Д. И. Кадыров, И. Г. Шапошников, Об уравнениях движения для макроскопических величин, *Докл. АН СССР*, 1972, том 204, номер 4, 817–819

Доклады Академии наук СССР
1972. Том 204, № 4

УДК 538.113 ФИЗИКА

Д. И. КАДЫРОВ, И. Г. ШАПОШНИКОВ

ОБ УРАВНЕНИЯХ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

(Представлено академиком С. В. Вонсовским 4 X 1971)

1. Уравнения движения для макроскопических величин получают обычно [1, 2], используя master-уравнение Цванцига [3]. Поскольку это master-уравнение является интегро-дифференциальным, то и уравнения для макровеличин также оказываются интегро-дифференциальными. Между тем, существует возможность написать точное master-уравнение в дифференциальной форме. Например, в [4] обсуждалось master-уравнение такого типа при специальном выборе проекционного оператора. Используя дифференциальное master-уравнение, можно получить для макровеличин дифференциальные уравнения движения. Ниже это будет сделано.

Если выбрать проекционный оператор так, чтобы результат его действия на статистический оператор выражался линейно через средние значения операторов, соответствующих макровеличинам, то для этих средних будут иметь место линейные уравнения. Требуя существования только запаздывающих решений и выполняя лоренцево усреднение по времени, мы уничтожим неоднородные члены упомянутых линейных уравнений. В результате получаются линейные однородные дифференциальные уравнения движения для макровеличин. Существование таких уравнений есть непосредственное следствие того, что уравнениеНоймана является линейным однородным дифференциальным уравнением.

2. Рассмотрим «гамильтонову» физическую систему, т. е. такую, движение которой определяется ее гамильтонианом, а входящие в этот гамильтониан величины, характеризующие внешние объекты рассматриваемой системы, являются заданными функциями времени. Для такой системы установим вид точного master-уравнения в дифференциальной форме. Для этого произведем формальную интеграцию уравнения Ноймана

$$\dot{\rho}(t) = -iL(t)\rho(t), \tag{1}$$

в котором $L(t)$ — оператор Лиувилля рассматриваемой системы, вообще говоря, содержащий время t. Результат интеграции (1) есть

$$\rho(t) = \mathscr{L}(t, t_0)\rho(t_0), \tag{2}$$

где $\mathscr{L}(t, t_0)$ — оператор эволюции, удовлетворяющий уравнению

$$\dot{\mathscr{L}}(t, t_0) = -iL(t)\mathscr{L}(t, t_0) \tag{3}$$

с начальным условием

$$\mathscr{L}(t_0, t_0) = 1. \tag{4}$$

Оператор эволюции можно представить в виде разложения

$$\mathscr{L}(t, t_0) = T\exp\left\{-i\int_{t_0}^{t} d\tau\, L(\tau)\right\}, \quad t > t_0, \tag{5}$$

где T — оператор хронологического упорядочивания.

Запишем уравнение Ноймана следующим образом:

$$\dot{\rho}(t) = -iL(t)N^{-1}(t, t_0)N(t, t_0)\rho(t). \tag{6}$$

Оператор N выберем таким образом, чтобы выполнялось соотношение

$$N(t, t_0)\rho(t) = (1-P)\rho(t_0) + P\rho(t), \tag{7}$$

т. е. положим

$$N(t, t_0) = 1 - (1-P)[1 - \mathscr{L}^{-1}(t, t_0)]; \tag{8}$$

тогда для обратного оператора N^{-1} будем иметь выражение

$$N^{-1}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \{(1-P)[1 - \mathscr{L}^{-1}(t, t_0)]\}^n, \tag{9}$$

причем сходимость ряда (9) должна быть обеспечена подходящим определением не содержащего времени t оператора P, в остальном произвольного. В результате уравнение Ноймана примет вид

$$\dot{\rho}(t) = -iL(t)N^{-1}(t, t_0)[(1-P)\rho(t_0) + P\rho(t)]. \tag{10}$$

Действуя на обе части (10) оператором P, приходим к следующему точному дифференциальному master-уравнению:

$$P\dot{\rho}(t) = iPL(t)N^{-1}(t, t_0)[(1-P)\rho(t_0) + P\rho(t)]. \tag{11}$$

3. Мы получим из (10) точные линейные дифференциальные уравнения движения для некоторых макровеличин, если определим P так, чтобы средние значения операторов, соответствующих этим макровеличинам, входили в $P\rho(t)$ линейно. Например, можно положить

$$P\ldots = \sum_{j=1}^{m} \widetilde{O_j^+}\eta\,(\mathrm{Sp}\,O_j\widetilde{O_j^+}\eta)^{-1}\,\mathrm{Sp}\,Q_j\ldots, \tag{12}$$

где O_j — упомянутые операторы, η — метрический оператор, гарантирующий сходимость шпура $\mathrm{Sp}\,O_jO_j^+\eta$ (если операторы O_j определены в конечномерном гильбертовом пространстве, то η есть просто единичный оператор; для системы в термостате в качестве η можно взять статистический оператор термостата). Входящая в (12) операция, изображаемая волнистой линией, определена так:

$$\widetilde{A} = \int_0^1 dx\,\eta^x A \eta^{-x}. \tag{13}$$

В случае, когда O_j образуют полную ортонормированную группу операторов (m равно числу измерений гильбертова пространства системы), $P\rho(t)$, согласно (12), есть разложение статистического оператора системы по этой группе. Действуя на уравнение (10) слева оператором O_j и беря шпур, получим для средних

$$\langle O_j\rangle(t) = \mathrm{Sp}\,O_j\rho(t) \tag{14}$$

следующую систему уравнений:

$$\langle \dot{O}_j\rangle(t) = -i\,\mathrm{Sp}\,O_jL(t)N^{-1}(t, t_0)\sum_k \widetilde{O_k^+}\eta\,(\mathrm{Sp}\,\widetilde{O_k^+}\eta)^{-1}\langle O_k\rangle(t) -$$
$$- i\,\mathrm{Sp}\,O_jL(t)N^{-1}(t, t_0)(1-P)\rho(t_0). \tag{15}$$

Неоднородные члены этих уравнений, содержащие $\rho(t_0)$, могут быть обращены в нуль, если учесть принцип причинности, делая по известному рецепту ([5]) предельный переход $t_0 \to -\infty$, и произвести лоренцево усреднение по времени, т. е. усреднение около каждого момента по интервалу, большому по сравнению с характерными для данной физической системы периодами микроскопических движений, но малому в макроскопическом масштабе. Это дает для макровеличин

$$F_j(t) \equiv \overline{\langle O_j \rangle (t)} \tag{16}$$

(черта означает лоренцево усреднение) систему линейных однородных дифференциальных уравнений

$$\dot{F}_j(t) = -i \operatorname{Sp} O_j L(t) N^{-1}(t, t_0) \sum_k \widetilde{O_k^+} \eta \, (\operatorname{Sp} O_k \widetilde{O_k^+} \eta)^{-1} F_k(t). \tag{17}$$

4. Очевидно, уравнения (17) значительно проще интегро-дифференциальных уравнений типа полученных в ([1], [2]). В частности, если выбор макровеличин F_j сделан так, что в их число входит макроскопический магнитный момент, уравнения (17) могут оказаться полезными для решения различных задач магнитной кинетики. Однако ясно, что для практического использования системы уравнений (17) необходимо располагать эффективным методом приближенного вычисления коэффициентов этой системы.

Пермский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступило
27 IX 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] B. Robertson, Phys. Rev., 144, 151 (1966). [2] T. Shimizu, J. Phys. Japan, 28, 811 (1970). [3] R. Zwanziy, J. Chem. Phys., 33, 1338 (1960). [4] A. Falinski, W. J. Kramerczyk, Physica, 39, 575 (1968). [5] M. Gell-Mann, M. L. Goldberger, Phys. Rev., 91, 398 (1953).