений Константинович
Семин Виталий Владимирович

МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие

Редакционно-издательская обработка
издательства Самарского университета

Подписано в печать 15.01.2023. Формат 60x84 1/16.
Бумага офсетная. Печ. л. 4,25.
Тираж 25 экз. Заказ № .

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

Издательство Самарского университета.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.