ЛЕКЦИЯ 8

КВАНТОВАЯ КИНЕТИКА. МЕТОД ЛАНЖЕВЕНА

1. Решение уравнений кинетики методами квантовой механики

С точки зрения квантовой механики физическая величина есть среднее от соответствующего оператора, усредненного с матрицей плотности, причем под знаком шпура операторы можно переставлять.

$$A = Sp\{\hat{A}\hat{\rho}\} = Sp\{\hat{\rho}\hat{A}\}.$$

Если задача стационарная, то есть когда речь идет о равновесии, распределение будет по Гиббсу. Если же задача не стационарная, то нужно написать уравнение для ρ:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]$$

— уравнение Лиувилля, которое нетрудно получить, перейдя от представления Гейзенберга к представлению Шрёдингера:

$$\hat{\rho}_{\text{Ш}} = \mathrm{e}^{-iHt}\,\hat{\rho}_{\Gamma}\,\mathrm{e}^{iHt} \qquad (\hbar = 1).$$

В квантовом случае надо описывать эволюцию системы в рамках уравнения Лиувилля. ρ — это матрица плотности замкнутой системы. Для того чтобы конкретизировать эту проблему, будем рассматривать случай, когда H — это гамильтониан электронов в металле:

$$H = H_0 + H_{\mathrm{f}}\,\mathrm{e}^{-i\omega t}.$$

Если $H_{\mathrm{f}} = 0$, то $H = H_0$, и тогда у этого уравнения возникает тривиальное решение — равновесное распределение Гиббса. В случае наличия внешнего электрического потенциала идет электрический ток. Электрический ток, как известно, это неравновесный процесс, и, следовательно, уже не описывается распределением Гиббса.

! *Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки.*
Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Воспользуемся приближением слабых возмущений:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^{(0)} + \hat{\rho}^{(1)},$$

где $\rho^{(0)}$ соответствует распределению Гиббса. Будем решать задачу в линейном приближении по $\rho^{(1)}$.

$$\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H_0 + H_\mathrm{f}\,\mathrm{e}^{-i\omega t}, \rho^{(0)} + \rho^{(1)}] = -\frac{i}{\hbar}([H_0, \rho^{(0)}] + [H_\mathrm{f}\,\mathrm{e}^{-i\omega t}, \rho^{(0)}] + [H_0, \rho^{(1)}]),$$

$$\frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}([H_0, \rho^{(1)}] + [H_\mathrm{f}\,\mathrm{e}^{-i\omega t}, \rho^{(0)}] \qquad (H_0 \text{ коммутирует с } \rho^{(0)}).$$

Воспользуемся методом адиабатического включения взаимодействия. Разделим ω на действительную и мнимую части:

$$\omega = \omega' + i\omega'',$$

$$\mathrm{e}^{-i\omega t} = \mathrm{e}^{-i\omega' t}\,\mathrm{e}^{\omega'' t}.$$

Тогда под знаком экспоненты будет стоять $\omega'' t$.

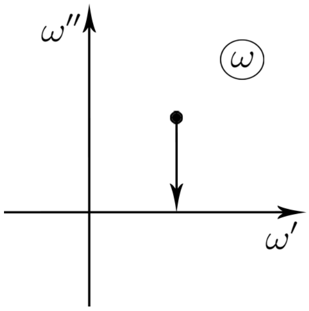

Рис. 8.1

Если положим $\omega'' > 0$, то есть в комплексной плоскости ω мнимая часть будет положительная, то в этом случае возмущение при больших отрицательных временах затухнет. Понятно, что при отрицательных временах система находится в равновесии, т. е. электрического тока нет.

Благодаря тому, что ω'' постепенно устремляется к нулю сверху, имеем задачу с нулевым начальным условием при $t \to -\infty$.

При больших отрицательных временах возбуждения нет, и тогда это дифференциальное уравнение становится проще решать. Сначала решим однородное уравнение для $\rho^{(1)}$. Его решение представимо в виде:

$$\rho^{(1)}(t) = \mathrm{e}^{-iH_0 t}\,\tilde{\rho}(t)\,\mathrm{e}^{-iH_0 t}$$

— поскольку здесь включено только свободное движение, то есть нет внешнего поля, то в экспоненте стоит H_0.

При учете внешнего поля для $\tilde{\rho}$ нужно написать дополнительное уравнение, которое определит эволюцию всей системы.

$$-\frac{i}{\hbar}[H_0, \rho^{(1)}] + \mathrm{e}^{-iH_0 t}\,\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t}\,\mathrm{e}^{iH_0 t} = -\frac{i}{\hbar}([H_0, \rho^{(1)}] - [H_\mathrm{f}, \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{-i\omega t}).$$

! *Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой.*
Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на
pulsar@phystech.edu

! **Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.**

$$\frac{\partial\tilde{\rho}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}[H_\mathrm{f}(t), \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{-i\omega t}, \qquad H_\mathrm{f}(t) = \mathrm{e}^{-iH_0 t}\,H_\mathrm{f}\,\mathrm{e}^{iH_0 t}\,.$$

Проинтегрируем:

$$\tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} dt'[H_\mathrm{f}(t'), \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{-i\omega t'}\,.$$

Надо поставить такой нижний предел интегрирования, чтобы в момент времени t_0 не было взаимодействия, то есть $\rho(t_0) = 0$. Это значит, что $t_0 = -\infty$.

Тогда получаем основную **формулу линейного отклика**:

$$\tilde{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'[H_\mathrm{f}(t'), \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{-i\omega t'},$$

$$\rho^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{-iH_0 t}\,dt'[H_\mathrm{f}(t'), \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{-i\omega t'}\,\mathrm{e}^{iH_0 t}\,.$$

Теперь из матрицы плотности получим электрический ток j. Запишем выражение для тока j, наблюдаемого в момент времени t:

$$j_\text{набл}(t) = Sp\{\hat{j}\hat{\rho}^{(1)}(t)\} = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\,Sp\{\hat{j}\,\mathrm{e}^{-iH_0 t}[\hat{H}_\mathrm{f}(t'), \rho^{(0)}]\,\mathrm{e}^{iH_0 t}\,\mathrm{e}^{-i\omega t'}\} =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\,Sp\hat{j}(t)(H_\mathrm{f}(t')\rho^{(0)} - \rho^{(0)}H_\mathrm{f}(t')).$$

Введём запаздывающую функцию Грина, которая отлична от нуля только при положительных временах:

$$G(t-t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t-t')Sp\rho^{(0)}[j(t), H_\mathrm{f}(t)].$$

Тогда получаем **формулу Кубо**:

$$j_\text{набл}(t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i\omega t'}\,G(t-t')dt' = \mathrm{e}^{-i\omega t}\,G_\omega$$

— электрический ток есть произведение внешней частоты и фурье-компоненты функции Грина.

Если подробнее расписать уравнение для запаздывающей функции Грина, то получится уравнение Больцмана.

Пусть имеется функция Грина:

$$G(t-t') = i\Theta(t-t')\langle[A_\mathrm{t}, B_{\mathrm{t}'}]\rangle,$$

причём $B = H_\mathrm{f}$ — внешний потенциал, $A = ev\hat{a}^+_\mathrm{p}\hat{a}_\mathrm{p}$ — ток.

$$\frac{\partial}{\partial t}G = -i\delta(t-t') - i\Theta(t-t')\langle[-i[H, A], B]\rangle.$$

! **Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu**

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки. Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Такое уравнение более удобно, чем однородное.

Решение волнового уравнения

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \phi = 0$$

есть любая функция $\phi(r - ct)$. Решение не определяется однозначно: нужны начальные условия.

Если подставить в волновое уравнение δ-функцию:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \phi = \delta(t)$$

и произвести преобразование Фурье:

$$\omega^2 \phi + c^2 k^2 \phi = \frac{1}{2\pi},$$

то получим однозначное решение:

$$\phi = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\omega^2 - c^2 k^2}.$$

2. Задача о броуновском движении

Имеется тяжелая частица в воде, и она совершает внутри воды броуновское движение из-за того, что молекулы воды толкают эту частицу то в одну сторону, то в другую.

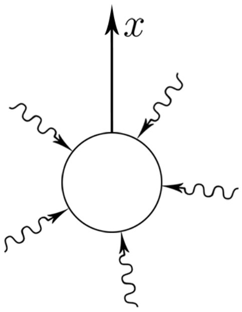

Рис. 8.2

Рассмотрим одномерное движение.

$$m\ddot{x} = -\alpha \dot{x} + \lambda(t),$$

где $\lambda(t)$ — сила Ланжевена, которая носит случайный характер, причём

$$\overline{\lambda(t), \lambda(t')} = \xi \delta(t - t').$$

Если известна амплитуда корреляций ξ, то можно легко сосчитать, как будет релаксировать эта система.

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой. Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

! Конспект не проходил проф. редактуру, создан студентами и, возможно, содержит смысловые ошибки.
Следите за обновлениями на lectoriy.mipt.ru.

Представим искомую функцию в следующем виде:

$$x = C\,\mathrm{e}^{-qt}$$

и подставим в однородное уравнение:

$$mq^2x = \alpha q x \quad \Rightarrow \quad q = \frac{\alpha}{m}.$$

Для решения неоднородного уравнения положим $C = C(t)$:

$$mq^2x + m\,\mathrm{e}^{-qt}\,C' = -\alpha x + \lambda(t) \quad \Rightarrow \quad C' = \lambda(t)\,\mathrm{e}^{qt},$$

$$C = \int\limits_{-\infty}^{t} dt'\lambda(t')\,\mathrm{e}^{qt'},$$

и тогда

$$x(t) = \mathrm{e}^{-qt}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\lambda(t')\,\mathrm{e}^{qt'}.$$

Теперь напишем выражение для скорости:

$$\dot{x} = -q\,\mathrm{e}^{-qt}\int\limits_{-\infty}^{t} dt'\lambda(t')\,\mathrm{e}^{qt'}.$$

$$<\dot{x}^2> = \int dt' \int dt''\lambda(t')\lambda(t'') = \frac{T}{m}.$$

Поскольку $<\lambda\lambda> \sim \xi$, то

$$\xi \sim <\dot{x}^2> \sim \frac{T}{m},$$

т. е. корреляции Ланжевена растут лийнейно с температурой.

Теперь посчитаем другой коррелятор:

$$\frac{1}{2}<x\dot{x}> = <\frac{dx^2}{dt}> = \mathrm{const},$$

$$<x^2> \sim t, \qquad <x^2> = Dt.$$

D называется коэффициентом диффузии.

Таким образом, используя метод Ланжевена, можно вычислить все характеристики броуновского движения, а именно, зная силу Ланжевена, известно, чему равняется коэффициент диффузии.

Метод силы Ланжевена позволяет тривиальным образом решать многочисленные задачи в релаксации.

Нечто близкое по духу используется в уравнении Фоккера – Планка.

Сначала рассмотрим уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (v\nabla)f = -\mathbf{St}f.$$

! Для подготовки к экзаменам пользуйтесь учебной литературой.
Об обнаруженных неточностях и замечаниях просьба писать на pulsar@phystech.edu

В общем случае

$$\mathbf{St} f = \sum_{pp'} w(f_{\mathrm{p}} - f_{\mathrm{p}'}).$$

В случае движения тяжелой частицы в воде изменение импульса частицы будет мало:

$$p' = p + k, \qquad k \ll p.$$

Тогда можно разложить **St** по производным импульса:

$$-\mathbf{St} f = -\frac{\partial}{\partial p}\left(\dot{p} f - D\frac{\partial f}{\partial p}\right).$$

Это уравнение называется уравнением Фоккера – Планка. Его физический смысл был виден в задаче о росте зародышей в теории дождя. Здесь оно тоже имеет место для случая диффузии тяжелых частиц в легких. Оно широко используется в теории плазмы, поскольку в случае рассеяния электронов они рассеиваются, в основном, на малые углы, поэтому можно применить это разложение и получить вместо интегрального уравнения дифференциальное уравнение Фоккера – Планка.