Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

К. Гокке, Г. Репке, Основное кинетическое уравнение для приведенного статистического оператора атома в плазме, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 31–62

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6150>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.91.87.62

26 апреля 2023 г., 15:01:20

© 2008 г.

К. Гокке*, Г. Рёпке*

ОСНОВНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПРИВЕДЕННОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА АТОМА В ПЛАЗМЕ

С использованием неравновесного уравнения Лиувилля выведено основное кинетическое уравнение для приведенного статистического оператора в термостате, представляющем многочастичное окружение. В случае слабой связи между системой и термостатом рассмотрена аппроксимация Борна–Маркова основного кинетического уравнения и произведено сравнение результатов, полученных в различных подходах. Основное кинетическое уравнение подробно исследовано для специального случая атома, рассматриваемого как подсистема в плазменном окружении. Найден динамический структурный фактор, определяющий влияние плазмы на подсистему. Операторное основное кинетическое уравнение рассмотрено в представлении атомных состояний и в представлении фазового пространства, что соответствует двум предельным случаям: квантово-механическому поведению, аналогичному поведению изолированного атома для низколежащих сильно связанных уровней, и квазиклассическому поведению для сильно возбужденных уровней Ридберга.

Ключевые слова: неравновесный статистический оператор, приведенный статистический оператор, квантовое основное кинетическое уравнение, квантовое броуновское движение, открытые квантовые системы, декогерентность, атомы Ридберга, сверххолодная плазма.

1. ВВЕДЕНИЕ

Открытые квантовые системы в последнее время стали предметом возрастающего интереса исследователей [1]–[3]. С фундаментальной точки зрения взаимодействие квантовой системы с термостатом позволяет описывать необратимые процессы и вычислять характеристики декогерентности [4]–[6]. С другой стороны, недавние экспериментальные исследования [7]–[10] позволяют проследить за дефазировкой квантового состояния и вычислить скорости переходов и времена жизни.

*University of Rostock, FB Physik, Rostock, Germany.
E-mail: gerd.roepke@uni-rostock.de

Такие мезоскопические системы, как квантовые точки, кластеры, наноконтуры находятся на границе между макроскопическим классическим миром и квантовыми явлениями [11], [12]. Таким образом, переход к классическому описанию представляет собой один из наиболее интригующих вопросов квантовой физики. Возможное решение этой задачи можно получить, исследуя взаимодействие с термостатом [1], [3]. Родственные задачи, в частности, интерпретация квантово-механических измерений, также рассматриваются как коллапс волновой функции, описывать который следует, задавая взаимодействие с термостатом [2], [13], [14].

Новая концепция состоит во введении жестких (robust) состояний, которые образуют оптимальный базис для представления статистического оператора с помощью матрицы плотности [1], [15]. Декогерентность возникает как затухание недиагональных элементов.

Хорошо изученным примером служит свободное движение, для которого имеет место броуновское поведение [16]–[18]. В этом случае волновая функция частиц локализуется за счет взаимодействия с термостатом, что приводит к смешанному состоянию волновых пакетов. Таким образом, квазиклассическое описание, используемое при численных расчетах в молекулярной динамике, также становится фундаментальным, по крайней мере для тяжелых компонент [19], [20].

Большой интерес представляют связанные состояния в термостате, в частности, водородоподобные состояния. Сильно возбужденные состояния, так называемые состояния Ридберга, лежат на границе между квантовым и классическим описаниями [21], [22]. Поэтому формулировка квантового основного кинетического уравнения для состояний Ридберга представляет собой интересное применение концепции открытых систем. Цель раздела 2 – вывести квантовое основное кинетическое уравнение для внесенных в плазму атомов водорода с использованием подхода Зубарева к теории неравновесных процессов [5], [6].

В модели ридберговой плазмы [23]–[25] атомы в высоковозбужденных состояниях помещены в плазму, состоящую из электронов и ионов. Таким образом, при описании процессов дефазировки представляют интерес не только взаимодействие с полем излучения [27], [26] и дипольное взаимодействие между атомами Ридберга [28], но и кулоновское взаимодействие с окружением из заряженных частиц. Это будет показано в разделе 3, где введен динамический структурный фактор и выписана линдбладова форма для случая броуновского движения. Представление в атомных собственных состояниях рассмотрено в разделе 4.

Временная эволюция ридберговой плазмы определяется такими микроскопическими процессами, как столкновения или возбуждения в плазме. Квазиклассический подход успешно описывает процессы рассеяния, в частности, переходы из-за столкновений с электронами [29], [30]. О применении квантового основного кинетического уравнения к этим процессам, недавно представленном авторами работ [31], [32], кратко упоминается в разделе 5. Другие применения, например, использование ридберговых состояний в квантовом компьютере, важны для современных экспериментальных исследований [33], но в настоящей работе не затрагиваются.

2. ОСНОВНОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПРИВЕДЕННОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА

2.1. Неравновесные процессы в открытых квантовых системах. Рассмотрим неравновесную квантовую систему S , описываемую статистическим оператором $\rho_S(t)$. Средние значения любых наблюдаемых A системы в момент времени t имеют вид

$$\langle A \rangle_S^t = \text{Tr}\{\rho_S(t)A\}. \quad (1)$$

Знание $\rho_S(t)$ позволяет проследить за эволюцией системы, т.е. вычислить средние в любой момент времени, поэтому вывод уравнения движения для статистического оператора системы, которое дает возможность для заданных начальных условий вычислить эволюцию $\rho_S(t)$, представляет значительный интерес.

Для замкнутой изолированной системы S уравнение движения является уравнением фон Неймана

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}_S \right) \rho_S^{\text{isol}}(t) = 0, \quad (2)$$

где $\mathcal{L}_S$ – оператор Лиувилля изолированной системы,

$$i\mathcal{L}_S A = \frac{1}{i\hbar} [A, H_S]. \quad (3)$$

Однако можно показать, что решения этого уравнения не могут описывать неравновесные процессы, поскольку энтропия системы, определенная как

$$S^{\text{isol}}(t) = \langle \ln \rho_S^{\text{isol}}(t) \rangle_S^t, \quad (4)$$

является интегралом движения, если $\rho_S^{\text{isol}}(t)$ – решение уравнения (2). Общий подход к преодолению этой проблемы, предложенный Зубаревым [6], состоит во введении в уравнение движения (2) слагаемого с инфинитезимальным источником с целью учета принципа Боголюбова ослабления начальных корреляций.

Происхождение источника, нарушающего симметрию относительно обращения времени, можно проследить более подробно, если рассмотреть открытую систему, взаимодействующую с окружением. Идеальная изоляция системы в принципе невозможна, и нам всегда приходится рассматривать взаимодействие с окружением. Тогда окружение и рассматриваемую систему можно объединить в единую систему. Можно показать, что из-за дополнительного взаимодействия с окружением получается другое уравнение движения для $\rho_S(t)$, которое называется квантовым основным кинетическим уравнением. Мы приведем главные черты вывода этого уравнения для открытых систем, используя метод неравновесного статистического оператора Зубарева. Основная идея этого подхода состоит в рассмотрении эволюции полной системы после ее разложения на рассматриваемую систему S , включающую соответствующие степени свободы, и окружение B . Предполагается, что микросостояния последнего не являются существенными для описания системы S ; окружение влияет на состояние системы только через усредненные свойства, такие как термостат или внешнее классическое поле. Подробности можно найти в учебниках [4]–[6].

Разложение полной системы на редуцированную систему S , которой мы интересуемся, и окружение B влечет за собой разложение гамильтониана на три слагаемых:

$$H = H_S + H_B + V_I, \quad (5)$$

где H_S – гамильтониан редуцированной системы, H_B – гамильтониан окружения, а V_I описывает взаимодействие между редуцированной системой и окружением. При этом существенно, что редуцированная система и окружение рассматриваются по-разному. После интегрирования по переменным окружения из статистического оператора $\rho(t)$ полной системы находится распределение для редуцированной системы

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B\{\rho(t)\}, \quad (6)$$

которое описывает все ее “доступные” свойства. Размерность оператора $\rho_S(t)$ определяется теми же степенями свободы, что и для статистического оператора изолированной системы, но получающиеся распределения соответствующих решений могут существенным образом измениться. Предполагается, что сама редуцированная система не изменяет состояния окружения, поэтому в главном приближении окружение можно описать равновесным статистическим оператором ρ_B . Поскольку мы имеем полную информацию о редуцированной системе, с одной стороны, и только глобальную информацию о переменных окружения, с другой стороны, релевантный статистический оператор задается в виде прямого произведения:

$$\rho_{\text{rel}}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_B. \quad (7)$$

Это означает, что релевантный статистический оператор не описывает корреляции между редуцированной системой и окружением.

Соответствующий статистический оператор не совпадает со статистическим оператором $\rho(t)$, потому что он не является решением уравнения Лиувилля–фон Неймана. Согласно Зубареву [4] (см. также [34]), он может служить начальным условием при решении уравнения Лиувилля–фон Неймана

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}_S + i\mathcal{L}_B + i\mathcal{L}_I \right) \rho(t) = -\epsilon \{ \rho(t) - \rho_S(t) \rho_B \}. \quad (8)$$

Здесь дополнительные операторы Лиувилля задаются так:

$$i\mathcal{L}_B A = \frac{1}{i\hbar} [A, H_B], \quad i\mathcal{L}_I A = \frac{1}{i\hbar} [A, H_I]. \quad (9)$$

Согласно Зубареву вместо нуля правая часть уравнения (8) содержит член с инфинитезимальным источником: $\epsilon \rightarrow 0$ после взятия термодинамического предела. Это означает, что момент времени, при котором задается начальное условие вида (7) (статистическая независимость системы и окружения), сдвигается к $-\infty$. Однако в результате динамической эволюции возникают полные корреляции между редуцированной системой и окружением, содержащиеся в несущественной части $\rho(t) - \rho_{\text{rel}}(t)$. Таким образом, $\rho(t)$ содержит обратную реакцию редуцированной системы на окружение. В силу выбора знака для $\epsilon \rightarrow 0^+$ отбирается запаздывающее решение. Подробности см. в книгах [4]–[6].

2.2. Уравнение Цванцига. Предполагая, что при $t \rightarrow -\infty$ справедливо равенство (7), согласно которому переменные системы и термостата в далеком прошлом не запутаны, а зависящие от времени состояния термостата известны, можно вывести замкнутое уравнение эволюции для $\rho_S(t)$. Мы полагаем, что в уравнении (8) термостат не изменяется с течением времени, в частности, имеет место стационарное (равновесное) распределение: $i\mathcal{L}_B\rho_B = 0$.

Чтобы вывести замкнутое уравнение для приведенного статистического оператора $\rho_S(t)$, надо исключить несущественную часть $\Delta\rho(t) = \rho(t) - \rho_S(t)\rho_B$, которая описывает статистическую зависимость между редуцированной системой и окружением. Без ограничения общности можно полагать, что среднее от взаимодействия V_I по конфигурациям окружения обращается в нуль,

$$\langle V_I \rangle_B = \text{Tr}_B\{V_I\rho_B\} = 0, \quad (10)$$

т.е. окружение в среднем не оказывает воздействия на редуцированную систему. Если возникают ненулевые средние, их можно учесть, сделав замены $H_S \rightarrow H_S + \langle V_I \rangle_B$ и $V_I \rightarrow V_I - \langle V_I \rangle_B$.

Взятие среднего по конфигурациям окружения в (8) дает

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}_S\right)\rho_S(t) = -\text{Tr}_B\{i\mathcal{L}_I\rho(t)\}. \quad (11)$$

В силу определения ρ_S (6) правая часть равенства (8) после взятия следа обращается в нуль. Для вычисления следа в (11) надо исключить вклад от несущественной части $\Delta\rho(t)$ статистического оператора. В уравнении движения

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta\rho(t) = \frac{\partial\rho(t)}{\partial t} - \frac{\partial\rho_S(t)}{\partial t}\rho_B \quad (12)$$

заменим $\partial\rho(t)/\partial t$ и $\partial\rho_S(t)/\partial t$ соответственно на (8) и (11), что дает

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \epsilon\right)\Delta\rho(t) = -(i\mathcal{L}_S + i\mathcal{L}_B + i\mathcal{L}_I)\rho(t) + i\mathcal{L}_S\rho_S(t)\rho_B + \rho_B \text{Tr}_B\{i\mathcal{L}_I\rho(t)\}. \quad (13)$$

Статистический оператор $\rho(t)$ в первом и последнем слагаемых правой части последнего уравнения разлагается на релевантный оператор $\rho_S(t)\rho_B$ и несущественную часть $\Delta\rho(t)$. Для релевантного оператора имеем: после сокращения со вторым слагаемым в первом остается только $i\mathcal{L}_I\rho_S(t)\rho_B$; равенство нулю вклада от релевантного статистического оператора в последний член уравнения (13),

$$\rho_B \text{Tr}_B\{i\mathcal{L}_I\rho_B\}\rho_S(t) = 0, \quad (14)$$

имеет место в силу равенства (10) для следа. Вклад от несущественной части $\Delta\rho(t)$ статистического оператора,

$$\rho_B \text{Tr}_B\{i\mathcal{L}_I\Delta\rho(t)\} = \mathcal{P}i\mathcal{L}_I\Delta\rho(t), \quad (15)$$

можно выразить, используя проекционный супероператор $\mathcal{P}$, введенный в [35]–[37] и определяемый как

$$\mathcal{P}A = \rho_B \text{Tr}_B\{A\}. \quad (16)$$

Этот оператор обладает такими свойствами: $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$, $\mathcal{P}\rho(t) = \rho_S(t)\rho_B$, $\mathcal{P}\Delta\rho(t) = 0$. Введем дополнительный проекционный оператор $\mathcal{Q} = (\mathcal{I} - \mathcal{P})$, где $\mathcal{I}$ – тождественный оператор. Разделяя существенную и несущественную части, из уравнения (13) получаем, что $\Delta\rho(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}_S + i\mathcal{L}_B + \mathcal{Q}i\mathcal{L}_I\mathcal{Q} + \epsilon \right) \Delta\rho(t) = -i\mathcal{L}_I\rho_S(t)\rho_B. \quad (17)$$

Учитывая граничное условие $\rho(t) \rightarrow \rho_S(t)\rho_B$, т.е. $\Delta\rho(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$, решение можно записать в виде

$$\Delta\rho(t) = - \int_{-\infty}^t dt' e^{-(t-t')(i\mathcal{L}_S+i\mathcal{L}_B+\mathcal{Q}i\mathcal{L}_I\mathcal{Q}+\epsilon)} i\mathcal{L}_I\rho_S(t')\rho_B. \quad (18)$$

Исключая $\Delta\rho(t)$ из (11) и учитывая, что по аналогии с уравнением (14) существенный член в правой части (11) обращается в нуль, получаем уравнение движения для приведенного статистического оператора

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}_S \right) \rho_S(t) = \int_0^\infty d\tau \mathcal{R}(\tau) \rho_S(t - \tau), \quad (19)$$

которое отличается от уравнения фон Неймана наличием интегрального члена, связанного с влиянием окружения.

Уравнение движения (19) для приведенного статистического оператора $\rho_S(t)$ является строгим результатом для модели любой системы, взаимодействующей с окружением. Мы предполагали только, что окружение находится в стационарном состоянии, свойства которого не зависят от состояния редуцированной системы. Однако ядро интеграла в (19),

$$\mathcal{R}(\tau) = e^{-\epsilon\tau} \text{Tr}_B \{ i\mathcal{L}_I e^{-i\tau(\mathcal{L}_S+\mathcal{L}_B+\mathcal{Q}i\mathcal{L}_I\mathcal{Q})} i\mathcal{L}_I \rho_B \}, \quad (20)$$

имеет сложный вид и не может быть рассчитано в общем случае. Для гамильтонианов специального вида можно продвинуться в вычислениях, используя интегралы по траекториям [3]. Для поиска решения уравнения эволюции (19) применяются также численные методы. Модель линейного взаимодействия между системой и термостатом рассматривается ниже.

Аналогичное (19) уравнение, описывающее эволюцию при $t > t_0$, было выведено Цванцигом [38]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{P}i\mathcal{L} \right) \rho_{\text{rel}}(t) = \int_{t_0}^t d\tau \mathcal{P}i\mathcal{L} e^{i(\tau-t)\mathcal{Q}\mathcal{L}} \mathcal{Q}i\mathcal{L} \rho_{\text{rel}}(\tau). \quad (21)$$

В начальный момент времени t_0 предполагается, что несущественная часть статистического оператора обращается в нуль. Если это не так, то следует ввести дополнительный член, описывающий временную эволюцию несущественной начальной конфигурации [39]. Для того чтобы связать уравнение (21) с уравнением (19), надо предположить стационарность ρ_B .

Такое представление в начальный момент времени t_0 , когда система и термостат распутаны, т.е. $\rho(t_0) = \rho_S(t_0)\rho_B$, может привести к нефизическим свойствам, например, к начальным колебаниям, зависящим от t_0 , или нефизичному поведению при $t < t_0$. В рамках метода неравновесного статистического оператора [4]–[6] приведенная в настоящей работе формулировка уравнения (8) лишена этих недостатков. Знак ϵ выбирается так, что выделяется запаздывающее решение уравнения Лиувилля–фон Неймана.

Окружение содержит “несущественные” степени свободы, которые влияют на эволюцию редуцированной системы только посредством члена с взаимодействием V_I . Однако они могут стать важными при определении базиса для приведенного статистического оператора ρ_S , когда производится диагонализация, связанная с процессом декогерентности.

2.3. Пертурбативное разложение основного кинетического уравнения.

Выведенное выше уравнение движения для статистического оператора ρ_S (19) служит прообразом основного кинетического уравнения. В общем случае строгое решение невозможно, поэтому требуются приближения. Мы рассмотрим борновское приближение для основного кинетического уравнения модели система–термостат.

В борновском приближении рассматривается случай слабого взаимодействия V_I , в силу чего членом $\mathcal{Q}\mathcal{L}_I\mathcal{Q}$ в показателе экспоненты в ядре (20) можно пренебречь по сравнению с остальными вкладами. Остающийся след имеет второй порядок по потенциалу взаимодействия.

Более того, мы предполагаем, что эффект памяти в уравнении (19) также мал, а потому основное кинетическое уравнение имеет марковский вид; это оправданно во многих приложениях. С учетом соотношений

$$\rho_S(t - \tau) \approx e^{i\tau\mathcal{L}_S}\rho_S(t), \quad e^{i\tau\mathcal{L}_B}\rho_B = \rho_B, \quad (22)$$

второе из которых следует из стационарности ρ_B , след подынтегрального выражения в борновском приближении можно переписать в виде

$$\text{Tr}_B\{i\mathcal{L}_I e^{-i\tau(\mathcal{L}_S+\mathcal{L}_B)} i\mathcal{L}_I e^{i\tau(\mathcal{L}_S+\mathcal{L}_B)} \rho_S(t)\rho_B\}. \quad (23)$$

Учитывая определение оператора Лиувилля для взаимодействия $i\mathcal{L}_I$ (см. равенства (9)), а также соотношение

$$e^{-i\tau(\mathcal{L}_S+\mathcal{L}_B)} A = e^{-i\tau(H_S+H_B)/\hbar} A e^{i\tau(H_S+H_B)/\hbar}, \quad (24)$$

получаем основное кинетическое уравнение во втором порядке по потенциалу взаимодействия V_I :

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\rho_S(t), H_S] = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \text{Tr}_B\{[V_I, [V_I(-\tau), \rho_S(t)\rho_B]]\}. \quad (25)$$

Здесь

$$V_I(\tau) = e^{i\tau(H_S+H_B)/\hbar} V_I e^{-i\tau(H_S+H_B)/\hbar}. \quad (26)$$

Если записать коммутаторы в уравнении (25) в явном виде, получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_S(t), H_S] = & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} [\langle V_I V_I(-\tau) \rangle_B \rho_S(t) + \rho_S(t) \langle V_I(-\tau) V_I \rangle_B - \\ & - \text{Tr}_B \{ V_I \rho_S(t) \rho_B V_I(-\tau) + V_I(-\tau) \rho_S(t) \rho_B V_I \}]. \end{aligned} \quad (27)$$

Основное кинетическое уравнение в приближении Борна–Маркова является уравнением для операторов, действующих в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_S$ редуцированной системы. Усреднение по состояниям термостата следует проводить на различных временных шагах. Упрощение возникает в случае, когда взаимодействие имеет вид прямого произведения, $V_I = V_S \otimes V_B$, как можно полагать во многих примерах. Здесь V_S действует в гильбертовом пространстве редуцированной системы $\mathcal{H}_S$, а V_B – в гильбертовом пространстве окружения $\mathcal{H}_B$. Таким образом, можно предполагать, что V_S и V_B коммутируют, кроме того, V_S коммутирует с гамильтонианом термостата H_B , а V_B – с гамильтонианом редуцированной системы H_S . Используя коммутационные свойства и инвариантность следа относительно циклических перестановок, можно разделить вклады системы и термостата в правой части уравнения (27) и переписать его в виде

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} [V_S V_S(-\tau) \rho_S(t) \langle V_B V_B(-\tau) \rangle_B + \rho_S(t) V_S(-\tau) V_S \langle V_B(-\tau) V_B \rangle_B - \\ - V_S \rho_S(t) V_S(-\tau) \langle V_B(-\tau) V_B \rangle_B - V_S(-\tau) \rho_S(t) V_S \langle V_B V_B(-\tau) \rangle_B]. \end{aligned} \quad (28)$$

Таким образом, в основном кинетическом уравнении влияние окружения задается автокорреляционными функциями $\langle V_B V_B(-\tau) \rangle_B$ и $\langle V_B(-\tau) V_B \rangle_B$. Для дальнейшего рассмотрения основного кинетического уравнения целесообразно ввести преобразование Фурье корреляционных функций. Определим обобщенную спектральную плотность $J_{V_B V_B}(\omega)$ равенством [6]

$$\langle V_B V_B(\tau) \rangle_B = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J_{V_B V_B}(\omega) e^{-i\omega\tau}. \quad (29)$$

В случае теплового равновесия спектральная плотность удовлетворяет условию детального равновесия

$$J_{V_B V_B}(-\omega) = e^{\beta\hbar\omega} J_{V_B V_B}(\omega), \quad (30)$$

где $\beta = (k_B T)^{-1}$ – обратная температура. Используя выражение для спектральной плотности, запишем правую часть (27) как

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega J_{V_B V_B}(\omega) \left\{ \int_0^\infty d\tau e^{i(\omega+i\epsilon)\tau} [V_S V_S(-\tau) \rho_S(t) - V_S(-\tau) \rho_S(t) V_S] + \right. \\ \left. + \int_0^\infty d\tau e^{-i(\omega-i\epsilon)\tau} [\rho_S(t) V_S(-\tau) V_S - V_S \rho_S(t) V_S(-\tau)] \right\}. \end{aligned} \quad (31)$$

Это выражение представляет особый интерес, если зависимость от времени задана в алгебраическом виде и можно взять интеграл по $d\tau$. Такая зависимость возникает, например, при использовании вторичного квантования для наблюдаемых редуцированной системы. В разделе 3 мы в качестве специального примера рассмотрим основное кинетическое уравнение для атома, взаимодействующего с различными окружениями.

3. ПРИМЕНЕНИЕ К АТОМАМ В МНОГОЧАСТИЧНОМ ОКРУЖЕНИИ

3.1. Борновско-марковское основное кинетическое уравнение для атома в плазме. В этом разделе основное кинетическое уравнение (25) для приведенных статистических операторов, выведенное в общем виде с использованием приближения Борна–Маркова, применяется к связанным состояниям в многочастичном окружении. Хотя мы имеем в виду, что взаимодействие атома с плазмой описывается кулоновским потенциалом, большая часть наших рассуждений остается верной и в значительно более общем случае. Для гамильтониана атома мы используем выражение (μ – приведенная масса, e – заряд электрона)

$$H_A = H_0 + U(|\mathbf{R}|) = \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{R}|}, \quad (32)$$

записанное в относительных координатах. В адиабатическом приближении движением центра масс можно пренебречь. Для однокомпонентной плазмы (при скомпенсированном заряде) гамильтониан многочастичного окружения имеет вид

$$H_B = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (33)$$

Вводя оператор координаты атома $\mathbf{R}$ и операторы координат частиц окружения $\mathbf{r}_i$, выразим кулоновский потенциал взаимодействия между атомом и плазмой как

$$V_I = \sum_{i=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|}. \quad (34)$$

Подставляя эти операторы в борновско-марковское основное кинетическое уравнение (25), можно вычислить эволюцию оператора атомной плотности, представляющего собой приведенный оператор плотности атома в плазме. В рамках такого подхода можно описывать полную квантово-механическую динамику, в том числе процессы перехода и декогерентности. В настоящей работе нас особенно интересует динамика сильно возбужденных атомов.

В дальнейшем для решения основного кинетического уравнения мы используем представление вторичного квантования. Исходя из уравнения (25) мы должны преобразовать оператор (26) взаимодействия в картине Дирака к его вторично-квантованному виду. Для редуцированной системы рассматриваются собственные состояния изолированных систем, в случае атома – связанные состояния водорода $|\alpha\rangle$, где α выражает набор атомных квантовых чисел n, l, m . В дальнейших рассуждениях мы пренебрегаем ионизацией и рассматриваем только связанные состояния при $E_\alpha < 0$. Согласно стандартной процедуре многочастичной теории [40] для частиц плазмы используются плоские волны $|\mathbf{k}\rangle$, дающие точное решение для свободных частиц. Таким образом, оператор взаимодействия в картине Шредингера имеет вид

$$V_I = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha, \alpha'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \alpha, \alpha'} \sigma_{\alpha', \alpha}^+ c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}'}, \quad (35)$$

где $c_{\mathbf{k}}^+$, и $c_{\mathbf{k}'}$ – операторы рождения и уничтожения частиц плазмы, соответственно, а $\sigma_{\alpha'\alpha} = |\alpha\rangle\langle\alpha'|$ – оператор в гильбертовом пространстве атома, который преобразует собственное состояние $|\alpha'\rangle$ в другое состояние $|\alpha\rangle$. Тогда соответствующий матричный элемент оператора взаимодействия можно вычислить по формуле

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\alpha,\alpha'} = \sum_{i=1}^N \int d^3\mathbf{R} d^3\mathbf{r}_i V(|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{R}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{R}) \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_i) \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_i). \quad (36)$$

Он содержит волновые функции (водорода) $\psi_{\alpha}(\mathbf{R}) = \langle \mathbf{R} | \alpha \rangle = R_{nl}(R) Y_{lm}(\theta, \phi)$ и плоские волны $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_i) = \langle \mathbf{r}_i | \mathbf{k} \rangle = \Omega^{-1/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}$ частиц окружения, где Ω обозначает нормировочный объем. С помощью преобразования Фурье

$$V(|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} V_q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_i)} \quad (37)$$

интегралы в равенстве (36) разделяются. Для оператора взаимодействия в картине Шредингера получаем окончательное вторично-квантованное выражение

$$V_I = \frac{N}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \alpha, \alpha'} V_q F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) \sigma_{\alpha'\alpha} c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}, \alpha, \alpha'} V_q F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) \sigma_{\alpha'\alpha} \rho_{\mathbf{q}}. \quad (38)$$

Оно содержит атомный формфактор, определяемый как

$$F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) = \langle \alpha | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} | \alpha' \rangle = \int d^3\mathbf{R} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{R}) \psi_{\alpha'}(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}. \quad (39)$$

Кроме того, в (38) введен оператор плотности во вторичном квантовании окружения $\rho_{\mathbf{q}} = N \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{k}}$; его не следует путать со статистическим оператором окружения ρ_B . При вычислении матричных элементов плоской волны использовано соотношение $\int d^3\mathbf{r}_i e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i} = \Omega \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}}$. В результате оператор взаимодействия, определяемый кулоновским потенциалом, в равенстве (38) можно разделить на операторную часть $V_A = \sigma_{\alpha'\alpha}$ в гильбертовом пространстве редуцированной системы (атома), (операторнозначную) часть $V_B = \rho_{\mathbf{q}}$ в гильбертовом пространстве окружения и соответствующий матричный элемент V_q . Это типичная структура взаимодействия – плотность – плотность.

В другом случае массивная частица, представляющая собой редуцированную систему, взаимодействует с окружением, заданным в виде поля излучения (см. работу [6]). Указанное взаимодействие имеет структуру плотность – смещение, причем определяемая окружением часть оператора взаимодействия пропорциональна оператору координаты поля: $V_B \sim \hat{\mathbf{r}} \sim a_1 \hat{b}^+ + a_2 \hat{b}$. Во вторичном квантовании она преобразуется в сумму лестничных операторов $\hat{b}$ и $\hat{b}^+$. Приведенные ниже рассуждения применимы, вообще говоря, и к взаимодействиям такого типа. В связи с этим обычно пренебрегают членами, пропорциональными $\hat{b}^+ \hat{b}^+$ или $\hat{b} \hat{b}$, которые возникают в операторе V_B^2 [26], [41]. Таким образом, остаются слагаемые, пропорциональные только $\hat{b}^+ \hat{b}$ или $\hat{b} \hat{b}^+$. Эта аппроксимация известна как приближение вращающейся волны.

В неунитарных членах в правой части (25) атомная и связанная с окружением части оператора взаимодействия во вторичном квантовании (38) разделяются. Следовательно, временную зависимость в картине Дирака в (26) также можно разделить, поскольку гамильтонианы атома H_A и окружения H_B коммутируют. Таким образом, остаются операторы в картине взаимодействия $\sigma_{\alpha'\alpha}(-\tau) = e^{-iH_A\tau/\hbar}\sigma_{\alpha'\alpha}e^{iH_A\tau/\hbar} = \sigma_{\alpha'\alpha}e^{i\omega_{\alpha'\alpha}\tau}$ (мы использовали соотношения $\omega_{\alpha'\alpha} = (E_{\alpha'} - E_{\alpha})/\hbar$) и $\rho_{\mathbf{q}}(-\tau) = e^{-iH_B\tau/\hbar}\rho_{\mathbf{q}}e^{iH_B\tau/\hbar}$. Разлагая двойной коммутатор в уравнении (25), для правой части основного кинетического уравнения получаем

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \text{Tr}_B \{ [V_I, [V_I(-\tau), \rho_A(t)\rho_B]] \} = \\ & = -\frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}'} \sum_{\alpha, \alpha', \alpha'', \alpha'''} F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) F_{\alpha'''\alpha''}(\mathbf{q}') \times \\ & \times [\sigma_{\alpha'\alpha} \sigma_{\alpha'''\alpha''}(-\tau) \rho_A(t) \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}'}(-\tau) \rangle - \sigma_{\alpha'\alpha} \rho_A(t) \sigma_{\alpha'''\alpha''}(-\tau) \langle \rho_{\mathbf{q}'}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle - \\ & - \sigma_{\alpha'''\alpha''}(-\tau) \rho_A(t) \sigma_{\alpha'\alpha} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}'}(-\tau) \rangle + \rho_A(t) \sigma_{\alpha'''\alpha''}(-\tau) \sigma_{\alpha'\alpha} \langle \rho_{\mathbf{q}'}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle]. \quad (40) \end{aligned}$$

Взятие следа по состояниям окружения порождает корреляционную функцию плотность–плотность (или частица–дырка). Мы ввели обозначение $\text{Tr}_B \{ \cdot \rho_B \} = \langle \cdot \rangle$ и использовали циклическую инвариантность следа. В силу трансляционной инвариантности окружения корреляционные функции должны удовлетворять соотношению $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}'}(-\tau) \rangle = \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'}$. Тогда первое и третье слагаемые в квадратных скобках в (40) можно переписать как $\langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle = \langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle^*$. Вводя вещественную и мнимую части корреляционных функций, получаем комбинации коммутаторов и антикоммутаторов, которые использовались, например, в работах [42], [43].

В дальнейших вычислениях вместо корреляционных функций плотность–плотность мы будем использовать соответствующую спектральную плотность (N – число частиц)

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle \rho_{-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}(\tau) \rangle e^{-i\omega\tau}. \quad (41)$$

Вещественнозначная величина $S(\mathbf{q}, \omega)$ представляет собой хорошо известный *динамический структурный фактор* (ДСФ). Его свойства рассматриваются в следующем пункте. Используя ДСФ, перепишем величины во втором и четвертом членах и аналогично в первом и третьем членах в квадратных скобках в (40) следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle &= \langle \rho_{-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}(\tau) \rangle = N \int d\omega S(\mathbf{q}, \omega) e^{i\omega\tau}, \\ \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle &= \langle \rho_{\mathbf{q}}(\tau) \rho_{-\mathbf{q}} \rangle = N \int d\omega S(-\mathbf{q}, -\omega) e^{i\omega\tau}. \end{aligned}$$

Пренебрегая знаком $\mathbf{q}$, что возможно вследствие изотропности окружения, приводим неунитарную часть основного кинетического уравнения к виду (31). Теперь можно выполнить интегрирование по $d\tau$, поскольку зависимость атомной части оператора взаимодействия от времени тривиальна в силу использования представления

собственных состояний во вторичном квантовании,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega_{\alpha'''\alpha''} + \omega + i\epsilon)\tau} S(\mathbf{q}, \omega) = \\ = \pi S(\mathbf{q}, -\omega_{\alpha'''\alpha''}) + i\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{S(\mathbf{q}, \omega)}{\omega_{\alpha'''\alpha''} + \omega}. \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь $\mathcal{P} \int$ обозначает интеграл в смысле главного значения Коши. После интегрирования по $d\tau$ правая часть последнего равенства получается в результате применения тождества Дирака к полюсу, сдвинутому на $i\epsilon$. Таким образом, определен предельный переход $\epsilon \rightarrow 0$. Требование взятия этого предела после термодинамического предела сохраняется, поскольку при использовании ДСФ и средней плотности частиц окружения $n = N/\Omega$ остаются только интенсивные термодинамические величины. При этом суммирование по волновым числам также преобразуется в интегрирование: $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \Omega/(2\pi)^3 \int d^3\mathbf{q}$. Для простоты мы определим “комплексный структурный фактор” в полюсе:

$$\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\alpha'\alpha}) = S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha'\alpha}) + \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{S(\mathbf{q}, \omega)}{\omega_{\alpha'\alpha} - \omega}, \quad (43)$$

где более важной является вещественная часть $S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha'\alpha})$.

Квантовое основное кинетическое уравнение (25) теперь принимает окончательный вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_A(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_A(t), H_A] = -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \sum_{\alpha, \alpha', \alpha'', \alpha'''} \int d^3\mathbf{q} V_q^2 F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) F_{\alpha'''\alpha''}(-\mathbf{q}) \times \\ \times \{ \sigma_{\alpha'''\alpha} \rho_A(t) \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\alpha'''\alpha''}) \delta_{\alpha', \alpha''} + \rho_A(t) \sigma_{\alpha'''\alpha} \tilde{S}^*(-\mathbf{q}, -\omega_{\alpha'\alpha}) \delta_{\alpha', \alpha''} - \\ - \sigma_{\alpha'\alpha} \rho_A(t) \sigma_{\alpha'''\alpha''} [\tilde{S}^*(\mathbf{q}, -\omega_{\alpha'''\alpha''}) + \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\alpha'\alpha})] \}. \end{aligned} \quad (44)$$

Это уравнение не имеет явно линдбладава вида [44], который гарантировал бы, что собственные значения (атомного) приведенного статистического оператора положительны. Это свойство необходимо поэтому специально исследовать для тех случаев уравнения (44), которые рассматриваются ниже.

3.2. Динамические структурные факторы. ДСФ был определен равенством (41) как спектральная плотность корреляционной функции типа плотность–плотность:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{N} J_{\rho-\mathbf{q}\rho_{\mathbf{q}}}(\omega). \quad (45)$$

При этом использование ДСФ в приведенной выше формулировке квантового основного кинетического уравнения следует процедуре пункта 2.3, в результате которой неунитарные члены приводятся к виду (31). Эквивалентное определение ДСФ, включающее в себя представление оператора плотности, имеет вид

$$S(-\mathbf{q}, -\omega) = \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} |\langle \mathbf{k}' | e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}) P_{\mathbf{k}}, \quad (46)$$

где $P_{\mathbf{k}}$ – равновесное распределение волновых чисел частиц плазмы. Используя обобщенную спектральную плотность, легко перенести случай плазменного окружения на другие ситуации. Наиболее важно рассмотреть случай поля излучения или фотонов. Тогда вместо ДСФ возникают спектральные функции лестничных операторов $J_{a-\mathbf{q}a_{\mathbf{q}}^+}(\omega)$ [26].

Можно вычислить ДСФ, учитывая флуктуационно-диссипационное соотношение, которое связывает ДСФ с мнимой частью обратной диэлектрической проницаемости:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\hbar}{n\pi} \frac{1}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1} \frac{\varepsilon_0 q^2}{e^2} \text{Im} \varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, \omega). \quad (47)$$

Диэлектрическая проницаемость представляет собой отклик плазмы на электромагнитное поле. В рамках теории линейного отклика были получены различные выражения для диэлектрической проницаемости [45], которые можно использовать для определения ДСФ. В приближении случайных фаз (ПСФ) диэлектрическую проницаемость можно записать через потенциал $V_{\mathbf{q}}$ взаимодействия частиц плазмы, функции распределения (функции Ферми) $f_{\mathbf{k}}$ и энергию одной частицы $E_{\mathbf{k}}$:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - V_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - f_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + \hbar(\omega + i\eta)}. \quad (48)$$

Как обычно в теории линейного отклика, параметр $\eta \rightarrow +0$ определяет правило обхода полюса. В невырожденном случае из (48) находим

$$\text{Im}\{\varepsilon(q, \omega)\} = \frac{\hbar\omega_{\text{pl}}^2}{k_B T q^3} \sqrt{\frac{\pi m}{2k_B T}} (1 - e^{\hbar\omega/(k_B T)}) \cdot \frac{1}{2} \int_{\left(\frac{q}{2} + \frac{m\omega}{\hbar q}\right)^2}^{\infty} dk^2 e^{-\hbar^2 k^2/(2mk_B T)}, \quad (49)$$

где $\omega_{\text{pl}} = e^2 n / (\epsilon_0 m)$ – так называемая плазменная частота. Вдали от плазмонного полюса, т.е. при $\omega \gg \omega_{\text{pl}}$ или $\omega \ll \omega_{\text{pl}}$, сумма в равенстве (48) много меньше единицы. Таким образом, вещественную часть функции диэлектрической проницаемости можно аппроксимировать единицей, что упрощает мнимую часть обратной диэлектрической проницаемости:

$$\text{Im}\left\{\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}\right\} = \frac{-\text{Im}\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}{|\text{Re}\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)|^2 + |\text{Im}\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)|^2} \approx -\text{Im}\varepsilon(\mathbf{q}, \omega). \quad (50)$$

Подстановка в равенство (47) дает формулу для ДСФ в ПСФ вдали от плазмонного полюса:

$$S_{\text{ПСФ}}(\mathbf{q}, \omega) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \frac{1}{q} e^{-(2m\omega + \hbar q^2)^2 / (8mk_B T q^2)}. \quad (51)$$

Описание плазменного окружения в рамках квантового основного кинетического уравнения можно улучшить за счет включения корреляций, выходящих за рамки ПСФ. С помощью уравнений этого пункта в приведенный статистический оператор можно включить улучшенные выражения для диэлектрической функции [46], [47] или прямые выражения ДСФ в сильно коррелированной двух- или более компонентной плазме [48], [49].

3.3. Форма Линдблада и квантовое броуновское движение. Теперь следует сравнить квантовое основное кинетическое уравнение (44) атома в многочастичном плазменном окружении с известными результатами. Лучше всего изучен случай квантового броуновского движения, когда редуцированная система является не атомом, а свободной частицей, имеющей большую массу по сравнению с частицами окружения. При выводе уравнения (44) необходимо только заменить атомные собственные состояния $|\alpha\rangle$ (с набором квантовых чисел α) плоскими волнами $|\mathbf{K}\rangle$ с квантовыми числами $\mathbf{K}$. Таким образом, для конечного объема квантования и дискретных квантовых чисел получаем $F_{\alpha'\alpha}(\mathbf{q}) \rightarrow \delta_{\mathbf{K}', \mathbf{K}-\mathbf{q}}$ и $\sigma_{\alpha'\alpha} \rightarrow |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{K}'|$. Аналогично выводу уравнения (44) в данном случае можно получить основное кинетическое уравнение для броуновской частицы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_M(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_M(t), H_0] = & -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \times \\ & \times \sum_{\mathbf{K}} \left\{ \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}}) |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{K}| \rho_M(t) + \tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}}) \rho_M(t) |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{K}| - \right. \\ & \left. - \sum_{\mathbf{K}'} |\mathbf{K} + \mathbf{q}\rangle\langle\mathbf{K}| \rho_M(t) |\mathbf{K}'\rangle\langle\mathbf{K}' + \mathbf{q}| [\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}}) + \tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'})] \right\}. \quad (52) \end{aligned}$$

Сумму в правой части равенства, которая вытекает из мнимой части комплексного структурного фактора (43), можно переупорядочить, что дает коммутатор некоторого оператора H'_M и ρ_M . Этот коммутатор можно включить в коммутатор в левой части уравнения эволюции посредством модификации гамильтониана редуцированной системы $\tilde{H}_M = H_0 + H'_M$, который тогда будет содержать интегралы от ДСФ в смысле главных значений. Эта модификация обычно мала, и в дальнейшем мы ею пренебрегаем.

Оставшаяся часть правой части уравнения (52), которая содержит вещественную часть комплексного структурного фактора, называется *диссипатором*. При включении диссипатора в основное кинетическое уравнение может оказаться, что статистический оператор редуцированной системы имеет отрицательные собственные значения в некоторые моменты времени. Линдблад доказал [44], что положительная определенность статистического оператора (положительность собственных значений при всех временах) имеет место, если и только если диссипатор можно записать в виде

$$\sum_q L_q^+ L_q \rho + \rho L_q^+ L_q - 2 L_q \rho L_q^+. \quad (53)$$

Операторы L_q называются операторами Линдблада. В работе [50] был получен следующий вид диссипатора в (52) для случая квантово-механического броуновского движения:

$$\begin{aligned} -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \sum_{\mathbf{K}} \left\{ S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}}) [|\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{K}|, \rho_M(t)]_+ - \right. \\ \left. - \sum_{\mathbf{K}'} |\mathbf{K} + \mathbf{q}\rangle\langle\mathbf{K}| \rho_M(t) |\mathbf{K}'\rangle\langle\mathbf{K}' + \mathbf{q}| [S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}}) + S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'})] \right\}. \quad (54) \end{aligned}$$

Также в этой работе изучалась положительная определенность диссипатора, для чего предполагалось, что либо матричный элемент $\langle \mathbf{K} | \rho_M | \mathbf{K}' \rangle$ в (54) обращается в нуль, либо, если это не так, $\mathbf{K} - \mathbf{K}' \ll \mathbf{K}$, т.е. броуновская частица имеет точное значение импульса в любой момент времени. Это условие согласуется с начальным условием плоской волны. Также следует ожидать выполнения этого условия в более поздние моменты времени, поскольку в коммутатор в квантовом основном кинетическом уравнении входит гамильтониан изолированной массивной частицы $H_0 = \hbar^2 \hat{\mathbf{K}}^2 / (2M)$. Тогда можно записать аппроксимацию частотных аргументов ДСФ $\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q},\mathbf{K}} = \hbar / M (Kq \cos \theta + q^2 / 2)$ как $\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q},\mathbf{K}} \approx \omega_{(\mathbf{K}+\mathbf{K}')/2+\mathbf{q},(\mathbf{K}+\mathbf{K}')/2} \approx \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}$. Чтобы установить, что диссипатор имеет форму Линдблада, необходимо показать, что можно факторизовать ДСФ усредненного импульса:

$$S(\mathbf{q}, \omega_{(\mathbf{K}+\mathbf{K}')/2+\mathbf{q},(\mathbf{K}+\mathbf{K}')/2}) \approx \sqrt{S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q},\mathbf{K}})} \sqrt{S(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'})}. \quad (55)$$

Это возможно, если ДСФ является достаточно гладким по частотному аргументу при рассматриваемых частотах перехода. Если верно (55), то в выражении (54) можно применить трансляционные свойства $|\mathbf{K} + \mathbf{q}\rangle = e^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{R}}} |\mathbf{K}\rangle$ и $\langle \mathbf{K}' + \mathbf{q}| = \langle \mathbf{K}'| e^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{R}}}$ собственных состояний импульса. Далее в аргументах ДСФ величины $\mathbf{K}$ и $\mathbf{K}'$, представляющие собой собственные значения собственных состояний $|\mathbf{K}\rangle$ и $|\mathbf{K}'\rangle$, можно заменить на оператор импульса $\hat{\mathbf{K}}$. Тогда ДСФ не зависит от остающихся собственных состояний $|\mathbf{K}\rangle$ и $|\mathbf{K}'\rangle$, поэтому суммы $\sum_{\mathbf{K}} |\mathbf{K}\rangle \langle \mathbf{K}|$ и $\sum_{\mathbf{K}'} |\mathbf{K}'\rangle \langle \mathbf{K}'|$ можно отождествить с единичным оператором. Таким образом, используя сокращенное обозначение $S(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{K}}) = S(\mathbf{q}, \omega_{\hat{\mathbf{K}}+\mathbf{q},\hat{\mathbf{K}}})$, запишем диссипатор в виде

$$- \frac{n}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \left\{ \frac{1}{2} [S(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{K}}), \rho_M(t)]_+ - e^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{R}}} \sqrt{S(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{K}})} \rho_M(t) \sqrt{S(\mathbf{q}, \hat{\mathbf{K}})} e^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{R}}} \right\}. \quad (56)$$

При сравнении с (53) линдбладов вид диссипатора становится очевидным. Операторы Линдблада в основном кинетическом уравнении для квантового броуновского движения имеют вид $L(\mathbf{q}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{R}}} \sqrt{S(\mathbf{q}, \omega_{\hat{\mathbf{K}}+\mathbf{q},\hat{\mathbf{K}}})}$, т.е. их можно представить как операторнозначную функцию операторов координаты $\hat{\mathbf{R}}$ и импульса $\hbar \hat{\mathbf{K}}$ броуновской частицы.

4. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ В АТОМНЫХ СОБСТВЕННЫХ СОСТОЯНИЯХ

4.1. Основное кинетическое уравнение Паули. Основное кинетическое уравнение из последнего раздела для приведенного статистического оператора атома в многочастичном окружении все еще является операторным уравнением. Для описания различного поведения диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности это уравнение необходимо рассмотреть в подходящем представлении. В нашем случае существуют два основных представления: представление собственных состояний изолированного атома и представление фазового пространства, в котором наиболее легко изучать соответствие с классической динамикой. Сам процесс декогерентности является универсальным и не зависит от представления. Тем не

менее в некоторых частных случаях при выборе подходящего представления основное кинетическое уравнение приобретает свойства, из которых особенно ясно видна роль дефазировки окружения.

Представление атомных собственных состояний для уравнения (44) весьма привлекательно, поскольку в этом представлении операторы атомных переходов $\sigma_{\alpha'\alpha} = |\alpha\rangle\langle\alpha'|$ становятся диагональными. Пусть наряду с $|\alpha\rangle, \dots, |\alpha'''\rangle$ также $|i\rangle$ и $|j\rangle$ являются (связанными) собственными состояниями атома с полным набором квантовых чисел. Если использовать равенства $\langle i|\rho_A(t)|j\rangle = \rho_{ij}(t)$ и $\langle i|\sigma_{\alpha'\alpha}|j\rangle = \delta_{i\alpha}\delta_{\alpha'j}$, то основное кинетическое уравнение принимает вид (мы далее опускаем индекс А, поскольку в уравнениях рассматривается только приведенный статистический оператор)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{ij}(t)}{\partial t} + i\omega_{ij} \rho_{ij}(t) = & -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \sum_{\alpha, \alpha'} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \times \\ & \times \{ F_{\alpha i}(\mathbf{q}) F_{\alpha' \alpha}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha' j}(t) \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\alpha' \alpha}) + F_{\alpha \alpha'}(\mathbf{q}) F_{j \alpha}(-\mathbf{q}) \rho_{i \alpha'}(t) \tilde{S}^*(-\mathbf{q}, \omega_{\alpha' \alpha}) - \\ & - F_{\alpha i}(\mathbf{q}) F_{j \alpha'}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha \alpha'}(t) [\tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\alpha' j}) + \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\alpha i})] \}. \end{aligned} \quad (57)$$

При первом сравнении уравнения (57) с другими уравнениями мы ограничимся диагональными элементами матрицы плотности, которые всегда являются вещественнозначными числами заполнения $P_i = \rho_{ii}$. При $i = j$ в силу соотношений $F_{\alpha' \alpha}^*(\mathbf{q}) = F_{\alpha \alpha'}(-\mathbf{q})$ и $\rho_{\alpha' \alpha}^* = \rho_{\alpha \alpha'}$ слагаемые во второй строке в формуле (57), очевидно, дают после суммирования вещественное число. Можно также показать, что выражение в третьей строке этой формулы также дает вещественное число, если скомбинировать члены с $\alpha < \alpha'$ и $\alpha' < \alpha$ после перестановки индексов α и α' . Члены с $\alpha = \alpha'$ в третьей и второй строках теперь разделены, поскольку они пропорциональны числам заполнения. Таким образом, правую часть основного кинетического уравнения для диагональных элементов можно записать как сумму членов, содержащих числа заполнения, и членов с недиагональными элементами:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = & -\frac{n}{(2\pi)^2 \hbar^2} \sum_{\alpha} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \left\{ |F_{i \alpha}(\mathbf{q})|^2 P_i S(\mathbf{q}, \omega_{i \alpha}) - |F_{\alpha i}(\mathbf{q})|^2 P_{\alpha} S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha i}) + \right. \\ & + \sum_{\alpha' \neq i} \operatorname{Re}\{F_{\alpha' \alpha}(\mathbf{q}) F_{\alpha i}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha' i}(t)\} S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha' \alpha}) - \\ & \left. - \sum_{\alpha' > \alpha} \operatorname{Re}\{F_{\alpha i}(\mathbf{q}) F_{i \alpha'}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha \alpha'}(t)\} [S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha' i}) + S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha i})] \right\}. \end{aligned} \quad (58)$$

Если недиагональными элементами можно пренебречь¹⁾, то мы приходим к замкнутому уравнению для скоростей изменения чисел заполнения. Его правая часть содержит член с потерями (пропорциональный P_i) и член с усилением (пропорциональный P_{α}). Соответствующие скорости перехода совпадают с теми, которые можно получить, применяя золотое правило Ферми к комбинированной системе

¹⁾Можно утверждать, что они осциллируют на очень малых временных масштабах и, следовательно, обращаются в нуль при усреднении по короткому временному интервалу, на котором числа заполнения можно считать постоянными.

в борновском приближении [51]. В данном случае борновское приближение означает, что все величины вычисляются с использованием энергетических собственных состояний обеих систем без взаимодействия.

Приведенные рассуждения согласуются с выводом уравнения Паули для чисел заполнения, в результате которого получается точно такое же скоростное уравнение с теми же вероятностями перехода. Для вывода уравнения Паули можно также исходить из неравновесного уравнения Лиувилля (8). Оно получается путем использования проекционных операторов, если в качестве релевантной части статистического оператора выбрать его диагональную часть [5].

4.2. Квантово-механический предел. Случай, который наиболее тесно связан с квантово-механическим решением для изолированного атома [43], соответствует тому, что ДСФ, описывающий свойства окружения, отличен от нуля только для значений $|\omega|$, много меньших модуля наименьшей частоты перехода рассматриваемого атома, т.е. $S(\mathbf{q}, \omega_{\alpha, \alpha'}) \approx 0$ для всех “существенных” состояний $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle$. Однако в сложном окружении, таком как электрон-ионная плазма, трудно исключить низкоэнергетические переходы. Тем не менее очевидно, что описанная выше аппроксимация пригодна для атомов в основном или в первых возбужденных состояниях при комнатных или более низких температурах окружения.

В этом предельном случае достаточно рассмотреть только стационарные значения ДСФ $S_{\mathbf{q}} = S(\mathbf{q}, 0)$. Анализ уравнения (58) в данном случае показывает, что скорости переходов Паули в первой строке сокращаются, приводя к постоянным числам заполнения при усреднении по коротким временным масштабам, как указывалось выше. Следовательно, для диагональных элементов релевантного статистического оператора мы имеем стационарный случай.

Для недиагональных элементов, с другой стороны, возникают различные варианты динамики. Поскольку в (57) для структурного фактора берется стационарное значение, в сумме во второй строке можно положить $\alpha' = \alpha$. В третьей строке имеем $\alpha' = j$ и $\alpha = i$, так что неунитарная часть основного кинетического уравнения принимает вид

$$C_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha} (F_{\alpha i}(\mathbf{q}) F_{\alpha \alpha}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha j}(t) \tilde{S}_{-\mathbf{q}} + F_{\alpha \alpha}(\mathbf{q}) F_{j \alpha}(-\mathbf{q}) \rho_{i \alpha}(t) \tilde{S}_{-\mathbf{q}}^* - F_{\alpha i}(\mathbf{q}) F_{j j}(-\mathbf{q}) \rho_{\alpha j}(t) \tilde{S}_{\mathbf{q}}^* - F_{i i}(\mathbf{q}) F_{j \alpha}(-\mathbf{q}) \rho_{i \alpha}(t) \tilde{S}_{\mathbf{q}}). \quad (59)$$

В (59) можно выделить наиболее важные члены, если при суммировании по α отдельно рассмотреть случай $\alpha = i, j$. Следуя этой процедуре, на первом шаге получаем члены

$$F_{i i}(\mathbf{q}) F_{j i}(-\mathbf{q}) \rho_{i i}(t) [\tilde{S}_{-\mathbf{q}} - \tilde{S}_{\mathbf{q}}], \quad F_{j j}(\mathbf{q}) F_{j j}(-\mathbf{q}) \rho_{j j}(t) [\tilde{S}_{-\mathbf{q}}^* - \tilde{S}_{\mathbf{q}}^*], \quad (60)$$

которые сокращаются, если окружение изотропно, т.е. $S_{-\mathbf{q}} = S_{\mathbf{q}}$. В результате получаем

$$[F_{i i}(\mathbf{q}) F_{i i}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{-\mathbf{q}} + F_{j j}(\mathbf{q}) F_{j j}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{-\mathbf{q}}^* - F_{i i}(\mathbf{q}) F_{j j}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}^* - F_{i i}(\mathbf{q}) F_{j j}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}] \rho_{i j}(t) = \\ = |F_{i i}(\mathbf{q}) - F_{j j}(\mathbf{q})|^2 S_{\mathbf{q}} \rho_{i j}(t) + \frac{i}{\pi} [|F_{i i}(\mathbf{q})|^2 - |F_{j j}(\mathbf{q})|^2] \mathcal{P} S_{\mathbf{q}} \rho_{i j}(t) =$$

$$= \gamma_{ij}(\mathbf{q}) S_{\mathbf{q}} \rho_{ij}(t) + \frac{i}{\pi} \varphi_{ij} \mathcal{P} S_{\mathbf{q}} \rho_{ij}(t), \quad (61)$$

где первое равенство мы получили, предполагая, что окружение изотропно. На этом же основании мы изменили знак переменной интегрирования $\mathbf{q}$ в четвертом слагаемом в первой строке. Для краткости мы использовали обозначение $\mathcal{P} S_{\mathbf{q}}$ для интеграла в смысле главного значения из (43). Учитывая, что теперь $\tilde{S}_{-\mathbf{q}} = \tilde{S}_{\mathbf{q}}$ для всех вкладов ДСФ, после дальнейших упрощений приходим к

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha \neq i, j} F_{\alpha i}(\mathbf{q}) [F_{\alpha\alpha}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}} - F_{jj}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}^*] \rho_{\alpha j}(t) + F_{j\alpha}(-\mathbf{q}) [F_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}^* - F_{ii}(\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}] \rho_{i\alpha}(t) = \\ = \sum_{\alpha \neq i, j} (A_{\alpha ij}(\mathbf{q}) \rho_{\alpha j}(t) + A_{\alpha ji}^*(\mathbf{q}) \rho_{i\alpha}(t)). \end{aligned} \quad (62)$$

При подстановке этого результата основное кинетическое уравнение в квантово-механическом предельном случае можно записать как

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i(t)}{\partial t} &= -\frac{n}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \sum_{\alpha \neq i} \text{Re}\{A_{\alpha ii}(\mathbf{q}) \rho_{\alpha i}(t)\}, \\ \frac{\partial \rho_{ij}(t)}{\partial t} + i\omega_{ij} \rho_{ij}(t) &= \\ &= -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \left(\left[S_{\mathbf{q}} \gamma_{ij}(\mathbf{q}) + \frac{i}{\pi} \mathcal{P} S_{\mathbf{q}} \varphi_{ij}(\mathbf{q}) \right] \rho_{ij}(t) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\alpha \neq i, j} A_{\alpha ij}(\mathbf{q}) \rho_{\alpha j}(t) + A_{\alpha ji}^*(\mathbf{q}) \rho_{i\alpha}(t) \right). \end{aligned} \quad (63)$$

Здесь использованы обозначения $\gamma_{ij}(\mathbf{q}) = |F_{ii}(\mathbf{q}) - F_{jj}(\mathbf{q})|^2$, $\varphi_{ij}(\mathbf{q}) = |F_{ii}(\mathbf{q})|^2 - |F_{jj}(\mathbf{q})|^2$, а также $A_{\alpha ij}(\mathbf{q}) = F_{\alpha i}(\mathbf{q}) [F_{\alpha\alpha}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}} - F_{jj}(-\mathbf{q}) \tilde{S}_{\mathbf{q}}^*]$, уже введенные в (61) и (62).

Члены в (63), содержащие множитель $A_{\alpha ij}(\mathbf{q})$, не играют важной роли. Их вклад становится равным нулю при усреднении, поскольку недиагональные элементы статистического оператора $\rho_{\alpha'\alpha}$, содержащиеся в сумме в $A_{\alpha ij}(\mathbf{q})$, вообще говоря, осциллируют с частотой, близкой к $\omega_{\alpha'\alpha}$. Особый случай в этом отношении представляют вырожденные состояния, для которых частоты совпадают.

Таким образом, при анализе основных свойств уравнения (63) мы можем считать, что члены, содержащие $A_{\alpha ij}(\mathbf{q})$, дают малый вклад. Если ими вообще пренебречь, то элементы матрицы плотности расщепляются, причем $P_i(t) = P_i(0)$ и

$$\rho_{ij}(t) = e^{-\Gamma_{ij}t} e^{i\tilde{\omega}_{ij}t} \rho_{ij}(0). \quad (64)$$

В результате диагональные элементы остаются постоянными, а эволюция недиагональных элементов принципиально отличается от случая изолированных систем за счет появления затухающего множителя. Когерентные суперпозиции собственных состояний распадаются со скоростью

$$\Gamma_{ij} = \frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 S_{\mathbf{q}} |F_{ii}(\mathbf{q}) - F_{jj}(\mathbf{q})|^2. \quad (65)$$

Другая особенность эволюции недиагональных элементов в (64) состоит в наличии сдвига частоты $\tilde{\omega}_{ij}$, пропорционального $\varphi_{ij}(\mathbf{q})$, как это вытекает из (63). Сдвинутая частота равна

$$\tilde{\omega}_{ij} = \omega_{ij} + \frac{n}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 [|F_{ii}(\mathbf{q})|^2 - |F_{jj}(\mathbf{q})|^2] \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{S(\mathbf{q}, \omega)}{-\omega}. \quad (66)$$

В отличие от затухающего множителя, который приводит к подавлению интерферирующих членов (что полностью отсутствует в случае изолированной системы), сдвиг частоты не приводит к новому поведению недиагонального элемента в основном кинетическом уравнении для редуцированной системы. Поэтому при обсуждении основного кинетического уравнения мы будем уделять основное внимание влиянию затухающего множителя (65).

Структура уравнений (64) и (65) напоминает хорошо известный пример непрерывного (энергетического) измерения в стандартной квантовой механике. В этом случае измерение не влияет на систему, если она приготовлена в собственном состоянии. Если же состояние системы в начальный момент времени $t = t_0$ приготовлено как суперпозиция энергетических собственных состояний (которая может оказаться диагональной в другом базисе), измерение переведет ее в смесь собственных состояний энергии.

Базис из собственных состояний энергии, в котором в квантово-механическом предельном случае (об этом случае иногда говорят также как о низкотемпературном пределе) имеет место диагонализация, определяется гамильтонианом изолированной системы. В этом пределе появляется специальный вид декогерентности, когда взаимодействие с окружением ответственно только за декогерентность, но не определяет диагонализующего базиса. Из (65) можно вывести, что имеются следующие два требования, которые надо удовлетворить, чтобы в квантово-механическом пределе возникала декогерентность.

1. В статическом пределе ДСФ окружения должен иметь ненулевое значение. Ситуация, когда это требование не выполнено, соответствует только (электромагнитному) вакууму, который не может приводить к декогерентности согласно равенству (65).

2. Диагональные формфакторы (редуцированной) системы (роль которой в настоящей работе играет атом) не должны обращаться в нуль и должны различаться для состояний, входящих в суперпозицию. Поскольку в дипольном приближении диагональные атомные формфакторы обращаются в нуль, при вычислении скорости декогерентности (65) необходимо использовать формфакторы высшего порядка.

4.3. Критическое главное квантовое число. Некоторые оценки позволяют ответить на вопрос, адекватны или нет статический предел взаимодействия и квантово-механический предел атомной подсистемы. Получить такие оценки оказывается возможным, поскольку при фиксированном главном квантовом числе n водородного состояния всегда существует переход с наименьшей частотой, который соответствует возбуждению в состояние со следующим главным квантовым числом $n + 1$. При больших n частоту перехода можно аппроксимировать в соответствии с $\hbar\omega_{n+1,n} \approx |dE_n/dn| = 2Ry/n^3$.

ДСФ электронного газа в ПСФ вдали от плазмонного полюса (см. (51)) можно выразить в атомных единицах, используя энергию $E_\theta = k_B T / R_y$, волновое число $\tilde{q} = a_0 q$ и масштабированную частоту $\tilde{\omega} = \hbar \omega / R_y$:

$$S(\tilde{q}, \tilde{\omega}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi E_\theta} \tilde{q}} e^{-(\tilde{\omega} + \tilde{q}^2)^2 / (4E_\theta \tilde{q}^2)}. \quad (67)$$

Замечательно, что в данном приближении ДСФ не зависит от плотности. Поэтому предельное главное квантовое число зависит только от температуры электронного газа. Сравнивая (67) с его значением при $\tilde{\omega} = 0$, $S(\tilde{q}, 0) = (2\tilde{q}\sqrt{\pi E_\theta})^{-1} e^{-\tilde{q}^2 / (4E_\theta)}$, можно дать оценку предела. Второй член показателя экспоненты в

$$\frac{S(\tilde{q}, \tilde{\omega})}{S(\tilde{q}, 0)} = e^{-(\tilde{\omega}^2 / \tilde{q}^2 + 2\tilde{\omega}) / (4E_\theta)} \quad (68)$$

определяющим образом влияет на поведение этого отношения. Поскольку ДСФ в приближении (67) при фиксированной температуре имеет ровно один максимум при $\tilde{q}_{\max}^2 = \sqrt{E_\theta^2 + \tilde{\omega}^2} - E_\theta$, волновое число можно исключить, если подставить $\tilde{q}_{\max}^2$ в соотношение (68).

Если для частоты перехода выполнено неравенство $\tilde{\omega} \gg E_\theta$, то можно использовать аппроксимацию $\tilde{q}_{\max}^2 \approx |\tilde{\omega}|$, что позволяет оценить первый член в экспоненте как $|\tilde{\omega}|$. Особая ситуация складывается в случае отрицательных частот перехода $\tilde{\omega} < 0$, которые имеют место, если энергия передается от атома к плазме. Простая аппроксимация для этого случая дает положительный показатель экспоненты. Но более тщательное рассмотрение показывает, что это происходит только в малом интервале волновых чисел $\tilde{q}$, которые часто не находятся в резонансе с атомным формфактором (39). В то же время вычисление скоростей перехода для чисел заполнения демонстрирует приблизительно симметричное поведение при возбуждении и при релаксации атома.

В итоге $|\tilde{\omega}| / (2E_\theta)$ можно в общем случае принять за разумную оценку адекватности квантово-механического предела. Подставляя дисперсию энергии водородных состояний, можно получить соотношение между главным квантовым числом и температурой, позволяющее найти критическое главное квантовое число n_T для заданной температуры окружения:

$$\sqrt[3]{\frac{T}{K}} = \frac{54}{n_T}. \quad (69)$$

Для атомных собственных состояний с главными квантовыми числами, значительно меньшими, чем критическое значение n_T , можно применить квантово-механический предел. В таблице приведены некоторые значения n_T , которые соответствуют температурам в типичных плазменных системах.

Значения n_T можно интерпретировать так: только атомные собственные состояния с главным квантовым числом, значительно меньшим, чем n_T , представляют собой устойчивые стационарные состояния, известные из квантовой механики. Для горячей плазмы на Солнце это не так для любого возбужденного состояния. Даже в плазменном окружении при комнатной температуре только наименьшие возбужденные состояния можно рассматривать как состояния изолированного атома. В случае

Плазменная система	$T[\text{K}]$	n_T
Ионы в сверххолодных плазмах	1	54
Электроны в сверххолодных плазмах	20	20
Плазма при комнатной температуре	300	8
Плазма на поверхности Солнца	6000	3

Критическое главное квантовое число, определяющее границу применимости квантово-механического предела при характерных температурах плазмы.

сверххолодной плазмы на ситуацию снова наиболее сильно влияют (более теплые) электроны, что позволяет атомным состояниям с умеренно большим квантовым числом $n \ll 20$ быть приблизительно стационарными. В то же время высоковозбужденные состояния с $n > 30$, которые сильно воздействуют на эволюцию сверххолодной плазмы, находятся существенно выше предела.

Следствия оценки (69) носят весьма общий характер, если применимы сделанные при выводе приближения. Уже указывалось, что предел не зависит от плотности окружения. Далее, из уравнения (67) очевидно, что масса частиц плазмы не имеет существенного значения, так как поведение структурного фактора определяется в основном смешанным членом в экспоненте. Наконец, взаимодействие между атомом и плазмой не влияет на значение критического главного квантового числа, величина которого определяется только внутренними свойствами окружения, выражаемыми через ДСФ.

Для произвольного атомного состояния (суперпозиции), компоненты которого в представлении собственных состояний энергии имеют главное квантовое число много меньше n_T , применимо основное кинетическое уравнение в квантово-механическом пределе (63). Диагональные элементы матрицы плотности (числа заполнения) квазистационарны. Тем не менее очевидно, что в случае высокой плотности окружения возникают конечные скорости перехода, задающие временной масштаб, при котором справедливо уравнение (63). Для более коротких времен экспоненциальный распад недиагональных элементов можно рассчитать, пользуясь уравнением (64):

$$\rho_{ij}(t) = e^{-\Gamma_{ij}t} e^{i\tilde{\omega}_{ij}t} \rho_{ij}(0), \quad (70)$$

где скорость распада Γ_{ij} имеет вид

$$\Gamma_{ij} = 16n \sqrt{\frac{\pi}{E_\theta}} \int_0^\infty \frac{d\tilde{q}}{\tilde{q}^3} |F_{ii}(\mathbf{q}) - F_{jj}(\mathbf{q})|^2 e^{-\tilde{q}^2/(4E_\theta)}. \quad (71)$$

Поскольку диагональные формфакторы из-за симметрии равны единице с точностью до дипольного приближения, интеграл не расходится, даже если рассматривается чисто кулоновский потенциал. Поэтому для вычисления скоростей распада не требуется вводить экранирование, как в работе [20].

5. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА

Аналогично представлению в атомных собственных состояниях уравнение для матрицы плотности можно вывести непосредственно из операторного основного ки-

нетического уравнения (44), что дает

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_A(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (H_A(\mathbf{R}) - H_A(\mathbf{R}')) \rho_A(\mathbf{R}, \mathbf{R}', t) = \\
 = -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \sum_{\alpha, \alpha', \alpha'', \alpha'''} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 F_{\alpha' \alpha}(\mathbf{q}) F_{\alpha''' \alpha''}(-\mathbf{q}) \int d^3 \mathbf{R}'' d^3 \mathbf{R}''' \rho(\mathbf{R}'', \mathbf{R}''', t) \times \\
 \times \{ \psi_\alpha(\mathbf{R}) \psi_{\alpha'''}^*(\mathbf{R}'') \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\alpha''' \alpha''}) \delta_{\alpha', \alpha''} \delta(\mathbf{R}''' - \mathbf{R}') + \\
 + \psi_\alpha(\mathbf{R}''') \psi_{\alpha'''}^*(\mathbf{R}') \tilde{S}^*(-\mathbf{q}, -\omega_{\alpha' \alpha}) \delta_{\alpha', \alpha''} \delta(\mathbf{R}'' - \mathbf{R}) - \\
 - \psi_\alpha(\mathbf{R}) \psi_{\alpha'}^*(\mathbf{R}') \psi_{\alpha''}(\mathbf{R}''') \psi_{\alpha'''}^*(\mathbf{R}') [\tilde{S}^*(\mathbf{q}, -\omega_{\alpha''' \alpha''}) + \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\alpha' \alpha})] \}. \quad (72)
 \end{aligned}$$

Здесь $H_A(\mathbf{R}) = -\hbar^2/(2\mu) \nabla_{\mathbf{R}}^2 - U(|\mathbf{R}|)$ – гамильтониан в координатном представлении.

Уравнение (72) можно применять при численном моделировании, коль скоро количество существенных квантовых чисел $\alpha, \dots, \alpha'''$, т.е. количество актуальных атомных состояний, все еще мало и поэтому имеет смысл учитывать только основное или первые возбужденные состояния. В случае сильно возбужденных состояний, когда количество атомных состояний возрастает с главным квантовым числом как n^2 , можно использовать слабость потенциала атомного ядра, который отвечает за связь электронов с ядром. Влияние потенциала ядра на диссипатор можно считать малым, как это предполагается и при вычислении скоростей перехода ридберговских атомов за счет рассеяния частиц [52]. Как и в случае “свободной” броуновской частицы, отвечающая редуцированной частице часть оператора взаимодействия V_I разлагается по плоским волнам. После преобразований, аналогичных тем, которые в случае атома приводят к уравнению (40), мы приходим к σ -оператору в картине взаимодействия:

$$\sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) = e^{-i[H_0+U(|\mathbf{R}|)]\tau/\hbar} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'} e^{i[H_0+U(|\mathbf{R}|)]\tau/\hbar}. \quad (73)$$

В данном случае расчет эволюции для этого оператора нетривиален из-за наличия потенциала ядра $U(|\mathbf{R}|)$ в экспоненте. К этому σ -оператору можно применить теорию возмущений по $U(|\mathbf{R}|)$, что более подробно делается в приложении Б. В результате операторное основное кинетическое уравнение приводится к виду

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_A(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_A(t), H_A] = -\frac{n}{2(2\pi)^2 \hbar^2} \int d^3 \mathbf{q} V_q^2 \times \\
 \times \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \left[|\mathbf{K}'\rangle \langle \mathbf{K}| \rho_A(t) \Sigma(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) + \rho_A(t) |\mathbf{K}\rangle \langle \mathbf{K}'| \Sigma^*(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) - \right. \\
 - \sum_{\mathbf{K}''} (|\mathbf{K} + \mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{K}| \rho_A(t) |\mathbf{K}'\rangle \langle \mathbf{K}'' + \mathbf{q}| \Sigma(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q}) + \\
 \left. + |\mathbf{K}'' + \mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{K}'| \rho_A(t) |\mathbf{K}\rangle \langle \mathbf{K} + \mathbf{q}| \Sigma^*(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})) \right]. \quad (74)
 \end{aligned}$$

Новый множитель

$$\begin{aligned}
 \Sigma(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) = \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}+\mathbf{q}}) \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} + \\
 + \frac{U_{|\mathbf{K}-\mathbf{K}'|}}{\hbar \Omega} \left[\frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}} - \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}} - \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}}} + \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}}} \right]
 \end{aligned}$$

включает в себя член нулевого порядка, который приводит к диссипатору квантово-механического броуновского движения, и поправки первого порядка по потенциалу ядра. Потенциал входит как фурье-образ, т.е. для потенциала протона в атоме водорода $U(|\mathbf{K} - \mathbf{K}'|) = e^2/(\varepsilon_0|\mathbf{K} - \mathbf{K}'|^2)$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя общий подход к неравновесным процессам, который основан на методе неравновесного статистического оператора Зубарева, мы рассмотрели временную эволюцию состояний атома, взаимодействующего с окружением. В других подходах выделяется момент времени t_0 , при котором задаются начальные условия. В сравнении с этими подходами преимуществом метода Зубарева является то, что в нем отсутствует неоднозначность этого допущения и исключаются начальные колебания при временах, близких к t_0 .

В качестве специального применения мы рассмотрели взаимодействие атома водорода с окружающей плазмой свободных носителей заряда. Вводя атомный форм-фактор и динамический структурный фактор плазмы, мы вывели квантовое основное кинетическое уравнение, описывающее дефазировку чисто водородных квантовых состояний. Эти эффекты связаны с диэлектрической проницаемостью плазмы, которую можно вычислить в различных аппроксимациях.

Подобно квантовому броуновскому движению, при котором частица движется под влиянием легких рассеивателей, эволюцию слабо связанных ридберговских состояний также можно описывать уравнением движения для матрицы плотности, как в случае “свободной” броуновской частицы. С введением волновых пакетов как жестких состояний переход от квантового к классическому поведению становится очевидным.

Следует отметить, что теперь мы можем понять квазиклассическое поведение в индуцированных столкновениями переходах ридберговских атомов [32] и использование классического описания ионов в плазме. С другой стороны, для основного состояния и первых возбужденных состояний наши рассуждения дают те же результаты, что и стандартная квантовая механика для изолированных атомов с тем добавлением, что интерференции и суперпозиции собственных состояний затухают из-за взаимодействия с окружением. В этих рамках можно вывести зависящее от температуры плазмы критическое главное квантовое число в квантовом случае.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Сравнение различных подходов к основному кинетическому уравнению для открытых систем

Основное кинетическое уравнение в приближении Борна–Маркова является важным инструментом исследования декогерентности и запутанности [16], [53]. Уравнения, подобные уравнению (27) с правой частью (31), для открытых квантовых систем известны и исследуются уже несколько лет [16], [53]. В этом контексте результат раздела 2 представляет собой новый подход к основному кинетическому уравнению для приведенного статистического оператора. Этот подход опирается

скорее на физически обоснованную теорию неравновесного статистического оператора, которая позволяет включить в рассмотрение многие хорошо известные концепции равновесной статистики, нежели на строгие математические рассуждения, как в работе [54]. Поэтому здесь мы обсудим допущения, сделанные в рамках концепции релевантного статистического оператора при изучении динамики редуцированной системы, и сравним наш подход с другими.

Мы начали наше рассмотрение с неравновесного уравнения Лиувилля (8), в котором предполагается, что динамика полной системы в основном определяется “релевантной” частью статистического оператора, выбранной в виде незапутанного состояния: $\rho_{\text{rel}}(t) = \rho_{\text{S}}(t) \otimes \rho_{\text{B}}$. В отличие от большинства других подходов к процессу декогерентности, мы при этом избегаем выбора времени t_0 (момента “начала” эксперимента или включения взаимодействия), когда система и окружение не запутаны. В нашей работе незапутанное состояние представляет собой опорное состояние, определяющее развитие во все моменты времени, при этом запутанность полностью исчезает только при $t \rightarrow -\infty$. Неравновесное уравнение Лиувилля и концепция релевантного статистического оператора в комбинации с набором существенных наблюдаемых была успешно применена к статистическому описанию процессов переноса [6], что делает данную методику притягательной для изучения открытых квантовых систем, где реальная динамика термостата очевидным образом “несущественна”.

Сравнивая наши рассуждения с выводом квантового основного кинетического уравнения в работе [7], мы ниже продемонстрируем отличия, которые возникают в подходе Зубарева. Основное отличие связано с отсутствием начального момента времени t_0 модели система–термостат, который следовало бы сдвинуть в $t \rightarrow -\infty$ в методе релевантного статистического оператора. Вывод основного кинетического уравнения для приведенного статистического оператора в [7] основан на уравнении движения для полного статистического оператора $\rho_{\text{D}}(t)$ (системы и окружения) в картине Дирака, где зависимость от времени динамических величин определяется гамильтонианами системы H_{S} и окружения H_{B} , а зависимость от времени состояний – оператором взаимодействия V_{I} . Используя оператор $U_{\text{D}}(t, t')$ временной эволюции в этой картине Дирака, можно записать

$$\rho_{\text{D}}(t) = U_{\text{D}}(t, t') \rho_{\text{D}}(t') U_{\text{D}}^+(t, t'). \quad (\text{A.1})$$

Здесь нельзя использовать уравнение Лиувилля $\partial \rho_{\text{D}}(t) / \partial t = (i/\hbar)[\rho_{\text{D}}(t), V_{\text{I}}(t)]$, поскольку производная по времени полного статистического оператора в левой части может содержать запутанные состояния, следовательно, не может быть разделена на части, отвечающие редуцированной системе и окружению. С другой стороны, можно ввести точное рекуррентное соотношение для оператора эволюции по времени

$$U_{\text{D}}(t, t') = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t d\tau V_{\text{I}}(\tau) U_{\text{D}}(\tau, t') = 1 + i\mathcal{T}(t, t'). \quad (\text{A.2})$$

В него входит оператор взаимодействия в картине Дирака $V_{\text{I}}(\tau)$, определенный в (26). Важно осознать, что с учетом (26) момент времени t_0 (в этом подходе он формально является моментом, при котором состояния в картине Дирака совпадают с состояниями в картине Шредингера) фиксирован так: $t_0 = 0$. После

подстановки (A.2) в (A.1) можно использовать унитарность оператора временной эволюции $U_D(t, t')U_D^+(t, t') = U_D^+(t, t')U_D(t, t') = 1$, откуда следует соотношение для $\mathcal{T}$ -операторов $i(\mathcal{T}(t, t') - \mathcal{T}^+(t, t')) = -\mathcal{T}^+(t, t')\mathcal{T}(t, t')$. В результате окончательное точное уравнение для эволюции $\Delta\rho_D(t, t') = \rho_D(t) - \rho_D(t')$ полного статистического оператора получается в виде

$$\begin{aligned} \Delta\rho_D(t, t') - \frac{i}{2}[\mathcal{T}(t, t') + \mathcal{T}^+(t, t'), \rho_D(t')] = \\ = -\frac{1}{2}(\mathcal{T}^+(t, t')\mathcal{T}(t, t')\rho_D(t') - 2\mathcal{T}(t, t')\rho_D(t')\mathcal{T}^+(t, t') + \\ + \rho_D(t')\mathcal{T}^+(t, t')\mathcal{T}(t, t')). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Следующий шаг состоит в выводе основного кинетического уравнения, и это требует введения аппроксимаций для $\mathcal{T}$ -оператора и полного статистического оператора ρ_D в картине Дирака.

Во-первых, очевидно, что коммутатор в левой части (A.3) дает вклад в унитарную эволюцию системы, потому что оператор $\mathcal{T}(t, t') + \mathcal{T}^+(t, t')$ эрмитов. Если интересоваться только неунитарной (диссипативной) частью, коммутатором можно пренебречь.

Во вторых, уравнение (A.3) надо поделить на дифференциал времени, определяемый обычным образом: $\Delta t = t' - t$. После взятия следа выражения в левой части этого уравнения имеем

$$\text{Tr}_B \left\{ \frac{\Delta\rho_D(t, t - \Delta t)}{\Delta t} \right\} \approx e^{iH_S t/\hbar} \left(\frac{\Delta\rho_S(t, t - \Delta t)}{\Delta t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho_S(t - \Delta t), H_S] \right) e^{-iH_S t/\hbar}, \quad (\text{A.4})$$

где использовано равенство $\rho_D(t) = e^{i(H_S + H_B)t/\hbar} \rho(t) e^{-i(H_S + H_B)t/\hbar}$ и выполнено разложение при малых Δt . Для вывода равенства (A.4) дополнительно требуется предположить, что $\rho(t) \approx \rho_S(t) \otimes \rho_B$, т.е. что запутанностью в коммутаторе можно пренебречь.

В неунитарном члене в правой части уравнения (A.3) используется только первый член в итерационном решении для $\mathcal{T}$ -оператора $\mathcal{T}(t, t - \Delta t)$, и тем самым рассмотрение ограничивается случаем слабого взаимодействия система–окружение (борновское приближение),

$$\mathcal{T}(t, t - \Delta t) \approx T_0(t, t - \Delta t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{t-\Delta t}^t V_I(\tau) d\tau. \quad (\text{A.5})$$

После исключения из интеграла оператора временной эволюции основное кинетическое уравнение одновременно приобретает марковский характер. После умножения слева и справа неунитарного члена на обратные операторы к экспонентам в (A.4) и сдвига пределов интегрирования по времени результат

$$-\frac{1}{2\hbar^2} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} d\tau \int_0^{\Delta t} d\tau' (V_I(-\tau)V_I(-\tau')\rho(t) - 2V_I(-\tau)\rho(t)V_I(-\tau') + \rho(t)V_I(-\tau)V_I(-\tau')) \quad (\text{A.6})$$

можно сравнить с левой частью в (27). Преобразуя далее два интеграла и отделяя взаимодействие и статистический оператор в системе и в окружении, мы можем

преобразовать, например, второе слагаемое в (A.6) к виду

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} J_{V_B V_B}(\omega) \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} d\tau \int_{-\tau}^0 d\tau' [e^{-i\omega\tau'} V(-\tau) \rho_S(t) V(-\tau' - \tau) + \\ + e^{i\omega\tau'} V(-\tau' - \tau) \rho_S(t) V(-\tau)]. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Снова, как и в коммутаторе в (A.4), использовано приближение незапутанного (сепарабельного) статистического оператора. В этом смысле выражение (A.7) представляет собой результат первого порядка в пертурбативном анализе запутанности; при этом вкладом членов высшего порядка по запутанности система–окружение мы пренебрегаем.

Допуская, что предел $\Delta t \rightarrow \infty$ существует, применяем теорему Абеля в виде [6]

$$\lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} d\tau f(\tau) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau} f(\tau) = f(0) - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\epsilon\tau} \frac{df(\tau)}{d\tau}. \quad (\text{A.8})$$

В нашем случае в роли функции $f(\tau)$ выступает интеграл $\int_{-\tau}^0 d\tau' g(\tau, \tau')$, где $g(\tau, \tau')$ обозначает подынтегральное выражение в (A.7). В этом случае внеинтегральный член при интегрировании по частям в (A.8), очевидно, обращается в нуль в силу $f(0) = 0$, что дает $df(\tau)/d\tau = g(\tau, -\tau) + \int_{-\tau}^0 d\tau' dg(\tau, \tau')/d\tau$. Второе слагаемое приводит к вкладам высшего порядка, тогда как удерживая только первый член и применяя результат к выражению (A.7), мы получаем соответствующий член в (31).

Поскольку теорема Абеля является точным результатом, единственное допущение, требующее обсуждения, состоит в применении предела $\Delta t \rightarrow \infty$. Это связано с тем, что в левой части основного кинетического уравнения были сделаны приближения, справедливые при достаточно малых Δt , тогда как тот же временной дифференциал считается бесконечно большим в правой части. Временная эволюция приведенного статистического оператора, вычисляемая с помощью основного кинетического уравнения, получается поэтому шаг за шагом при временных интервалах, достаточно больших для того, чтобы можно было использовать асимптотику влияния окружения в неунитарной части. Поэтому не следует ожидать, что удастся описать быстро осциллирующие начальные процессы основным кинетическим уравнением такого типа. Тем не менее принципиально важное затухание недиагональных элементов (декогерентность) воспроизводится. Подобные аргументы можно найти практически в любом исследовании декогерентности в открытых квантовых системах. В книге [3], например, предполагается, что ядро интегрирования убывает много быстрее, чем временной интервал Δt стремится к нулю. В качестве фундаментального свойства отсюда следует, что затухание недиагональных элементов схоже с процессом распада при линейной зависимости от времени в экспоненте. Другим центральным свойством основного кинетического уравнения для неравновесных процессов без эффектов памяти является локальность во времени, т.е. условие $\partial \rho_S(t)/\partial t \sim \rho_S(t)$. Применимость этого предположения в общем случае была проанализирована в [55].

Термодинамическое описание окружения в равновесии позволяет проверить справедливость формально противоречивого предела. Используя соотношение детального равновесия (30), можно оценить частотные зависимости спектральных плотностей. Из $e^{\beta\hbar/\Delta t} \approx 1$ следует, что при $\Delta t \gg \beta\hbar$, т.е. для заданного интервала

времени Δt , спектральная плотность при соответственно высокой температуре становится приближенно постоянной в частотном интервале $[-1/\Delta t, 1/\Delta t]$. С другой стороны, осциллирующий множитель $e^{i\omega\tau'}$ в силу $|\tau'| < \Delta t$ приводит к тому, что главный вклад в интеграл вносит этот интервал. Таким образом, интегрирование по $d\omega$ дает $\frac{J_{V_B, V_B}(0)}{\pi} \cdot \frac{\sin(\tau/\Delta t)}{\tau/\Delta t}$. Тогда легко перейти к пределу $\Delta t \rightarrow 0$.

Существует другой пример использования асимптотических соотношений при вычислении скоростей перехода – вывод золотого правила Ферми. Известно, что скорости переходов, полученные таким способом, пригодны в большинстве случаев для значительно больших интервалов, чем предполагает аппроксимация при выводе золотого правила Ферми. С другой стороны, можно использовать неравновесное уравнение Лиувилля (8) для вывода основного кинетического уравнения Паули для чисел заполнения [6]. При этом релевантный статистический оператор определяется как диагональная часть истинного статистического оператора. Скорости переходов в рамках уравнения Паули совпадают с теми, которые можно вычислить с помощью золотого правила Ферми. Из-за этого тесного соотношения с основным кинетическим уравнением Паули на основании борновско-марковского основного кинетического уравнения для приведенного статистического оператора (27) с правой частью (31) можно ожидать, что для диагональных элементов будет также иметь место подобный результат. Для недиагональных элементов, которые нельзя описать основным кинетическим уравнением Паули, следует ожидать адекватного описания общего поведения с помощью уравнения (27) с учетом (31). Исключение составляют очень малые времена, при которых в ряде случаев проявляется иное поведение процесса декогерентности. Например, в рамках этого подхода нельзя рассматривать процессы с зависимостью типа t^2 в показателе экспоненты.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Пертурбативное основное кинетическое уравнение для атома в плазме

В этом приложении основное кинетическое уравнение (74) из раздела 5 выводится на основе теории возмущений по (слабому) потенциалу ядра в диссипаторе. Исходным объектом при пертурбативном подходе служит диссипатор. Его можно получить из фундаментального двойного коммутатора, записывая с помощью плоских волн собственные состояния $|\mathbf{K}\rangle$ для базиса вторичного квантования редуцированной системы (атом Ридберга) и операторов $\sigma_{\mathbf{K}', \mathbf{K}} = |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{K}'|$ аналогично тому, как это было сделано при выводе уравнения (40). Имеем

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \sum_{\mathbf{q}} V_q^2 \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} [\sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q}, \mathbf{K}} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) \rho_A(t) \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle - \\ & \quad - \sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q}, \mathbf{K}} \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) \langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle - \\ & \quad - \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q}, \mathbf{K}} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle + \\ & \quad + \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) \sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q}, \mathbf{K}} \langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle]. \end{aligned} \quad (\text{Б.1})$$

Здесь требуется особый анализ зависящего от времени σ -оператора в картине взаимодействия,

$$\sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) = e^{-i[H_0 + U(|\mathbf{R}|)]\tau/\hbar} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}, \mathbf{K}'} e^{i[H_0 + U(|\mathbf{R}|)]\tau/\hbar}, \quad (\text{Б.2})$$

потому что H_0 и $U(|\mathbf{R}|)$ не коммутируют и $|\mathbf{K}\rangle$ не являются собственными состояниями $U(|\mathbf{R}|)$.

Поскольку сильно возбужденный электрон в атоме Ридберга слабо связан с ядром, разумно предполагать, что влияние потенциала ядра $U(|\mathbf{R}|)$ на диссипатор мало, и к $\sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}(-\tau)$ можно применить теорию возмущений по $U(|\mathbf{R}|)$. Заметим, что $e^{A+B} \neq e^A e^B$ для некоммутирующих операторов A, B , поэтому экспоненту надо разложить по формулам Бейкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа, которые мы запишем в виде [6]

$$\begin{aligned} e^{A+B} &= e^A \left(1 + \int_0^1 dx e^{-xA} B e^{x(A+B)} \right) \approx e^A \left(1 + \int_0^1 dx e^{-xA} B e^{xA} \right), \\ e^{A+B} &= \left(1 + \int_0^1 dx e^{x(A+B)} B e^{-xA} \right) e^A \approx \left(1 + \int_0^1 dx e^{xA} B e^{-xA} \right) e^A. \end{aligned} \quad (\text{Б.3})$$

Применяя эти соотношения и стандартное приближение малых B и используя обычное обозначение $\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'} = (E_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{K}'})/\hbar$, получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}(-\tau) &\approx \left[1 - \frac{i\tau}{\hbar} U_x(-\tau) \right] e^{-iH_0\tau/\hbar} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'} e^{iH_0\tau/\hbar} \left[1 + \frac{i\tau}{\hbar} U_x(-\tau) \right] \approx \\ &\approx e^{i\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}\tau} \left\{ \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'} + \frac{i\tau}{\hbar} [\sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}, U_x(-\tau)] \right\}, \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

где для $U_x(-\tau)$ в дальнейшем мы используем разложение по собственным состояниям импульса или волнового числа, в котором можно выполнить интегрирование по dx :

$$\begin{aligned} U_x(-\tau) &= \int_0^1 dx e^{-ixH_0\tau/\hbar} U(|\mathbf{R}|) e^{ixH_0\tau/\hbar} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'''} \int_0^1 dx e^{-ixH_0\tau/\hbar} |\mathbf{K}''\rangle U_{|\mathbf{K}'''-\mathbf{K}''|} \langle \mathbf{K}''' | e^{ixH_0\tau/\hbar} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'''} U_{|\mathbf{K}'''-\mathbf{K}''|} |\mathbf{K}''\rangle \langle \mathbf{K}''' | \int_0^1 dx e^{ix\omega_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}\tau} = \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'''} U_{|\mathbf{K}'''-\mathbf{K}''|} \frac{1}{i\tau\omega_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}\tau} - 1) \sigma_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}. \end{aligned} \quad (\text{Б.5})$$

Здесь Ω , как и выше, обозначает нормировочный объем. В результате коммутатор в последней строке уравнения (Б.4) по существу определяется через такое произведение двух σ -операторов:

$$\sigma_{\mathbf{K}',\mathbf{K}} \sigma_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''} = |\mathbf{K}\rangle \langle \mathbf{K}' | \mathbf{K}''\rangle \langle \mathbf{K}''' | = \sigma_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{K}',\mathbf{K}''}.$$

С использованием этого соотношения коммутатор можно записать как

$$\begin{aligned} \frac{i\tau}{\hbar} [\sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}, U_x(-\tau)] &= \sum_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'''} \frac{U_{|\mathbf{K}'''-\mathbf{K}''|}}{\hbar\Omega\omega_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}''}\tau} - 1) \times \\ &\times (\sigma_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}'} \delta_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'+\mathbf{q}} - \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''} \delta_{\mathbf{K}''',\mathbf{K}'}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\mathbf{K}'''} \frac{U_{|\mathbf{K}''' - \mathbf{K}' - \mathbf{q}|}}{\hbar \Omega \omega_{\mathbf{K}''', \mathbf{K}' + \mathbf{q}}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}''', \mathbf{K}' + \mathbf{q}} \tau} - 1) \sigma_{\mathbf{K}''', \mathbf{K}' -} \\
&\quad - \sum_{\mathbf{K}''} \frac{U_{|\mathbf{K}' - \mathbf{K}''|}}{\hbar \Omega \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''} \tau} - 1) \sigma_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''}.
\end{aligned} \tag{Б.6}$$

Учитывая, что диссипатор также включает суммирование по волновым числам $\mathbf{K}$ и $\mathbf{K}'$ и что это суммирование распространяется на все пространство волновых чисел, индексы суммирования можно переставить, а волновые числа сдвинуть без изменения суммы. Поэтому в первой сумме в (Б.6) можно произвести переобозначения $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}''$ и $\mathbf{K}''' \rightarrow \mathbf{K}'$ и сдвиг $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}' + \mathbf{q}$. Тогда пертурбативное выражение для $\sigma_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau)$ примет вид

$$\begin{aligned}
\sigma_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'}(-\tau) &= \sum_{\mathbf{K}''} \left[e^{i\omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'} \tau} \delta_{\mathbf{K}'', \mathbf{K}'} + \right. \\
&\quad + e^{i\omega_{\mathbf{K}'' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''} \tau} \frac{U_{|\mathbf{K}' - \mathbf{K}''|}}{\hbar \Omega \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'' + \mathbf{q}}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'' + \mathbf{q}} \tau} - 1) - \\
&\quad \left. - e^{i\omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'} \tau} \frac{U_{|\mathbf{K}' - \mathbf{K}''|}}{\hbar \Omega \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''}} (e^{i\omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''} \tau} - 1) \right] \sigma_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''}.
\end{aligned} \tag{Б.7}$$

Используя пертурбативный зависящий от времени σ -оператор, мы можем продолжить вычисление следа по окружению и двойного коммутатора в диссипаторе аналогично процедуре из раздела 3: введя ДСФ и используя соответствующие соотношения для второго и четвертого членов, а также для первого и третьего членов в диссипаторе (Б.1),

$$\langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle = N \int d\omega S(\mathbf{q}, \omega) e^{i\omega \tau}, \quad \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle = N \int d\omega S(-\mathbf{q}, -\omega) e^{i\omega \tau},$$

можно выполнить интегрирование по $d\tau$. Далее можно проинтегрировать по новой переменной $d\omega$ аналогично тому, как это было сделано выше. Остается вычислить пять интегралов, представляющих пять слагаемых в квадратных скобках в (Б.7). Для первого и последнего членов интегралы равны; используя “комплексные” ДСФ (43), получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\pm \mathbf{q}, \pm \omega) \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega + \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'} + i\epsilon)\tau} = \pi \tilde{S}^{(*)}(\pm \mathbf{q}, \pm \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}' + \mathbf{q}}),$$

где $(*)$ обозначает комплексное сопряжение, которое применяется только в “(+)-случае.” Во втором и четвертом членах в (Б.7) суммирование частот в экспонентах дает в обоих случаях $\omega_{\mathbf{K}'' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''} + \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'' + \mathbf{q}} = \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''}$ и $\omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}'} + \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''} = \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''}$. Следовательно, оба интеграла равны

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\pm \mathbf{q}, \pm \omega) \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega + \omega_{\mathbf{K}' + \mathbf{q}, \mathbf{K}''} + i\epsilon)\tau} = \pi \tilde{S}^{(*)}(\pm \mathbf{q}, \pm \omega_{\mathbf{K}'', \mathbf{K}' + \mathbf{q}}).$$

Расчет третьего члена отличается от уже проведенного расчета первого члена лишь заменой $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}''$.

Окончательное выражение для первого и третьего членов в диссипаторе (Б.1) после интегрирования по $d\tau$ приобретает вид

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}(-\tau) \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rangle &= \pi N \sum_{\mathbf{K}''} \left\{ \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}) \delta_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'} + \right. \\ &+ \frac{U_{|\mathbf{K}'-\mathbf{K}''|}}{\hbar\Omega\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''+\mathbf{q}}} [\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''}) - \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}''+\mathbf{q},\mathbf{K}''})] - \\ &\left. - \frac{U_{|\mathbf{K}'-\mathbf{K}''|}}{\hbar\Omega\omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}''}} [\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''}) - \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'})] \right\} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''}. \end{aligned} \quad (\text{Б.8})$$

Аналогичное вычисление второго и четвертого членов в (Б.1) дает

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}(-\tau) \langle \rho_{-\mathbf{q}}(-\tau) \rho_{\mathbf{q}} \rangle &= \\ &= \pi N \sum_{\mathbf{K}''} \left\{ \tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}'+\mathbf{q}}) \delta_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'} + \right. \\ &+ \frac{U_{|\mathbf{K}'-\mathbf{K}''|}}{\hbar\Omega\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''+\mathbf{q}}} [\tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'+\mathbf{q}}) - \tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}''+\mathbf{q}})] - \\ &\left. - \frac{U_{|\mathbf{K}'-\mathbf{K}''|}}{\hbar\Omega\omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}''}} [\tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}'+\mathbf{q}}) - \tilde{S}^*(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}'+\mathbf{q}})] \right\} \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''}. \end{aligned} \quad (\text{Б.9})$$

Подставляя (Б.8) и (Б.9) в диссипатор (Б.1) и используя стандартный переход от суммирования к интегрированию по волновым числам $\sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \Omega/(2\pi)^3 \int d^3\mathbf{q}$, запишем диссипатор основного кинетического уравнения как

$$\begin{aligned} & - \frac{n}{2(2\pi\hbar)^2} \int d^3\mathbf{q} V_q^2 \times \\ & \times \sum_{\mathbf{K},\mathbf{K}',\mathbf{K}''} (\sigma_{\mathbf{K}'-\mathbf{q},\mathbf{K}} \rho_A(t) \Sigma_I(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) \delta_{\mathbf{K}'',\mathbf{K}-\mathbf{q}} + \\ & + \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}',\mathbf{K}''} \Sigma_{II}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q}) \delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'+\mathbf{q}} - \sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q},\mathbf{K}} \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''} \Sigma_{III}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q}) - \\ & - \sigma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}''} \rho_A(t) \sigma_{\mathbf{K}-\mathbf{q},\mathbf{K}} \Sigma_{IV}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})). \end{aligned} \quad (\text{Б.10})$$

Функцию $\Sigma_I(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q})$ можно вычислить, применяя дельта-символы Кронекера к фигурным скобкам в (Б.8):

$$\begin{aligned} \Sigma_I(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) &= \tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'}) \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{q},\mathbf{K}'} + \frac{U_{|\mathbf{K}'-\mathbf{K}+\mathbf{q}|}}{\hbar\Omega} \times \\ &\times \left[\frac{\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}-\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}}} - \frac{\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K},\mathbf{K}-\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}}} - \right. \\ &\left. - \frac{\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}-\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}-\mathbf{q}}} + \frac{\tilde{S}(-\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}'+\mathbf{q},\mathbf{K}'})}{\omega_{\mathbf{K}',\mathbf{K}-\mathbf{q}}} \right]. \end{aligned}$$

Краткие обозначения $\Sigma_{II}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q}) = \Sigma_{III}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$ и $\Sigma_{IV}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$ применяются для немодифицированных фигурных скобок соответственно из (Б.9) и (Б.8). Для упрощения можно снова использовать тот факт, что переменные интегрирования

по волновым числам можно менять местами и сдвигать без изменения результата. Обращая знак $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ и далее производя сдвиг $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}' + \mathbf{q}$, вместо $\Sigma_I(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q})$ можно использовать

$$\Sigma(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q}) = \tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}+\mathbf{q}}) \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} + \frac{U_{|\mathbf{K}-\mathbf{K}'|}}{\hbar\Omega} \times \\ \times \left[\frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}} - \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}', \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}} - \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}}} + \frac{\tilde{S}(\mathbf{q}, \omega_{\mathbf{K}, \mathbf{K}+\mathbf{q}})}{\omega_{\mathbf{K}+\mathbf{q}, \mathbf{K}'+\mathbf{q}}} \right].$$

При этом из $\Sigma_{II}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$, производя замену $\mathbf{K}'' \rightarrow \mathbf{K}$, получаем $\Sigma^*(\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{q})$, поскольку $\omega_{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2}$ изменяет знак при перестановке индексов. Так же путем взаимной замены $\mathbf{K}' \leftrightarrow \mathbf{K}''$ из $\Sigma_{III}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$ получаем $\Sigma^*(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$. Наконец, обращение знака $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ и последующие сдвиги $\mathbf{K}' \rightarrow \mathbf{K}' + \mathbf{q}$ и $\mathbf{K}'' \rightarrow \mathbf{K}'' + \mathbf{q}$ приводят от $\Sigma_{IV}(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$ к $\Sigma(\mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{q})$. С индексами σ -операторов в соответствующих членах можно выполнить преобразования переменных интегрирования. После окончательного сдвига $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K} + \mathbf{q}$ в третьем члене диссипатор (Б.10) можно привести к виду (74).

Благодарности. Авторы благодарят профессора В. Г. Морозова за обсуждения. Данная работа была поддержана DFG SFB 652.

Список литературы

- [1] E. Joos, H. D. Zeh, C. Kiefer et al., *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, Berlin, 2003.
- [2] G. Auletta, *Foundations and Interpretation of Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore, 2000.
- [3] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems*, World Scientific, Signapore, 1999.
- [4] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М., 1971.
- [5] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Т. 1, Физматлит, М., 2002.
- [6] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Т. 2, Физматлит, М., 2002.
- [7] K. Hornberger, J. E. Sipe, *Phys. Rev. A*, **68** (2003), 012105.
- [8] L. Hackermüller, K. Hornberger, B. Brezger et al., *Nature*, **427** (2004), 711–714.
- [9] L. Hackermüller, S. Uttenthaler, K. Hornberger et al., *Phys. Rev. Lett.*, **91** (2003), 090408.
- [10] B. Brezger, L. Hackermüller, S. Uttenthaler et al., *Phys. Rev. Lett.*, **88** (2002.), 100404.
- [11] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2002.
- [12] B. Krummheuer, V. M. Axt, T. Kuhn, *Phys. Rev. B*, **65** (2002), 195313.
- [13] R. Omnès, *The Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton Ser. Phys., Princeton Univ. Press, Princeton, 1994.
- [14] R. Omnès, *Understanding Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, 1999.
- [15] W. H. Zurek, S. Habib, J. P. Paz, *Phys. Rev. Lett.*, **70** (1993), 1187–1190.
- [16] F. Petruccione, B. Vacchini, *Phys. Rev. E*, **71** (2005), 046134.
- [17] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, *Phys. A*, **121** (1983), 587–616.
- [18] L. Diósi, *Europhys. Lett.*, **30** (1995), 63–68.
- [19] W. Ebeling, A. Filinov, M. Bonitz et al., *J. Phys. A*, **39** (2006), 4309–4317.
- [20] C. Gocke, G. Röpke, *Contrib. Plasma Phys.*, **47** (2007), 291–296.
- [21] T. F. Gallagher, *Rydberg Atoms*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1994.
- [22] I. L. Beigman, V. S. Lebedev, *Physics of Highly Excited Atoms and Ions*, Springer, Berlin, 1998.

- [23] T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin et al., *Phys. Rev. Lett.*, **86** (2001), 3759–3762.
- [24] T. C. Killian, *Science*, **316** (2007), 705–708.
- [25] T. C. Killian, T. Pattard, T. Pohl, J. M. Rost, *Phys. Rep.*, **449** (2007), 77–130.
- [26] M. Fleischhauer, S. F. Yelin, *Phys. Rev. A*, **59** (1999), 2427.
- [27] L. C. Johnson, *Astrophys. J.*, **174** (1972), 227–236.
- [28] M. D. Lukin, M. Fleischhauer, R. Cote et al., *Phys. Rev. Lett.*, **87** (2001), 037901.
- [29] P. Mansbach, J. Keck, *Phys. Rev.*, **181** (1969), 275–289.
- [30] L. Vriens, A. H. M. Smeets, *Phys. Rev. A*, **22** (1980), 940–951.
- [31] C. Gocke, G. Röpke, “Dephasing in Rydberg plasmas”, *Condensed Matter Theories*, **21**, eds. H. Akai, A. Hosaka, H. Toki, F. B. Malik, Huntington, NY, Nova Sci. Publ., 2007.
- [32] C. Gocke, G. Röpke, *J. Phys. A*, **39** (2006), 4587–4594.
- [33] I. I. Ryabtsev, D. B. Tretyakov, I. I. Beterov, *J. Phys. B*, **38** (2005), S421–S436.
- [34] Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике*, Гостехиздат, М.–Л., 1946.
- [35] S. Nakajima, *Prog. Theor. Phys.*, **20** (1958), 948–959.
- [36] R. Zwanzig, *J. Chem. Phys.*, **33** (1960), 1338–1341.
- [37] R. Zwanzig, “Statistical mechanics of irreversibility”, *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. 3, eds. W. E. Brittin, B. W. Downs, J. Downs, Interscience, New York, 1961, 106–141.
- [38] R. Zwanzig, *Physica*, **30** (1964), 1109–1123.
- [39] J. Kupsch, “Open quantum systems”, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, eds. E. Joos, H. D. Zeh, C. Kiefer et al., Springer, Berlin, 2003, 317–356.
- [40] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics. Physics of Solids and Liquids*, Plenum Press, New York, 1990.
- [41] S. F. Yelin, M. Kostrun, T. Wang, M. Fleischhauer, *Correlation in superradiance: A closed-form approach to cooperative effects*, [arXiv: quant-ph/0509184](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0509184).
- [42] H. M. Cataldo, M. A. Despósito, E. S. Hernández, D. M. Jezek, *Phys. Rev. B*, **55** (1997), 3792–3797.
- [43] J. P. Paz, W. H. Zurek, *Phys. Rev. Lett.*, **82** (1999), 5181–5185.
- [44] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.*, **48** (1976), 119–130.
- [45] В.-Д. Крефт, Д. Кремп, В. Эбелинг, Г. Репке, *Квантовая статистика систем заряженных частиц*, Мир, М., 1988.
- [46] G. Röpke, *Phys. Rev. E*, **57** (1998), 4673–4683.
- [47] G. Röpke, A. Wierling, *Phys. Rev. E*, **57** (1998), 7075–7085.
- [48] H. Reinholz, R. Redmer, G. Röpke, A. Wierling, *Phys. Rev. E*, **62** (2000), 5648–5666.
- [49] A. Selchow, G. Röpke, A. Wierling et al., *Phys. Rev.*, **64** (2001), 056410.
- [50] B. Vacchini, *Phys. Rev. E*, **63** (2001), 066115.
- [51] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, 1998.
- [52] J. P. Coleman, “The impulse approximation and related methods in the theory of atomic collisions”, *Case Studies in Atomic Collision Physics*, Vol. 1, eds. E. W. McDaniel, M. R. C. McDowell, North-Holland, Amsterdam, 1969, 99–167.
- [53] K. Hornberger, J. E. Sipe, M. Arndt, *Phys. Rev. A*, **70** (2004), 053608.
- [54] A. S. Holevo, “Covariant quantum dynamical semigroups: unbounded generators”, *Irreversibility and Causality. Semigroups and Rigged Hilbert Spaces* (Goslar, Germany, 1996), *Lecture Notes in Phys.*, **504**, eds. P. Kielanowski, A. Bohm, H.-D. Doebner, Springer, Berlin, 1998, 67–81.
- [55] S. Chaturvedi, F. Shibata, *Z. Phys. B*, **35** (1979), 297–308.