ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ"

Кафедра общей и теоретической физики

Е.К. Башкиров, С.В. Петрушкин

ЗАДАЧИ ПО НЕРАВНОВЕСНОЙ КВАНТОВОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Утверждено Редакционно-издательским советом университета в качестве учебного пособия

Самара
Издательство «Самарский университет»
2008

УДК 535.14
ББК 22.31
Б 33

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. А.В. Горохов

Башкиров Е.К.

Б 33 **Задачи по неравновесной квантовой статистической физике**: учебное пособие / Е.К. Башкиров, С.В. Петрушкин; Федеральное агентство по образованию. – Самара: Изд-во "Самарский университет", 2008. – 92 с.

Данное учебное пособие составлено на основе лекций для студентов физического факультета специализации "Теоретическая физика" Рассмотрены приложения методов квантовой неравновесной статистической физики к некоторым задачам физики твердого тела и квантовой оптики.

Предназначено для студентов старших курсов физических специальностей университетов.

УДК 535.14
ББК 22.31

Оглавление

Предисловие

В настоящем учебном пособии представлены задачи, дополняющие лекционный курс "Неравновесная квантовая статистическая физика", читаемый студентам 4 курса специализации "Теоретическая физика" Соответствующий курс предназначен для ознакомления студентов с современными методами квантовой статистической физики. В нем не обсуждаются традиционные методы классической статистической физики, такие как уравнение Больцмана, уравнение Власова и т.д., поскольку указанные вопросы детально излагаются в курсе "Термодинамика и статистическая физика", читаемом студентам четвертого курса. Физические примеры, иллюстрирующие основные идеи неравновесной статистической физики, взяты в основном из области квантовой оптики и физики твердого тела, поскольку именно в этих областях удалось на основе общих подходов получить качественное и количественное описание целого ряда неравновесных процессов, находящееся в хорошем соответствии с экспериментом.

В пособие не включен материал лекционной части курса. Этот материал подробно изложен в ряде учебников, а также в учебных пособиях одного из соавторов настоящего издания. В каждом разделе представлены наиболее типичные задачи с подробными решениями. При этом авторы выбирали задачи, в которых, по их мнению, наиболее полно реализованы идеи обсуждаемого метода неравновесной статистической физики. Кроме того, в пособии имеются задания для самостоятельной работы. Для выполнения обычных заданий достаточно хорошего усвоения материала лекционной части курса. Особо трудные задания помечены звездочкой. Такие задачи можно использовать в качестве индивидуальных заданий студентам. Предполагается, что при выполнении таких заданий студенты должны ознакомиться с общей схемой решения по предложенной библиографической ссылке и провести детальные расчеты, опущенные, как правило, в соответствующем учебном пособии, монографии или оригинальной статье. Для удобства работы с пособием в каждом разделе имеется свой отдельный библиографический список.

Программа лекционного курса

Чистые и смешанные квантовые состояния. Матрица плотности. Равновесные квантовые распределения. Вычисление наблюдаемых. Квазисредние. Квантовое уравнение Лиувилля. Условия необратимости. Марковские процессы. Квантовое уравнение релаксации неравновесной системы. Секулярное приближение. Основное обобщенное кинетическое уравнение. Уравнение Паули. Модель двухуровневого атома. Квазиспиновое представление. Кинетика двухуровневой системы, взаимодействующей с электромагнитным полем. Магнитный резонанс. Уравнения Блоха. Продольная и поперечная релаксация. Механизмы продольной и поперечной релаксации. Однородное и неоднородное уширение энергетических уровней. Оптические уравнения Блоха. Вектор Блоха. Решение Раби. Решение Торри для резонансного случая при совпадающих временах поперечной и продольной релаксации. Спиновое и фотонное эхо, оптическая нутация, затухание свободной поляризации.

Линейная реакция системы на внешнее механическое возмущение. Формула Кубо. Временные корреляционные функции и статистические средние. Определение двухвременных температурных функций Грина. Спектральные представления для корреляционых функций и функций Грина. Свойства симметрии функций Грина. Правила сумм. Идеальные квантовые газы. Общий вид одночастичной функции Грина. Квазичастицы. Ферромагнетизм. Модель ферромагнетика Гейзенберга. Сверхпроводимость. Гамильтониан БКШ. Преобразование Боголюбова. Сверхпроводник в магнитном поле. Модель Дикке. "Равновесное" сверхизлучение. Ферромагнитный резонанс. Расчет динамической диэлектрической проницаемости, магнитной восприимчивости и электропроводности электронного газа в металле.

Сокращенное описание квантовых неравновесных состояний. Метод проектирования. Обобщенное кинетическое уравнение Цванцига. Проекционный оператор для логарифма статистического оператора. Квантовая H-теорема Больцмана. Усреднение по начальным состояниям. Релаксация гармонического осциллятора с трением. Динамика моды квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе при наличии утечки фотонов. Сверхизлучение Дикке. Одномодовый лазер. Одноатомные мазер и лазер. Спиновая релаксация. Метод неравновесного статистического оператора Зубарева, метод Мори, метод Робертсона.

Список литературы к лекционному курсу

1. Боголюбов, Н.Н. Введение в квантовую статистическую механику / Н.Н. Боголюбов, Н.Н. Боголюбов-мл. – М.: Наука, 1984. – 384 с.

2. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем / И.А. Квасников. – М.: Изд-во МГУ. 1987. – 560 с.

3. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика. Квантовая статистика / И.А. Квасников. – М.: URSS, 2005. – 349 с.

4. Зубарев, Д.Н. Статистическая механика неравновесных процессов / Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, Г. Репке. – М.: Физматлит, 2002. Ч. 1. – 432 с.; Ч. 2. – 296 с.

5. Зайцев, Р.О. Введение в современную кинетическую теорию / Р.О. Зайцев. – М.: URSS, 2006. – 480 с.

6. Блум, К. Теория матрицы плотности и ее приложения / К.Блум. – М.: Мир, 1983. – 248 с.

7. Аллен, Л. Оптический резонанс и двухуровневые атомы / Л. Аллен, Дж. Эберли. – М.: Мир, 1978. – 224 с.

8. Хакен, Г. Синергетика / Г. Хакен. – М.: Мир, 1980. – 406 с.

9. Башкиров, Е.К. Метод функций Грина. Ч. 1 / Е.К. Башкиров. – Самара: Изд-во СамГУ, 1997. – 32 с.

10. Башкиров, Е.К. Метод функций Грина. Ч. 2 / Е.К. Башкиров. – Самара: Изд-во СамГУ, 1999. – 28 с.

11. Башкиров, Е.К. Метод проекционного оператора / Е.К. Башкиров. – Самара: Изд-во СамГУ, 1996. – 56 с.

1. Квантовая теория релаксации. Обобщенное основное кинетическое уравнение. Уравнение Паули.

Основная литература

1. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем / И.А. Квасников. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 560 с.

2. Блум, К. Теория матрицы плотности и ее приложения / К. Блум. – М.: Мир, 1983. – 248 с.

Дополнительная литература

3. Кондратьев, А.С. Задачи по статистической физике / А.С. Кондратьев, В.П. Романов. – М.: Наука, 1992. – 232 с.

4. Сликтер, Ч. Основы теории магнитного резонанса / Ч. Сликтер. – М.: Мир, 1981. – 448 с.

5. Елютин, П.В. Теоретические основы квантовой радиофизики / П.В. Елютин. – М.: Изд-во МГУ, 1982. – 144 с.

1.1. Задачи с решениями

Задача 1. Вывести основное кинетическое уравнение для релаксации незамкнутой системы, взаимодействующей с окружающей средой (термостатом) в равновесном состоянии.

Решение

Рассмотрим незамкнутую систему S, находящуюся в постоянном контакте с ненаблюдаемой системой R (термостат или тепловой резервуар) и обменивающуюся с ней энергией, поляризацией и т.д. Обозначим матрицу плотности всей системы через $\rho(t)$ и полный гамильтониан через

$$H = H_S + H_R + H_{SR},$$

где H_S и H_S – гамильтонианы систем S и R, а H_{SR} описывает взаимодействие между S и R. В представлении взаимодействия временная эволюция $\rho(t)$ описывается уравнением Лиувилля

$$\imath\hbar\frac{\partial\rho(t)_I}{\partial t} = [H_{SR}(t), \rho(t)_I] \tag{1}$$

с начальным условием

$$\rho(t)_I|_{t=0} = \rho(0)_I.$$

Здесь

$$H_{SR}(t) = e^{(i/\hbar)H_0 t} H_{SR} e^{-(i/\hbar)H_0 t},$$

где $H_0 = H_R + H_S$. Формальное решение уравнения Лиувилля можно записать в виде

$$\rho(t)_I = \rho(0)_I - \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^t [H_{SR}(t),\, \rho(\tau)_I]\, d\tau. \qquad (2)$$

Подставляя решение (2) в правую часть уравнения (1), получаем

$$\dot{\rho}(t)_I = -\frac{i}{\hbar}[H_{SR}(t), \rho(0)_I] - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_0^t dt' \, [H_{SR}(t),\, [H_{SR}(t'), \rho(t')_I]\,]. \qquad (3)$$

Для описания динамики S – подсистемы введем редуцированную матрицу плотности $\rho(t)_S = Sp_R\rho(t)$ или в представлении взаимодействия $\rho(t)_{SI} = Sp_R\rho(t)_I$. Тогда для редуцированной матрицы плотности $\rho(t)_{SI}$ получаем из (2) следующее уравнение:

$$\dot{\rho}(t)_{SI} = -\frac{i}{\hbar} Sp_R[H_{SR}(t), \rho(0)_I] -$$

$$- \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_0^t dt' Sp_R \, [H_{SR}(t),\, [H_{SR}(t'), \rho(t')_I]\,]. \qquad (4)$$

При записи уравнений (3) и (4) предполагалось, что взаимодействие включается в момент времени $t = 0$. До этого момента времени подсистемы R и S некоррелированы, и полная матрица плотности равна прямому произведению

$$\rho(0) = \rho(0)_S \; \rho(0)_R = \rho(0)_I.$$

Предположим, что подсистема R имеет так много степеней свободы, что результат взаимодействия с S быстро исчезает и не оказывает сколько-нибудь значительной обратной реакции на S, поэтому система R всегда описывается с помощью теплового равновесного распределения при постоянной температуре независимо от количества энергии и степени поляризации, перешедших в нее из системы S. Другими словами, мы предполагаем, что можно пренебречь реакцией S на R, и поэтому система R всегда описывается равновесной матрицей плотности

$$\rho_R(0) = Q^{-1} e^{-H_R/kT},$$

где $Q = Sp_R e^{-H_R/kT}$ и T – равновесная температура термостата. В рамках сделанного приближения матрицу плотности всей системы в приближении взаимодействия можно записать как

$$\rho_I(t) = \rho_{SI}(t)\, \rho_R(0).$$

Тогда уравнение (4) примет вид

$$\dot{\rho}_{SI}(t) = -\frac{\imath}{\hbar} Sp_R[H_{SR}(t), \rho(0)_{SI}\rho_R(0)]-$$

$$-\left(\frac{\imath}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' Sp_R\left[H_{SR}(t)\left[H_{SR}(t'), \rho_{SI}(t')\rho_R(0)\right]\right]. \tag{5}$$

В уравнении (5) редуцированная матрица плотности $\rho(t')_{SI}$ стоит под знаком интеграла, следовательно, поведение системы зависит от ее предыстории с момента времени $t' = 0$ до момента времени $t' = t$. Однако движение S демпфируется за счет ее связи с резервуаром; это демпфирование уничтожает информацию о поведении системы в прошлом. Поэтому предположим, что $\dot{\rho}_{SI}(t)$ зависит только от текущего значения $\rho(t)_{SI}$, т.е. система теряет свою память о прошлом. Тогда в уравнении (5) можно сделать замену

$$\rho_{SI}(t') \to \rho_{SI}(t).$$

Эта замена соответствует марковскому приближению и приводит к уравнению

$$\dot{\rho}_{SI}(t) = -\frac{\imath}{\hbar} Sp_R[H_{SR}(t), \rho_{SI}(0)\rho_R(0)]-$$

$$-\left(\frac{\imath}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' Sp_R\left[H_{SR}(t), \left[H_{SR}(t'), \rho_{SI}(t)\rho_R(0)\right]\right]. \tag{6}$$

Для дальнейшего упрощения уравнения (6) сделаем предположение о характере взаимодействия подсистем S и R. Предположим, что оператор взаимодействия можно записать в виде

$$H_{SR} = \sum_i S_i R_i,$$

где операторы S_i действуют только на переменные динамической подсистемы S, о операторы R_i – на переменные термостата. В представлении взаимодействия

$$H_{SR}(t) = \sum_i S_i(t) R_i(t), \tag{7}$$

где

$$S_i(t) = e^{iH_St/\hbar} S_i e^{iH_St/\hbar}, \quad R_i(t) = e^{iH_Rt/\hbar} R_i e^{iH_Rt/\hbar}.$$

Подставляя (7) в уравнение (6), используя коммутативность операторов R_i и S_i и возможность циклической перестановки операторов под знаком следа, получаем

$$\dot{\rho}(t)_{SI} = -\frac{i}{\hbar}\sum_i \{S_i(t)\rho_{SI}(0)Sp_R(R_i(t)\rho_R(0) - \rho_{SI}(0)S_i(t)Sp_R(R_i(t)\rho_R(0)\} -$$

$$-\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{i,j}\int_0^t dt' \{(S_i(t)S_j(t')\rho_{SI}(t) - S_j(t')\rho_{SI}(t)S_t(t))\, Sp_R(R_i(t)R_j(t')\rho_R(0)) -$$

$$-\left(S_i(t)\rho_{SI}(t)S_j(t') - \rho_{SI}S_j(t')(t)S_t(t)\right) Sp_R(R_j(t')R_i(t')\rho_R(0))\}. \qquad (8)$$

Рассмотрим сначала средние значения вида

$$\langle R_i(t)\rangle = Sp_R(R_i(t)\rho_R(0)) = \sum_N \langle N \mid R_i(t) \mid N\rangle\langle N \mid \rho_R(0 \mid N\rangle,$$

где след удобно вычислять с помощью собственных состояний $\mid N\rangle$ оператора H_R, поскольку равновесная матрица плотности термостата диагональна в этом представлении. Предполагая, что операторы взаимодействия R_i не имеют диагональных элементов в этом представлении (иначе свободный гамильтониан можно было бы переопределить так, чтобы включить в него соответствующие члены), получаем

$$\langle R_i(t)\rangle = 0. \qquad (9)$$

Далее рассмотрим временную корреляционную функцию

$$\langle R_i(t)R_j(t')\rangle = Sp_R(R_i(t)R_j(t')\rho_R(0)), \qquad (10)$$

которая характеризует корреляцию состояний в моменты времени t и t'. Термостат предполагается большим и таким, что в нем быстро затухают эффекты взаимодействия, следовательно, термостат быстро "забывает" о взаимодействиях с системой S. Таким образом, можно ожидать. что функция $\langle R_i(t)R_j(t')\rangle$ отлична от нуля только в некотором интервале $t - t' \preceq \tau$, где τ представляет собой характерное корреляционное время термостата. Тогда для $t - t' > \tau$ имеем

$$\langle R_i(t)R_j(t')\rangle \approx \langle R_i(t)\rangle\langle R_j(t')\rangle \approx 0. \qquad (11)$$

Корреляционное время τ в среднем определяет время, в течение которого сохраняется некоторая память о взаимодействии. Природа τ зависит от природы термостата. В газах, например, τ может определяться средним временем свободного пробега между столкновениями. Нетрудно показать, используя свойство цикличности следа и коммутативность матрицы плотности термостата с гамильтонианом H_R, что корреляционные функции (10) зависят только от разности времен $t - t'$:

$$\langle R_i(t)R_j(t')\rangle = \langle R_i(t-t')R_j\rangle. \tag{12}$$

Теперь используя полученные результаты, вновь вернемся к марковскому приближению. В силу соотношения (10) в интеграл (5) дает ненулевой вклад фактически только интервал от $t' \approx t - \tau$ до $t' = t$. Следовательно, значения $\rho_{SI}(t')$ в моменты t', лежащие вне этого интервала, влияют мало на значение $\dot{\rho}_{SI}(t)$ в момент времени t. Таким образом, система способна помнить свое состояние только в течение интервала времени, немного превышающего корреляционное время. Интерес представляет макроскопическое поведение системы, а не детальное изменение ее состояния. Если $\tau \ll 1/\gamma$, где γ – характерное время изменения $\rho_{SI}(t)$ в макроскопическом масштабе, то в подынтегральном выражении в уравнении (5) $\rho_{SI}(t') \approx \rho_{SI}(t)$ и марковское приближение справедливо.

Используя соотношения (9) и (12), вводя переменную $t'' = t - t'$ и учитывая, что корреляционная функция $\langle R_i(t'')R_j\rangle$ фактически равна нулю при $t'' \gg \tau$ (это свойство позволяет верхний предел интегрирования устремить к бесконечности), мы можем переписать уравнение (8) в виде

$$\dot{\rho}(t)_{SI} = -\left(\frac{1}{\hbar}\right)^2 \sum_{i,j} \int_0^\infty dt'' \{[S_i(t), S_j(t-t'')\rho_{SI}(t)]\langle R_i(t'')R_j\rangle - \\ - [S_i(t), \rho_{SI}(t)S_j(t-t'')]\langle\langle R_jR_i(t'')\rangle\} . \tag{13}$$

Беря матричные элементы от операторов S_i по собственным состояниям $\mid m\rangle$ гамильтониана H_S, получаем

$$\langle m \mid S_i(t) \mid n\rangle = e^{\imath\omega_{mn}t}\langle m \mid S_i \mid n\rangle,$$

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

$$P^+_{mkln} = (1/\hbar)^2 \sum_{ij} \langle m \mid S_i \mid k\langle\langle l \mid S_j \mid n\rangle \int_0^\infty dt'' e^{-\imath\omega_{ln}} \langle S_i(t'')S_j\rangle, \tag{14}$$

$$P^-_{mkln} = (1/\hbar)^2 \sum_{ij} \langle m \mid S_i j \mid k \langle\langle l \mid S_i \mid n \rangle \int_0^\infty dt'' e^{-\imath\omega_{mk}} \langle S_j S_i(t'') \rangle, \qquad (15)$$

перепишем уравнение (13) в виде

$$\langle m' \mid \dot\rho_{SI}(t) \mid m \rangle = \sum_{n'n} \langle n' \mid \rho_{SI}(t) \mid n \rangle \left\{ -\sum_k \delta_{mn} P^+_{m'kkn'} + P^+_{nmm'n'} + \right.$$

$$\left. + P^-_{nmm'n'} - \sum_k \delta_{n'm'} P^-_{nkkm} \right\} e^{[\imath(\omega_{m'n'}+\omega_{mn})t]} \ . \qquad (16)$$

Зависящая от времени экспонента в (16) обращается в нуль при условии

$$\omega_{m'n'} + \omega_{mn} = E_{m'} - E_m - E_{n'} + E_n = 0. \qquad (17)$$

Оставим в сумме в уравнении (16) только "секулярные" слагаемые, т.е. слагаемые, удовлетворяющие условию (17). Такое приближение означает, что "крупнозернистая" производная берется по интервалу Δt, большему по сравнению с периодом свободного движения системы

$$\Delta t \gg 1/\omega_{mn},$$

так что в течение интервала Δt система совершает много циклов.

Будем рассматривать случай, когда не существует никакой регулярности в распределении уровней системы. Тогда условие (17) удовлетворяется в одном из следующих случаев:

$$\begin{array}{ll} (1) & m' = n',\ m = n, m' \neq m; \\ (2) & m' = m,\ n' = n, m' \neq n'; \\ (3) & m' = m = n' = n. \end{array}$$

В указанных случаях уравнение (16) можно записать как

$$\langle m' \mid \dot\rho_{SI}(t) \mid m \rangle = \delta_{mm'} \sum_{n \neq m} \langle n \mid \rho_{SI}(t) \mid n \rangle \Gamma_{mn} - \gamma_{m'm} \langle m' \mid \rho_{SI}(t) \mid m \rangle, \quad (18)$$

где

$$\Gamma_{mn} = P^+_{nmmn} + P^-_{nmmn} \quad (m \neq n),$$

$$\gamma_{m'm} = \sum_k (P^+_{m'kk'm'} + P^-_{mkkm}) - P^+_{mmm'm'} - P^-_{mmm'm'} \, .$$

Нетрудно показать, что

$$(P^-_{mnkl})^* = P^+_{lknm}$$

и, следовательно, величины Γ_{mn} действительны.

В "секулярном" приближении недиагональные элементы матрицы плотности подчиняются уравнению

$$\langle m' \mid \dot{\rho}_{SI}(t) \mid m\rangle = -\gamma_{m'm}\langle m' \mid \rho_{SI}(t) \mid m\rangle.$$

Из условия эрмитовости матрицы плотности имеем

$$\gamma_{m'm} = \gamma^*_{mm'}.$$

Уравнение (18) можно преобразовать в представление Шредингера с помощью соотношения

$$\rho_{SI}(t) = e^{\imath H_S t/\hbar)}\rho_S(t)e^{-\imath H_S t/\hbar)},$$

которое дает

$$\langle m' \mid \dot{\rho}_S(t) \mid m\rangle = -(\imath/\hbar)\langle m' \mid [H_S, \rho_S(t)] \mid m\rangle +$$
$$+\delta_{mm'}\sum_{n\neq m}\langle n \mid \rho_S(t) \mid n\rangle\Gamma_{mn} - \gamma_{m'm}\langle m' \mid \rho_S(t) \mid m\rangle. \tag{19}$$

Первый член в (20) описывает движение невозмущенной системы.

Уравнение движения для редуцированной матрицы плотности подсистемы S называется обобщенным основным кинетическим уравнением (*generalized master equation*). Основное кинетическое уравнение (*master equation*) для диагональных элементов матрицы плотности может быть получено из уравнения (19) и имеет вид

$$\langle m \mid \dot{\rho}_S(t) \mid m\rangle = \sum_{n\neq m}\langle n \mid \rho_S(t) \mid n\rangle\Gamma_{mn} - \gamma_{mm}\langle m \mid \rho_S(t) \mid m\rangle$$

или, опуская для упрощения записей индекс S у редуцированной матрицы плотности,

$$\dot{\rho}(t)_{mm} = \sum_{n\neq m}\rho(t)_{nn}\Gamma_{mn} - \gamma_{mm}\rho(t)_{mm},$$

где $\rho(t)_{nn} = \langle n \mid \rho_S(t) \mid n\rangle$. Учитывая, что

$$\gamma_{mm} = \sum_k (P^+_{mkkm} + P^-_{mkkm}) - P^+_{mmmm} - P^-_{mmmm} = \sum_k \Gamma_{km} - \Gamma_{mm} = \sum_{k\neq m}\Gamma_{km},$$

мы можем записать уравнение для диагональных элементов редуцированной матрицы плотности как

$$\dot{\rho}(t)_{mm} = \sum_{n\neq m}\rho(t)_{nn}\Gamma_{mn} - \rho(t)_{mm}\sum_{n\neq m}\Gamma_{nm}. \tag{20}$$

Уравнение (20) впервые было получено в 1928 году Паули. Поэтому его часто называют уравнением Паули. Уравнение (20) можно интерпретировать следующим образом. Диагональный элемент $\rho_{mm}(t)$ дает вероятность обнаружить атомный уровень $\mid m\rangle$ занятым в момент времени t. Эта вероятность увеличивается со временем благодаря переходам из всех других уровней $\mid n\rangle$ на данный уровень $\mid m\rangle$. Она уменьшается в результате переходов с уровня $\mid m\rangle$ на все другие уровни $\mid n\rangle$. Параметры Γ_{mn} имеют смысл вероятностей переходов между атомными уровнями $\mid n\rangle \to \mid m\rangle$ в единицу времени, вызванных взаимодействием с резервуаром.

Задача 2. Используя уравнение Паули, рассмотреть спиновую релаксацию системы электронов в термостате, считая частоты переворота спина одинаковыми.

Решение

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:

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

Вероятности $p_\uparrow(t)$ и $p_\downarrow(t)$ обнаружения электрона в состоянии спин "вверх" $\uparrow$ и спин "вниз" $\downarrow$, соответственно, представляют собой диагональные элементы редуцированной матрицы плотности электронной системы: $p_\uparrow(t) = \rho(t)_{11}$ и $p_\downarrow(t) = \rho(t)_{22}$. 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. Величина $T_1 = 1/2w$, определяющая скорость релаксации спиновых состояний, называется продольным временем релаксации.

Задача 3. Используя уравнение Паули, рассмотреть кинетику населенностей двухуровневой системы, находящейся в контакте с термостатом.

Решение

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 $S = k\,ln\,\Omega$

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

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

Частоты переходов не равны, поскольку учитываются степени свободы термостата. Населенности атомных уровней представляют собой диагональные элементы матрицы плотности: $\rho_{11} = p_1, \quad \rho_{22} = p_2$.

Равновесие ($\dot{p}_1 = -\dot{p}_2 = 0$) имеет место, когда

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

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

(каноническое распределение). Откуда

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

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

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

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

В общем случае решение уравнения для разности населенностей можно записать в виде

$$\Delta p(t) = \Delta p(0)\, e^{-t/T_1}.$$

где продольное время релаксации

$$\frac{1}{T_1} = \Gamma_{12} + \Gamma_{21}.$$

Задача 4. Доказать, что для квантовой системы, подчиняющейся уравнению Паули, выполняется Н-теорема Больцмана.

Решение

Переход к редуцированной атомной матрице плотности (сокращенному описанию неравновесных состояний) позволяет ввести соответствующую ей энтропию. Полный статистический оператор "изучаемая система + термостат" $\tilde{\rho}(t)$ не может быть использован для определения энтропии (как это принято в теории равновесного состояния $S = -\langle k \ln \tilde{\rho} \rangle$), т.к. среднее значение логарифма полного статистического оператора $\langle \ln \tilde{\rho} \rangle$ 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

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

Тогда для энтропии имеем

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

$$= sp\,\{\, U(t,0)\,\tilde{\rho}(0)\,U^{-1}(t,0)\,\ln\,(\,U(t,0)\,\rho(0)\,U^{-1}(t,0))\,\} =$$
$$= -sp\,\{\, U(t,0)\,\tilde{\rho}(0)\,U^{-1}(t,0)\;U(t,0)\;\ln\,(\tilde{\rho}(0)\,U^{-1}(t,0))\,\}\,,$$

так как

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

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

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

Однако, если принять за энтропию неравновесного состояния среднее значение логарифма редуцированной атомной матрицы плотности $\rho(t) = Sp_T\tilde{\rho}(t) = Sp_{Thermostat}\tilde{\rho}(t)$, представляющей сокращенное описание

$$S(t) = -\,\langle\ln\rho(t)\rangle\,, \qquad (21)$$

то такая энтропия уже может возрастать, поскольку $\rho(t)$ удовлетворяет обобщенному кинетическому уравнению, а не уравнению Лиувилля.

Покажем, что если ρ_{nn} удовлетворяет уравнению Паули, то энтропия (21) может только возрастать и лишь в случае равновесия оставаться постоянной. Продифференцируем (21) по времени

$$\dot{S} = -\sum_n\,(\ln\rho_{nn} + 1)\,\dot{\rho}_{nn} = -\sum_n\,\ln\rho_{nn}\,\dot{\rho}_{nn}, \qquad (22)$$

так как второй член обращается в нуль вследствие условия нормировки

$$\sum_n p_n(t) = \sum_n \rho_{nn}(t) = 1.$$

Подставляя в формулу (21) выражение для $\dot{\rho}_{nn}$ из уравнения Паули и учитывая условие $\Gamma_{mn} = \Gamma_{nm}$, получим

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{mn}\,\Gamma_{nm}\,\ln\rho_{nn}\,\left(\rho_{mm} - \rho_{nn}\right). \qquad (23)$$

Используя симметрию коэффициентов под знаком суммы и переставляя индексы суммирования, запишем (23) в виде

$$\frac{dS}{dt} = \frac{1}{2}\,\sum_{mn}\;\Gamma_{nm}\,(\ln\rho_{nn} - \ln\rho_{mm})\;(\rho_{mm} - \rho_{nn}). \qquad (24)$$

Каждое из слагаемых суммы в правой части уравнения (24) положительно или равно нулю (т.к. $\ln(x/y)(x-y) \geq 0$). Таким образом

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

т.е. энтропия для любых процессов возрастает (или остается постоянной).

Задача 5. Используя обобщенное кинетическое уравнение, исследовать кинетику индуцированного излучения и поглощения двухуровневой системы, взаимодействующую с радиочастотным (или микроволновым) электромагнитным полем, при наличии процессов релаксации [2].

Решение

Рассмотрим систему двухуровневых атомов с невырожденными значениями энергии E_1 и E_2, которым соответствуют состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Рассмотрим случай, когда разность энергий атомных состояний не слишком велика, так что соответствующая частота лежит в области радиочастот ($10^4 - 10^9$ Гц) или в микроволновой области (10^9 - 10^{12} Гц). Пусть система атомов взаимодействует с электромагнитным полем, имеющим частоту, близкую к частоте атомного перехода. Одно из существенных свойств переходов в радиочастотной и микроволновой области заключается в преобладании вынужденного излучения над спонтанным излучением. Предположим, что внешнее поле перпендикулярно оси квантования, так что существует выделенное поперечное направление. В этом случае для двухуровневой системы под действием поля возникает когерентная суперпозиция состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$, следовательно, приведенная матрица плотности $\rho(t)$ в отличие от случаев, рассмотренных в задачах 1 и 2, не будет больше диагональной. Как и предыдущих случаях, среду, окружающую атомы, будем считать тепловым резервуаром, находящимся в состоянии теплового равновесия.

Гамильтониан системы атомов, взаимодействующих с внешним электромагнитным полем (без учета релаксации), можно записать в виде

$$H(t) = H_0 + V(t), \tag{25}$$

где H_0 - гамильтониан свободных двухуровневых атомов в отсутствие переменного поля (в случае магнитного резонанса статическое поле должно быть включено в H_0). Гамильтониан взаимодействия атомов с полем представим в виде

$$V(t) = V\cos\omega t = (1/2)V\left[\exp(\imath\omega t) + \exp(-\imath\omega t)\right].$$

Для электрических дипольных переходов, например, оператор взаимодействия равен

$$V(t) = -e\vec{r}\vec{E}(t) = -e\vec{r}\vec{E}\cos\omega t,$$

где $e\vec{r}$ – оператор дипольного момента атома и $\vec{E}(t)$ – напряженность электрического поля. Взаимодействие парамагнитных атомов или ионов с переменным электромагнитным полем, имеющим вектор напряженности магнитного поля $\vec{H}(t)$, описывается формулой

$$V(t) = -\vec{\mu}\vec{H}(t) = -\vec{\mu}\vec{H}\cos\omega t,$$

где $\vec{\mu}$ – магнитный дипольный момент атомов.

Для исследования кинетики изучаемой системы воспользуемся обобщенным основным кинетическим уравнением для редуцированной матрицы плотности атомной подсистемы (19)

$$\dot{\rho}(t)_{m'm} = -(\imath/\hbar)\langle m'|[H(t),\rho(t)]|m\rangle + \delta_{m'm}\sum_{n\neq m}\Gamma_{mn}\rho(t)_{nn} - \gamma_{m'm}\rho(t)_{m'm},$$

где $\rho(t)_{m'm} = \langle m' \mid \rho(t) \mid m\rangle$.

Для пояснения физического смысла входящих в него релаксационных коэффициентов запишем обобщенное кинетическое уравнение в более удобной форме

$$\dot{\rho}(t)_{m'm} = -(\imath/\hbar)\langle m'|[H(t),\rho(t)]|m\rangle +$$

$$+\delta_{m'm}\left\{\sum_{n\neq m}\Gamma_{mn}\rho(t)_{nn} - \sum_{n\neq m}\Gamma_{nm}\rho(t)_{mm}\right\} - (1-\delta_{m'm})\gamma_{m'm}\rho(t)_{m'm}, \qquad (26)$$

где коэффициенты Γ_{mn} (Γ_{nm}) описывают релаксацию диагональных элементов редуцированной матрицы плотности и представляют собой вероятности перехода между состояниями $|n\rangle \mapsto |m\rangle$ ($|m\rangle \mapsto |n\rangle$) в единицу времени. Коэффициенты γ_{mn} описывают релаксацию недиагональных элементов редуцированной матрицы плотности, причем мнимая часть $Im\gamma_{mn}$ приводит к сдвигу линии, а действительная часть $Re\gamma_{mn}$ – к уширению линии (например, в случае магнитного резонанса действительная часть $Re\gamma_{mn}$, называемая обратным временем поперечной релаксации, отражает релаксацию компонент магнитного момента, перпендикулярных статическому полю). Заметим, что для поперечных полей отличны от нуля только недиагональные элементы оператора V

Для рассматриваемой системы из обобщенного основного кинетического уравнения (26) получаем уравнения для диагональных и недиагональных элементов редуцированной матрицы плотности

$$\dot{\rho}(t)_{11} = -(\imath/\hbar)\langle 1|[V(t), \rho(t)]|1\rangle + \Gamma_{12}\rho(t)_{22} - \Gamma_{21}\rho(t)_{11}, \tag{27}$$

$$\dot{\rho}(t)_{22} = -(\imath/\hbar)\langle 2|[V(t), \rho(t)]|2\rangle + \Gamma_{21}\rho(t)_{11} - \Gamma_{12}\rho(t)_{22}, \tag{28}$$

$$\dot{\rho}(t)_{21} = \dot{\rho}(t)^*_{12} = -\imath(\omega_{21} - \imath\gamma_{21})\rho(t)_{21} - (\imath/\hbar)\langle 2|[V(t), \rho(t)]|1\rangle =$$
$$= -\imath(\omega_{21} - \imath\gamma_{21})\rho(t)_{21} -$$
$$-(\imath/2\hbar)\langle 2|V|1\rangle \left[\exp(\imath\omega t) + \exp(-\imath\omega t)\right] (\rho(t)_{11} - \rho(t)_{22}). \tag{29}$$

Уравнения (27) – (29) определяют скорость изменения элементов матрицы плотности за счет совместного действия внешнего поля и релаксации. Динамическое равновесие устанавливается при $\dot{\rho}_{11} = \dot{\rho}_{22} = 0$, т.е. когда эффекты вынужденного излучения и поглощения уравновешиваются процессами релаксации. Первый член в уравнениях (27), (28)

$$[\dot{\rho}(t)_{mm}]_{rad} = -(\imath/\hbar)\langle m|[V(t), \rho(t)]|m\rangle \tag{30}$$

есть скорость изменения вероятности уровня $|m\rangle$ за счет электромагнитного поля, а другие члены описывают влияние процессов релаксации.

Исследуем "стационарные"решения более детально. Найдем вначале решение уравнения (29) для недиагональных элементов матрицы плотности. Элемент $(\rho(t)_{21}))_{int}$ в представлении взаимодействия связан с $\rho(t)_{21}$ соотношением

$$\rho(t)_{21} = \exp(-\imath\omega_{21}t)(\rho(t)_{21}))_{int}.$$

Для величины $(\rho(t)_{21}))_{int}$ из (29) получаем уравнение

$$(\dot{\rho}(t)_{21})_{int} = -\gamma_{21})(\rho(t)_{21})_{int} - -(\imath/2\hbar)\langle 2|V|1\rangle \{\exp[\imath(\omega_{21} + \omega)t)] +$$
$$+ \exp[\imath(\omega_{21} - \omega)t]\} (\rho(t)_{11} - \rho(t)_{22}). \tag{31}$$

В резонансной области $\omega_{21} \approx \omega$ основной вклад дает низкочастотный член $\exp[\imath(\omega_{21} - \omega)t]$, и в первом приближении быстро осциллирующими членами

$\exp[\imath(\omega_{21}+\omega)t] \approx \exp(2\imath\omega t)$ можно пренебречь (такое приближение называется в физике приближением "медленно меняющейся волны"). В рассматриваемом приближении уравнение (31) упрощается

$$(\dot{\rho}(t)_{21})_{int} = -\gamma_{21})(\rho(t)_{21})_{int} - -(\imath/2\hbar)\langle 2|V|1\rangle \exp[\imath(\omega_{21}-\omega)t](\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}). \tag{32}$$

Решение уравнения (32) можно представить в виде

$$(\rho(t)_{21}))_{int} = \exp[\imath(\omega_{21}-\omega)t]\rho(\omega)_{21},$$

которому в представлении Шредингера соответствует решение вида

$$\rho(t)_{21} = \exp(-\imath\omega t)\rho(\omega)_{21}, \tag{33}$$

где

$$\rho(\omega)_{21} = (1/2\hbar)\langle 2|V|1\rangle \exp[\imath(\omega_{21}-\omega)t]\frac{\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}}{\omega-\omega_{21}+\imath\gamma_{21}}.$$

Аналогично для $\rho(t)_{12}$ можно получить

$$\rho(t)_{12} = \exp(\imath\omega t)\rho(\omega)_{21}, \tag{34}$$

$$\rho(\omega)_{12} = (1/2\hbar)\langle 2|V|1\rangle^* \exp[\imath(\omega_{21}-\omega)t]\frac{\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}}{\omega-\omega_{21}-\imath\gamma_{21}}$$

Рассмотрим теперь уравнения для диагональных элементов. Подставляя найденные решения (33), (34) в уравнение (30), получим для радиационной части диагонального элемента в приближении вращающейся волны

$$[\dot{\rho}(t)_{22}]_{rad} = -(\imath/\hbar)\langle 2|V(t)|1\rangle\rho(t)_{12} + (\imath/\hbar)\langle 1|V(t)|2\rangle\rho(t)_{21} =$$

$$= -(\imath/2\hbar^2)|\langle 2|V(t)|1\rangle|^2(\rho_{11}-\rho_{22})\left(\frac{1}{\omega-\omega_{21}-\imath\gamma_{21}^*} - \frac{1}{\omega-\omega_{21}+\imath\gamma_{21}}\right) =$$

$$= (1/\hbar^2)|\langle 2|V(t)|1\rangle|^2\frac{Re\gamma_{21}}{(\omega-\omega_{21}-Im\gamma_{21})^2+Re\gamma_{21}^2}(\rho_{11}-\rho_{22}). \tag{35}$$

Аналогичное выражение можно получить и для $[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad}$, причем, естественно, что $[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad} = -[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad}$. Вводя обозначение

$$\Gamma(\omega)_{21} = (1/2\hbar^2)|\langle 2|V|1\rangle|^2\frac{Re\gamma_{21}}{(\omega-\omega_{21}-Im\gamma_{21})^2+Re\gamma_{21}^2},$$

мы можем теперь переписать полные уравнения для диагональных элементов матрицы плотности в стационарном состоянии

$$\dot{\rho}(t)_{11} = [\Gamma_{12}+\Gamma(\omega)_{12}]\rho_{22} - [\Gamma_{21}+\Gamma(\omega)_{21}]\rho_{11} = 0,$$

$$\dot{\rho}(t)_{22} = [\Gamma_{21} + \Gamma(\omega)_{21}]\rho_{11} - [\Gamma_{12} + \Gamma(\omega)_{12}]\rho_{22} = 0.$$

Если интенсивность поля достаточно велика, то вероятности заселенностей ρ_{11} и ρ_{22} могут значительно отличаться от своих равновесных значений $\rho_{11}^{(0)}$ и $\rho_{22}^{(0)}$. В этом случае говорят о накачке, обусловленной полем. Если интенсивность поля мала, то диагональные элементы остаются близкими к своим равновесным значениям, и в правых частях выражений (33), (34) можно положить

$$\rho_{mm} \approx \rho_{mm}^{(0)}.$$

Энергию, поглощенную двухуровневыми атомами и отданную полем, можно записать в виде

$$\frac{dE}{dt} = E_1[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad} + E_2[\dot{\rho}(t)_{22}]_{rad} = (E_1 - E_2)[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad}. \tag{36}$$

Если $[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad} < 0$, то число вынужденных переходов $|1\rangle \to |2\rangle$ превышает число переходов $|2\rangle \to |1\rangle$, и система поглощает энергию поля. Так как $E_2 > E_1$, в этом случае $dE/dt > 0$. Наоборот, при $[\dot{\rho}(t)_{11}]_{rad} > 0$ в процессе вынужденного излучения энергии выделяется больше, чем поглощается, и $dE/dt < 0$. Подстановка (35) в (36) дает

$$\frac{dE}{dt} = (1/\hbar^2)(E_2 - E_1)|\langle 2|V(t)|1\rangle|^2 \frac{Re\gamma_{21}}{(\omega - \omega_{21} - Im\gamma_{21})^2 + Re\gamma_{21}^2}(\rho_{11} - \rho_{22}),$$

а для слабого поля

$$\frac{dE}{dt} = (1/\hbar^2)(E_2 - E_1)|\langle 2|V(t)|1\rangle|^2 \frac{Re\gamma_{21}}{(\omega - \omega_{21} - Im\gamma_{21})^2 + Re\gamma_{21}^2}(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}).$$

Так как в тепловом равновесии $\rho_{11}^{(0)} > \rho_{22}^{(0)}$, то для случая слабого поля имеем $dE/dt > 0$, и энергия из поля поглощается. В этом случае последнее выражение показывает, что наличие релаксации приводит к сдвигу линии за счет мнимой части $Im\gamma_{21}$ и уширению линии за счет действительной части $Re\gamma_{21}$. В случае мазеров и лазеров, когда имеет место инверсия заселенностей ($\rho_{11} < \rho_{22}$), выполняется условие $dE/dt < 0$. В этом случае излучение не ослабляется, а усиливается.

Задача 6. Используя решение задачи 4, вывести систему уравнений Блоха для магнитного резонанса в диссипативной системе спинов 1/2 (двухуровневой системы во внешнем поле) [2].

Решение

Простейшей системой, в которой можно наблюдать магнитный резонанс, является двухуровневая система. В качестве такой системы можно рассмотреть атомы или молекулы с нулевым орбитальным угловым моментом и спином 1/2 или атомы с нулевым угловым моментом электронов и спином ядра 1/2, находящиеся в статистическом магнитном поле. Все полученные ниже результаты будут справедливы и в оптическом диапазоне для двухуровневого атома, резонансно взаимодействующего с внешним электромагнитным полем.

Будем для определенности рассматривать систему спинов 1/2 в статическом магнитном поле $\vec{H}_0$, которое приложено в направлении оси z. Расстояние между энергиями для состояний спин "вниз" и спин "вверх" будет равно $\Delta E = E_2 - E_1 = 2\mu|\vec{H}_0|$.

Пусть к системе приложено также поперечное электромагнитное поле с напряженностью магнитного поля $\vec{H}_1(t)$, которое осциллирует с угловой частотой ω_L, удовлетворяющей условию резонанса: $\hbar\omega_L = \Delta E$ (ларморовской частотой). Тогда энергия поля будет поглощаться за счет переходов атомов с нижнего уровня на верхний. Одновременно будет происходить и обратный процесс, обусловленный релаксацией, которая приводит к передаче энергии возбужденного состояния "окружающей среде". Действие этих конкурирующих факторов на спиновую матрицу плотности описывается уравнением (26), в котором гамильтониан H_0 включает в себя теперь взаимодействие спинов со статическим магнитным полем :

$$H_0 = H_0^{'} - \vec{\mu}\vec{H}_0.$$

Тогда взаимодействие спина с внешними полями можно описать с помощью гамильтониана

$$H(t) = -\vec{\mu}\vec{H}_0 + V(t) = -\vec{\mu}(\vec{H}_0 + \vec{H}_1(t)).$$

Рассмотрим вначале решение уравнений (27), (28) для диагональных элементов матрицы плотности в отсутствие внешнего электромагнитного поля. При этом

$$\dot{\rho}(t)_{11} = \Gamma_{12}\rho(t)_{22} - \Gamma_{21}\rho(t)_{11} = -\dot{\rho}(t)_{22}.$$

Будем считать, что спины ведут себя независимо, и "окружающую среду" можно рассматривать как термостат или тепловой резервуар в состоянии теплового равновесия. С учетом условия $\rho_{11}+\rho_{22}=1$ уравнения для диагональных элементов ρ_{11} и ρ_{22} можно записать как

$$\dot{\rho}(t)_{11}=\Gamma_{12}-(\Gamma_{12}+\Gamma_{21})\rho(t)_{11},$$

$$\dot{\rho}(t)_{22}=\Gamma_{21}-(\Gamma_{12}+\Gamma_{21})\rho(t)_{22},$$

откуда вытекает, что

$$\dot{\rho}(t)_{11}-\dot{\rho}(t)_{22}=(\Gamma_{12}-\Gamma_{21})-(\Gamma_{12}+\Gamma_{21})[\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}].$$

В состоянии теплового равновесия из условия $\dot{\rho}_{11}=\dot{\rho}_{22}=0$ имеем

$$\rho_{11}^{(0)}-\rho_{22}^{(0)}=\frac{\Gamma_{12}-\Gamma_{21}}{\Gamma_{12}+\Gamma_{21}},$$

где $\rho_{11}^{(0)},\rho_{22}^{(0)}$ – равновесные населенности уровней (в присутствии статического поля). Определим действительный параметр T_1 как

$$T_1^{-1}=\Gamma_{12}+\Gamma_{21}.$$

Тогда предыдущее уравнение можно записать в виде

$$\dot{\rho}(t)_{11}-\dot{\rho}(t)_{22}=\frac{1}{T_1}\left\{(\rho_{11}^{(0)}-\rho_{22}^{(0)})-[\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}]\right\} \tag{37}$$

Электромагнитное поле можно учесть, добавляя соответствующие члены в уравнение (37)

$$\dot{\rho}(t)_{11}-\dot{\rho}(t)_{22}=-(\imath/\hbar)\{\langle 1|[V(t),\rho(t)]|1\rangle-\langle 2|[V(t),\rho(t)]|2\rangle\}+$$
$$+\frac{1}{T_1}\left\{(\rho_{11}^{(0)}-\rho_{22}^{(0)})-[\rho(t)_{11}-\rho(t)_{22}]\right\} \tag{38}$$

Теперь рассмотрим недиагональные элементы, пренебрегая мнимой частью γ_{12} (т.е. сдвигом линии). В этом приближении определим T_2 следующим образом:

$$T_2=1/\gamma_{12}$$

и запишем уравнение для недиагональных элементов

$$\dot{\rho}(t)_{21}=(-\imath\omega_{12}+1/T_2)\rho(t)_{21}-(\imath/\hbar)\langle 2|[V(t),\rho(t)]|1\rangle=$$
$$=-(\imath/\hbar)\langle 2|[H(t),\rho(t)]|1\rangle+(1/T_2)\rho(t)_{21}=-\dot{\rho}(t)_{12}^{*}. \tag{39}$$

Макроскопическую поляризацию системы можно определить как

$$M_i=N\gamma\hbar\langle\sigma_i\rangle/2,\qquad i=x,y,z,$$

где σ_i – соответствующая матрица Паули, N - полное число атомов в единице объема, γ – гиромагнитное соотношение. Учитывая определение матриц Паули, можно записать для проекций намагниченности

$$M_x = (1/2)N\gamma\hbar(\rho_{12} + \rho_{21}), \quad M_y = (1/2)N\gamma\hbar\imath(\rho_{12} - \rho_{21}),$$

$$M_y = (1/2)N\gamma\hbar\imath(\rho_{11} - \rho_{22}).$$

Используя уравнения (38) и (39), мы можем тогда получить уравнения движения для проекций вектора намагниченности

$$\begin{aligned}
\frac{dM_x}{dt} &= \gamma[\vec{M} \times (\vec{H}_0 + \vec{H}_1(t))]_x - \frac{M_x}{T_2},\\
\frac{dM_y}{dt} &= \gamma[\vec{M} \times (\vec{H}_0 + \vec{H}_1(t))]_y - \frac{M_y}{T_2},\\
\frac{dM_z}{dt} &= \gamma[\vec{M} \times \vec{H}_1(t)]_z - \frac{M_z - M_z^{(0)}}{T_1},
\end{aligned} \tag{40}$$

где

$$M_z^{(0)} = \frac{\Gamma_{12} - \Gamma_{21}}{\Gamma_{12} + \Gamma_{21}} \frac{N\gamma\hbar}{2}.$$

Уравнения (40) называются уравнениями Блоха; они впервые были выведены Феликсом Блохом в 1946 году.

Выясним физический смысл параметров T_1 и T_2. Предположим в определенный момент времени (скажем, при $t = 0$), что поле $\vec{H}_1(t)$ исчезло. В отсутствие внешнего электромагнитного поля уравнения Блоха сводятся к уравнениям

$$\begin{aligned}
\frac{dM_x}{dt} &= \omega_L M_y - \frac{M_x}{T_2},\\
\frac{dM_y}{dt} &= -\omega_L M_x - \frac{M_y}{T_2},\\
\frac{dM_z}{dt} &= -\frac{M_z - M_z^{(0)}}{T_1},
\end{aligned} \tag{41}$$

где $\omega_L = \gamma|\vec{H}_0|$. Если все процессы релаксации отсутствуют, вектор $\vec{M}$ свободно прецессирует вокруг статического поля $\vec{H}_0$ с частотой ω_L. Компонента M_z остается постоянной, а M_x и M_y изменяются по гармоническому закону. За счет взаимодействия с окружением спиновая система будет релаксировать к состоянию теплового равновесия.

При наличии релаксации решения уравнений (41) имеют вид

$$M_x(t) = A\sin(\omega_L t + \varphi)e^{-t/T_2},$$

$$M_x(t) = A\cos(\omega_L t + \varphi)e^{-t/T_2},$$

$$M_z(t) = (B - M_z^{(0)})e^{-t/T_1},$$

где A, B и φ – постоянные интегрирования. Из решений видно, что компоненты $M_x(t)$ и $M_y(t)$ стремятся к равновесному нулевому значению с постоянной времени T_2, а компонента $M_z(t)$ стремится к своему равновесному значению с постоянной времени T_1. Таким образом, T_2 отражает распад компонент M_x и M_y, перпендикулярных статическому полю, и поэтому называется временем поперечной релаксации, тогда как T_1 отражает распад продольной компоненты M_z и называется временем продольной релаксации.

В оптике для описания кинетики двухуровневых атомов (основное состояния атома соответствует состоянию спин "вниз", а возбужденное – спин "вверх") в электромагнитном поле при наличии релаксации используют аналог уравнений Блоха – "оптические" уравнения Блоха [5]:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -\Delta\, v - \frac{u}{T_2},\\ \dot{v} &= -\Delta\, v - \frac{v}{T_2} + \kappa\mathcal{E}\omega,\\ \dot{\omega} &= -\frac{\omega - \omega^{(0)}}{T_1} - \kappa\mathcal{E}v,\end{aligned} \tag{42}$$

где $u = \rho_{12} + \rho_{21}$, $v = \imath[\rho_{12} - \rho_{21}]$, $\omega = \rho_{11} - \rho_{22}$, Δ – расстройка частот атома и поля и $\kappa\mathcal{E}$ – частота Раби.

1.2. Задачи для самостоятельной работы

1. Исходя из определения коэффициентов $P^{\pm}_{mnkl}$ (14) и (15), показать, что $(P^{-}_{mnkl})^* = P^{+}_{lknm}$, откуда следует, что величины Γ_{mn} действительны.

2. Показать, что недиагональные элементы матрицы плотности для двухуровневой системы осциллируют с частотой перехода между уровнями энергии двухуровнего атома и затухают со скоростью, характеризуемой поперечным временем релаксации $T_2^{-1} = \gamma_{12}$.

3. Исходя из определения параметров Γ_{mn} и γ_{mn}, показать. что для двухуровневой системы $T_2 < T_1$.

4. Показать, что уравнение Паули сохраняет нормировку вероятности $\sum\limits_n p_n(t) = 1$.

5. Найти временную зависимость вероятностей $p_n(t)$ для релаксации трехуровневой системы при отличных от нуля частотах переходов Γ_{21} и Γ_{32} и начальном условии $p_n(0) = \delta_{n,3}$.

6. Решить уравнение Паули для многоуровневой модели Саймона ($\Gamma_{mn} = w = const$) с начальными условиями $p_n(0) = \delta_{n,k}$ и определить временное поведение для энтропии в случае, когда статистический вес $\Omega \gg 1$ (статистическая система) и $\Omega = 2$ (двухуровневая система).

7. С помощью кинетического уравнения Паули исследовать поведение системы N частиц, каждая из которых имеет два уровня энергии E_1 и $E_2 = E_1 + \Delta$, считая, что система имеет температуру T_0 и в момент времени $t = 0$ приведена в контакт с термостатом, имеющим температуру T. Определить поток энергии из двухуровневой системы в термостат и изменение температуры T_0 с течением времени, исследовав предельные случаи больших и малых времен.

8. Колония бактерий содержит в начальный момент времени $t = 0$ N особей. Каждая бактерия может поделиться в единицу времени на две с вероятностью (скоростью) Γ_1 и погибнуть со скоростью Γ_2. Записать основное уравнение эволюции для числа бактерий. Найти решение уравнения. Определить число бактерий в стационарном режиме.

9*. Показать, что при любом начальном распределении вероятностей $p_n(0)$ уравнение Паули является уравнением релаксационного типа [3].

10.* Вывести "обобщенные" или "оптические" уравнения Блоха (42) для диссипативной системы двухуровневых атомов, взаимодействующей с электромагнитным полем [2, 5].

11. Найти решение уравнений Блоха для диссипативной двухуровневой модели в отсутствие внешнего поля.

12. Найти соотношения для коэффициентов Эйнштейна спонтанного и вынужденного излучения для модели двухуровневого атома, взаимодействующего с модой теплового электромагнитного поля.

13. Решить уравнения Блоха в отсутствие внешнего поля для диссипативной двухуровневой модели, в которой состояния 1 и 2 вырождены по энергии, т.е. $E_1 = E_2$.

14. Найти стационарное решение уравнений Блоха для двухуровневой модели, взаимодействующей с гармоническим внешним полем с частотой Раби Ω и расстройкой Δ и временами продольной и поперечной релаксации T_1 и

T_2 соответственно.

15.* В условиях предыдущей задачи найти квазистационарное решение уравнений Блоха для двухуровневой системы в адиабатическом приближении ($T_2 \ll T_1$) на временах $T_2 \ll t \ll T_1$) [6].

16. Получить из общего решения Раби "оптических" уравнений Блоха без затухания выражение для временной зависимости средней полуразности населенностей двухуровневого атома, который первоначально находился: а) в основном, б) в возбужденном состоянии.

2. Метод двухвременных температурных функций Грина. Равновесные свойства систем

Основная литература

1. Зубарев, Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев. – М.: Наука, 1971. – 415 с.

2. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика. Квантовая статистика / И.А. Квасников. – М.: URSS, 2005. – 349 с.

Дополнительная литература

3. Тябликов, С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. – М.: Наука, 1975. – 546 с.

4. Плакида, Н.М. Некоторые вопросы квантовой теории твердого тела (Метод двухвременных функций Грина) / Н.М. Плакида. – Дубна: Изд-во ОИЯИ, 1985 – 154 с.

5. Давыдов, А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1976. – 640 с.

6. Задачи по термодинамике и статистической физике / под ред. П. Лансберга. – М.: Мир, 1974. – 639 с.

7. Рудой, Ю.Г. Современное состояние метода двухвременных функций Грина в квантовой теории магнетизма / Ю.Г. Рудой. // Статистическая физика и квантовая теория поля / под. ред. Н.Н. Боголюбова. – М.: Наука. 1973, – 456 с.

8. Барьяхтар, В.Г. Функции Грина в теории магнетизма / В.Г. Барьяхтар, В.Н. Криворучко, Д.А. Яблонский. – Киев: Наукова думка, 1984. – 336 с.

9. Дудкин, С.И. Функции Грина в теории поглощения света кристаллами / С.И. Дудкин. – Киев: Наукова думка, 1983. - 176 с.

10. Башкиров, Е.К. Об оценке времени конверсии в двухуровневых макроскопических системах / Е.К. Башкиров, Н.Н. Боголюбов-мл., А.С. Шумовский // Теоретическая и математическая физика. – 1983. – Т.56. – С. 395 404.

11. Лайнс, М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / М. Лайнс, А. Гласс. – М.: Мир, 1981. – 736 с.

12. Sung, C.C. Phase transition in the multimode two- and three-level Dicke model (Green's function method) / C.C. Sung, C.M. Bowden // J. Phys. A. – 1979. - V. 12. – № 11. – P. 2273 - 2286.

13. Блинц, Р. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Р. Блинц, Р. Жекш. - М.: Мир, 1975. – 400 с.

2.1. Задачи с решениями

Задача 1. Исследовать равновесные свойства идеальных бозе- и ферми-газов.

Решение

Рассмотрим систему невзаимодействующих ферми- или бозе-частиц. Гамильтониан такой системы в представлении вторичного квантования можно записать в виде

$$H = \sum_k \varepsilon_k \, a_k^+ \, a_k, \qquad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu.$$

Здесь a_k^+ и a_k – операторы рождения и уничтожения частиц в квантовом состоянии k, удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[a_k, a_{k'}^+]_\eta = \delta_{k k'}; \qquad [a_k, a_{k'}]_\eta = [a_k^+, a_{k'}^+]_\eta = 0,$$

где $\eta = 1$ для бозе-частиц и $\eta = -1$ для ферми-частиц. Введем коммутаторную (для бозе-частиц) или антикоммутаторную (для ферми частиц) запаздывающую функцию Грина

$$G_{k k'}(t - t') = \langle\langle a_k(t); a_{k'}^+(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t - t')\,\langle [a_k(t), a_{k'}^+(t')]_\eta \rangle.$$

Уравнение движения для введенной функции Грина имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t} G_{k k'}(t - t') = \delta(t - t')\,\langle [a_k, a_{k'}^+]_\eta \rangle + \varepsilon_k \, G_{k k'}(t - t').$$

Для упрощения записей везде в дальнейшем будем полагать $\hbar = 1$. Перейдем в последнем уравнении к фурье-компонентам

$$G_{k\,k'}(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} G_{k\,k'}(\omega)\, e^{-i\omega\,(t-t')}\, d\omega,$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\,(t-t')}\, d\omega.$$

Тогда вместо дифференциального мы получим алгебраическое уравнение вида

$$\omega\, G_{k\,k'}(\omega) = \delta_{k\,k'} + \varepsilon_k\, G_{k\,k'}(\omega).$$

Откуда

$$G_{k\,k'}(\omega) = \frac{\delta_{k\,k'}}{\omega - \varepsilon_k}.$$

Теперь мы можем найти спектральную интенсивность соответствующей корреляционной функции

$$J_{k'k}(\omega) = -\frac{1}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}\, 2\,Im\, \frac{\delta_{k\,k'}}{\omega - \varepsilon_k + i\,\varepsilon} = \frac{2\,\pi\,\delta(\omega-\varepsilon_k)}{e^{\frac{\omega}{\theta}} - \eta}\,\delta_{k\,k'}.$$

Следовательно, временная корреляционная функция имеет вид

$$\langle a^{+}_{k'}(t')\, a_k(t)\rangle = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, J_{k'k}(\omega)\, e^{-i\omega\,(t-t')} = \langle n_k\rangle\, e^{-i\varepsilon_k\,(t-t')}\,\delta_{k\,k'},$$

где $\langle n_k\rangle = \langle a^{+}_k\, a_k\rangle = 1/(e^{\frac{\varepsilon_k}{\theta}} - \eta)$ - среднее число бозе- $(\eta = 1)$ или ферми-частиц $(\eta = -1)$. Запаздывающая функция Грина имеет вид

$$\langle\langle a_k(t); a^{+}_{k'}(t')\rangle\rangle^{r} = -i\,\theta(t-t')\, e^{-i\varepsilon_k\,(t-t')}.$$

Хорошо видно, что временные корреляционные функции и функции Грина идеального квантового газа периодичны во времени и не затухают при $|t-t'| \to \infty$. При этом фурье-компонента функции Грина имеет простой полюс при частоте, равной энергии возбуждения системы $\omega_k = \varepsilon_k$.

Задача 2. Исследовать равновесные свойства ферромагнетика Гейзенберга [3-8].

Решение

Рассмотрим магнитный диэлектрик, состоящий из N одинаковых атомов со спином $S = \frac{1}{2}$, расположенных в узлах кристаллической решетки. Обменное взаимодействие этих спинов может быть описано гейзенберговской моделью

$$H = -h \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f f' \alpha} I(\vec{f} - \vec{f}') S_f^\alpha S_{f'}^\alpha, \tag{43}$$

где $h = \mu \mathcal{H}^z$ – зеемановская энергия магнитного момента атома μ во внешнем магнитном поле $\vec{\mathcal{H}}$, направленном по оси z, S_f^α – оператор спина в узле решетки f, $\alpha = x, y, z$, $I(\vec{f} - \vec{f}')$ – обменное взаимодействие спинов, которое в однородной решетке зависит лишь от расстояния между узлами $|\vec{f} - \vec{f}'|$, причем в сумме учитывается взаимодействие только между разными узлами: $f \neq f'$ В случае $I(\vec{f} - \vec{f}') > 0$ основное состояние системы при температуре $T = 0$ является ферромагнитным.

Операторы спина подчиняются известным коммутационным соотношениям ($\hbar = 1$):

$$[S_f^x, S_{f'}^y] = i\, S_f^z\, \delta_{ff'}$$

и т.д.

Для описания свойств магнетика удобно ввести операторы переворота спина

$$S_f^\pm = S_f^x \pm i\, S_f^y, \qquad \left(S_f^+\right)^+ = S_f^-,$$

действие которых на собственные состояния с заданной проекцией спина S_f^z приводит к увеличению или уменьшению проекции спина на $\hbar$. Коммутационные соотношения для этих операторов имеют вид

$$[S_f^+, S_{f'}^-] = 2\, S_f^z\, \delta_{ff'}, \qquad [S_f^\pm, S_{f'}^z] = \mp\, S_f^\pm\, \delta_{ff'}.$$

Кроме того, для операторов переворота можно записать следующие полезные соотношения:

$$S_f^z = \frac{1}{2} - S_f^-\, S_f^+, \qquad S_f^z = S_f^+\, S_f^- - \frac{1}{2}, \qquad S_f^-\, S_f^+ + S_f^+\, S_f^- = 1.$$

Для определения спектра элементарных возбуждений магнетика рассмотрим коммутаторную запаздывающую функцию Грина

$$G_{ff'}(t - t') = \langle\langle S_f^+(t); S_{f'}^- \rangle\rangle^r = -i\Theta(t - t') \langle [S_f^+(t); S_{f'}^-]_{\eta=1} \rangle^r$$

Запишем для нее уравнение движения

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{ff'}(t-t') = \delta(t-t')\langle[S_f^+, S_{f'}^-]_{\eta=1}\rangle + h\,G_{ff'}(t-t') +$$
$$+\sum_{f''} I(\vec{f}-\vec{f}'')\,\langle\langle(S_{f''}^z(t)\,S_f^+(t) - S_f^z(t)\,S_{f''}^+(t));\ S_{f'}^-(t')\rangle\rangle.$$

Переходя к фурье-образам в уравнении для запаздывающей функции Грина, получим вместо дифференциальных систему алгебраических уравнений

$$(\omega-h)\,G_{ff'}(\omega) = 2\,\langle S_f^z\rangle\,\delta_{ff'} +$$
$$+\sum_{f''} I(\vec{f}-\vec{f}'')\,\langle\langle(S_{f''}^z\,S_f^+ - S_f^z\,S_{f''}^+)|\,S_{f'}^-\rangle\rangle_\omega.$$

В правую часть уравнения для двухчастичной функции Грина $G_{ff'}$ входит трехчастичная функция Грина. Для нее мы также можем записать уравнение движения и т.д. В результате получим бесконечную систему зацепляющихся уравнений. Такая проблема, как известно, возникает при описании динамических свойств любой многочастичной системы с взаимодействием. Способ обрыва такой цепочки может быть иногда подсказан конкретным видом гамильтониана задачи; в отдельных случаях, когда гамильтониан взаимодействия содержит малый параметр, процедуру расцепления можно провести регулярным образом с использованием специальной теории возмущений. Однако при построении теории ферромагнетика в широком интервале температур подобные рассуждения теряют силу из-за отсутствия в задаче какого-либо универсального малого параметра. В настоящее время неизвестны какие-либо внутренние критерии "качества" расцепления. Оправданием того или иного расцепления может служить полный анализ термодинамических следствий построенной теории. В настоящем пособии мы рассмотрим одно из простейших расцеплений первого порядка (т.е. расцеплений для трехчастичных функций Грина) – расцепление Тябликова [4], которое дает качественно верное поведение средней намагниченности во всем температурном интервале. Отметим, что более сложные и на первый взгляд более последовательные расцепления первого порядка (Кэллена, Дембинского и др. [8]) не дают никаких существенных преимуществ по сравнению с теорией Тябликова.

Расцепление Тябликова имеет вид

$$\langle\langle S_{f''}^z\,S_f^+|S_{f'}^-\rangle\rangle \;=\; \langle S_{f''}^z\rangle\langle\langle S_f^+|S_{f'}^-\rangle\rangle \qquad (f\neq f'') \tag{44}$$

Физический смысл расцепления (44) состоит в пренебрежении флуктуациями z-компоненты спина, что заведомо плохо в окрестности точки Кюри. Действительно, введем оператор флуктуации z-компоненты спина $\nu_f = S^z_f - \langle S^z_f \rangle$, обладающий очевидным свойством $\langle \nu_f \rangle = 0$. В приближении Тябликова, когда мы заменяем оператор S^z_f его средним значением $\langle S^z_f \rangle \equiv S\sigma$ (σ - относительная намагниченность на один узел), величина

$$\langle \nu^2_f \rangle_{appr} = \langle (S^z_f)^2 \rangle - \langle S^z_f \rangle^2 = 0.$$

Тогда как ее точное значение для $S = \frac{1}{2}$ имеет вид

$$\langle \nu^2_f \rangle = \frac{1}{4}(1 - \sigma^2).$$

Так что $\langle \nu^2_f \rangle_{appr} \to \langle \nu^2_f \rangle$ лишь при малых температурах $T \to 0, \sigma \to 1/2$. При высоких температурах и вблизи точки Кюри $\sigma \to 0$ и $\langle \nu^2_f \rangle \to 1/4$, и приближение (44) становится весьма грубым.

При использовании расцепления (44) уравнение (43) становится замкнутым относительно исходной функции Грина

$$(\omega - h)\, G_{ff'}(\omega) = 2\,\langle S^z_f \rangle\, \delta_{ff'} +$$
$$+ \langle S^z \rangle \sum_{f''} I(\vec{f} - \vec{f}'')\, \{G_{ff'}(\omega) - G_{f''f'}(\omega)\}\,, \tag{45}$$

где мы учли, что среднее значение спина в узле однородной решетки не зависит от номера узла: $\langle S^z_{f''} \rangle = \langle S^z \rangle = S\,\sigma$. Учитывая теперь, что функция Грина $G_{ff'}$ зависит лишь от расстояния между узлами в случае однородной решетки, представим ее в виде фурье-разложения по векторам обратного пространства (волновым векторам $\vec{q}$):

$$G_{ff'}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')}\, G_q(\omega). \tag{46}$$

Подставляя разложение (46) в уравнение (45) и учитывая представление символа Кронекера

$$\delta_{ff'} = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')},$$

получаем решение для коллективной функции Грина $G_q(\omega)$ в виде

$$G_q(\omega) = \frac{2\,\langle S^z \rangle}{\omega - h - E(q)}, \tag{47}$$

где энергия элементарных возбуждений в приближении Тябликова имеет вид

$$E(q) = \langle S^z \rangle \sum_{f''} I(\vec{f} - \vec{f}'')\,(1 - e^{-i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}'')}) =$$

$$= \frac{1}{2}\sigma\,\{J(0) - J(q)\} = \sigma\,E^0(q), \tag{48}$$

где введена фурье-компонента обменного взаимодействия:

$$J(q) = \sum_f e^{-i\vec{q}\vec{f}}$$

При вычислении средней относительной намагниченности при низких температурах нам потребуется знание поведения спектра (48) в длинноволновом приближении $q \to 0$. В этом случае можно провести разложение (48) по q

$$J(0) - J(q) \approx \sum_f I(f)\,\frac{1}{2}(\vec{q}\vec{f})^2 = \frac{1}{6}\,q^2 \sum_f I(f)\,f^2$$

и записать энергию возбуждений в виде

$$E(q \to 0) \approx \sigma\,D\,q^2,$$

где константа D определяется выражением

$$D = \frac{1}{12}\sum_f I(f)\,f^2$$

и зависит от типа решетки.

Выражение для коллективной функции Грина (47) позволяет определить корреляционную функцию спинов, для которой получаем

$$\langle S^-_{f'}\,S^+_f\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{1}{e^{\omega/\theta} - 1}\,[-2\,ImG_{ff'}(\omega + i\,\varepsilon)] =$$

$$= \frac{2\,\langle S^z\rangle}{N}\sum_q e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')}\,N_q, \tag{49}$$

где

$$N_q = \left[exp\left(\frac{h + E(q)}{\theta}\right) - 1\right]^{-1} -$$

среднее число возбуждений с энергией $h + E(q)$ при температуре $\theta = k\,T$.

Используя свойства квазиспиновых операторов, имеем

$$\langle S^z\rangle = \frac{1}{2} - \langle S^-_f\,S^+_f\rangle = \frac{1}{2} - 2\,\langle S^z\rangle\,P,$$

где, учитывая (49), введена функция температуры

$$P = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{e^{\frac{h+E(q)}{\theta}} - 1}. \tag{50}$$

Тогда для определения относительной намагниченности σ мы получаем уравнение

$$\sigma = 1 - 2\,P\,\sigma \tag{51}$$

или

$$\frac{1}{\sigma} = 1 + 2\,P = \frac{1}{N} \sum_q \coth \frac{h + E(q)}{2\,\theta}. \tag{52}$$

Это уравнение является самосогласованным, так как энергия возбуждения $E(q)$ сама зависит от намагниченности: $E(q) = \sigma\,E_0(q)$. Решение трансцендентного уравнения (51) может быть найдено только путем численного интегрирования. Однако в предельных случаях низких температур $T \ll T_C$, вблизи температуры Кюри $T_C - T \ll T_C, T < T_C$ и в парамагнитной области высоких температур $T > T_C$ решения уравнения (51) или (52) могут быть найдены в аналитическом виде.

1. Низкие температуры: $T \ll T_C, \sigma \to 1$.

В случае низких температур намагниченность близка к максимальной ($\sigma < 1, \sigma \simeq 1$), а число возбуждений N_q для каждого q мало: $P \ll 1$. В этом случае уравнение (51) может быть решено методом последовательных итераций:

$$\sigma^{(0)} = 1;$$

$$\sigma^{(1)} = 1 - 2\,P^{(0)}, \qquad P^{(0)} = \frac{1}{N} \sum_q N_q^{(0)}$$

Для определения величины $P^{(0)}$ перейдем в формуле (50) от суммы к интегралу по q и положим $E(q) \approx E_0(q)$:

$$P^{(0)} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}}{e^{\frac{h+E_0(q)}{\theta}} - 1} = \frac{v}{(2\,\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \int d\vec{q}\, e^{-n\,\frac{h+E_0(q)}{\theta}},$$

так что

$$P^{(0)}(\theta \to 0) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\,\frac{h}{\theta}} \frac{4\,\pi\,v}{(2\,\pi)^3} \int_0^{\infty} q^2\,dq\,e^{-n\frac{D}{\theta}\,q^2} =$$

$$= \left(\frac{\theta}{D}\right)^{3/2} \frac{v}{2\,\pi^2} \int_0^{\infty} x^2\,dx\,e^{-n\,x^2} = \left(\frac{\theta}{4\,\pi\,D}\right)^{3/2} v\,Z^{3/2}\left(\frac{h}{\theta}\right).$$

Здесь

$$Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{h^p} e^{-nx}, \qquad Z_p(0) = \zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p},$$

где $\zeta(p)$ – дзета-функция Римана.

Таким образом, в отсутствие внешнего магнитного поля ($h = 0$) температурная зависимость намагниченности имеет вид

$$\sigma(\theta) \approx 1 - 2\, v\, \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{\theta}{4\pi D}\right)^{3/2} = 1 - \gamma T^{3/2},$$

т.е. имеет место так называемый закон "3/2", впервые полученный Блохом.

2. Высокие температуры вблизи точки Кюри $T < T_C$.

Рассмотрим уравнение (52) в нулевом магнитном поле при высоких температурах

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{q}\, \coth \frac{\sigma E_0(q)}{2\theta} \tag{53}$$

В случае достаточно высоких температур, $\theta \gg \sigma E(q_{max})$ с помощью разложения

$$\coth x \approx \frac{1}{x} + \frac{1}{3} x + \dots, \qquad (x = \frac{\sigma E(q)}{2\theta} \ll 1)$$

уравнение (53) можно переписать в виде

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \left\{ \frac{2\theta}{\sigma E^0(q)} + \frac{1}{3} \frac{\sigma E^0(q)}{2\theta} + \dots \right\}. \tag{54}$$

Как видно из (54), при $\theta \to \infty$ это уравнение имеет лишь одно решение, $\sigma = 0$. При понижении температуры при $\theta = \theta_C$ возникает ненулевое решение $\sigma \ll 1$, которое можно определить методом последовательных итераций. Предварительно определим интегралы в правой части уравнения (54):

$$\frac{v}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} E^0(q) = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} \{J(0) - J(q)\} = \frac{1}{2} J(0),$$

так как

$$\sum_q J(q) = \sum_f I(f) \sum_q e^{-i\vec{q}\vec{f}} = 0, \qquad I(f = 0) = 0;$$

$$\frac{v}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{q}}{E^0(q)} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{2}{J(0)} \frac{1}{1 - J(0)/J(q)} = \frac{2}{J(0)} C,$$

где постоянная C определяется геометрией решетки и для всех кристаллов лежит в интервале $1 \le C \le 2$.

Подставляя найденные интегралы в (54), приходим к уравнению

$$\frac{1}{\sigma} = C\frac{\tau}{\sigma} + \frac{1}{3}\frac{\sigma}{\tau} + O(\sigma^2), \qquad \tau = \frac{4\,k\,T}{J(0)},$$

или

$$\sigma = \sqrt{3\,\tau\,(1 - C\,\tau)}.$$

При температуре $\tau_C = 1/C$ намагниченность обращается в нуль, а при $\tau \le \tau_C$ имеет вид

$$\sigma \approx \sqrt{3\,\tau_C\,(1 - \frac{T}{T_C})},$$

где температура Кюри определяется соотношением

$$k\,T_C = \theta_C = \frac{J(0)}{4}\,\tau_C = \frac{J(0)}{4\,C}.$$

Зависимость намагниченности во всей области температур $0 \le \theta \le \theta_C$ может быть получена численным интегрированием уравнения (52).

3. Парамагнитная область $T > T_C$.

В этом случае намагниченность отлична от нуля только во внешнем поле $H^z \neq 0, \sigma \sim h$. В случае температур $T \gg T_C$ первый член разложени в уравнении (53) имеет стандартный вид:

$$\frac{1}{\sigma} \approx \frac{1}{N}\sum_q \coth\frac{h}{2\,\theta}; \qquad \sigma \approx \tanh\frac{h}{2\,\theta}.$$

Таким образом, приближение Тябликова позволяет дать удовлетворительную интерполяционную формулу для намагниченности во всем интервале температур.

Задача 3. Вычислить время конверсии системы двухуровневых атомов, взаимодействующих с равновесным многомодовым квантовым электромагнитным полем [9].

Решение

Рассмотрим систему N двухуровневых атомов, взаимодействующих с равновесным многомодовым квантовым электромагнитным полем. Для простоты исследуем случай, когда размеры системы гораздо меньше длины волны излучения ("сосредоточенная" модель Дикке). Для описания такой системы мы можем использовать гамильтониан Дикке

$$H = H_A + H_F + H_{AF}, \tag{55}$$

где

$$H_A = \sum_f \hbar\Omega_0 R_f^z$$

– гамильтониан системы свободных двухуровневых атомов,

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

– гамильтониан свободного равновесного электромагнитного поля,

$$H_{AF} = \sum_f \sum_k \hbar\, g_k \left(R_f^+ a_k + a_k^+ R_f^- \right)$$

– гамильтониан взаимодействия между двухуровневыми атомами и квантовым полем. Здесь индекс f нумерует излучатели в образце, Ω_0 – частота перехода в двухуровневом атоме, R_f^z – оператор инверсии населенности в f-м излучателе, $R_f^\pm$ – операторы, описывающие переходы в f-м двухуровневом излучателе (аналогичные операторам $S_f^\pm$ в предыдущей задаче) и удовлетворяющие коммутационным соотношениям

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

$a_k^+(a_k)$ - оператор рождения (уничтожения) фотона с частотой ω_k, волновым вектором $\vec{k}$ и поляризацией $\vec{e}_\lambda$, g_k - константа диполь-фотонного взаимодействия

$$g_k = \sqrt{\frac{2\,\pi\,\rho\,\hbar}{N\,\omega_k}}\,\Omega_0\,\langle +|\vec{d}\,\vec{e}_\lambda|-\rangle,$$

где $\vec{d}$ - оператор дипольного перехода в двухуровневом атоме, $|\pm\rangle$ - волновые функции возбужденного и девозбужденного состояний в двухуровневом атоме, ρ - плотность числа излучателей в системе.

Для вычисления среднего числа заполнения $\langle n_f\rangle = \langle R_f^+ R_f^-\rangle$ для возбужденного состояния $|+\rangle_f$ двухуровневого атома f введем запаздывающую антикоммутаторную двухвременную функцию Грина (как и прежде будем считать $\hbar \equiv 1$)

$$G(t-t') = \langle\langle R_f^-(t); R_f^+(t')\rangle\rangle^r = -i\,\theta(t-t')\,\langle [R_f^-(t), R_f^+(t)]_\eta\rangle, \qquad (56)$$

где $\eta = -1$. Усреднение в (56) производится по равновесному каноническому ансамблю Гиббса

$$\rho = Q^{-1}\, e^{-H/\theta}.$$

Уравнение движения для функции Грина (56) имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}G(t-t') = \delta(t-t')\,\langle [R_f^-, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle + \Omega_0\, G(t-t') - $$
$$-2\sum_k g_k\,\langle\langle a_k(t)\,R_f^z(t); R_f^+(t')\rangle\rangle, \tag{57}$$

где $\langle [R_f^-, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle = 1$.

Введем обозначение для антикоммутаторной запаздывающей функции Грина более высокого порядка в правой части (57)

$$G_k(t-t') = \langle\langle a_k(t)\,R_f^z(t); R_f^+(t')\rangle\rangle$$

и составим для нее уравнение движения

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}G_k(t-t') = \delta(t-t')\,\langle [a_k\,R_f^z, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle + \omega_k\, G_k(t-t') - $$
$$-\frac{1}{2}\,g_k\, G(t-t') + \sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a_{k'}(t)\,a_k(t)\,R_f^+(t); R_f^+(t')\rangle\rangle -$$
$$-\sum_{k'} g_{k'}\,\langle\langle a_{k'}^+(t)\,a_k(t)\,R_f^-(t); R_f^+(t')\rangle\rangle +$$
$$+\sum_{f'(f\neq f')} g_k\,\langle\langle R_f^z(t)\,R_{f'}^-(t); R_f^+(t')\rangle\rangle. \tag{58}$$

Заметим, что среднее $\langle [a_k\,R_f^z, R_f^+]_{\eta=-1}\rangle$ в правой части (58) равно нулю.

В изучаемой системе могут быть реализованы два физически различных состояния. Если плотность излучателей в системе мала, то двухуровневые атомы излучают независимо. В этом случае последним слагаемым в уравнении (57), которое описывает взаимодействие между излучателями через общее поле излучения, можно пренебречь. Однако возможна и другая ситуация, когда взаимодействие между атомами через общее поле излучения велико. В этом случае система находится в коллективном состоянии, когда вероятности излучения атомами фотонов значительно возрастают. Такое состояние можно назвать "равновесным" сверхизлучением. Динамическая теория сверхизлучения для модели Дикке рассмотрена в задаче 3 раздела 6. В рассматриваемой задаче мы ограничимся рассмотрением спонтанного излучения независимых атомов. Перейдем в уравнениях (57) и (58) к фурье-образам

$$\omega\, G(\omega) = 1 + \Omega_0\, G(\omega) - 2\sum_k g_k\, G_k(\omega), \tag{59}$$

$$\omega\, G_k(\omega) = \omega_k\, G_k(\omega) - \frac{1}{2}\, g_k\, G(\omega) +$$
$$+ \sum_{k'} g_{k'}\, \langle\langle a_{k'}\, a_k\, R_f^+ | R_f^+ \rangle\rangle_\omega - \sum_{k'} g_{k'}\, \langle\langle a_{k'}^+\, a_k\, R_f^- | R_f^+ \rangle\rangle_\omega.$$

Используя очевидные расцепления для функций Грина

$$\langle\langle a_{k'}^+\, a_k\, R_f^- | R_f^+ \rangle\rangle_\omega \approx \langle a_{k'}^+\, a_k \rangle \langle\langle R_f^- | R_f^+ \rangle\rangle_\omega = \nu_k\, \langle\langle R_f^- | R_f^+ \rangle\rangle_\omega\, \delta_{k\,k'},$$
$$\langle\langle a_{k'}\, a_k\, R_f^+ | R_f^+ \rangle\rangle_\omega \approx \langle a_{k'}\, a_k \rangle \langle\langle R_f^+ | R_f^+ \rangle\rangle_\omega = 0,$$

где $\nu_k = \langle a_k^+\, a_k \rangle$ - среднее число фотонов в состоянии k, уравнение для $G_k(\omega)$ запишем в виде

$$(\omega - \omega_k)\, G_k(\omega) = -\frac{1}{2}\, (1 + 2\,\nu_k)\, g_k\, G(\omega). \tag{60}$$

Решая уравнения (59) и (60) совместно, получаем для фурье-образа исходной функции Грина $G(\omega)$ выражение

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \Omega_0 - M(\omega)},$$

где массовый оператор

$$M(\omega) = \sum_k g_k^2\, \frac{1 + 2\,\nu_k}{\omega - \omega_k}.$$

Введем стандартным образом действительную и мнимую части массового оператора

$$M(\omega \pm i\,\varepsilon) = \Delta(\omega) \mp i\,\Gamma(\omega),$$

где

$$\Gamma(\omega) = \pi \sum_k g_k^2\, (1 + 2\,\nu_k)\, \delta(\omega - \omega_k).$$

Считая затухание малым, мы можем вычислить вероятности испускания и поглощения фотона излучателем. В частности, для вакуумного состояния электромагнитного поля ($T = 0$) мы можем вычислить вероятность спонтанного излучения по формуле

$$\gamma = 2\,\Gamma(\Omega_0) = 2\,\pi \sum_k g_k^2\, (1 + 2\,\nu_k)\, \delta(\omega - \Omega_0) \quad (\nu_k = 0). \tag{61}$$

Переходя в (61) известным образом (см., например, [10]) от суммирования к интегрированию по k, получаем для вероятности спонтанного излучения одиночного атома стандартное выражение

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{\hbar\, c^3}{4\, d^3\, \Omega_0^3}$$

(с учетом $\hbar$), где d – модуль вектора дипольного момента двухуровневого атома.

Задача 4. Исследовать равновесные свойства сверхпроводника на основе модели Бардина, Купера и Шриффера (БКШ) [4].

Решение

Взаимодействие электронов в металле может быть описано с помощью эффективного гамильтониана

$$H = \sum_p \varepsilon_p \, a_p^+ \, a_p \, + \, \frac{1}{2} \sum_{p_1 \, p_2 \, p_1' \, p_2'} V(p_1, p_2) \, a_{p_1}^+ \, a_{p_1'}^+ \, a_{p_2'} \, a_{p_2}. \tag{62}$$

где $\varepsilon_p = \left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right)$ – кинетическая энергия электронов, отсчитанная от энергии Ферми $\mu = p_F^2/2m$, $\quad p = (\vec{p}, \sigma)$ ($\vec{p}$ – импульс электрона, σ – спиновое число); $V(p_1, p_2)$ – матричный элемент эффективного электрон-электронного взаимодействия, учитывающий как экранированное кулоновское отталкивание электронов, так и косвенное взаимодействие электронов, обусловленное поляризацией решетки (которое носит динамический характер и при определенной энергии рассеяния приводит к притяжению электронов). Притяжен электронов может преобладать в некоторой области фазового пространства $|\varepsilon_{p_1} - \varepsilon_{p_2}| < \bar{\omega}$, где $\bar{\omega}$ – характерная энергия фононов, порядка дебаевской частоты. Эффект динамического притяжения электронов в ионной решетке является решающим в объяснении сверхпроводимости металлов. Наиболее эффективно притяжение проявляется для электронов с противоположными импульсами и спинами, то есть при $\vec{p}_1{}' = -\vec{p}_1$, $\vec{p}_2{}' = -\vec{p}_2$, $\sigma' = -\sigma$. Поэтому для описания явления сверхпроводимости достаточно сохранить в гамильтониане (62) только эти члены и записать его в виде

$$H = \sum_p \varepsilon_p \, a_p^+ \, a_p \, + \, \frac{1}{2} \sum_{p p'} V(p, p') \, a_p^+ \, a_{-p}^+ \, a_{-p'} \, a_{p'}, \tag{63}$$

где матричный элемент эффективного электрон-электронного взаимодействия $V(p, p')$ может быть представлен в виде

$$V(p, p') = \frac{1}{2}\{J(\vec{p}, \vec{p}\,') \, \delta_{\sigma, \sigma'} - J(\vec{p}, -\vec{p}\,') \, \delta_{-\sigma, \sigma'}\},$$

и значение его, усредненное по углам рассеяния, отлично от нуля лишь в узкой области энергий вблизи поверхности Ферми:

$$I(\varepsilon_p, \varepsilon_{p'}| = \frac{V}{4\pi} \int d\Omega_{p'} \, J(\vec{p}, \vec{p}\,') = \begin{cases} -g & |\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}| < \bar{\omega} \\ \ \ 0 & |\varepsilon_p - \varepsilon_{p'}| > \bar{\omega} \end{cases} , \tag{64}$$

где g – константа притяжения, V – нормировочный объем.

Модельный гамильтониан (63), называемый обычно гамильтонианом БКШ, описывает эффективное притяжение между электронами в узком энергетическом слое $\bar{\omega}$ вблизи поверхности Ферми. Хотя само по себе взаимодействие может быть достаточно слабым, оно приводит к неустойчивости основного состояния невзаимодействующих электронов – заполненной сферы Ферми и переходу системы электронов в новое основное состояние, содержащее связанные состояния пар электронов (куперовские пары). При этом "аномальные" средние с гамильтонианом БКШ

$$\langle a_{-p}\, a_p \rangle,\ \langle a_p^+\, a_{-p}^+ \rangle, \tag{65}$$

определяющие среднее число пар, должны быть отличны от нуля. Это возможно, если мы будем понимать все средние в смысле квазисредних Боголюбова.

Для определения спектра одночастичных возбуждений в системе, описываемой гамильтонианом БКШ, введем одноэлектронную антикоммутаторную функцию Грина

$$G_p(t-t') = \langle\langle a_p(t); a_p^+(t') \rangle\rangle.$$

Запишем для нее уравнение движения

$$i\frac{\partial}{\partial t} G_p(t-t') = \delta(t-t')\langle [a_p, a_p^+]_{\eta=-1} \rangle +$$

$$+\varepsilon_p\, G_p(t-t') + \sum_{p'} V(p,p')\, \langle\langle a_{-p}^+(t)\, a_{-p'}(t)\, a_{p'}(t); a_p^+(t') \rangle\rangle.$$

Переходя к фурье-образам, уравнение движения перепишем в виде

$$(\omega - \varepsilon_p)\, G_p(\omega) = 1 + \sum_{p'} V(p,p')\, \langle\langle a_{-p}^+\, a_{-p'} a_{p'} | a_p^+ \rangle\rangle_\omega. \tag{66}$$

Учтем, что средние (65) отличны от нуля, и поэтому функцию Грина в правой части (66) удобно записать в виде

$$\langle\langle a_{-p}^+\, a_{-p'} a_{p'} | a_p^+ \rangle\rangle = \langle a_{-p'} a_{p'} \rangle \langle\langle a_{-p}^+ | a_p^+ \rangle\rangle +$$

$$+ \langle\langle a_{-p}^+\, (a_{-p'} a_{p'} - \langle a_{-p'}\, a_{p'} \rangle) | a_p^+ \rangle\rangle. \tag{67}$$

Первый член в (67) учитывает вклад среднего поля, обусловленного наличием куперовских пар, второй член имеет вид поправки к приближению среднего поля. Как показывает строгий анализ, второй член имеет асимптотическую малость $\sim \frac{1}{V}$ и в термодинамическом пределе может быть опущен.

Определяя новую функцию

$$\Delta_p = \sum_p V(p,p')\, \langle a_{-p'}\, a_{p'} \rangle, \tag{68}$$

запишем уравнение для функции Грина в приближении среднего поля в виде

$$(\omega - \varepsilon_p)\, G_p(\omega) = 1 + \Delta_p\, \Gamma_p(\omega),$$

где введена "аномальная" функция Грина

$$\Gamma_p(t-t') = \langle\langle a_p^+(t)\, a_p^+(t') \rangle\rangle.$$

Уравнение для фурье-образа этой функции Грина в приближении среднего поля имеет вид

$$(\omega + \varepsilon_p)\, \Gamma_p(\omega) = \sum_p V(p,p')\, \langle\langle a_{p'}^+\, a_{-p'}^+\, a_p | a_p^+ \rangle\rangle_\omega \approx \Delta_p^+\, G_p(\omega).$$

Решая совместно полученную систему уравнений, находим:

$$G_p(\omega) = \frac{\omega + \varepsilon_p}{\omega^2 - E_p^2}, \qquad \Gamma_p(\omega) = \frac{\Delta_p^+}{\omega^2 - E_p^2},$$

где спектр элементарных возбуждений E_p имеет вид

$$E-p = (\varepsilon_p^2 + |\Delta_p|^2)^{1/2}. \tag{69}$$

Чтобы определить функцию Δ_p, имеющую смысл щели в спектре элементарных возбуждений E_p, воспользуемся спектральной теоремой и определим корреляционную функцию

$$\langle a_p^+\, a_{-p}^+ \rangle = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{e^{\frac{\omega}{\theta}} + 1}\, \left[-2\, Im\, \Gamma_p(\omega)\right] = -\frac{\Delta_p^+}{2\, E_p}\, \tanh \frac{E_p}{2\,\theta}. \tag{70}$$

Подставляя теперь (70) в (68), получаем интегральное уравнение для щели в спектре элементарных возбуждений:

$$\Delta_p = -\sum_{\vec{p}'\,\sigma'} V(p,p')\, \frac{\Delta_{p'}}{2\, (\varepsilon_{p'}^2 + |\Delta_{p'}|^2)^{1/2}}\, \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + |\Delta_{p'}|^2}}{2\,\theta}. \qquad (71),$$

переходя от суммы по $\vec{p}'$ к интегралу и выполняя интегрирование по углам $d\Omega_{p'}$, согласно (64) получаем уравнение для $\Delta_{\vec{p}\sigma} = \Delta_{\varepsilon\sigma}$ в виде

$$\Delta_\varepsilon = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \, I(\varepsilon, \varepsilon') \, N_{\varepsilon'} \frac{\Delta_{\varepsilon'}}{\sqrt{(\varepsilon_{p'}^2 + |\Delta_{p'}|^2)}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon'^2 + |\Delta_{\varepsilon'}|^2}}{2\,\theta}. \tag{72}$$

где $N_{\varepsilon'}$ – плотность электронных состояний при энергии ε'. Отметим, что уравнение (71) имеет тривиальное решение $\Delta_\varepsilon \equiv 0$, но может иметь и ненулевое решение: $\Delta_\varepsilon = const = \Delta$ при $\varepsilon \approx \bar{\omega}, \varepsilon < \bar{\omega}$.

Рассмотрим это решение при нулевой температуре $\theta = 0$, когда

$$\tanh \frac{E_{p'}}{2\,\theta} = 1$$

для энергии ε на поверхности Ферми, т.е. при $\varepsilon = 0$. Учитывая (64), получим

$$\Delta_0 = g \, N_F \int_0^{\bar{\omega}} d\varepsilon' \frac{\Delta_0}{\sqrt{\varepsilon'^2 + |\Delta_0|^2}},$$

где плотность электронных состояний $N_{\varepsilon'}$ мы положили равной плотности на поверхности Ферми N_F, поскольку интервал интегрирования $\bar{\omega} \ll \mu_F$. Выполняя интегрирование, и полагая Δ_0 действительной величиной, получим

$$\frac{1}{\rho} = \ln \frac{\bar{\omega} + \sqrt{\bar{\omega}^2 + \Delta_0^2}}{\Delta_0}; \qquad \Delta_0 \approx 2\,\bar{\omega}\, e^{-1/\rho}, \tag{73}$$

где $\rho = N_F\, g$. Для обычных сверхпроводников $0,2 < \rho < 0,5$. Следовательно величина энергетической щели $\Delta_0 \sim 10^{-2}\,\bar{\omega}$ и обычно составляет несколько Кельвин.

Температурная зависимость щели определяется уравнением (72), которое можно записать в виде

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\bar{\omega}} d\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta(T)^2}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta(T)^2}}{2\,k\,T}. \tag{74}$$

С ростом T величина $\Delta(T) \to 0$ и при $T = T_C$ обращается в нуль. Критическая температура T_C определяется из уравнения (74) при $\Delta = 0$ и с учетом (73) имеет вид

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\bar{\omega}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh \frac{\varepsilon}{2\,k\,T}; \qquad k\,T_C = \frac{1}{1,76}\,\Delta_0.$$

Вблизи T_C разложение по $(1-\frac{T}{T_C}) \ll 1$ в уравнении (74) дает следующую зависимость:

$$\Delta(T) = 3,2\,k\,T_C\sqrt{1-\frac{T}{T_C}}.$$

Полученные в приближении БКШ соотношения универсальны для всех сверхпроводников и определяются константой взаимодействия $\rho = gN_F$ и шириной области притяжения электронов $2\bar{\omega}$.

2.2. Задачи для самостоятельной работы

1. Записать спектральные представления для двухвременных корреляционных функций и функций Грина при $T=0$.

2. Получить для фурье-образов запаздывающей двухвременной функции Грина правила сумм:

$$\int\limits_{\infty}^{\infty} \langle\langle A|B\rangle\rangle^r_\omega d\omega = -\imath\pi\langle[A,B]_\eta\rangle,$$

$$\int\limits_{\infty}^{\infty} \{\omega\langle\langle A|B\rangle\rangle^r_\omega - \langle[A,B]_\eta\}d\omega = \pi\langle[\dot{A},B]_\eta\rangle,$$

где $\langle[A,B]_\eta$ – коммутатор или антикоммутатор в зависимости от выбора знака η:

$$\langle[A,B]_\eta = AB - \eta BA, \quad \eta = \pm 1.$$

3. Доказать соотношение симметрии для фурье-образов запаздывающей (*retarded*) и опережающей функции Грина (*advanced*):

$$\langle\langle A|B\rangle\rangle^r_\omega = \eta\langle\langle B|A\rangle\rangle^a_{-\omega}.$$

4. Доказать, что коммутаторные функции Грина из эрмитовых операторов вещественны:

$$\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^* = \langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle.$$

5. Вывести уравнение движения для запаздывающей двухвременной температурной функции Грина

$$\imath\,\frac{\partial\langle\langle A(t);B(t')\rangle\rangle^r}{\partial t} = \delta(t-t')\langle[A,B]_\eta\rangle + \langle\langle[A(t),H];B(t')]\rangle\rangle^r$$

6. Используя результаты задачи 2, вычислить для ферромагнетика Гейзенберга внутреннюю энергию и теплоемкость.

7. Найти двухвременные корреляционные функции и функции Грина, а также равновесные средние чисел заполнения для идеальных ферми- и бозе-газов, выбирая в определении двухвременной температурной запаздывающей функции Грина параметр $\eta = 1$ для ферми-частиц и $\eta = -1$ для бозе-частиц. Сравнить полученные результаты с результатами задачи 1 в разделе 2.1.

8. Используя метод функций Грина, исследовать равновесные свойства системы N неподвижных двухуровневых атомов. Использовать при решении задачи квазиспиновое представление для гамильтониана модели:

$$H = \hbar\Omega_0 \sum_{f=1}^{N} R_f^z,$$

где Ω_0 – частота резонасного перехода в двухуровневом атоме.

9*. Решить предыдущую задачу, принимая во внимание прямое диполь-дипольное взаимодействие атомов, которое может быть описано гамильтонианом

$$-J \sum_{f,f'} R_f^+ R_{f'}^-,$$

где J – параметр, описывающий интенсивность диполь-дипольного взаимодействия [10].

10*. Исследовать равновесные свойства ферромагнетика Гейзенберга, используя вместо расцепления Тябликова (44) расцепления [6]:

а) Хартри-Фока

$$\langle\langle S_f^+ S_f^- S_{f'}^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega = \langle S_f^+ S_f^- \rangle \langle\langle S_{f'}^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega + \langle S_f^+ S_{f'}^- \rangle \langle\langle S_f^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega$$

б) Кэллена

$$\langle\langle S_f^+ S_f^- S_{f'}^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega = \langle S_f^+ S_f^- \rangle \langle\langle S_{f'}^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega + 2\langle S_f^z \rangle \langle S_f^+ S_{f'}^- \rangle \langle\langle S_f^- | S_g^+ \rangle\rangle_\omega.$$

11*. Используя метод функций Грина, найти спектр элементарных возбуждений сегнетоэлектрика типа KDP [11]. Гамильтониан такого сегнетоэлектрика (наиболее типичными представителями данного класса сегнетоэлектриков являются кристаллы KH_2PO_4 и KD_2PO_4) в квазиспиновом виде можно представить как [13]:

$$H = -\hbar\Omega \sum_f S_f^x - \frac{1}{2} \sum_{ff'} J_{ff'} S_f^z S_{f'}^z,$$

где Ω – параметр туннелирования протонов в двухминимумной потенциальной яме, $J_{ff'}$ – константа прямого диполь-дипольного взаимодействия протонов. Воспользоваться при решении расцеплениями Тябликова и Хартри-Фока. Показать, что в приближении Тябликова в спектре элементарных возбуждений сегнетоэлектрика типа KDP отсутствует мягкая мода.

12.* Используя решение задачи 4 и каноническое преобразование Боголюбова

$$a_p = u_p A_p + v_p A^+_{-p},$$

$$a^+_p = u_p A^+_p + v_p A_{-p},$$

$$u_p^2 + v_p^2 = 1, \quad \varepsilon_p u_p v_p + \frac{\Delta_p}{2}(u_p^2 - v_p^2) = 0,$$

$$u_p^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\varepsilon_p}{E_p}\right), \quad v_p^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_p}{E_p}\right), \quad u_p v_p = -\frac{\Delta_p}{E_p},$$

привести гамильтониан БКШ к диагональному виду [4,5]:

$$H + \sum_p E_p \alpha_p^+ \alpha_p + \sum_p \left\{ \varepsilon_p v_p^2 - \frac{\Delta_p^2}{E_p} \right\},$$

где

$$E_p = \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta_p^2}, \quad \Delta_p = \sum_{p'} V(p,p') U_{p'} v_{p'} (1 - 2\nu_{p'}) =$$

$$= \sum_{k'} V(p,p') \frac{\Delta_{p'}}{2E_{p'}} th \frac{E_p{}'}{2kT},$$

где $\nu_p = \langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle$, $p \equiv (\vec{p}, \sigma)$, σ – спиновой индекс электрона. Показать, что выражение для энергетической щели Δ_p в рассматриваемом подходе совпадает с выражением (71) в задаче 4.

13.* Вычислить дифференциальное сечение упругого и неупругого рассеяния нейтронов на кристалле. Использовать в качестве потенциала взаимодействия нейтрона с ядром псевдопотенциал Ферми

$$V(\vec{r} - \vec{R}_i) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} a_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i),$$

где a_i – длина рассеяния атома, находящегося в узле $\vec{R}_i$ и m_n – масса нейтрона [4].

14.* Используя формулы, полученные в предыдущей задаче, вычислить фактор Дебая-Валлера

$$e^{-W_l(k)} = e^{-(1/2)\langle(\vec{k}\vec{u}_l)^2\rangle}$$

в кубическом кристалле в предельных случаях высоких и низких температур для дебаевской модели кристалла [4]. Здесь $\vec{u}_l$ – смещение атома из положения равновесия в узле решетки $\vec{l}$, $\vec{k}$ – волновой вектор.

15.* Найти среднюю населенность атомных уровней и среднее число фотонов в модах для равновесной сосредоточенной модели Дикке. Исследовать возможность фазового перехода в сверхизлучательное состояние [12].

3. Теория линейной реакции Кубо на внешние механические возмущения

Основная литература

1. Тябликов, С.В. Методы квантовой теории магнетизма / С.В. Тябликов. – М.: Наука, 1975. – 546 с.

2. Квасников, И.А. Термодинамика и статистическая физика. Квантовая статистика / И.А. Квасников. – М. : URSS, 2005. – 349 с.

Дополнительная литература

3. Зубарев, Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика / Д.Н. Зубарев. – М.: Наука, 1971. – 415 с.

4. Плакида, Н.М. Некоторые вопросы квантовой теории твердого тела (Метод двухвременных функций Грина) / Н.М. Плакида. – Дубна: Изд-во ОИЯИ, 1985. – 154 с.

5. Задачи по термодинамике и статистической физике / под. ред. П.Ландсберга. – М.: Мир, 1974. – 640 с.

3.1. Задачи с решениями

Задача 1. Вывести формулу Кубо, описывающую линейную реакцию неравновесной системы на малое механическое возмущение.

Решение

Рассмотрим реакцию квантовомеханической системы с гамильтонианом H, не зависящим от времени, на включение внешнего механического возмущения H_t^1. В статистической физике необратимых процессов механическими возмущениями называются возмущения, которые можно полностью описать добавлением к гамильтониану соответствующей энергии взаимодействия системы с полем. Возмущения, которые не допускают такого представления, называются термическими. В последнем случае причиной возникновения неравновесного состояния могут быть совершаемая над системой работа через изменение ее объема или взаимодействие с другими телами, обладающими другой температурой или химическим потенциалом. В этих случаях изменение внешних параметров влияет на матрицу плотности не прямым, а косвенным образом; оно создает статистически неравновесное состояние, которое затем стремится к равновесному, если нет препятствующих этому воздействий. Если же возмущение вызвано внешними полями, оно непосредственно влияет на матрицу плотности системы, с чем и связана относительная простота описания механических возмущений. Будем считать, что возмущение включается адиабатически при $t = -\infty$. Для описания адиабатического включения взаимодействия воспользуемся следующим приемом. Добавим в спектральное разложение оператора возмущения множитель $e^{\varepsilon t}$, где ε – малое положительное число. Понятно, что при $\varepsilon \to 0$ указанный множитель обращается в нуль для $t = -\infty$. Далее мы должны провести вычисления макроскопических параметров и уже в конечных формулах перейти к пределу $\varepsilon \to 0$. Таким образом, для адиабатически включаемого взаимодействия мы имеем

$$H_t^1 = \frac{e^{\varepsilon t}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} H_\omega^1 \quad (\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0). \tag{75}$$

Вычислим среднее значение некоторой динамической переменной $\mathcal{O}$ при действии возмущения (75). По определению среднего

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle = Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\}, \tag{76}$$

где статистический оператор $\rho(t)$ удовлетворяет квантовому уравнению Лиувилля

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H + H_t^1, \rho(t)] \tag{77}$$

и начальному условию

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T, V)e^{-H/kT}, \tag{78}$$

которое означает, что при $t = -\infty$ система находилась в состоянии статистического равновесия и описывалась каноническим ансамблем Гиббса (везде в дальнейшем будем полагать для упрощения записей $\hbar \equiv 1$). Для начального условия можно применить также и большой канонический ансамбль Гиббса

$$\rho(t)|_{t=-\infty} = \rho_0 = Q^{-1}(T, V, N) e^{-(H-\mu N)}/kT.$$

Считая возмущение H_t^1 малым, решение уравнения (77) будем искать в виде

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_t^1 \tag{79}$$

с начальным условием

$$\rho_t^1|_{t=-\infty} = 0.$$

Подставляя представление (79) в уравнение Лиувилля (77), получим

$$i\frac{\partial}{\partial t}(\rho_0 + \rho_t^1) = [H, \rho_0] + [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{80}$$

Учитывая, что невозмущенный гамильтониан H коммутирует с равновесным статистическим оператором ρ_0 и равновесный статистический оператор ρ_0 не зависит от времени, мы можем переписать уравнение (80) в виде

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0] + [H_t^1, \rho_t^1]. \tag{81}$$

Ограничим себя исследованием линейной реакции системы на малые механические возмущения. Тогда мы можем пренебречь последним слагаемым в уравнении (81), имеющим второй порядок малости по возмущению. В результате получаем:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 = [H, \rho_t^1] + [H_t^1, \rho_0]. \tag{82}$$

Для того чтобы избавиться от первого слагаемого в правой части уравнения (82), перейдем к представлению взаимодействия для ρ_t^1:

$$\rho_t^1(t) = e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt} \tag{83}$$

Умножая (83) на мнимую единицу и дифференцируя по времени, имеем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = -He^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt} + He^{iHt} i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1 e^{-iHt} + e^{iHt}\rho_t^1 e^{-iHt}H,$$

или

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [\rho_t^1(t), H] + He^{iHt}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1\right)e^{-iHt}. \tag{84}$$

Подставляя во второе слагаемое в правой части (84) выражение (82) и взаимно уничтожая члены $[H, \rho_t^1(t)]$ и $[\rho_t^1(t), H]$, получаем

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_t^1(t) = [H_t^1(t), \rho_0], \tag{85}$$

где $H_t^1(t) = e^{iHt}H_t^1e^{-iHt}$– оператор возмущения в представлении взаимодействия. При выводе (85) мы учли также коммутативность невозмущенного гамильтониана H и начального равновесного статистического оператора ρ_0.

С учетом начального условия $\rho_t^1(t)|_{t\to-\infty} = 0$ решение уравнения (85) имеет вид

$$\rho_t^1(t) = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[H_{t'}^1(t'), \rho_0]. \tag{86}$$

Умножая правую и левую части уравнения (86) слева на e^{-iHt}, а справа на e^{iHt}, получаем решение для статистического оператора ρ_t^1

$$\rho_t^1 = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}. \tag{87}$$

Тогда среднее значение динамической переменной $\mathcal{O}$ можно записать в виде

$$\begin{aligned}\langle\mathcal{O}(t)\rangle &= Sp\{\mathcal{O}\rho(t)\} = \\ &= Sp\{\mathcal{O}\rho_0\} + Sp\{\mathcal{O}\rho_t^1\} = \\ &= \langle\mathcal{O}\rangle - i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'Sp\{e^{-iHt}[H_{t'}^1(t'), \rho_0]e^{iHt}\mathcal{O}\},\end{aligned} \tag{88}$$

где $\langle\mathcal{O}\rangle$ – равновесное среднее для динамической переменной $\mathcal{O}$. Проводя циклическую перестановку операторов под знаком шпура, мы можем переписать формулу (88) в следующем виде:

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = -i\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\langle[\mathcal{O}(t), H_{t'}^1(t')]\rangle, \tag{89}$$

где $\langle\ldots\rangle = Sp\{\ldots\rho_0\}$ означает усреднение по равновесному статистическому оператору.

Формулу (89) можно сделать более симметричной, если использовать под знаком интеграла тета-функцию Хевисайда:

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = -i\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt'\Theta(t-t')\langle[\mathcal{O}(t), H_{t'}^1(t')]\rangle.$$

Наконец, вводя запаздывающую двухвременную температурную функцию Грина:

$$\langle\langle A(t); B(t')\rangle\rangle^r = -i\Theta(t-t')\langle[A(t); B(t')]\rangle, \tag{90}$$

для приращения среднего значения динамической переменной $\mathcal{O}$ получаем так называемую формулу Кубо

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' \langle\langle \mathcal{O}(t), H^1_{t'}(t') \rangle\rangle^r \tag{91}$$

Физический смысл запаздывающих двухвременных функций Грина состоит в том, что они описывают реакцию системы на мгновенное δ-образное возмущение вида

$$H^1_t = B\delta(t - t'),$$

где B – не зависящий от времени оператор. Для такого возмущения приращение среднего любой динамической величины определяется непосредственно запаздывающей функцией Грина

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \langle\langle \mathcal{O}(t), B(t') \rangle\rangle^r.$$

(отсюда и название для величин (90) по аналогии с теорией дифференциальных уравнений, где функции Грина являются решениями уравнений с δ-образными неоднородностями). Связь между приращением средних для динамических переменных и запаздывающей функцией Грина становится особенно простой при переходе к фурье-образам соответствующих величин.

Введем фурье-разложение запаздывающей функции Грина:

$$\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE(t-t')} \langle\langle A|B \rangle\rangle^r_E. \tag{92}$$

Подставляя разложение (92) в формулу Кубо (91), получаем

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dE dt' \langle\langle \mathcal{O}|H^1_{t'} \rangle\rangle^r_E e^{-iE(t-t')}.$$

В правой части последнего выражения воспользуемся также фурье-разложением для оператора возмущения вида (75). Тогда

$$\langle \mathcal{O}(t) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega dE dt' e^{\varepsilon t'} \langle\langle \mathcal{O}|H^1_{\omega} \rangle\rangle^r_E e^{-iE(t-t')} e^{-i\omega t'}. \tag{93}$$

Используя интегральное представление для δ-функции

$$\delta(\omega - E) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i(\omega - E)t'},$$

формулу (93) можно записать в виде

$$\langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \langle\langle\mathcal{O}|H^1_\omega\rangle\rangle^r_{E=\omega+i\varepsilon} e^{-i\omega t}.$$

Тогда фурье-компонента приращения среднего значения динамической переменной будет непосредственно связана с фурье-компонентой запаздывающей функции Грина

$$\langle\Delta\mathcal{O}\rangle = \langle\mathcal{O}(t)\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle = \langle\langle\mathcal{O}|H^1_\omega\rangle\rangle^r_{\omega+i\varepsilon}. \tag{94}$$

Часто внешнее поле (75) можно представить в виде

$$H^1_t = -\sum_i B_j A_j(t),$$

где B_j – операторная часть внешнего поля, а $A_j(t)$ – зависящая от времени амплитуда внешнего поля. В этом случае формулу (94) можно записать в виде

$$\langle\Delta\mathcal{O}_i(\omega)\rangle = \chi_{ij}(\omega)A_j(\omega), \tag{95}$$

где $\chi_{ij}(\omega) = -\langle\langle\mathcal{O}_i|B_j\rangle\rangle^r_\omega$ – комплексная обобщенная восприимчивость системы. Например, если внешнее возмущение представляет собой электрическое поле, то

$$H^1_t = -\sum_\alpha P_\alpha E_\alpha(t).$$

Здесь P_α – проекция α оператора дипольного момента системы. Тогда средний ток представляем как

$$\langle j_\alpha(\omega)\rangle = \sigma_{\alpha\beta}(\omega)E_\beta(\omega),$$

где

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\langle\langle j_\alpha|P_\beta\rangle\rangle_\omega$$

– тензор электропроводности системы.

Задача 2. Используя формулу Кубо (91), описать явление ферромагнитного резонанса [1].

Решение

Если на спиновую систему наложить постоянное магнитное поле $\vec{\mathcal{H}}$ и перпендикулярно к нему переменное радиочастотное поле $\vec{h}(t)$, то при частоте переменного поля, близкой к частоте свободной прецессии спинов вокруг направления вектора $\vec{\mathcal{H}}$, резко возрастает передача энергии от поля $h(t)$ к спиновой системе. Рассмотрим это явление на основе развитой ранее теории.

Пусть спиновая система состоит из N одинаковых спинов $1/2$, помещенных в узлах решетки f. Для того чтобы не учитывать энергию размагничивания, будем считать образец неограниченным. Постоянное подмагничивающее поле будем считать направленным по оси z. В этом случае гамильтониан спиновой системы H можно взять в виде (43) без учета взаимодействия между спинами.

Ограничимся рассмотрением случая, когда длина волны радиочастотного поля много больше размеров образца, и поле можно считать однородным. Кроме того, положим, что радиочастотное поле $\vec{h}$ перпендикулярно подмагничивающему полю и лежит, следовательно, в плоскости (x, y). Тогда оператор взаимодействия спиновой системы с переменным полем запишется в виде

$$H_t^1 = -\mu \sum_{\omega} e^{-i\omega t} \vec{h}_\omega \vec{S}, \tag{96}$$

где $\vec{S} = \sum_f \vec{S}_f$ – полный спин системы, μ – магнитный момент спина.

Считая возмущение малым, мы можем согласно формуле (95) представить приращение фурье-образа среднего значения вектора намагниченности при адиабатном включении взаимодействия

$$\langle \Delta M^\alpha(\omega) \rangle = \mu \Delta \langle S^\alpha(\omega) \rangle = \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta,$$

где магнитная восприимчивость

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = -2\pi\mu^2 \langle\langle S^\alpha | S^\beta \rangle\rangle_\omega^r.$$

Здесь мы учли, что фурье-образ оператора возмущения

$$H_\omega^1 = 2\pi \sum_\beta S^\beta h_\omega^\beta.$$

Из свойств симметрии функций Грина следует, что

$$\chi_{\alpha\beta}(\omega) = \chi_{\alpha\beta}^*(-\omega).$$

Соответственно, приращение временного среднего для намагниченности имеет вид

$$\langle \Delta M^\alpha(t) \rangle = \sum_{\beta\omega} e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(\omega) h_\omega^\beta. \tag{97}$$

Для оператора возмущения H_t^1 используется также форма записи

$$H_t^1 = -\mu \sum_{\omega>0} \left(e^{-i\omega t} \vec{h}_\omega \vec{S} + e^{i\omega t} \vec{h}^*_{-\omega} \vec{S} \right),$$

где $h^\alpha_{-\omega} = h^{*\alpha}_\omega$ Тогда взамен формулы (97) имеем

$$\langle \Delta M^\alpha(t) \rangle = \sum_{\beta,\omega>0} \left(e^{-i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(\omega) h^\beta_\omega + e^{i\omega t} \chi_{\alpha\beta}(-\omega) h^{\beta *}_\omega \right).$$

Так как восприимчивость χ выражается линейно через функции Грина, то их полюсы будут определять поведение χ в области резонанса. Явный вид χ определяется явным видом гамильтониана взаимодействия.

При описании ферромагнетиков удобно ввести коллективные спиновые операторы

$$S^\pm = \sum_f S^\pm_t,$$

где

$$S^\pm_f = S^x_f \pm i S^y_f$$

(свойства этих операторов описаны в задаче 2 из раздела 4), и функц''' Грина вида

$$G_{11}(\omega) = \langle\langle S^+ | S^+ \rangle\rangle^r_\omega, \quad G_{12}(\omega) = \langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle^r_\omega,$$
$$G_{21}(\omega) = \langle\langle S^- | S^+ \rangle\rangle^r_\omega, \quad G_{11}(\omega) = \langle\langle S^- | S^- \rangle\rangle^r_\omega.$$

Тогда компоненты тензора магнитной восприимчивочти χ будут выражаться через функции $G_{11}, G_{12}, G_{21}, G_{22}$:

$$\chi_{xx}(\omega) = -\frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) + G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{xz}(\omega) = \chi_{zx}(\omega) = \chi_{zy}(\omega) = 0,$$

$$\chi_{yx}(\omega) = \frac{\pi\mu^2 i}{2}(G_{11}(\omega) - G_{22}(\omega) + G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \frac{\pi\mu^2}{2}(G_{11}(\omega) + G_{22}(\omega) - G_{12}(\omega) - G_{21}(\omega)),$$

$$\chi_{zz} = \chi_{st},$$

где χ_{st} – статическая восприимчивость. Энергия, поглощенная спиновой системой из радиочастотного поля за единицу времени, численно равна работе, совершенной полем за это же время. Определим последнюю следующим образом:

$$\frac{d}{dt}A(t) = \sum_{\alpha} h^{\alpha}(t)\frac{d}{dt}\Delta\langle M^{\alpha}(t)\rangle =$$

$$= \sum_{\alpha\beta,\omega\omega'>0} \omega' \left\{h^{\alpha}_{\omega}e^{-i\omega t} + h^{\alpha*}_{\omega}e^{i\omega t}\right\}\left\{\chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\beta}_{\omega'}e^{-i\omega' t} - \chi_{\alpha\beta}(-\omega')h^{\beta*}_{\omega'}e^{i\omega' t}\right\}. \quad (98)$$

Средняя мощность, поглощаемая системой, равна

$$W = -\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int\limits_{0}^{T}\frac{d}{dt}A(t)dt.$$

Используя (98), получаем отсюда следующее выражение:

$$W = -i\sum_{\alpha\beta,\omega>0}\omega\left\{\chi^{*}_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha}_{\omega}h^{\beta^*}_{\omega} - \chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha^*}_{\omega}h^{\beta}_{\omega}\right\}. \quad (99)$$

В случае линейно поляризованного поля $h^{\alpha}_{\omega} = h^{\alpha*}_{\omega}$ формула (99) принимает вид

$$W = -\sum_{\alpha\beta,\omega>0} 2\omega Im\chi_{\alpha\beta}(\omega)h^{\alpha}_{\omega}h^{\beta}_{\omega}. \quad (100)$$

Из (100) следует, что поглощение энергии спиновой системой определяется в случае линейно поляризованного поля мнимой частью тензора восприимчивости. В окрестности полюсов функций Грина восприимчивость резко возрастает и поглощение имеет резонансный характер.

Предположим, что функции Грина $G_{ij}(\omega)$ в некотором приближении имеют полюсы в нижней полуплоскости $\omega = \pm\omega_R - i\Gamma$ ($\Gamma > 0$ – описывает затухание тех спиновых волн, которые возбуждаются при ферромагнитном резонансе)

$$G_{ij} \sim \frac{1}{\omega \pm \omega_R + i\Gamma}.$$

В этом случае нетрудно показать, что мощность, поглощаемая системой, имеет вид

$$W \simeq \sum_{\alpha\beta,\omega>0}\chi^{0}_{\alpha\beta}h^{\alpha}_{\omega}h^{\beta}_{\omega}\frac{\omega^2\omega_R\Gamma}{(\omega^2-\omega_R^2-\Gamma^2)^2+(2\omega\Gamma)^2}, \quad (101)$$

где $\chi^{0}_{\alpha\beta}$ – некоторые постоянные. При приближении частоты внешнего поля к собственной частоте системы ω_R поглощение возрастает и достигает при $\omega \sim \omega_R$ максимального значения

$$W_{\max} \sim \frac{\omega_R}{\Gamma}$$

Таким образом, введение затухания как мнимых частей функций Грина равноценно учету перераспределения энергии в системе между различными степенями свободы. В результате имеет место диссипация энергии, поглощаемой при резонансе. Перейдем теперь к вычислению компонент тензора магнитной восприимчивости χ в рамках рассматриваемой модели изотропного неограниченного ферромагнетика.

В задаче 2 из раздела 2 для системы с гамильтонианом H нами была вычислена в приближении Тябликова функция Грина вида $\langle\langle S_f^+|S_{f'}^-\rangle\rangle_\omega^r$, которая оказалась равной

$$\langle\langle S_f^+|S_{f'}^-\rangle\rangle_\omega^r = \sum_{\vec{q}} \frac{\delta_{ff'}\sigma}{\omega - E(\vec{q}) + i\varepsilon} e^{i\vec{q}(\vec{f}-\vec{f}')}, \tag{102}$$

где $E(\vec{q}) = \omega_R + \frac{1}{2}\{J(0) - J(\vec{q})\}$ – энергия элементарных возбуждений в ферромагнитном кристалле. Здесь $\omega_R = \mu\mathcal{H}$ – зеемановская энергия магнитного момента μ во внешнем магнитном поле $\mathcal{H}$, σ – относительная намагниченность на один узел и $J(\vec{q})$ – фурье-компонента обменного взаимодействия спинов в узлах решетки. Суммирование по волновым векторам $\vec{q}$ в формуле (102) производится по N значениям в пределах первой зоны Бриллюэна. Тогда функция Грина G_{12} есть

$$G_{12}(\omega) = \langle\langle S^+|S^-\rangle\rangle_\omega^r = \sum_{ff'}\langle\langle S_f^+|S_{f'}^-\rangle\rangle_\omega^r =$$

$$= \frac{N\sigma}{\omega - E(\vec{q}=0) + i\varepsilon} = \frac{N\sigma}{\omega - \omega_R + i\varepsilon}.$$

Нетрудно также вычислить и остальные функции Грина. Они оказываются равными

$$G_{21}(\omega) = -\frac{N\sigma}{\omega + \omega_R + i\varepsilon}$$

и

$$G_{11}(\omega) = G_{22}(\omega) = 0. \tag{103}$$

Тогда легко вычислить действительные и мнимые части компонент тензора магнитной проницаемости

$$Re\chi_{xx}(\omega) = P\frac{\chi_0}{1 - (\omega/\omega_R)^2}.$$

$$Im\chi_{xx}(\omega) = \frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega - \omega_R) - \delta(\omega + \omega_R)\},$$

$$Re\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\pi\chi_0}{2}\omega_R\{\delta(\omega - \omega_R) + \delta(\omega + \omega_R)\},$$

$$Im\chi_{yx}(\omega) = -\frac{\omega}{\omega_R}P\frac{\chi_0}{1 - (\omega/\omega_R)^2}.$$

$$\chi_{yy}(\omega) = \chi_{xx}(\omega), \quad \chi_{xy}(\omega) = -\chi_{yx}(\omega),$$

где $\chi_0 = \frac{N\sigma\mu^2}{2\omega_R}$.

В рассмотренном случае резонансная частота ω_R совпадает с частотой ларморовской прецессии спина вокруг направления постоянного поля $\vec{\mathcal{H}}$. Так как ω_R - энергия элементарного возбуждения (спиновой волны) с $\vec{q} = 0$, то это означает, что при резонансе (в линейном приближении) возбуждаются только такие спиновые волны. Форма линии поглощения в рассматриваемом случае имеет δ-образный вид. Если в спиновой системе учесть затухание, что можно сделать феноменологически, смещая полюсы функций Грина в комплексную плоскость: $\omega\pm\omega_R \to \omega\pm\omega_R+i\Gamma$, где Γ – величина затухания для спиновых волн с $\vec{q} = 0$, мы можем получить более реалистичные формулы для компонент тензора восприимчивости [4]. Форма линии в этом случае будет лоренцевской.

3.2. Задачи для самостоятельной работы

1. Найти формулу для линейной реакции квантовой системы на внешнее механическое возмущение при его мгновенном включении в момент времени $t = t_0$:

$$H_t^1 = \Theta(t - t_0)\frac{e^{\varepsilon t}}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t}H_\omega^1, \quad (\varepsilon \to 0, \varepsilon > 0),$$

где

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 1 & t > t_0 \\ \\ 0 & t < t_0 \end{cases}$$

– ступенчатая функция Хевисайда.

2.* Найти формулу для нелинейной реакции системы на адиабатически включаемое внешнее механическое возмущение [3].

3. Показать, что мощность, поглощаемая системой спинов при ферромагнитном резонансе, имеет вид (101).

4. Показать, что функции Грина $G_{11}(\omega$, $G_{22}(\omega)$ и $G_{21}(\omega)$, введенные в задаче 2, имеют вид (103).

3. При изучении ферромагнитного резонанса исследуют образцы, имеющие конечные размеры. Чтобы учесть граничные эффекты, в гамильтониане Гейзенберга во внешнем поле добавляют член (оператор размагничивания)

$$H_{demagn} = \frac{1}{2}(N_x M_x^2 + N_y M_y^2 + N_z M_z^2),$$

где

$$\vec{M} = 2\mu_B/\hbar \sum_f \vec{S}_f$$

– вектор намагниченности, а N_x, N_y, N_z – размагничивающие факторы, зависящие от формы образца.

Предположим, что помимо постоянного магнитного поля $\vec{\mathcal{H}}$ в направлении оси z на образец действует высокочастотное поле $\vec{h}(t)$ в плоскости xy. Пусть высокочастотное поле имеет компоненты $\vec{h}(t) = \{b\cos\omega t,\ b\sin\omega t,\ 0\}$. Тогда возмущенный гамильтониан H_{int} можно записать в виде

$$H_{int}(t) = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\sum_f \vec{h}(t)\vec{S}_f = Ue^{\imath\omega t} + U^* e^{-\imath\omega t},$$

где

$$U = -\frac{\mu_B}{\hbar}\sum_f S_f^- \qquad (S_f^{\pm} = S_f^x \pm \imath S_f^y).$$

Высокочастотное поле будет создавать дополнительную намагниченность в плоскости xy:

$$\delta M_{\pm} = (M_x - \imath M_y) = N\chi_{\pm}e^{\pm\imath\omega t}$$

Определите восприимчивость $\chi_{\pm}$, используя уравнение движения для запаздывающей функции Грина и применяя расцепление Тябликова для трехчастичных функций Грина. Выразите энергию, поглощаемую в единицу времени через $\chi' = Re\chi_{\pm}$ и $\chi'' = Im\chi_{\pm}$.

4.* Используя теорию линейной реакции Кубо, получить явное выражение для диамагнитной восприимчивости Ландау идеального электронного газа [2].

5.* Рассчитать динамическую диэлектрическую проницаемость электронного газа в металле [2].

6.* Найти выражения для фононной и примесной проводимости электронов в металлах [4].

7.* Используя формулу Кубо совместно с уравнениями Максвелла, рассмотреть поведение сверхпроводника в слабом магнитном поле в случае, когда глубина проникновения магнитного поля $\lambda \gg \xi_0$, где ξ_0 – длина когерентности в сверхпроводнике (случай Лондонов). Показать, что зависимость магнитного поля от глубины z имеет вид [4]:

$$H(z) = H_0 e^{-z/\lambda}.$$

4. Метод проекционного оператора Цванцига

Основная литература

1. Репке, Г. Неравновесная статистическая механика / Г. Репке. – М.: Мир, 1990. – 320 с.

2. Зубарев, Д.Н. Статистическая механика неравновесных процессов / Д.Н. Зубарев, В.Г. Морозов, Г. Репке. – М.: Физматлит, 2002. Ч. 1. – 432 с.; Ч. 2 – 296 с.

Дополнительная литература

3. Зубарев, Д.Н. Современные методы статистической теории неравновесных процессов / Д.Н. Зубарев // Итоги науки и техники. Современные проблемы математики. – М.: ВИНИТИ, 1980. – Т.15. – С. 131 - 226.

4. 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.

5. Carmichael, H. An open systems approach to quantum optics / H. Carmichael. – Berlin: Springer, 1993. – 179 p.

6. Puri, R.R. Mathematical Methods of Quantum Optics / R.R. Puri. – Berlin: Springer, 2001. – 285 p.

7. Скалли, М.О. Квантовая оптика / М.О. Скалли, М.С. Зубайри. – М.: Физматлит, 2003. – 512 с.

8. Башкиров, Е.К. Метод проекционного оператора / Е.К. Башкиров. – Самара: Изд-во СамГУ, 1996 – 56 с.

9. Мандель, Л. Оптическая когерентность и квантовая оптика / Л. Мандель, Э. Вольф. – М.: Физматлит, 2000. – 896 с.

4.1. Задачи с решениями

Задача 1. Вывести для системы со слабым взаимодействием обобщенное кинетическое уравнение Цванцига.

Решение

Рассмотрим квантовомеханическую систему, описываемую невозмущенным гамильтонианом H_0, испытывающую слабое взаимодействие с окружающими телами. Полный гамильтониан системы с учетом взаимодействия с окружением можно представить в виде

$$H = H_0 + H_1,$$

где H_1 – слабое возмущение. Диагональные элементы полного статистического оператора ρ в представлении по собственным функциям H_0 изменяются со временем медленно, по сравнению с его недиагональными элементами. Действительно, из уравнения Лиувилля для диагональных и недиагональных элементов оператора ρ имеем

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

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

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

Поскольку возмущение 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 быстро меняющиеся части. Тогда 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:

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

и, следовательно,

$$P^2 = P$$

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

Следуя Цванцигу, введем теперь проекционный оператор P, который выделяет медленно меняющуюся (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 $\rho_2 = (1 - P)\rho$ - быстро меняющаяся (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

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + iL\rho = 0. \tag{104}$$

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

Будем искать формальное решение уравнения Лиувилля (104) 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 (104) слева операторами P и $(1 - P)$. В результате получим систему замкнутых уравнений для ρ_1 и ρ_2

$$\frac{\partial\rho_1}{\partial t} + iPL(\rho_1 + \rho_2) = 0, \tag{105}$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + i(1-P)L(\rho_1+\rho_2) = 0 \tag{106}$$

с начальным условием

$$\rho_2(0) = 0. \tag{107}$$

Формальное решение уравнения (106) с учетом начального условия (107) можно представить в виде

$$\rho_2(t) = -\int\limits_0^t \exp[(t_1-t)(1-P)iL](1-P)iL\rho_1(t_1)dt_1. \tag{108}$$

Тогда искомый статистический оператор

$$\rho(t) = \rho_1(t) - \int\limits_0^t \exp[(t_1-t)(1-P)iL](1-P)iLP\rho(t_1)dt_1. \tag{109}$$

Подставляя решение (108) в уравнение (105), получим замкнутое уравнение для оператора $\rho_1(t)$

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

$$= -\int\limits_0^t PL\exp[(t_1-t)(1-P)iL](1-P)L\rho_1(t_1)dt_1 =$$

$$= -\int\limits_0^t PL\exp\left[-is(1-P)L\right]](1-P)L\rho_1(t-s)ds \tag{110}$$

– основное кинетическое уравнение Цванцига.

Формально основное кинетическое уравнение (110) 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.

Таким образом, 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 (подробное обсуждение данной проблемы имеется в [4]). 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.

Решение уравнения Лиувилля, удовлетворяющее начальному условию отсутствия корреляций

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

имеет вид

$$\rho(t,t_0) = e^{-i\,L\,(t-t_0)}\,P\rho(t_0). \tag{111}$$

Однако оно содержит нефизическую зависимость от начального времени t_0. Поэтому решение (111) 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 усредняя (111) по начальным моментам времени в этом промежутке, можно получить

$$\rho(t) = \frac{1}{t-t_0}\int\limits_{t_0}^{t} e^{-i\,L\,(t-t_0)}\,P\rho(t_0)\,dt_0 \tag{112}$$

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 (112) определяет неравновесный статистический ансамбль. Заметим, что в (112) 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 (112) удовлетворяет уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} + i\,L\,\rho(t) = \frac{\rho(t) - P\,\rho(t)}{t - t_0} \tag{113}$$

с правой частью, которую можно назвать источником и которая стремится к нулю при $t - t_0 \to \infty$ (при этом как всегда предельный переход по времени 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, решение которого при условии $t_0 = 0$ будет иметь вид

$$\rho(t) = \rho_1(t) - \int\limits_0^t (1 - t_1/t)\exp[-it_1(1-P)iL](1-P)iLP\rho(t-t_1)dt_1.$$

где $t - t_0 = t \to \infty$, что совпадает с уравнением Цванцига (110) при больших t.

Задача 2. Вывести из обобщенного кинетического уравнения Цванцига кинетическое уравнение Паули [1-3].

Решение

Покажем, 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

$$i\hbar\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \sum_l (H_{nl}\rho_{lm} - \rho_{nl}H_{lm}) \tag{114}$$

удобно записать, используя так называемое тетрадное представление. Супероператоры, или тетрады, были введены в 1958 году Накадзимой. 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

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

Уравнение Лиувилля

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

в матричной тетрадной форме имеет вид

$$i\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = \sum_{m'n'} L_{mnm'n'}\rho_{m'n'}, \tag{115}$$

где $L_{mnm'n'}$ – матрица с удвоенными индексами или тетрада. Сравнивая (114) с (115), найдем, что (для сокращения записей будем везде в дальнейшем полагать $\hbar = 1$)

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

Основное кинетическое уравнение в тетрадной форме примет вид

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} + i(PL\rho_1)_{mm} = \int\limits_0^t \left[\mathcal{H}(s)\rho_1(t-s)\right]_{mm} ds, \tag{116}$$

где

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

и $\rho_{mm} = (\rho_1)_{mm}$. Нетрудно показать, что второе слагаемое в левой части уравнения (116) 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 (116) примет вид

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int\limits_0^t \left[\mathcal{H}(s)\rho_1(t-s)\right]_{mm} ds. \qquad (117)$$

Учитывая, что оператор ρ_1 диагонален, запишем уравнение (117) в виде

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int\limits_0^t \sum_n \mathcal{H}_{mmnn}(s)\rho_{nn}(t-s)ds. \qquad (118)$$

Здесь

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

где мы учли, что $(PL)_{mmlp} = L_{mmlp}$. Ядро интегрального уравнения (118) удовлетворяет правилу сумм

$$\sum_n \mathcal{H}_{mmnn}(s) = 0. \qquad (119)$$

Для доказательства соотношения (119) 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, суммируя 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 (119), получаем

$$\sum_{n\neq m} \mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\mathcal{H}_{mmmm}(s). \tag{120}$$

Соотношение (120) позволяет записать основное кинетическое уравнение (118) в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \int_0^t \sum_{n\neq m} \mathcal{H}_{mmnn}(s)\left[\rho_{nn}(t-s) - \rho_{mm}(t-s)\right] ds. \tag{121}$$

Уравнение (121) представляет собой точное уравнение. Уравнение Паули можно получить из (121), 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 (121) мы можем представить как

$$\mathcal{H}_{mmnn}(s) = -\left[(L_0 + L_1)e^{-is(1-P)(L_0+L_1)}(1-P)(L_0+L_1)\right]_{mmnn}. \tag{122}$$

Учитывая явный вид оператора L_0, формулу (122) можно упростить. Имеем

$$(L_0)_{mmm'n'} = (H_0)_{mm'}\,\delta_{mn'} - (H_0)_{nm'}\,\delta_{mm'} =$$

$$= E_m\delta_{mm'}\delta_{mn'} - E_m\delta_{mn'}\delta_{mm'} = 0,$$

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

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

Поскольку ядро 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

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

Кроме того, нетрудно доказать следующие соотношения:

$$PL_0 = L_0 P = 0.$$

Действительно, в тетрадном представлении произвольный матричный элемент оператора PL_0 можно записать как

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

Аналогично показывается, что и $L_0 P = 0$. Теперь оператор $T^0(s)$ примет вид

$$T^0(s) = e^{-isL_0}$$

Как обычно операторное выражение понимается в смысле разложения в ряд Тейлора

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

Принимая во внимание соотношения

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

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

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

$$\ldots \quad ,$$

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

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

где $\omega_{mn} = E_m - E_n$.

Тогда ядро интегрального уравнения (121) во втором порядке по взаимодействию принимает вид

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

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

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

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

$$= -\sum_{ab\,(a\neq b)} \left(H^1_{ma}\delta_{mb} - H^1_{bm}\delta_{ma}\right) e^{-is\,\omega_{ab}} \left(H^1_{an}\delta_{bn} - H^1_{nb}\delta_{an}\right). \qquad (123)$$

В правой части уравнения (121) суммирование производится при условии $m \neq n$. В этом случае для ядра интегрального уравнения $\mathcal{H}^0_{mmnn}$ из (123) получаем

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

В результате основное кинетическое уравнение приводится к следующему:

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \sum_{n\neq m} \int\limits_0^t \left|H^1_{mn}\right|^2 \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) \left\{\rho_{nn}(t-s) - \rho_{mm}(t-s)\right\} ds. \quad (124)$$

При $n = m$ в правой части уравнения (124) 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 подынтегральном выражении в правой части уравнения (124) 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 (124) получаем

$$\frac{\partial \rho_{mm}}{\partial t} = \sum_{n} \left|H^1_{mn}\right|^2 \left\{\rho_{nn}(t) - \rho_{mm}(t)\right\} \int\limits_0^t \left(e^{-is\,\omega_{nm}} + e^{is\,\omega_{nm}}\right) ds. \qquad (125)$$

Теперь интеграл по времени в правой части уравнения (125) легко вычисляется

$$\int\limits_0^t \left(e^{-is\omega_{nm}} + e^{is\omega_{nm}}\right) ds = -\int\limits_{-t}^{t} e^{-is\omega_{mn}} ds = \frac{\sin\omega_{mn}t}{\omega_{mn}}.$$

Введем вероятность перехода из состояния n в состояние m 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 (125) окончательно принимает вид уравнения Паули

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

Задача 3. Рассмотреть кинетику спонтанного коллективного излучения или сверхизлучения Дикке для сосредоточенной системы двухуровневых излучателей [8,9].

Решение

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 "сосредоточенная" или "точечная" модель Дикке). Рассмотрение упрощенной модели позволит не принимать во внимание эффектов распространения 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 "карандаша", 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. [8]), к эффективному уменьшению числа излучателей. Гамильтониан рассматриваемой модели можно записать в виде (55).

Пусть ρ – статистический оператор всей системы, удовлетворяющий уравнению Лиувилля (104) с гамильтонианом (55). 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 для статистического оператора имеет вид

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

где

$$\tilde{L}(t)\tilde{\rho} = [\tilde{H}_{AF}, \tilde{\rho}]/\hbar$$

и

$$\tilde{H}_{AF} = \sum_{k,f} g_k(a_k R_f^+ e^{i\kappa_k t} + a_k^+ R_f^- e^{-i\kappa_k t}). \tag{126}$$

Здесь $\kappa_k = \Omega - \omega_k$ и $\tilde{X}(t) = U^{-1}(t)\,X\,U(t)$ – произвольный оператор в представлении взаимодействия.

При записи формулы (126) мы учли, что

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

$$e^{i\hbar\Omega_0 R_f^z}\; R_f^+\, e^{-i\hbar\Omega_0 R_f^z} = e^{i\hbar\Omega_0}\; R_f^+$$

Вводя проекционный оператор P, мы можем переписать обобщенное уравнение Цванцига (110) в представлении взаимодействия

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

$$-P\tilde{L}(t)\int\limits_0^t ds \exp\left[i(1-P)\int\limits_{t-s}^t \tilde{L}(t')dt'\right](1-P)\tilde{L}(t-s)P\tilde{\rho}(t-s). \qquad (127)$$

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 (127) примет вид

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

$$-|0\rangle\langle 0|\int\limits_0^t ds \quad sp_F\,\tilde{L}(t)\exp\left[i(1-P)\int\limits_{t-s}^t \tilde{L}(t')dt'\right]\times$$

$$\times\tilde{L}(t-s)\,|0\rangle\langle 0|\,\tilde{\rho}_A(t-s). \qquad (128)$$

Будем искать решение уравнения (128) с точностью до членов второго порядка малости по взаимодействию. Подынтегральное выражение уже содержит в качестве множителей операторы $\tilde{L}(t)$ и $\tilde{L}(t-s)$, пропорциональные малой константе взаимодействия. Поэтому в разложении

$$\exp\left[i(1-P)\int\limits_{t-s}^t \tilde{L}(t')dt'\right] = 1 + i(1-P)\int\limits_{t-s}^t \tilde{L}(t')dt' + \ldots$$

по малой константе взаимодействия мы оставим только первое слагаемое, равное 1.

Теперь мы можем вычислить подынтегральное выражение в правой части уравнения (128). Имеем

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

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

(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 к, получаем

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

$$\left. - e^{i\kappa_k(t-s)} \tilde{\rho}_A(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,1_k\,|\,R^+ \right\} \qquad (129)$$

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 (129) оператором $\tilde{L}(t)$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= \sum_k g_k^2/\hbar^2 \left\{ e^{i\kappa_k s}\, R^+ R^- \,\tilde\rho_A(t-s) - e^{-i\kappa_k s}\, R^- \,\tilde\rho_A(t-s)\, R^+ + \right.$$
$$\left. + \, e^{-i\kappa_k s}\,\tilde\rho_A(t-s)\, R^+ R^- \, - e^{i\kappa_k s}\, R^- \,\tilde\rho_A(t-s)\, R^+ \right\}.$$

Проводя под знаком следа циклическую перестановку операторов, последнее выражение можно записать в виде

$$Sp_A\, \tilde L(t) \tilde L(t-s)\,|\,0\,\rangle\,\langle\,0\,|\,\tilde\rho_A(t-s) =$$
$$= D^+(s)\left[\, R^+ R^-, \tilde\rho_A(t-s)\,\right] \, + \, D^-(s)\left[\,\tilde\rho_A(t-s), R^+ R^-\,\right],$$

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

$$\frac{\partial\tilde\rho_A(t)}{\partial t} = \int_0^t ds \left\{ D^+(s)\left[\, R^+, R^- \,\tilde\rho_A(t-s)\,\right] \, + \right.$$
$$\left. + D^-(s)\left[\,\tilde\rho_A(t-s), R^+ R^-\,\right] \right\}. \tag{130}$$

Для вычисления в явном виде интеграла по времени в правой части уравнения (130) 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 медленно меняющуюся амплитуду.

В марковском приближении уравнение (130) есть

$$\frac{\partial\tilde\rho_A(t)}{\partial t} = \Gamma/2\left[\, R^+, R^- \,\tilde\rho_A(t)\,\right] \, + \, \Gamma/2\left[\,\tilde\rho_A(t), R^+ R^-\,\right], \tag{131}$$

где

$$\Gamma = 2\int_0^\infty D^{\pm}(s) ds = \sum_k g_k^2/\hbar^2 \delta(\omega_k - \Omega_0)$$

(для времен $t \gg 1/\Omega_0$, 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 [8]. Тогда τ_0 – время спонтанного излучения изолированного атома. Перейдем в уравнении (131) к представлению Шредингера. Воспользовавшись очевидными соотношениями

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

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

получаем

$$\frac{\partial \rho_A(t)}{\partial t} = i\,\Omega\;[R^z, \rho_A(t)] +$$

$$+\Gamma/2\left[R^+, R^-\,\rho_A(t)\right] + \Gamma/2\left[\rho_A(t), R^+\,R^-\right]. \qquad (132)$$

Исследуем теперь с помощью уравнения (132) кинетику атомной подсистемы. Вычислим среднюю коллективную полуразность населенностей системы двухуровневых атомов:

$$\langle \dot{R}^z(t)\rangle = Sp_A\;\{R^z\,\dot{\rho}_A(t)\} = -\,\Gamma\;Sp_A\;\{R^+\,R^-\,\dot{\rho}_A(t)\} =$$

$$= -\,\Gamma\;Sp_A\;\{R^+(t)\,R^-(t)\,\rho_A(0)\} = -\,\Gamma\,\langle R^+(t)\,R^-(t)\rangle =$$

$$= -\,\Gamma\;(N/2 + \langle R^z(t)\rangle) - \Gamma\,S(t),$$

где

$$\langle ...\rangle = Sp_A\,(...\rho_A(0)), \qquad S(t) = \sum_{f\neq f'}\langle R^+_f(t)\,R^-_{f'}(t)\rangle.$$

Уравнение для $\langle R^z(t)\rangle$ получилось незамкнутым. Для коррелятора второго порядка из (132) можно получить следующее уравнение:

$$\dot{S}(t) = 2\,\Gamma \sum_{f,f',f''(f\neq f')}\langle R^z_f(t)\,R^+_{f'}(t)\,R^-_{f''}(t)\rangle.$$

Для тройного коррелятора с использованием (132) можно получить новое уравнение и т.д. Обычно в теории сверхизлучения используют расцепления корреляторов второго порядка вида:

$$\langle R^z_f\,R^+_{f'}\,R^-_{f''}\rangle = \langle R^z_f\rangle\,\langle R^+_{f'}\,R^-_{f''}\rangle \qquad (133)$$

(в теории ферромагнетизма, как уже отмечалось выше, такое расцепление носит название расцепления Тябликова). В рамках расцепления (133) для корреляторов первого и второго порядков получаем замкнутую систему уравнений

$$\langle \dot{R}^z(t)\rangle = -\,\Gamma\;(N/2 + \langle R^z(t)\rangle) - \Gamma\,S(t),$$

$$\dot{S}(t) = 2\,\Gamma\, S. \tag{134}$$

Найдем приближенное решение системы уравнений (134). Предположим, что в начальном состоянии все атомы возбуждены, т.е. $\langle R^z(0)\rangle = N/2$, но макроскопическая поляризация отсутствует, т.е. дипольные моменты атомов не скоррелированы ($S(0) = 0$). В этом случае второе слагаемое будет давать вклад только на достаточно больших временах $t \sim t_D$, где t_D называется временем задержки сверхизлучательного импульса. Коррелятор S на временах порядка времени задержки пропорционален квадрату числа излучателей N^2, в то время как $\langle R^z\rangle$ пропорционально N. Тогда для времен $t \sim t_D$ система уравнений (134) принимает вид

$$\langle \dot{R}^z\rangle \approx -\Gamma\, S, \qquad \dot{S} = 2\,\Gamma\, S.$$

Откуда $\langle R^z\rangle^2 + S = \mathrm{const} = N^2/4$ и $S(t) = N^2/4 - \langle R^z\rangle^2$. Тогда для величины $\langle R^z\rangle$ из системы уравнений (136) мы можем получить замкнутое кинетическое уравнение вида

$$\langle \dot{R}^z\rangle = -\,\Gamma\,(N/2 + \langle R^z\rangle) - \Gamma\,(N^2/4 - \langle R^z\rangle^2). \tag{135}$$

Решение уравнения (135) есть

$$\langle R^z(t)\rangle \doteq \frac{N}{2}\left[\frac{1}{N} - \left(1 + \frac{1}{N}\right)\;\tanh\left\{\frac{t - t_D}{2\tau_R}\right\}\right], \tag{136}$$

где $\tau_R = (1 + N)/\Gamma$ – время коллективного излучения или сверхизлучения, $t_D = \tau_R \ln N$ – время задержки сверхизлучательного импульса. Имея решение (136), нетрудно вычислить интенсивность сверхизлучательного импульса $I(t)$. Действительно, из закона сохранения энергии полной системы "атомы + фотоны":

$$I(t) = \frac{d}{dt}\sum_k \hbar\omega_k\,\langle a_k^+\, a_k\rangle = -\hbar\,\Omega_0\,\langle \dot{R}^z(t)\rangle =$$
$$= \frac{\hbar\Omega_0}{4\,\tau_R}\,(N^2 + 1)^2\,\mathrm{sech}^2\,\frac{t - t_D}{2\,\tau_R}.$$

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.

Задача 4. Исследовать динамику моды квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе при наличии утечки фотонов [1,2].

Решение

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

$$H = H_S + H_T + H_{ST}. \tag{137}$$

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_T – 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_T

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

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

$$\rho_T = Q^{-1} e^{-H_T/kT}, \tag{138}$$

где статистическая сумма

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

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 (138).

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

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

В представлении взаимодействия гамильтониан системы (137) примет вид

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

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

$$\tilde{B}(t)_{mn} = e^{i\omega_{mn}\,t}\,B_{mn}, \tag{139}$$

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

Обобщенное кинетическое уравнение для рассматриваемой системы в представлении взаимодействия можно записать в виде (127). Выберем проекционный оператор в виде:

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

Тогда уравнение (127) во втором порядке по взаимодействию для рассматриваемой модели примет вид

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_S}{\partial t} = - \int\limits_0^t ds\, sp_T\, \tilde{L}(t)\, \tilde{L}(t-s)\, \rho_T\, \tilde{\rho}_S(t-s) =$$

$$= - \int\limits_0^t dt_1\, sp_T\, \tilde{L}(t)\, \tilde{L}(t_1)\, \rho_T\, \tilde{\rho}_S(t_1). \tag{140}$$

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 (140) к пределу $t_0 \to -\infty$ с учетом этих соотношений, получаем

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

$$= - \lim_{\varepsilon \to +0} \int\limits_0^\infty ds\, e^{-\varepsilon s}\, Sp_T\, \tilde{L}(t)\, \tilde{L}(t-s)\, \rho_T\, \tilde{\rho}_S(t-s). \tag{141}$$

Теперь вычислим подынтегральное выражение в правой части уравнения (141). Имеем

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

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

$$+\rho_T\,\tilde{\rho}_S(t-s)\,\tilde{H}_{ST}(t-s)\,\tilde{H}_{ST}(t)\Big\}\,/\,\hbar^2. \qquad (142)$$

Подставляя в формулу (142) явный вид гамильтониана взаимодействия, 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 быстро осциллирующими во времени и называются нерезонансными членами, а слагаемые типа $a^+\,a$ или $a\,a^+$ являются медленно меняющимися 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 в представлении Гейзенберга 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 медленно меняющимися функциями времени, а нерезонансные по-прежнему останутся быстро осциллирующими функциями времени. Вычисление интеграла в правой части уравнения (141) производится по временам, большим времени осцилляций моды $\sim 1/\Omega$, и поэтому вклад в интеграл нерезонансных слагаемых будет равен нулю.

Оставляя в (142) лишь резонансные слагаемые, получаем

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

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

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

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

$$+\rho_T\,\tilde{B}(t-s)\,\tilde{B}(t)\,\tilde{\rho}_S(t-s)\,\left[e^{-i\Omega s}\,a^+a+e^{i\Omega s}\,a\,a^+\right]\Big\}. \tag{143}$$

Вычислим теперь Sp по переменным термостата от выражения (143). Учитывая, что под знаком шпура можно делать циклическую перестановку операторов, а также принимая во внимание формулу (139) 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 (141), получим окончательно с учетом формулы Сохоцкого

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\int\limits_0^\infty ds\,e^{-\varepsilon s}\,e^{-i(\omega_{mn}+\Omega)s} = i\,\mathcal{P}\frac{1}{\omega_{mn}+\Omega} + \pi\,\delta(\omega_{mn}+\Omega)$$

в представлении Шредингера кинетическое уравнение вида

$$\frac{\partial\rho_S}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar}[H_S, \rho_S] = -\nu\,[\rho_S\,a^+, a] - \nu\,[a^+, a\,\rho_S]-$$
$$-\delta\,[\rho_S\,a, a^+] - \delta\,[a, a^+\,\rho_S]. \tag{144}$$

Здесь знак $\mathcal{P}$ означает операцию вычисления интеграла в смысле главного значения.

При вычислении коэффициентов ν и δ в уравнении (144) суммирование по n, m можно провести путем перехода к интегрированию с использованием плотности состояний термостата $D(E)$:

$$\sum_{mn}(...) = \int\limits_0^\infty dE_n\,D(E_n)\int\limits_0^\infty dE_m\,D(E_m)\,(...) =$$

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

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

С учетом того, что

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

где

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

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

получаются следующие выражения для коэффициентов ν и δ:

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

$$\delta = e^{-\hbar\Omega/kT}\, \nu. \tag{145}$$

Правую часть уравнения (144) для ρ_S, которая называется дисссипативным 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 (144) кинетику средних

$$\langle a^+(t)\rangle = Sp_S\ \{\rho_S(t)\, a^+\}$$

и

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

где $n = a^+ a$ - оператор числа фотонов в моде квантового поля. Уравнения для этих величин легко получаются из (144)

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

$$\frac{d\langle n(t)\rangle}{dt} = 2\,\delta - 2\,(\nu - \delta))\,\langle n(t)\rangle.$$

Решения последних уравнений есть

$$\langle a^+(t)\rangle = \langle a^+(0)\rangle\, e^{\imath\Omega t - (\nu-\delta)\,t},$$

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

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

$$\frac{\nu}{\nu-\delta} = \left[e^{\hbar\Omega/kT} - 1\right]^{-1} = \bar{n}_0(T)$$

представляет собой среднее число квантов в моде резонаторного поля при температуре термостата, определяемое распределением Бозе.

Заметим, что в квантовой оптике уравнение (144) обычно записывают так, что оно содержит одну константу затухания. Используя соотношение (145), введем новую константу затухания γ следующим образом:

$$\delta = \frac{1}{2}\,\gamma\,\bar{n}_0, \quad \nu = \frac{1}{2}\,\gamma\,(\bar{n}_0 + 1).$$

Тогда уравнение (144) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_S(t)}{\partial t} &= \imath\Omega[\rho_S(t), a^+a] - \\ -\frac{1}{2}\gamma\, &\left\{\bar{n}_0\left(a\,a^+\,\rho_S(t) - 2\,a^+\,\rho_S(t)\,a + \rho_S(t)\,a\,a^+\right) + \right. \\ &\left. +(\bar{n}_0+1)\left(a^+\,a\,\rho_S(t) - 2\,a\,\rho_S(t)\,a^+ + \rho_S(t)\,a^+\,a\right)\right\}, \end{aligned} \tag{146}$$

где мы также учли, что $[\rho_S(t)\,, H_S] = \hbar\Omega[\rho_S(t), a^+a]$.

Задача 5. Исследовать кинетику одномодового лазера на двухуровневых активных атомах [2,5-7].

Решение

Рассмотрим открытую систему, состоящую из N двухуровневых атомов, взаимодействующих с модой квантового электромагнитного поля в неидеальном резонаторе. Активные атомы и мода излучения взаимодействуют с некими резервуарами энергии (термостатами). В качестве таких резервуаров могут выступать: резонатор, внешнее электромагнитное поле (в частном случае вакуумное) и т.д. Считается, что состояние каждого резервуара является стационарным, но необязательно равновесным. Явная форма гамильтониана резервуаров, как и в предыдущей задаче, нам не понадобится. Будем лишь предполагать, что резервуары статистически независимы, т.е. их полный статистический оператор имеет вид произведения

$$\rho_T = \rho_T^{(F)} \prod_f \rho_T^{(f)},$$

в котором $\rho_T^{(F)}$ и $\rho_T^{(f)}$ – статистические операторы термостатов (резервуаров), взаимодействующих с полем излучения и f-м двухуровневым атомом.

Гамильтониан рассматриваемой модели с учетом резервуаров, как и в предыдущей задаче, можно выбрать в виде (137). Гамильтониан H_S теперь может быть записан как сумма

$$H_S = H_F + H_A + H_{AF}. \tag{147}$$

Здесь $H_F = \hbar\Omega\, a^+ a$ – гамильтониан моды поля в резонаторе с собственной частотой Ω, где $a^+(a)$ – оператор рождения (уничтожения) фотона моды поля, $H_A = \sum\limits_f H_f$, где $H_f = \hbar\Omega_0 R_f^z$ – гамильтониан свободного f-го двухуровневого атома и $H_{AF} = \sum\limits_f H_{Ff} = \sum\limits_f \hbar(g_f R_f^+ a + g_f^* R_f^- a^+)$ – гамильтониан взаимодействия двухуровневых атомов с модой резонаторного поля (одномодовый гамильтониан Дикке). Для простоты будем считать, что полевая мода имеет форму бегущей волны. Тогда амплитуды взаимодействия g_f различаются только фазами

$$g_f = g e^{i\varphi_f},$$

где g – действительное число.

Гамильтониан, который описывает взаимодействие излучения и активных атомов с другими степенями свободы, запишем в виде

$$H_{ST} = H_{ST}^{(F)} + H_{ST}^{(A)}. \tag{148}$$

Здесь слагаемое $H_{ST}^{(F)}$ описывает взаимодействие с термостатом моды резонаторного поля. Его мы выберем, используя модель линейного затухания $H_{ST}^{(F)} = (aB^+ + a^+B)$, где B – некоторый оператор, действующий на волновые функции резервуара. Для единообразия при описании взаимодействия подсистем с термостатами мы выбрали гамильтониан $H_{ST}^{(F)}$ более общего вида, нежели в предыдущей задаче. Взаимодействие активных атомов с резервуарами описывается оператором

$$H_{ST}^{(A)} = \sum_f H_{ST_f}^{(A)} = \sum_f (R_f^- A_f^+ + R_f^+ A_f^- + R_f^z A_f^z), \qquad (149)$$

где $(A_f^{\pm})^+ = A_f^{\mp}$ и $(A_f^z)^+ = A_f^z$. Без ограничения общности можно считать, что операторы резервуаров удовлетворяют соотношениям

$$\langle A_f^{\pm} \rangle_T = \langle A_f^z \rangle_T = 0.$$

Процессы, описываемые гамильтонианом (149), имеют простой физический смысл. Слагаемые с $A_f^{\pm}$ в (129) соответствуют безызлучательным переходам активных атомов (или излучательным переходам в моды термостата, см. задачу 2 для самостоятельной работы), а слагаемые с A_f^z описывают модуляцию частоты перехода, обусловленную влиянием резервуара. Константы взаимодействия включены в операторы резервуаров.

Как и в предыдущей задаче, предположим. что взаимодействие моды поля и активных атомов со своими резервуарами является слабым и может быть учтено в кинетических уравнениях во втором порядке по взаимодействию. Фактически это предположение означает, что соответствующие времена релаксации поля (τ_F) и атомов (τ_f) достаточно велики, т.е. $\tau_F \, \Omega \gg 1$ и $\tau_f \, \Omega_0 \gg 1$. Для реальных лазеров с высокой добротностью эти условия всегда выполняются. Будем также пренебрегать влиянием взаимодействия между полями и атомами на релаксационные процессы, обусловленные взаимодействием с резервуарами.

В рамках сделанных приближений задача о динамике одномодового лазера в математическом смысле эквивалентна предыдущей задаче. Поэтому для рассматриваемого случая мы можем использовать кинетическое уравнение вида (141) с подынтегральным выражением вида (142). Используя выражения (147) - (149) для гамильтонианов H_S и H_{ST} и переходя к представлению Шредингера, мы можем получить из (141) обобщенное кинетическое уравнение для редуцированной матрицы плотности ρ_S подсистемы "атомы + мода резонаторного поля"вида

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} \right)_F + \sum_f \left(\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} \right)_f ,$$

$$\left(\frac{\partial\rho_s}{\partial t}\right)_F = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{0} dt_1 \left\{ Sp_T\{H_{ST}^{(F)} H_{ST}^{(F)}(t_1)\rho_T\}\rho_S + \right.$$
$$+\rho_S Sp_T\{H_{ST}^{(F)}(t_1) H_{ST}^{(F)}\rho_T\} -$$
$$\left. - Sp\{H_{ST}^{(F)}\rho_T\rho_S(t) H_{ST}^{(F)}(t_1) + H_{ST}^{(F)}(t_1)\rho_T\rho_S(t_1) H_{ST}^{(F)}\}\right\}, \tag{150}$$
$$\left(\frac{\partial\rho_s}{\partial t}\right)_f = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{0} dt_1 \left\{ Sp_T\{H_{ST_f}^{(A)} H_{ST_f}^{(A)}(t_1)\rho_T\}\rho_S + \right.$$
$$+\rho_S Sp_T\{H_{ST_f}^{(A)}(t_1) H_{ST}^{(F)}\rho_T\} -$$
$$\left. - Sp\{H_{ST_f}^{(A)}\rho_T\rho_S(t) H_{ST_f}^{(A)}(t_1) + H_{ST_f}^{(A)}(t_1)\rho_T\rho_S(t_1) H_{ST_f}^{(A)}\}\right\}. \tag{151}$$

Поскольку мы пренебрегаем влиянием взаимодействия между полем и атомами на процессы релаксации, обусловленные резервуарами, гейзенберговские операторы $H_{ST}^{(F)}(t_1)$ и $H_{ST_f}^{(A)}(t_1)$ можно записать как

$$H_{ST}^{(F)}(t_1) = e^{-\imath\Omega t_1} a B^+(t_1) + e^{\imath\Omega t_1} a^+ B(t_1),$$
$$H_{ST_f}^{(A)}(t_1) = e^{-\imath\Omega_0 t_1} R_f^- A_f^+(t_1) + e^{\imath\Omega_0 t_1} R_f^+ A_f^-(t_1).$$

Подстановка этих выражений в уравнения (150), (151) позволяет исключить переменные термостатов. Соответствующие выкладки проводятся совершенно аналогично выкладкам из задачи 4. Для простоты будем считать, что статистический оператор полевого резервуара $\rho_T^{(F)}$ соответствует состоянию равновесия при температуре T_F. В таком случае уравнение (150) приводится к виду, аналогичному уравнению (146)

$$\left(\frac{\partial\rho_S(t)}{\partial t}\right)_F = \imath\Delta\Omega[\rho_S(t)\,, a^+a] -$$
$$-\frac{1}{2}\gamma\,\left\{\bar{n}_0\left(a\,a^+\rho_S(t) - 2\,a^+\rho_S(t)\,a + \rho_S(t)\,a\,a^+\right) + \right. \tag{152}$$
$$\left. +(\bar{n}_0+1)\left(a^+a\,\rho_S(t) - 2\,a\,\rho_S(t)\,a^+ + \rho_S(t)\,a^+a\right)\right\}.$$

Формула (152) отличается от (146) видом первого слагаемого в правой части, что связано с выбором гамильтониана $H_{ST}^{(F)}$ в более сложном виде и некоммутируемостью операторов B и B^+ Сдвиг частот $\Delta\Omega$ в формуле (152) определяется формулой

$$\Delta\Omega = \Omega - \frac{1}{\hbar^2}\,\mathrm{Im}\int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{(\imath\Omega_0+\varepsilon)t}\langle[B, B^+(t)]\rangle_T.$$

При вычислении вклада от взаимодействия атомов с резервуарами оставим только корреляционные функции $\langle A_f^+ A_f^-(t_1)\rangle_T$ и $\langle A_f^-(t_1) A_f^+\rangle_T$, описывающие "резонансное" взаимодействие между активными атомами и резервуарами. Тогда выражение (151) сводится к

$$\left(\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t}\right)_f = \imath\Delta\omega[\rho_S(t)\,, R_f^z] - \gamma_\perp \left\{\frac{1}{2}\rho_S(t) - 2R_f^z\rho_S(t)R_f^z\right\} - \tag{153}$$

$$-\gamma_\uparrow \left\{\frac{1}{4} + R_f^z\rho_S(t)R_f^z - \frac{1}{2}\left(R_f^z\,\rho_S(t) + \rho_S(t)R_f^z\right) - R_f^+\rho_S(t)R_f^-\right\} -$$

$$-\gamma_\downarrow \left\{\frac{1}{4} + R_f^z\rho_S(t)R_f^z - \frac{1}{2}\left(R_f^z\,\rho_S(t) + \rho_S(t)R_f^z\right) - R_f^-\rho_S(t)R_f^+\right\}.$$

Величина $\Delta\omega$ определяется как

$$\Delta\omega = -\frac{1}{\hbar^2}\ \mathrm{Im}\int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{(\imath\Omega_0+\varepsilon)t}\langle(A_f^+ A_f^-(t) + A_f^-(t)R_f^+)\rangle_T$$

и представляет собой поправку к частоте атомного перехода. Релаксационные параметры определяются выражениями

$$\gamma_\uparrow = \frac{2}{\hbar^2}\ \mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{(\imath\Omega_0+\varepsilon)t}\langle(A_f^+ A_f^-(t)\rangle_T,$$

$$\gamma_\downarrow = \frac{2}{\hbar^2}\ \mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{(\imath\Omega_0+\varepsilon)t}\langle(A_f^-(t) A_f^+\rangle_T,$$

$$\gamma_\perp = \frac{1}{2}(\gamma_\uparrow + \gamma_\downarrow) + \frac{1}{\hbar^2}\ \mathrm{Re}\int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{(\imath\Omega_0+\varepsilon)t}\langle A_f^z A_f^z(t)\rangle_T.$$

Решения уравнений весьма сложны, поэтому мы лишь выясним физический смысл входящих в них релаксационных констант. Если предположить, что каждый атом взаимодействует только со своим термостатом, то для матричных элементов редуцированной матрицы плотности f-го атома из (152), (153) легко можно получить следующие уравнения:

$$\frac{d\rho_{11}^{(f)}(t)}{dt} = -\frac{d\rho_{22}^{(f)}(t)}{dt} = -\gamma_\uparrow\rho_{11}^{(f)}(t) + \gamma_\downarrow\rho_{22}^{(f)}(t), \tag{154}$$

$$\frac{d\rho_{12}^{(f)}(t)}{dt} = \left(\frac{d\rho_{21}^{(f)}(t)}{dt}\right)^* = -\imath(\Omega_0 + \Delta\omega)\rho_{12}^{(f)}(t) - \gamma_\perp\rho_{12}^{(f)}(t). \tag{155}$$

Из уравнений (154), (155) видно, что релаксационная константа $\gamma_\uparrow$ определяет скорость переходов из основного состояния атомов в возбужденное состояние под действием резервуара. Константа $\gamma_\downarrow$ определяет скорость затухания возбужденного состояния. Наконец, член с константой поперечной релаксации $\gamma_\perp$ описывает затухание квантовой когерентности между различными квантовыми состояниями атома.

Найдем стационарные решения уравнений (154), (155). Учитывая условие нормировки $\rho_{11}^{(f)} + \rho_{22}^{(f)} = 1$, получаем стационарные матрицы плотности двухуровневых атомов

$$\rho_{11}^{(f)} = \frac{\gamma_\downarrow}{\gamma_\parallel}, \quad \rho_{22}^{(f)} = \frac{\gamma_\uparrow}{\gamma_\parallel}, \quad \rho_{12}^{(f)} = \rho_{21}^{(f)} = 0,$$

где $\gamma_\parallel = \gamma_\uparrow + \gamma_\downarrow$ - константа продольной релаксации. Величина

$$\Delta_0 = \rho_{22}^{(f)} - \rho_{11}^{(f)} = \frac{(\gamma_\uparrow - \gamma_\downarrow)}{\gamma_\parallel}$$

называется параметром накачки. Для возникновения лазерного эффекта необходимо, чтобы величина Δ_0 была положительной. Если предположить, что состояние атомных резервуаров характеризуется некоторой температурой, то для параметра накачки можно получить простое выражение

$$\Delta_0 = -\tanh\left(\frac{\hbar\Omega_0}{2kT_A}\right) \tag{156}$$

Параметр накачки положителен, если температура атомных резервуаров отрицательна. Состояние с отрицательной температурой является неравновесным и может быть реализовано только в открытой системе благодаря потоку энергии от других систем. В реальных лазерах неравновесное стационарное состояние обеспечивается накачкой.

4.2. Задачи для самостоятельной работы

1. Вывести из уравнения Лиувилля с источником (113) обобщенное уравнение Цванцига.

2. Используя метод проекционного оператора, вывести основное кинетическое уравнение двухуровневого атома в неидеальном резонаторе, если неидеальность резонатора обусловлена спонтанным излучением атома в моды внешнего термостата. Гамильтониан взаимодействия атома с термостатом выбрать

в виде [5-7]:

$$\sum_k \hbar g_k (R^- b_k^+ + R^+ b_k),$$

где $b_k^+(b_k)$ – операторы рождения (уничтожения) фононных мод термостата. Термостат находится в вакуумном состоянии.

3. Записать обобщенное кинетическое уравнение Цванцига (110) в представлении взаимодействия.

4. Вывести формулу (156) для параметра накачки одномодового лазера.

5.* Используя метод проекционного оператора, вывести уравнения Блоха для релаксации системы спинов 1/2 [4].

Заключение

Таким образом, в настоящем учебном пособии представлены материалы для самостоятельной работы студентов физического факультета при изучении курса неравновесной статистической физики. В силу ограниченности объема в пособии не рассматриваются некоторые широко известные методы неравновесной квантовой статистики: неравновесного статистического оператора Зубарева, температурных мацубаровских функций Грина, исключения бозонных переменных и некоторые другие. Указанные методы подробно изложены в монографиях, указанных в списке литературы к лекционному курсу. Методу исключения бозонных переменных будет посвящено отдельное учебное пособие, подготовленное в издательстве "Самарский университет".

Авторы благодарны чл.-корр. РАН, проф. Н.Н. Боголюбову-мл., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАЕН, проф. В.В. Самарцеву, проф. А.С. Шумовскому, д.ф.-м.н. В.И. Юкалову, д.ф.-м.н. С.Н. Андрианову за совместные многолетние исследования в области неравновесной квантовой статистической физики и ее приложений к физике твердого тела и квантовой оптике.