Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Г. Морозов, Статистическая механика релаксационных процессов в переменных полях, *ТМФ*, 2008, том 154, номер 1, 102–112

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6154>

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: 3.89.197.203

26 апреля 2023 г., 11:43:44

© 2008 г.

В. Г. Морозов*

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЕРЕМЕННЫХ ПОЛЯХ

С помощью метода неравновесного статистического оператора и проекционной техники выведена система точных релаксационных уравнений для квантовой системы, взаимодействующей с переменным внешним полем. Эти уравнения справедливы в случае, когда некоторые базисные динамические переменные, описывающие неравновесное состояние, явно зависят от времени. Получено точное выражение для производства энтропии в переменном внешнем поле.

Ключевые слова: неравновесная статистическая механика, метод неравновесного статистического оператора, релаксационные процессы.

1. ВВЕДЕНИЕ

Теория релаксационных процессов во внешних переменных полях относится к наиболее важным разделам неравновесной статистической механики. В последнее время интерес к этому кругу проблем значительно возрос в связи с экспериментами по взаимодействию мощных коротких лазерных импульсов с полупроводниками [1]–[3].

Кроме многочисленных частных подходов, в настоящее время существуют мощные методы, позволяющие получать конкретные уравнения для различного типа релаксационных процессов в переменном внешнем поле. Метод неравновесных функций Грина [1], [4] наиболее удобен в тех случаях, когда неравновесный процесс можно описать в рамках квазичастичного приближения. К сожалению, в этом методе сложно учесть многочастичные корреляции, роль которых исключительно важна в немарковском режиме, характерном для релаксационных процессов в переменном поле. Существенным недостатком приближенных схем вывода кинетических уравнений в методе функций Грина является то, что в немарковских интегралах столкновений неправильно учитывается баланс энергии при взаимодействии системы с полем и нарушается закон сохранения полной энергии после окончания действия поля [1]. Как показывает численное решение немарковских кинетических уравнений, это приводит к нефизическому поведению функций распределения на релаксационной стадии процесса. В принципе этот недостаток можно преодолеть,

*Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (Технический университет), Москва, Россия. E-mail: vmorozov@orc.ru

решая численно полные уравнения Каданова–Бейма для корреляционных функций [4], однако возможности современных компьютеров пока позволяют получить решение лишь для очень простых моделей.

Альтернативными методами в теории релаксационных процессов являются метод неравновесного статистического оператора (НСО) Зубарева [5]–[8] и близкий к нему по основным идеям метод неравновесной матрицы плотности [9], [10]. В рамках квазичастичного приближения эти методы, по существу, эквивалентны методу функций Грина, однако в них гораздо легче учесть вклад многочастичных неравновесных корреляций в кинетические и релаксационные уравнения. Это позволяет, в частности, получать немарковские интегралы столкновений, которые не нарушают баланса энергии при взаимодействии системы с переменным полем и согласуются с законом сохранения энергии на релаксационной стадии процесса [11]–[13].

При описании конкретных процессов в твердых телах под воздействием переменного поля обычно используют приближение слабого взаимодействия между квазичастицами, а влияние самого поля на кинетические свойства системы учитывают по возможности точно, поскольку наиболее интересные эффекты проявляются именно в сильных полях [1], [4], [8], [10], [14]. Несмотря на “естественность” такого подхода, условия его применимости в настоящее время не вполне ясны, о чем, в частности, свидетельствуют упомянутые выше проблемы с балансом энергии в немарковском режиме. В связи с этим представляют интерес *точные* релаксационные уравнения для произвольного набора наблюдаемых, характеризующих неравновесное состояние системы. Такие уравнения выводятся в методе НСО с помощью техники проекционных операторов [6]. Хотя эти уравнения весьма сложны, они могут служить основой для построения самосогласованных приближений.

В общем случае роль наблюдаемых $P_m(t)$ играют средние значения (квантовых или классических) базисных динамических переменных $\hat{P}_m$, вычисленные с НСО $\varrho(t)$ или классической фазовой функцией распределения. В зависимости от выбора базисных динамических переменных обобщенные релаксационные уравнения могут описывать неравновесные процессы на различных временных масштабах¹⁾. До сих пор при выводе обобщенных релаксационных уравнений из “первых принципов” предполагалось, что сами базисные динамические переменные не зависят явно от времени. Однако для описания неравновесных процессов в переменном внешнем поле бывает удобно отказаться от этого предположения. Например, если система заряженных частиц находится в переменном электромагнитном поле, то в оператор плотности тока явно входит векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Другой типичный пример ситуации, когда базисные динамические переменные явно зависят от времени, будет рассмотрен в следующем разделе.

В данной работе схема вывода релаксационных уравнений в методе НСО [6] обобщается на случай, когда система находится в произвольном переменном внешнем поле и некоторые базисные динамические переменные явно зависят от времени. Как будет показано далее, такое обобщение содержит ряд нетривиальных моментов, которые необходимо учитывать при построении самосогласованных приближений.

¹⁾ Подробное обсуждение этого вопроса приводится, например, в книге [8].

2. МЕТОД НСО ДЛЯ ПРОЦЕССОВ В ПЕРЕМЕННОМ ПОЛЕ

Как известно, для описания *необратимых* процессов необходимо нарушить симметрию квантового или классического уравнения Лиувилля относительно обращения времени. В методе НСО отбор запаздывающих решений уравнения Лиувилля осуществляется с помощью бесконечно малого источника [5]–[7]. Если система находится во внешнем переменном поле и, следовательно, ее гамильтониан $\hat{H}(t)$ явно зависит от времени, то модифицированное уравнение Лиувилля для статистического оператора $\varrho(t)$ имеет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(t)\right)\varrho(t) = -\varepsilon\{\varrho(t) - \varrho_{\text{rel}}(t)\}, \quad \varepsilon \rightarrow +0. \quad (2.1)$$

Действие оператора Лиувилля $L(t)$ на динамические переменные определяется соотношением²⁾ $iL(t)\hat{A} = [\hat{A}, \hat{H}(t)]/(i\hbar)$. Вспомогательный *релевантный статистический оператор* $\varrho_{\text{rel}}(t)$ находится из условия максимума информационной энтропии при заданных значениях наблюдаемых $P_m(t) = \text{Tr}\{\hat{P}_m(t)\varrho(t)\}$, где аргумент t базисных динамических переменных $\hat{P}_m(t)$ учитывает возможную явную зависимость этих переменных от времени. Релевантный статистический оператор удобно записывать в форме

$$\varrho_{\text{rel}}(t) = e^{-\hat{S}(t)}, \quad (2.2)$$

где $\hat{S}(t)$ играет роль оператора энтропии и дается выражением [6]

$$\hat{S}(t) = \Phi(t) + \sum_m \hat{P}_m(t) F_m(t). \quad (2.3)$$

Функция Массье–Планка $\Phi(t)$ определяется из условия нормировки

$$\Phi(t) = \ln \text{Tr} \exp \left\{ - \sum_m \hat{P}_m(t) F_m(t) \right\}, \quad (2.4)$$

а параметры $F_m(t)$ (множители Лагранжа) находятся из условий самосогласования (неравновесных уравнений состояния)

$$P_m(t) = \text{Tr}\{\hat{P}_m(t)\varrho_{\text{rel}}(t)\}. \quad (2.5)$$

Опишем кратко одну из типичных реализаций этой схемы. Предположим, что интересующая нас подсистема (S) взаимодействует с переменным внешним полем и с другой подсистемой (T) – термостатом. В этом случае полный гамильтониан записывается как

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_S(t) + \hat{H}_T + \hat{V}_{ST}, \quad (2.6)$$

где $\hat{H}_S(t)$ – гамильтониан подсистемы S, $\hat{H}_T$ – гамильтониан термостата, $\hat{V}_{ST}$ – гамильтониан взаимодействия между ними. Будем считать, что в каждый момент

²⁾Для определенности мы будем рассматривать квантовые системы, однако все последующие рассуждения легко переносятся на классический случай, если статистический оператор, гамильтониан и динамические переменные интерпретировать как функции в фазовом пространстве.

времени состояния подсистемы S и термостата являются пространственно однородными³⁾. В качестве базисных динамических переменных выберем операторы $\{\hat{P}_m(t)\} = \{\hat{\mathcal{H}}_S(t), \hat{H}_T, \{\hat{f}_i\}\}$, где $\hat{\mathcal{H}}_S(t) = \hat{H}_S(t) + \hat{V}_{ST}$ – эффективный гамильтониан подсистемы S , $\hat{f}_i$ – дополнительные динамические переменные, средние значения которых характеризуют неравновесное состояние. Например, при кинетическом описании $\hat{f}_i = \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}$, где $\mathbf{p}$ – импульс квазичастицы, σ – спиновый индекс. Тогда релевантный статистический оператор имеет вид

$$\varrho_{\text{rel}}(t) = \exp \left\{ -\Phi(t) - \beta_S(t) \hat{\mathcal{H}}_S(t) - \beta_T(t) \hat{H}_T - \sum_i \lambda_i(t) \hat{f}_i \right\}. \quad (2.7)$$

Параметры $\beta_S(t)$ и $\beta_T(t)$ можно интерпретировать как обратные квазitemпературы подсистемы и термостата, соответственно; $\lambda_i(t)$ – дополнительные лагранжевы множители, сопряженные динамическим переменным $\hat{f}_i$. Как видно из (2.7), в данном случае $\hat{\mathcal{H}}_S(t)$ явно зависит от времени.

Отметим, что включение $\hat{\mathcal{H}}_S(t)$ и $\hat{H}_T$ в набор базисных динамических переменных приводит к важным последствиям. Во-первых, автоматически обеспечивается правильный баланс энергии во время действия переменного поля и сохранение энергии после выключения поля. Во-вторых, на стадии релаксации системы к равновесию релевантный статистический оператор (2.7) описывает многочастичные корреляции, связанные с сохранением энергии. Учет вклада этих корреляций в немарковские интегралы столкновений устраняет нефизическое поведение функций распределения квазичастиц [11]–[13].

Остановимся на одном обстоятельстве, которое играет важную роль при выводе релаксационных уравнений для наблюдаемых $P_m(t)$ в случае, когда некоторые базисные динамические переменные явно зависят от времени. Как уже отмечалось, условия самосогласования (2.5) имеют смысл неравновесных уравнений состояния. Из них, в принципе, лагранжевы множители находятся в виде $F_m = F_m(\{P_n(t)\}; t)$, где второй аргумент указывает на явную зависимость параметров F_m от времени, связанную с зависимостью от времени динамических переменных $\hat{P}_n(t)$. Поэтому

$$\frac{dF_m(t)}{dt} = \sum_n \frac{\delta F_m(t)}{\delta P_n(t)} \frac{dP_n(t)}{dt} + \left(\frac{\partial F_m(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}}, \quad (2.8)$$

где операция $\delta/\delta P_m(t)$ означает обычное дифференцирование, если индексы m принимают дискретный ряд значений, или вариационное дифференцирование в случае непрерывных индексов. Последняя производная в (2.8) вычисляется при постоянных значениях наблюдаемых. Она равна нулю, если динамические переменные не зависят явно от времени. Очевидно, что аналогичные выражения справедливы для $d\Phi(t)/dt$ и для производной от неравновесной энтропии

$$S(t) = \Phi(t) + \sum_m P_m(t) F_m(t). \quad (2.9)$$

³⁾ Это предположение вполне оправданно, например, для описания взаимодействия лазерного излучения с полупроводниками [1].

Отметим, однако, что в переменном поле сохраняют свой вид “термодинамические” равенства [6]

$$P_m(t) = -\frac{\delta\Phi(t)}{\delta F_m(t)}, \quad F_m(t) = \frac{\delta S(t)}{\delta P_m(t)} \quad (2.10)$$

и выполняются соотношения

$$\frac{\delta P_m(t)}{\delta F_n(t)} = -(\hat{P}_m, \hat{P}_n), \quad \frac{\delta F_m(t)}{\delta P_n(t)} = -(\hat{P}, \hat{P})_{mn}^{-1}, \quad (2.11)$$

где

$$(\hat{A}, \hat{B}) = \int_0^1 dx \langle \Delta \hat{A} \varrho_{\text{rel}}^x \Delta \hat{B} \varrho_{\text{rel}}^{-x} \rangle_{\text{rel}} \quad (2.12)$$

– корреляционные функции в релевантном ансамбле, $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\text{rel}}$, $\Delta \hat{B} = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_{\text{rel}}$.

3. ОБОБЩЕННЫЕ РЕЛАКСАЦИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ

Уравнения движения для наблюдаемых получаются дифференцированием по времени соотношений $P_m(t) = \text{Tr}\{\hat{P}_m(t)\varrho(t)\}$. С учетом уравнения (2.1) имеем

$$\frac{dP_m(t)}{dt} = \text{Tr}\left\{\frac{d\hat{P}_m(t)}{dt} \varrho(t)\right\}, \quad (3.1)$$

где

$$\frac{d\hat{P}_m(t)}{dt} = \{\partial_t + iL(t)\}\hat{P}_m(t) \quad (3.2)$$

– полная производная динамической переменной по времени. Чтобы преобразовать уравнения движения (3.1) в релаксационные уравнения, нужно найти представление для НСО $\varrho(t)$ в виде функционала от наблюдаемых. Для этого применим обычную схему метода НСО [6]. Запишем статистический оператор в виде суммы

$$\varrho(t) = \varrho_{\text{rel}}(t) + \Delta\varrho(t). \quad (3.3)$$

Подстановка этого выражения в уравнение Лиувилля (2.1) приводит к уравнению для $\Delta\varrho(t)$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(t) + \varepsilon\right)\Delta\varrho(t) = -\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL(t)\right)\varrho_{\text{rel}}(t). \quad (3.4)$$

Если базисные динамические переменные не зависят явно от времени, производную $\partial\varrho_{\text{rel}}(t)/\partial t$ удастся исключить с помощью проекционных операторов [6]. Покажем, что это можно сделать и в рассматриваемом случае.

Учитывая, что квазиравновесный статистический оператор зависит от наблюдаемых $P_n(t)$ и параметрически зависит от времени через операторы базисных динамических переменных, запишем

$$\frac{\partial\varrho_{\text{rel}}(t)}{\partial t} = \sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \frac{dP_m(t)}{dt} + \left(\frac{\partial\varrho_{\text{rel}}(t)}{\partial t}\right)_{\text{expl}} =$$

$$\begin{aligned}
&= -\mathcal{P}_R(t)iL(t)\Delta\varrho(t) + \sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \text{Tr}\{(\partial_t \hat{P}_m)\Delta\varrho(t)\} - \\
&\quad - \mathcal{P}_R(t)iL(t)\varrho_{\text{rel}}(t) + \sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} + \left(\frac{\partial\varrho_{\text{rel}}(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}}, \quad (3.5)
\end{aligned}$$

где $\mathcal{P}_R(t)$ – проекционный оператор Робертсона [6], действие которого на любую динамическую переменную $\hat{A}$ определяется формулой⁴⁾

$$\mathcal{P}_R(t)\hat{A} = \sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \text{Tr}\{\hat{P}_m(t)\hat{A}\}. \quad (3.6)$$

Дальнейшие преобразования двух последних членов в (3.5) элементарны, но несколько громоздки. Они подробно рассмотрены в приложении. Здесь мы приведем окончательный результат:

$$\begin{aligned}
&\sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} + \left(\frac{\partial\varrho_{\text{rel}}(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \\
&\quad = - \sum_n \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x(t) \{ \mathcal{Q}(t) \partial_t \hat{P}_n \} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}(t) F_n(t), \quad (3.7)
\end{aligned}$$

где $\mathcal{Q}(t) = 1 - \mathcal{P}(t)$ – проектор, дополнительный к проекционному оператору Мори [6], действующему на динамические переменные по правилу

$$\mathcal{P}(t)\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle_{\text{rel}}^t + \sum_m \frac{\delta \langle \hat{A} \rangle_{\text{rel}}^t}{\delta P_m(t)} (\hat{P}_m(t) - P_m(t)). \quad (3.8)$$

Как и в случае, когда базисные динамические переменные не зависят явно от времени, проекционный оператор Мори обладает важным свойством: $\mathcal{P}(t)\hat{P}_m(t) = \hat{P}_m(t)$.

Подставляя выражение (3.7) в (3.5) и используя тождества [6]

$$iL\varrho_{\text{rel}} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \{ iL\hat{S} \} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}, \quad \mathcal{P}_R iL\varrho_{\text{rel}} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \{ \mathcal{P} iL\hat{S} \} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}, \quad (3.9)$$

уравнение (3.4) можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + i\mathcal{L}(t) + \varepsilon \right) \Delta\varrho(t) = \sum_n \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x(t) \hat{I}_n(t) \varrho_{\text{rel}}^{1-x}(t) F_n(t), \quad (3.10)$$

где введены операторы “случайных сил”

$$\hat{I}_n(t) = \mathcal{Q}(t) \frac{d\hat{P}_n(t)}{dt} = \mathcal{Q}(t) \{ \partial_t + iL(t) \} \hat{P}_n(t). \quad (3.11)$$

⁴⁾Заметим, что для оператора $\mathcal{P}_R$, определяемого (3.6), справедливо равенство $\mathcal{P}_R^2 = \mathcal{P}_R$, однако соотношение $\mathcal{P}_R(\partial\varrho(t)/\partial t) = \partial\varrho_{\text{rel}}(t)/\partial t$, которое играет ключевую роль в методе Робертсона [6], выполняется только в случае, когда базисные динамические переменные не зависят явно от времени.

Отметим, что эти операторы ортогональны к базисным динамическим переменным, т.е. $\mathcal{P}(t)\hat{I}_n(t) = 0$. Эволюция $\Delta\varrho(t)$ описывается “приведенным оператором Лиувилля”, действие которого определяется соотношением

$$i\mathcal{L}(t)\hat{A} = [1 - \mathcal{P}_R(t)]iL(t)\hat{A} + \sum_m \frac{\delta\varrho_{\text{rel}}(t)}{\delta P_m(t)} \text{Tr}\{\hat{A}\partial_t\hat{P}_m(t)\}. \quad (3.12)$$

Второй член отсутствует, если базисные динамические переменные не зависят явно от времени.

Формальное интегрирование уравнения (3.10) от $-\infty$ до t дает

$$\Delta\varrho(t) = \sum_n \int_{-\infty}^t dt' e^{-\varepsilon(t-t')} F_n(t') \mathcal{U}(t, t') \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x(t') \hat{I}_n(t') \varrho_{\text{rel}}^{1-x}(t'), \quad (3.13)$$

где оператор эволюции имеет вид упорядоченной экспоненты:

$$\mathcal{U}(t, t') = \exp_+ \left\{ - \int_{t'}^t d\tau i\mathcal{L}(\tau) \right\}. \quad (3.14)$$

Заметим теперь, что, поскольку $\text{Tr}\{(\mathcal{P} d\hat{P}_m/dt)\Delta\varrho\} = 0$, уравнения движения (3.1) можно записать как

$$\frac{dP_m(t)}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{P}_m(t)}{dt} \right\rangle_{\text{rel}}^t + \text{Tr}\{\hat{I}_m(t)\Delta\varrho(t)\}.$$

Подставляя сюда выражение (3.13) для $\Delta\varrho(t)$, приходим к системе обобщенных релаксационных уравнений для наблюдаемых:

$$\frac{dP_m(t)}{dt} = \left\langle \frac{d\hat{P}_m(t)}{dt} \right\rangle_{\text{rel}}^t + \sum_n \int_{-\infty}^t dt' e^{-\varepsilon(t-t')} \mathcal{K}_{mn}(t, t') F_n(t'). \quad (3.15)$$

Величины

$$\mathcal{K}_{mn}(t, t') = \int_0^1 dx \text{Tr}\{\hat{I}_m(t)\mathcal{U}(t, t')\varrho_{\text{rel}}^x(t')\hat{I}_n(t')\varrho_{\text{rel}}^{1-x}(t')\} \quad (3.16)$$

играют роль кинетических коэффициентов.

Релаксационные уравнения (3.15) являются *точными* и имеют ту же структуру, что и уравнения для средних значений базисных динамических переменных, не зависящих явно от времени [6], однако теперь вместо потоков $iL\hat{P}_m$ всюду входят полные производные (3.2) базисных переменных. Кроме того, изменяется определение приведенного оператора Лиувилля (см. (3.12)).

4. ПРОИЗВОДСТВО ЭНТРОПИИ В ПЕРЕМЕННОМ ПОЛЕ

Важным аспектом неравновесной статистической механики является вопрос о поведении энтропии. Покажем, что с помощью релаксационных уравнений (3.15) можно получить общую формулу для производства энтропии системы, находящейся в переменном внешнем поле.

Из соотношения (2.9) ясно, что $S(t) = S(\{P_n(t)\}; t)$. Второй аргумент указывает на параметрическую зависимость энтропии от времени, связанную с явной зависимостью от времени базисных переменных $\hat{P}_n(t)$. Поэтому

$$\begin{aligned} \frac{dS(t)}{dt} &= \sum_m \frac{\delta S(t)}{\delta P_m(t)} \frac{dP_m(t)}{dt} + \left(\frac{\partial S(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \\ &= \sum_m F_m(t) \frac{dP_m(t)}{dt} + \left(\frac{\partial S(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

где были использованы термодинамические равенства (2.10). Согласно (2.9) последний член в (4.1) можно переписать как

$$\left(\frac{\partial S(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \left(\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} + \sum_m \left(\frac{\partial F_m(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} P_m(t).$$

Для вычисления производной от функции Масье–Планка проще всего воспользоваться ее определением (2.4). С учетом условий самосогласования (2.5) получаем

$$\left(\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = - \sum_m F_m(t) \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}}^t - \sum_m \left(\frac{\partial F_m(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} P_m(t).$$

Комбинируя два последних равенства, приводим выражение (4.1) к виду

$$\frac{dS(t)}{dt} = \sum_m F_m(t) \frac{dP_m(t)}{dt} - \sum_m F_m(t) \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}}^t. \quad (4.2)$$

Производные от наблюдаемых можно исключить с помощью кинетического уравнения (3.15). При этом оказывается, что вклад первого члена из правой части (3.15) в производство энтропии точно сокращается с последним членом в выражении (4.2). Действительно, для суммы этих вкладов имеем

$$\sum_m F_m \left\langle \frac{d\hat{P}_m(t)}{dt} \right\rangle_{\text{rel}} - \sum_m F_m \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} = \sum_m F_m \langle iL\hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} = \langle \{\hat{S}, \hat{H}\}_{\text{P}} \rangle_{\text{rel}},$$

где $\{\hat{S}, \hat{H}\}_{\text{P}}$ – квантовая или классическая скобка Пуассона. Очевидно, что ее среднее значение, вычисленное с релевантным статистическим распределением (2.2), равно нулю. Таким образом, вклад в производство энтропии дает только интегральный член кинетического уравнения:

$$\frac{dS(t)}{dt} = \sum_{m,n} \int_{-\infty}^t dt' e^{-\varepsilon(t-t')} F_m(t) \mathcal{K}_{mn}(t, t') F_n(t'). \quad (4.3)$$

Формально этот результат совпадает с выражением для производства энтропии в случае, когда отсутствует внешнее поле и базисные динамические переменные не зависят явно от времени [6].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основным результатом настоящей работы является система обобщенных релаксационных уравнений (3.15) для набора наблюдаемых, средние значения которых характеризуют неравновесное состояние системы в переменном внешнем поле. Как уже отмечалось, формальная структура релаксационных уравнений оказалась точно такой же, как в случае, когда отсутствует внешнее поле и базисные динамические переменные $\hat{P}_m$ не зависят явно от времени. Сохраняет свой вид и выражение для производства энтропии. Тем не менее уравнения (3.15) обладают некоторыми особенностями, которые необходимо учитывать в конкретных задачах.

Основная сложность теории релаксационных процессов при наличии переменного поля заключается в нелокальности по времени последнего члена в уравнении (3.15). Поскольку для реальных многочастичных систем невозможно точно вычислить кинетические коэффициенты (3.16) и найти точные выражения для параметров $F_m = F_m(\{P_n(t)\}; t)$ из неравновесных уравнений состояния (2.5), приходится использовать различного рода приближения. Например, если взаимодействие в системе мало, кажется естественным применить теорию возмущений по этому взаимодействию. Напомним, однако, что упомянутые во введении проблемы с балансом энергии в немарковских кинетических уравнениях удается преодолеть, только если сама энергия, включая энергию взаимодействия между частицами системы и, вообще говоря, энергию взаимодействия системы с внешним полем, рассматривается как *независимый* параметр состояния наряду с неравновесными функциями распределения квазичастиц. Поэтому система уравнений (3.15) включает в себя кинетические уравнения для квазичастиц и релаксационное уравнение для энергии системы или ее квазitemпературы. Таким образом, приближения в интегралах столкновений и в уравнении для энергии должны быть согласованы друг с другом. В работе [13] в немарковском борновском приближении была выведена и исследована подобная система связанных кинетических и релаксационных уравнений для электронов в полупроводнике, взаимодействующих с фононами и с произвольным высокочастотным электрическим полем. Полученные в настоящей работе уравнения (3.15) могут быть использованы для построения высших приближений по взаимодействию квазичастиц.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь мы приводим вывод соотношения (3.7). Сначала вычислим вариационную производную $\delta \varrho_{\text{rel}}(t)/\delta P_m(t)$. Согласно (2.2) имеем (для краткости аргумент t опущен)

$$\frac{\delta \varrho_{\text{rel}}}{\delta P_m} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \frac{\delta \hat{S}}{\delta P_m} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}.$$

Вариационную производную оператора энтропии (2.3) можно записать в виде

$$\frac{\delta \hat{S}}{\delta P_m} = \sum_n \Delta \hat{P}_n \frac{\delta F_n}{\delta P_m} = - \sum_n \Delta \hat{P}_n (\hat{P}, \hat{P})_{nm}^{-1},$$

где $\Delta\hat{P}_n = \hat{P}_n - P_n$. Таким образом,

$$\frac{\delta \varrho_{\text{rel}}}{\delta P_m} = \sum_n \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \Delta\hat{P}_n (\hat{P}, \hat{P})_{nm}^{-1} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}. \quad (\text{П.1})$$

Для упрощения формул удобно перейти к матричным обозначениям. Введем векторы $\hat{P} = (\dots, \hat{P}_m, \dots)$, $\partial_t \hat{P} = (\dots, \partial_t \hat{P}_m, \dots)$ и матрицу $(\hat{P}, \hat{P})$ с элементами $(\hat{P}_m, \hat{P}_n)$. Тогда, используя выражение (П.1), получаем

$$\sum_m \frac{\delta \varrho_{\text{rel}}}{\delta P_m} \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} = \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \Delta\hat{P} \frac{1}{(\hat{P}, \hat{P})} \langle \partial_t \hat{P} \rangle_{\text{rel}} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}. \quad (\text{П.2})$$

Рассмотрим теперь частную производную

$$\left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}. \quad (\text{П.3})$$

Из (2.3) следует, что

$$\left(\frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)_{\text{expl}} + \sum_m F_m \partial_t \hat{P}_m + \sum_m \hat{P}_m \left(\frac{\partial F_m}{\partial t} \right)_{\text{expl}}.$$

Частная производная от функции Массье–Планка легко находится с помощью условия (2.4):

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = - \sum_m F_m \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} - \sum_m P_m \left(\frac{\partial F_m}{\partial t} \right)_{\text{expl}}.$$

Два последних соотношения позволяют записать (П.3) в виде

$$\left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = - \sum_m \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \left\{ F_m \Delta(\partial_t \hat{P}_m) + \Delta\hat{P}_m \left(\frac{\partial F_m}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \right\} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}, \quad (\text{П.4})$$

где $\Delta(\partial_t \hat{P}_m) = \partial_t \hat{P}_m - \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}}$.

Для вычисления производных $(\partial F_m / \partial t)_{\text{expl}}$, которые входят в (П.4), воспользуемся следующим приемом. Вернемся к равенству (2.5). Продифференцируем обе части этого равенства по t при условии, что наблюдаемые P_m фиксированы. Это дает

$$\text{Tr} \left\{ \hat{P}_m(t) \left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}(t)}{\partial t} \right)_{\text{expl}} \right\} + \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} = 0.$$

Подставляя сюда выражение (П.4), можно получить систему уравнений для производных $(\partial F_m / \partial t)_{\text{expl}}$. Ее удобно записать в матричной форме

$$(\hat{P}, \hat{P}) \left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{expl}} + (\hat{P}, \partial_t \hat{P}) F = \langle \partial_t \hat{P} \rangle_{\text{rel}}, \quad (\text{П.5})$$

где $F = (\dots, F_m, \dots)$ и $(\hat{P}, \partial_t \hat{P})$ – матрица с элементами $(\hat{P}_m, \partial_t \hat{P}_n)$. Решение системы уравнений (П.5) легко находится:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \frac{1}{(\hat{P}, \hat{P})} [\langle \partial_t \hat{P} \rangle_{\text{rel}} - (\hat{P}, \partial_t \hat{P}) F]. \quad (\text{П.6})$$

Используя этот результат, из (II.4) получаем окончательное выражение для производной релевантного статистического оператора:

$$\left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}}{\partial t}\right)_{\text{expl}} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x \left\{ \Delta(\partial_t \hat{P})F + \Delta \hat{P} \frac{1}{(\hat{P}, \hat{P})} [\langle \partial_t \hat{P} \rangle_{\text{rel}} - (\hat{P}, \partial_t \hat{P})F] \right\} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}. \quad (\text{II.7})$$

Объединяя формулы (II.2) и (II.7), находим

$$\sum_m \frac{\delta \varrho_{\text{rel}}}{\delta P_m} \langle \partial_t \hat{P}_m \rangle_{\text{rel}} + \left(\frac{\partial \varrho_{\text{rel}}}{\partial t}\right)_{\text{expl}} = - \int_0^1 dx \varrho_{\text{rel}}^x F \left\{ \Delta(\partial_t \hat{P}) - (\partial_t \hat{P}, \hat{P}) \frac{1}{(\hat{P}, \hat{P})} \Delta \hat{P} \right\} \varrho_{\text{rel}}^{1-x}, \quad (\text{II.8})$$

где мы учли, что корреляционные функции (2.12) обладают свойством симметрии: $(\hat{A}, \hat{B}) = (\hat{B}, \hat{A})$. Легко проверить, что выражения (II.8) и (3.7) совпадают, так как действие проекционного оператора Мори на динамические переменные (см. (3.8)) можно представить в форме

$$\mathcal{P}(t)\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle_{\text{rel}}^t + (\hat{A}, \hat{P}) \frac{1}{(\hat{P}, \hat{P})} \Delta \hat{P}, \quad (\text{II.9})$$

где было использовано соотношение (II.1).

Список литературы

- [1] Н. Haug, A.-P. Jauho, *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, Springer, Berlin–Heidelberg, 1996.
- [2] J. Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Microstructures*, Springer, Berlin–Heidelberg, 1996.
- [3] F. Rossi, T. Kuhn, *Rev. Mod. Phys.*, **74**:3 (2002), 895.
- [4] M. Bonitz, *Quantum Kinetic Theory*, Teubner Texte zur Physik, **33**, Teubner, Stuttgart–Leipzig, 1998.
- [5] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, М., 1971.
- [6] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Т. 1, Физматлит, М., 2002.
- [7] Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Рёпке, *Статистическая механика неравновесных процессов*, Т. 2, Физматлит, М., 2002.
- [8] R. Luzzi, A. R. Vasconcellos, J. G. Ramos, *Predictive Statistical Mechanics. A Nonequilibrium Ensemble Formalism*, Fund. Theories Phys., **122**, Kluwer, Dordrecht, 2002.
- [9] А. И. Ахиезер, С. В. Пелетминский, *Методы статистической физики*, Наука, М., 1977.
- [10] В. Г. Барьяхтар, Э. Г. Петров, *Кинетические явления в твердых телах*, Наукова думка, Киев, 1989.
- [11] V. G. Morozov, *Condens. Matter Phys.*, **3**:3(23) (2000), 577.
- [12] V. G. Morozov, G. Röpke, *J. Stat. Phys.*, **102**:1–2 (2001), 285.
- [13] V. V. Ignatyuk, V. G. Morozov, *Condens. Matter Phys.*, **7**:3(39) (2004), 579.
- [14] V. P. Seminozhenko, *Phys. Rep.*, **91**:3 (1982), 103.