

РЕЛАКСАЦИЯ ДИАГОНАЛЬНЫХ И НЕДИАГОНАЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ В ТЕРМОСТАТЕ

А. С. Бруев, В. К. Коников

УДК 530.145; 531.3; 533.7

Приведен вывод кинетических уравнений, описывающих релаксацию матрицы плотности динамической подсистемы в термостате.

В задачах квантовой электроники часто возникает необходимость изучения различных релаксационных процессов, в результате которых некоторая динамическая подсистема, являющаяся частью замкнутой системы, приходит в равновесное состояние I/I . Известно, что поведение замкнутой системы описывается обратимым уравнением движения для матрицы плотности ρ :

$$i\dot{\rho} = [H_0 + gV, \rho], \quad \text{Sp } \rho = 1, \quad (1)$$

где H_0 - гамильтониан невзаимодействующих частей замкнутой системы, V - оператор взаимодействия подсистем друг с другом, g - константа связи, характеризующая величину взаимодействия подсистем, $[AB] \equiv AB - BA$, система единиц такова, что $\hbar = 1$.

В настоящей заметке приводится отличный от общепринятого вывод из уравнения (1) необратимого кинетического уравнения для матрицы плотности малой части замкнутой системы (динамической подсистемы) в условиях, когда оставшуюся большую часть замкнутой системы (термостат) можно описать равновесной матрицей плотности. Отметим, что хорошо известна эвристическая форма таких уравнений /2,3/

$$\dot{\gamma}_{nm} = \text{Sp}_m [W_{mn}\gamma_{nm} - W_{nm}\gamma_{nm}], \quad \dot{\gamma}_{nm} + i(E_n - E_m)\gamma_{nm} = -\gamma_{nm}^{-1}\gamma_{nm}, \quad (2)$$

где индексы n и m нумеруют состояния подсистемы, а величины W_{nm} и τ_{nm}^{-1} характеризуют скорость релаксации соответственно диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности.

Пусть индекс $\alpha = (n, \nu)$ задает представление, в котором диагонален оператор H_0 . Следуя работе /4/, рассмотрим элементы $\sigma_{\alpha\beta}$ лаплас-образа матрицы плотности в α представлении. С помощью (1) при $\rho_{\alpha\beta}(0) = \rho_{\alpha\alpha} \delta_{\alpha\beta}$ имеем

$$(\omega - E_{\alpha} + E_{\beta})\sigma_{\alpha\beta} - \rho_{\alpha\alpha}(0)\delta_{\alpha\beta} = g \text{Sp}_{\gamma} [V_{\alpha\gamma} \sigma_{\gamma\beta} - \sigma_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}]. \quad (3)$$

В уравнении для диагонального элемента лаплас-образа матрицы плотности в правой части выразим недиагональные элементы через диагональные. Используя уравнение (3) в первом приближении по константе связи получаем

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = g V_{\alpha\beta} (\sigma_{\beta\beta} - \sigma_{\alpha\alpha}) (\omega - E_{\alpha} + E_{\beta})^{-1}. \quad (4)$$

Результат следующего приближения соответствует замене недиагональных элементов в правой части уравнения (3) найденными выше приближенными значениями (4). Применяя обратное преобразование Лапласа, получаем следующую форму уравнений движения для диагональных элементов матрицы плотности

$$\dot{\rho}_{\alpha\alpha}(t) = \text{Sp}_{\gamma} \int_0^t d\tau [\tilde{K}_{\gamma\alpha}(\tau) \rho_{\gamma\gamma}(t - \tau) - K_{\alpha\gamma}(\tau) \rho_{\alpha\alpha}(t - \tau)], \quad (5)$$

в которой функции памяти $\tilde{K}_{\gamma\alpha}$ и $K_{\alpha\gamma}$ заданы в виде разложений по константе связи. Приведем явные выражения для первых коэффициентов в этих разложениях

$$\tilde{K}_{\gamma\alpha}^{(1)} = 2V_{\gamma\alpha}^2 \cos(E_{\gamma} - E_{\alpha})\tau, \quad K_{\alpha\gamma}^{(1)} = 2V_{\alpha\gamma}^2 \cos(E_{\alpha} - E_{\gamma})\tau. \quad (6)$$

Рассмотрим модификацию уравнений движения для диагональных элементов матрицы плотности. В соответствии с уравнением (3) имеем

$$\sigma_{\alpha\beta} = (i\omega - E_{\alpha} + E_{\beta})^{-1} \text{Sp}_{\gamma} [V_{\alpha\gamma} \sigma_{\gamma\beta} - \sigma_{\alpha\gamma} V_{\gamma\beta}]. \quad (7)$$

Подставив найденное выражение для $\sigma_{\alpha\beta}$ в правую часть уравнения (3) в первом приближении по константе связи находим

$$\begin{aligned} & [i\omega - E_{\alpha} + E_{\beta} + 2g^2 V_{\alpha\alpha} (i\omega - E_{\alpha} + E_{\beta})^{-1} V_{\beta\beta} - g^2 \text{Sp}_{\gamma} V_{\alpha\gamma} (i\omega - E_{\gamma} + \\ & + E_{\beta})^{-1} V_{\gamma\alpha} - g^2 \text{Sp}_{\gamma} V_{\beta\gamma} (i\omega - E_{\alpha} + E_{\gamma})^{-1} V_{\gamma\beta}] \sigma_{\alpha\beta}^{(1)} = O(g^3), \quad (8) \end{aligned}$$

где правая часть уравнения (8) имеет порядок малости $\sim g^3$. Следующее приближение получается при подстановке выражения (7) в правую часть уравнения (8). Последовательно продолжая описанный процесс можно получить выражение для недиагонального элемента $\sigma_{\alpha\beta}$ лаплас-образа матрицы плотности, записанное в виде разложения по константе связи. Применяв к этому выражению обратное преобразование Лапласа, приходим к уравнению движения для недиагональных элементов матрицы плотности

$$\dot{\rho}_{\alpha\beta} + i(E_{\alpha} - E_{\beta})\rho_{\alpha\beta} = - \int_0^t d\tau P_{\alpha\beta}(\tau)\rho_{\alpha\beta}(t - \tau), \quad (9)$$

в котором функция памяти $P_{\alpha\beta}(\tau)$ задана в виде разложения по константе связи, первый член которого имеет следующий вид

$$\begin{aligned} P_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau) = & - 2V_{\alpha\alpha} V_{\beta\beta} \exp[-i(E_{\alpha} - E_{\beta})\tau] + \text{Sp}_{\gamma} \{ V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha} \exp[-i(E_{\gamma} - \\ & - E_{\beta})\tau] + V_{\beta\gamma} V_{\gamma\beta} \exp[i(E_{\gamma} - E_{\alpha})\tau] \}. \quad (10) \end{aligned}$$

Уравнения движения (5) и (9) для элементов матрицы плотности имеют нелокальный по времени характер, т.е. обладают памятью. Причиной появления памяти в этих уравнениях является неявная зависимость от исключенных описанным выше способом элементов матрицы плотности. Модифицированные уравнения движения (5),

(9) полностью эквивалентны уравнению движения (I).

Чтобы превратить модифицированные уравнения движения в кинетические уравнения, перейдем к термодинамическому пределу, устремив к бесконечности число и суммарный объем (при постоянной плотности) подсистем, образующих термостат. Чтобы избежать расходимостей необходимо вычислить шпур по индексам термостата /5/. При взятии шпура (регуляризации) устраняется вклад в функции памяти от "быстрых столкновений", происходящих благодаря коррелированному взаимодействию между отдельными подгруппами, куда входит выделенная подсистема и подсистемы, образующие термостат. Решая уравнение для быстрых процессов, получаем следующую форму квазиинтеграла движения

$$\rho(\gamma_1) = \gamma_1 \rho_T^{(0)}, \quad (II)$$

где γ_1 - матрица плотности подсистемы, $\rho_T^{(0)}$ - равновесная матрица плотности термостата, поскольку матрица плотности в форме (II) отмеченную корреляцию не учитывает. Подставив выражение для квазиинтеграла движения (II) в уравнения (5) и (9) и выполнив свертывание по индексам термостата, получаем

$$\dot{\gamma}_{nn} = \text{Sp}_{p\delta\gamma} \rho_{\gamma}^{(0)} \int_0^t d\tau \left\{ \tilde{K}_{p\delta, n\gamma}(\tau) \gamma_{pp}(t - \tau) - K_{n\gamma, p\delta}(\tau) \gamma_{nn}(t - \tau) \right\},$$

$$\dot{\gamma}_{nm} + i(E_n - E_m) \gamma_{nm} = - \text{Sp}_{\gamma} \rho_{\gamma}^{(0)} \int_0^t d\tau P_{n\gamma, m\gamma}(\tau) \gamma_{nm}(t - \tau), \quad (I2)$$

где $\rho_{\gamma}^{(0)} \equiv [\rho_T^{(0)}]_{\gamma\gamma}$. Вследствие затухания регуляризованных функций памяти основной вклад при интегрировании по τ в (I2) вносит область $0 < \tau < \tau_C^I$, где τ_C^I - характерное время убывания регуляризованных функций памяти. Отметим, что вследствие регуляризации $\tau_C^I \ll \tau_R^I$, где τ_R^I - характерное время релаксации матрицы плотности динамической подсистемы. На малом временном интервале $0 < \tau < \tau_C^I$ можно пренебречь эффектом запаздывания для одночастичной матрицы плотности, положив

$$\gamma_1(t - \tau) \approx \gamma_1(t). \quad (13)$$

При взятии термодинамического предела для моментов времени $t \gg \tau_c^I$, не изменяя существенно величину интегралов в (12), верхний предел можно положить равным бесконечности. В результате приходим к марковской форме кинетических уравнений для матрицы плотности подсистемы в термостате, с точностью до перенормировки энергии ($E_n \rightarrow E_{nm}$, $E_m \rightarrow E_{mn}$) совпадающей с эвристической формой кинетических уравнений (2), причем для величин W_{mn} , E_{mn} и $\tau_{mn}^{(1)}$ в первом порядке по константе связи получаются следующие выражения

$$\begin{aligned} W_{mn}^{(1)} &= 2\pi S \rho_{\mu}^{(0)} |V_{m\mu, n\mu}|^2 \delta(E_m + E_{\mu} - E_n - E_{\mu}) \rho_{\mu}^{(0)}, \\ E_{mn}^{(1)} &= E_m + S \rho_{\mu}^{(0)} V_{m\mu, m\mu} V_{n\mu, n\mu} P(E_m - E_n)^{-1} + \\ &+ S \rho_{s\delta\mu}^{(0)} V_{m\mu, s\delta} V_{s\delta, m\mu} P[E_s + E_{\delta} - E_n - E_{\mu}]^{-1}; \quad (14) \\ \tau_{mn}^{(1)} &= \pi S \rho_{s\delta\mu}^{(0)} V_{m\mu, s\delta} V_{s\delta, m\mu} \rho_{\mu}^{(0)} \delta(E_s + E_{\delta} - E_n - E_{\mu}) + \\ &+ \pi S \rho_{s\delta\mu}^{(0)} V_{n\mu, s\delta} V_{s\delta, n\mu} \rho_{\mu}^{(0)} \delta(E_s + E_{\delta} - E_m - E_{\mu}) - \\ &- 2\pi S \rho_{\mu}^{(0)} V_{m\mu, m\mu} V_{n\mu, n\mu} \rho_{\mu}^{(0)} \delta(E_m - E_n). \end{aligned}$$

Отметим, что формулы для $E_{mn}^{(1)}$ и $\tau_{mn}^{(1)}$, полученные ранее в работе /1/, несколько отличаются от аналогичных формул (14). Эти отличия обусловлены допущениями, принятыми в /1/ относительно спектра собственных значений H_0 .

Поступила в редакцию
26 апреля 1982 г.

Л и т е р а т у р а

1. В. М. Файн, Фотон и нелинейные среды, "Сов. радио", М., 1972 г.
2. В. Т. Канторович, А. М. Прохоров, ЖЭТФ, 33, 1428 (1957).

3. A. M. Clogston, J. Phys. Chem. Sol., 4, 271 (1958).
4. V. F. Weisskopf, E. Wigner, Zs. Phys., 63, 54 (1930).
5. П. Резибуа, М. Де Ленер, Классическая кинетическая теория жидкостей и газов, "Мир", М., 1980 г.