Библиографический список

1. *Morse R. W., Gavenda J. D.* Magnetic oscillations of ultrasonic attenuation in copper crystal at low temperatures // Phys. Rev. Lett. 1959. V. 2, № 6.

2. *Bömmel H., Dransfeld K.* Absorption and rotational dispersion in YIG-crystals // Bull. Am. Phys. Soc. Ser. 2. 1960. V. 5.

3. *Luthi B.* Ferro-acoustic resonance in yttrium iron garnet // Phys. Lett. 1963. V. 3, № 6.

4. *Boyd R. J., Gavenda J. D.* Attenuation and rotation of plane-polarized ultrasound in copper in longitudinal magnetic field // Phys. Rev. 1966. V. 52, № 2.

5. *Гудков В. В., Власов К. Б.* Определение вращения плоскости поляризации и эллиптичности ультразвуковых волн в магнитнополяризованных средах // Физика металлов и металловедение. 1978. Т. 46, вып. 2.

6. *Gudkov V. V., Tarasov B. V.* A technique for measuring the ellipticity and rotation of the polarization plane of ultrasound // J. Acoust. Soc. America. 1998. V. 104, № 5.

7. *Gudkov V. V., Gavenda J. D.* Magnetoacoustic polarization phenomena in solids. New York, 2000.

В. П. Верещагин

ЭКВИВАЛЕНТНОСТЬ СХЕМ МАРКОВСКОГО И НЕМАРКОВСКОГО ОПИСАНИЯ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ СО СЛАБЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В МЕТОДЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ АНСАМБЛЕЙ

Теоретическое описание неравновесных макроскопических систем производится обычно в рамках ограниченного набора переменных, эволюцию которых можно проследить в макроскопическом эксперименте. Такое описание становится возможным, если интересоваться поведением системы на достаточно больших временных масштабах $t - t_0$ (t_0 – начальный момент времени), когда детали начального состояния системы оказываются уже несущественными и сокращается число параметров, необходимых для ее описания. Решение любой конкретной задачи в этом случае заключается в построении и решении уравнений (так называемых уравнений переноса или кинетических уравнений) для ограниченного числа макроскопических переменных (МП), характеризующих состояние системы на рассматриваемом этапе неравновесного процесса. Универсальным методом построения кинетических уравнений может служить в принципе метод неравновесного статистического оператора (НСО) в форме, предложенной Д. Н. Зубаревым и В. П. Калашниковым [1–5]. Этот метод основывается на использовании неравновесного статистического оператора $\hat{\rho}$, который должен соответствовать принятому в каждом конкретном случае уровню сокращенного описания и сам подлежит определению в виде некоторого функционала, зависящего во все моменты времени только от долгоживущих МП – параметров сокращенного описания.

В любом из вариантов метода [1–5] точные выражения для $\hat{\rho}$ представляют собой немарковские функционалы от МП, поэтому кинетические уравнения, получаемые в его рамках, имеют немарковский характер. С другой стороны, анализ конкретных систем показывает, что использование немарковских НСО не всегда оправдано. В частности, так обстоит дело при исследовании неравновесных процессов в системах со слабым взаимодействием V в отсутствие переменных внешних полей. О том свидетельствуют, например, результаты работ [6–7], в которых метод [1–5] применяется к описанию кинетической стадии неравновесного процесса в слабо неидеальных системах, и работы [8]. В работе [6] показано, что в выражении для НСО с точностью до членов $\sim V$ можно пренебречь запаздыванием по МП и получить в этом приближении локальные по времени (марковские) кинетические уравнения, а в статье [7] найдена марковская аппроксимация НСО и интеграла столкновений в следующем приближении по V. В статье [8] был предложен систематический подход, позволяющий последовательно учитывать эффекты запаздывания по МП в виде разложения по степеням V, и на его основе показано, что НСО аппроксимируется марковским функционалом с любой точностью по V. Следует подчеркнуть, что переход к марковскому описанию в работах [6–8] не связан с использованием каких-либо специальных предположений о характере зависимости НСО от МП.

Альтернативным является подход, при котором марковский тип зависимости НСО постулируется с самого начала [9; 10]. Установлено, что в низших порядках по V этот подход приводит к тем же кинетическим уравнениям, что и [6–8]. Таким образом, имеются основания предполагать, что в случае систем со слабым взаимодействием возможен переход к схеме марковского (в широком смысле) описания эволюции МП, эквивалентной в этом случае схеме [1–5].

Для того чтобы обосновать эту точку зрения и решить поставленную в работе [5] проблему доказательства эквивалентности различных форм НСО, необходимо исследовать возможность вывода в рамках метода [1–5] точного марковского уравнения для НСО без использования каких-либо априорных предположений о марковости неравновесного процесса.

В данной статье развиваются и обобщаются результаты работ [8; 11; 12] в этом направлении. Рассмотрено решение задачи для систем, описываемых квантовой статистикой, найдено точное марковское уравнение для НСО в интегральной форме, удобной для решения методом итераций, и установлена его эквивалентность уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником, т. е. исходному уравнению для НСО в методе [1–5]. На основании этого делается вывод об эквивалентности марковской и немарковской форм НСО. Предложен способ перехода к марковскому интегральному уравнению в рамках метода [1–5], иллюстрирующий конструктивность заключения об эквивалентности марковской и немарковской форм НСО. Объясняется причина различий в характере интегральных уравнений, полученных в данной работе и в работе [3] авторами метода [1–5]. Проведено сравнение с уравнениями, которые используются в подходах других авторов. Установлена эквивалентность методов [1–5] и [9] при описании систем со слабым взаимодействием.

Формулировка задачи. Рассмотрим квантово-механическую систему с гамильтонианом $H = H_0 + V$, где H_0 включает в себя основные взаимодействия, а V описывает относительно слабые взаимодействия. Предположим, что на достаточно больших масштабах времени $t - t_0 > \tau_c$ (τ_c – некоторое характерное время, называемое временем хаотизации) имеется возможность сокращенного описания неравновесного состояния системы с помощью ограниченного набора переменных $\langle P\rangle^t = \{\langle P_\nu\rangle^t\}$, где $P = \{P_\nu\}$ – некоторые операторы, зависящие от совокупности индексов ν, $\langle\ldots\rangle^t$ – означает усреднение с НСО. Тогда, следуя [1–5], можно определить вспомогательный статистический оператор:

$$\rho_q = Q^{-1}\exp\left\{-\sum_\nu F_\nu(t)P_\nu\right\},\quad Q_q = Sp\exp\left\{-\sum_\nu F_\nu(t)P_\nu\right\}, \tag{1}$$

обеспечивающий при сохранении нормировки и заданных $\langle P\rangle^t$ максимум информационной энтропии, где $F_\nu(t)$ – параметры, связанные с $\langle P\rangle^t$ дополнительными условиями $\langle P\rangle^t = \langle P\rangle^t_q$ $\langle\ldots\rangle^t_q$ – означает усреднение с ρ_q. По своему определению оператор (1) описывает наиболее представительное при заданных $<P>^t$ макроскопическое состояние, называемое условно квазиравновесным, и приводит к правильным значениям параметров сокращенного описания.

Предположим, что операторы P удовлетворяют соотношениям

$$L_0 P_\nu = \hbar^{-1}\left[H_0, P_\nu\right] = \hbar^{-1}\sum_\lambda \alpha_{\nu\lambda}\, P_\lambda\,, \tag{2}$$

где $\alpha_{\nu\lambda}$ – некоторые c-числа. Уравнения для $<P>^t$ можно получить, усредняя с НСО уравнения движения для операторов P, что дает

$$<\dot{P}_\nu> = \frac{d}{dt} < P_\nu >^t = \frac{i}{\hbar}\sum_\lambda \alpha_{\nu\lambda} < P_\lambda >^t + I_\nu(t), \tag{3}$$

где $I_\nu(t) = i < L_1 P_\nu >^t \equiv \frac{i}{\hbar} < \left[V, P_\nu\right] >^t$ – интеграл столкновений.

Чтобы замкнуть уравнения (3) относительно $<P>^t$, необходимо иметь НСО в виде функционала, зависящего во все моменты времени от переменных $<P>^t$. НСО в такой форме можно найти [2], решая уравнение Лиувилля с граничным условием

$$\lim_{t-t_0\to\infty} \exp\left[-i(t-t_0)L\right]\left[\hat{\rho}(t_0,0) - \rho_q(< P >^{t_0}, 0)\right] = 0\,, \tag{4}$$

выражающим тот факт, что начальное состояние системы задается макроскопически, где $L = L_0 + L_1$, первый аргумент в операторах $\hat{\rho}$ и ρ_q указывает на неявную зависимость от времени, через МП, смысл второго аргумента поясняется ниже.

Уравнение Лиувилля с граничным условием (4) записывается в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + iL\right)\hat{\rho}(t,0) = -\varepsilon\left[\hat{\rho}(t,0) - \rho_q(< P >^t, 0)\right], \tag{5}$$

где $\varepsilon \to +0$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних. Решение уравнения (5) легко находится:

$$\hat{\rho}(t,0) = \varepsilon\int_{-\infty}^{0} d\tau \exp\left[\tau(\varepsilon + iL)\right]\rho_q\left(< P >^{t+\tau}, 0\right) \tag{6}$$

и определяет искомый НСО в виде запаздывающего (немарковского) функционала от $<P>^{t+\tau}$, $\tau \leqslant 0$.

При построении кинетических уравнений по указанной схеме приходится прибегать к разложению НСО (6) в ряд теории возмущений по взаимодействию. Такое разложение можно получить, исходя из интегрального уравнения [3]:

$$\hat{\rho}(t,0)=\rho_q\left(<P>^t,0\right)-i\int\limits_{-\infty}^{0}dt_1\exp\left[t_1\left(\varepsilon+iL_0\right)\right]K_q\left(<P>^{t+t_1}\right)L_1\rho\left(t+t_1,0\right),(7)$$

которому удовлетворяет НСО в случае замкнутого в смысле соотношений (2) набора операторов P, где $K_q = 1 - \Pi_q$,

$$\Pi_q\left(<P>^t\right)...=\sum_{\nu}\frac{\partial\rho_q\left(<P>^t,0\right)}{\partial<P_\nu>^t}Sp\left(P_\nu...\right).$$

Интеграл в правой части уравнения (7) содержит явно оператор L_1, пропорциональный гамильтониану V, который считается малым. Это позволяет искать решение уравнения (7) в виде ряда по степеням V.

Оказывается, что такое решение не содержит запаздывания по переменным $<P>^t$, т. е. является марковским функционалом от $<P>^t$ [8], несмотря на немарковский характер уравнения (7). Следует уточнить, что марковская форма указанного решения не связана с использованием какихлибо ограничений на вид функциональной зависимости НСО или приближений, исключающих возможность точного учета эффектов запаздывания по переменным $<P>^t$. Поэтому естественно предположить, что для рассматриваемого класса систем сокращенному описанию в терминах средних значений операторов P соответствует НСО, допускающий марковскую форму записи $\rho = \rho(<P>^t, 0)$, эквивалентную (6). Явный вид функционала $\rho(<P>^t, 0)$ определяется в принципе из решения уравнения (7), если использовать итерационную схему [7]. Однако такой подход приводит к трудностям, обусловленным быстрым усложнением структуры членов итерационного разложения с возрастанием их порядка. Поэтому имеет смысл сформулировать задачу по-иному, а именно: искать в явном виде уравнение, эквивалентное уравнению (7), которое не содержало бы запаздывания по переменным $<P>^t$ и определяло бы НСО непосредственно в виде марковского функционала от $<P>^t$.

Такой путь представляется более перспективным как с точки зрения практического приложения, так и с точки зрения сравнительного анализа уравнений в схемах марковского и немарковского описания.

Вывод рекуррентных соотношений. Интегральное уравнение для НСО, не содержащее запаздывания по переменным $<P>^t$, можно получить, используя рекуррентное соотношение

$$\delta\hat{\rho}_n(t,0) = -i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t+t_1,-t_1))L_{l'}(t_1)\,\delta\hat{\rho}_{n-1}(t+t_1,t_1),\ \ \delta\rho_0 = \rho_q \tag{8}$$

для поправок $\delta\hat{\rho}_n$ в итерационном разложении

$$\hat{\rho}(t,0) = \rho_q(<P>^t,0) + \sum_{n=1}^{\infty}\delta\hat{\rho}_n(t,0) \tag{9}$$

решения уравнения (7), где индекс n указывает степень оператора $L_{l'}$, содержащуюся явно в поправке $\delta\hat{\rho}_n$,

$$\delta\hat{\rho}_n(\ldots,t_1) = \exp(it_1L_0)\delta\hat{\rho}_n(\ldots,0),$$

$$L_{l'}(t_1) = \exp(it_1L_0)L_{l'}\exp(-it_1L_0),$$

$$\exp(it_1L_0)\ldots = \exp(it_1H_0/\hbar)\ldots\exp(-it_1H_0/\hbar).$$

Соотношение (8) записано в представлении медленно меняющихся переменных $P(t+\tau,-\tau)$ [4], наиболее удобном при исследовании систем с замкнутым набором операторов P, переход к которому производится по формулам

$$P_\nu(t+\tau,-\tau) = \sum_\lambda\left\{\exp\left(-\frac{i\tau}{\hbar}\alpha\right)\right\}_{\nu\lambda} <P_\lambda>^{t+\tau},\ \ \alpha = \|\alpha_{\nu\lambda}\|,$$

$$\exp(i\tau L_0)\rho_q(<P>^{t+\tau},0) = \rho_q(P(t+\tau,-\tau),0),$$

$$\exp(i\tau L_0)\Pi_q(<P>^{t+\tau})\exp(-i\tau L_0)\ldots = \Pi_q(P(t+\tau,-\tau))\ldots =$$

$$= \sum_\nu \frac{\partial\rho_q(P(t+\tau,-\tau),0)}{\partial P_\nu(t+\tau,-\tau)} Sp(P_\nu\ldots).$$

Согласно работе [8], задача об аппроксимации НСО марковским функционалом может быть формально решена с любой желаемой степенью точности по V. Поэтому предположим, что для произвольных k и $1 \leqslant n \leqslant k$ известны разложения

$$\delta\hat{\rho}_n(t,0) = \sum_{e=n}^{k} \Delta_n^{(e)}(<P>', 0) + \hat{\sigma}_{k+1}(t,0), \tag{10}$$

$$\hat{\rho}(t,0) = \rho^{(k)}(<P>', 0) + \hat{\sigma}'_{k+1}(t,0), \tag{11}$$

где $\Delta_n^{(e)} \sim V^e$, $\hat{\sigma}_{k+1}, \hat{\sigma}'_{k+1} \sim L_{V}^{k+1}$, $\rho^{(k)} = \rho_q + \sum_{n=1}^{k} \delta\rho^{(n)}$,

$$\delta\rho^{(n)} = \sum_{i=1}^{n} \Delta_i^{(n)} \sim V^n. \tag{12}$$

Тогда соотношение (8) с точностью до членов $\sim V^k$ можно записать в виде

$$\delta\hat{\rho}_n(t,\ 0) \cong$$

$$\cong -i \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t+t_1,-t_1))\, L_{V}(t_1) \sum_{e=n-1}^{k-1} \Delta_{n-1}^{(e)} \left(\exp\left(\frac{it_1}{\hbar}\alpha\right) P(t+t_1,-t_1),\ t_1 \right), \tag{13}$$

$$\Delta_0^{(e)} = \delta_{0e}\rho_q,$$

где δ_{0e} – символ Кронекера.

Основная задача, решение которой необходимо для перехода от уравнения (7) к эквивалентному ему интегральному уравнению марковского типа, состоит в том, чтобы исключить в (13) запаздывание по переменным $P(t,0) = <P>'$ и найти рекуррентное соотношение для поправок в марковском разложении НСО по степеням V.

Покажем, как исключается запаздывание по переменным $P(t, 0)$ в выражениях типа

$$\delta\hat{\rho}(t,0) = \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \Phi\left\{(P(t+t_1,-t_1));t_1\right\}, \tag{14}$$

к которому, в частности, относится и соотношение (13), где Φ – функционал, зависящий от t_1 явно и через переменные $P(t+t_1, -t_1)$.

Преобразуем подынтегральное выражение в (14) к виду

$$e^{\varepsilon t_1}\Phi\{P(t+t_1,-t_1);t_1\} \equiv \left\{\frac{d}{dt_1}\int_{-\infty}^{t_1}d\tau - \int_{-\infty}^{t_1}d\tau\frac{d}{dt_1}\right\}e^{\varepsilon\tau}\Phi\{P(t+t_1,-t_1);\tau\}. \quad (15)$$

После подстановки (15) в (14) получим

$$\begin{aligned}\delta\hat{\rho}(t,0) &\equiv \int_{-\infty}^{0}d\tau e^{\varepsilon\tau}\Phi\{P(t,0);\tau\} - \int_{-\infty}^{0}dt_1\int_{-\infty}^{t_1}d\tau e^{\varepsilon\tau}\frac{d}{dt_1}\Phi\{P(t+t_1,-t_1);\tau\} \equiv \\ &\equiv \Delta(P(t,0),0)+\hat{\sigma}(t,0).\end{aligned} \quad (16)$$

Первое слагаемое в (16) имеет марковский тип зависимости от $P(t, 0)$. Второе слагаемое содержит производную функционала, зависящего от t_1 только через $P(t + t_1, - t_1)$ и, в силу соотношения

$$\frac{d}{dt_1}\Phi\{P(t+t_1,-t_1);\tau\} = \sum_{\nu}\frac{\partial\Phi\{P(t+t_1,-t_1);\tau\}}{\partial P_{\nu}(t+t_1,-t_1)}Sp[\hat{\rho}(t+t_1,t_1)iL_{1'}(t_1)P_{\nu}],$$

$$\hat{\rho}(\ldots,\ t_1) = \exp(it_1L_0)\hat{\rho}(\ldots,0),$$

имеет порядок малости по V по крайней мере на единицу больший по сравнению с первым. При отбрасывании второго слагаемого в (16) получаем марковскую аппроксимацию функционала (14).

Вернемся теперь к соотношению (13). Используя (16), преобразуем (13) к виду

$$\begin{aligned}\delta\hat{\rho}_n(t,0) &\cong -i\sum_{e=n}^{k}\int_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}K_q(P(t,0))L_{1'}(t_1)\Delta_{n-1}^{(e-1)}(P(t,t_1),t_1) + \\ &+i^2\sum_{e=n}^{k-1}\int_{-\infty}^{0}dt_1\int_{-\infty}^{0}dt_2e^{\varepsilon(t_1+t_2)}\sum_{\nu}Sp[\hat{\rho}(t+t_1,t_1)L_{1'}(t_1)P_{\nu}]\frac{\partial}{\partial P_{\nu}(t+t_1,-t_1)}\times \\ &K_q(P(t+t_1,-t_1))L_{1'}(t_1+t_2)\Delta_{n-1}^{(e-1)}\left(\exp\left(\frac{i}{\hbar}(t_1+t_2)\alpha\right)P(t+t_1,-t_1),t_1+t_2\right),\end{aligned} \quad (17)$$

где $P(t,t_1) = \exp(\frac{i\alpha t_1}{\hbar})P(t,0)$. Оператор $\hat{\rho}(t+t_1,t_1)$ в (17) с точностью до членов $\sim V^k$ можно заменить, согласно (11), на

$$\rho^{(k-e-1)}(P(t+t_1,0),t_1) \equiv \rho^{(k-e-1)}\left(\exp\left(\frac{it_1}{\hbar}\alpha\right)P(t+t_1,-t_1),t_1\right).$$

В результате немарковский остаток в (17) преобразуется к виду функционала (14) и может быть в свою очередь разложен на марковскую и немарковскую части по формуле (16). Продолжая этот процесс, можно последовательно исключить в соотношении (13) немарковские слагаемые порядка V^{n+1}, V^{n+2}, ..., V^{nk}. После чего, отбрасывая слагаемые, пропорциональные V^{k+1}, V^{k+2},..., и суммируя члены одного порядка по V, получим:

$$\begin{aligned}
\delta\hat{\rho}_n(t,0) \cong {} & -i\sum_{e=n}^{k}\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t,0)) L_{V}(t_1)\Delta_{n-1}^{(e-1)}(P(t,t_1),t_1) + \\
& +\sum_{e=n+1}^{k}\sum_{m=1}^{e-n}\sum_{x_1=0}^{e-m-n}\sum_{x_2=0}^{x_1}\ldots\sum_{x_m=0}^{x_{m-1}}(-i)^{m+1}\int_{-\infty}^{0} dt_1\ldots\int_{-\infty}^{0} dt_{m+1}\exp[\varepsilon(t_1+\ldots+t_{m+1})]\times \\
& D^{(x_1-x_2+1)}(t_1)D^{(x_2-x_3+1)}(t_1+t_2)\ldots D^{(x_{m-1}-x_m+1)}(t_1+\ldots+t_{m-1})D^{(x_m+1)}\times \\
& (t_1+\ldots+t_m)K_q\left(P(t,0)\right)\times \\
& L_{V}(t_1+\ldots+t_{m+1})\Delta_{n-1}^{(e-m-x_1-1)}(P(t,t_1+\ldots+t_{m+1}),t_1+\ldots+t_{m+1}),
\end{aligned} \tag{18}$$

где

$$D^{(x+1)}(\tau)=\sum_{\nu} Sp\left[\delta\rho^{(x)}(P(t,\tau),\tau)L_{V}(\tau)P_{\nu}\right]\frac{\partial}{\partial P_{\nu}(t,0)}\sim V^{x+1}.$$

С точностью до членов $\sim V^k$ левую часть в (18) можно заменить разложением (10) и приравнять затем члены одного порядка по V в обеих частях полученного равенства. В результате получаются рекуррентные соотношения:

$$\Delta_n^{(n)}=I_n^{(n)}\left\{\Delta_{n-1}^{(n-1)}\right\},$$

$$\Delta_n^{(e)}=I_n^{(e)}\left\{\Delta_1^{(1)},\ldots,\Delta_1^{(e-1)},\ldots,\Delta_{n-1}^{(n-1)},\ldots\Delta_{n-1}^{(e-1)}\right\},\ e>n. \tag{19}$$

Выражения для $I_n^{(n)}$ и $I_n^{(e)}$ в явном виде находятся легко и не приводятся здесь из-за их громоздкости. После подстановки (19) в выражение

$$\delta\rho^{(k)}(P(t,0),0)=\sum_{n=1}^{k}\Delta_n^{(k)}(P(t,0),0)$$

и суммирования по n получается искомое рекуррентное соотношение для поправок $\delta\rho^{(k)}$:

$$
\begin{gathered}
\delta\rho^{(k)}(P(t,0),0) = -i\int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t,0)) L_{1'}(t_1)\delta\rho^{(k-1)}(P(t,t_1),t_1) + \\
+\sum_{m=1}^{k-1}\sum_{x_1=0}^{k-1-m}\sum_{x_2=0}^{x_1}\ldots\sum_{x_m=0}^{x_{m-1}}(-i)^{m+1}\int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\ldots\int\limits_{-\infty}^{0} dt_{m+1}\exp\left[\varepsilon(t_1+\ldots+t_{m+1})\right]\times \\
D^{(x_1-x_2-1)}(t_1)D^{(x_2-x_3+1)}(t_1+t_2)\ldots D^{(x_{m-1}-x_m+1)}(t_1+\ldots+t_{m-1})D^{(x_m+1)}(t_1+\ldots+t_m)\times \\
K_q(P(t,0))L_{1'}(t_1+\ldots+t_{m+1})\delta\rho^{(k-m-x_1-1)}(P(t,t_1+\ldots+t_{m+1}),\ t_1+\ldots+t_{m+1})
\end{gathered}
\tag{20}
$$

При $k=1$ в (20) следует удержать только первое слагаемое и $\delta\rho^{(0)}$заменить на ρ_q.

Уравнение для марковского НСО в интегральной форме

Дальнейшая задача состоит в том, чтобы перейти от рекуррентного соотношения (20) к интегральному уравнению. Для этого сложим первые n членов в цепочке соотношений (20). Добавляя затем ρ_q к обеим частям полученного равенства и переходя к пределу $n\to\infty$, будем иметь:

$$
\begin{gathered}
\rho(P(t,0),0) = \lim_{n\to\infty}\left\{\rho_q(P(t,0),0) + \sum_{k=1}^{n}\delta\rho^{(k)}(P(t,0),0)\right\} = \\
=\rho_q(P(t,0),0) - i\int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t,0))\, L_{1'}(t_1)\rho(P(t,t_1),\ t_1) + \\
+\sum_{k=2}^{\infty}\sum_{m=1}^{k-1}\sum_{x_1=0}^{k-1-m}\sum_{x_2=0}^{x_1}\ldots\sum_{x_m=0}^{x_{m-1}}(-i)^{m+1}\int\limits_{-\infty}^{0} dt_1\ldots\int\limits_{-\infty}^{0} dt_{m+1}\exp\left[\varepsilon(t_1+\ldots+t_{m+1})\right]\times \\
D^{(x_1-x_2+1)}(t_1)D^{(x_2-x_3+1)}(t_1+t_2)\ldots D^{(x_{m-1}-x_m+1)}(t_1+\ldots+t_{m-1})\times \\
D^{(x_m+1)}(t_1+\ldots+t_m)K_q(P(t,0))L_{1'}(t_1+\ldots+t_{m+1})\times \\
\delta\rho^{(k-(m+x_1+1))}(P(t,\ t_1+\ldots+t_{m+1}),\ t_1+\ldots+t_{m+1}).
\end{gathered}
\tag{21}
$$

Выполним в (21) следующие операции.

1. Изменим порядок суммирования: $\sum\limits_{k=2}^{\infty}\sum\limits_{m=1}^{k-1}\to\sum\limits_{m=1}^{\infty}\sum\limits_{k=m+1}^{\infty}$.

2. Сделаем замену $k = l + m + 1$.

3. Изменим порядок суммирования: $\sum\limits_{l=0}^{\infty}\sum\limits_{x_1=0}^{l}\to\sum\limits_{x_1=0}^{\infty}\sum\limits_{e=x_1}^{\infty}$

и выполним суммирование по l.

4. Изменим порядок суммирования:

$$\sum_{x_1=0}^{\infty}\sum_{x_2=0}^{x_1}\dots\sum_{x_m=0}^{x_{m-1}} \to \sum_{x_m=0}^{\infty}\sum_{x_{m-1}=x_m}^{\infty}\dots\sum_{x_2=x_3}^{\infty}\sum_{x_1=x_2}^{\infty}.$$

5. Сделаем замену $\alpha_1 = x_1 - x_2$, $\alpha_2 = x_2 - x_3$, …, $\alpha_{m-1} = x_{m-1} - x_m$ и просуммируем по α_1, …, α_{m-1}, x_m.

В результате будем иметь уравнение

$$\begin{gathered}\rho(P(t,0),0) = \rho_q(P(t,0),0) - i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t,0)) L_{1'}(t_1)\rho(P(t,t_1),t_1) + \\ +\sum_{m=1}^{\infty}(-i)^{m+1}\int_{-\infty}^{0} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{0} dt_{m+1}\exp[\varepsilon(t_1+\dots+t_{m+1})] D(t_1) D(t_1+t_2)\dots\times \\ D(t_1+\dots+t_m) K_q(P(t,0)) L_{1'}(t_1+\dots t_{m+1})\rho(P(t,t_1+\dots+t_{m+1}),t_1+\dots+t_{m+1}),\end{gathered} \tag{22}$$

где $D(\tau) = \sum\limits_{\nu} Sp\left[\rho(P(t,\tau),\tau) L_{1'}(\tau) P_\nu\right]\dfrac{\partial}{\partial P_\nu(t,0)}$.

Выполняя в (22) замену $P(t, 0) \to P(t, t')$ и используя соотношения

$$\rho_q = (P(t, t'), 0) = \exp(-it'L_0)\rho_q(P(t, 0), 0),$$

$$K_q(P(t, t')) = \exp(-it'L_0)K_q(P(t, 0))\exp(it'L_0),$$

$$D(\tau)|_{P(t,0)\to P(t,t')} = D(\tau + t'),$$

следующие из формул перехода к представлению медленно меняющихся переменных, получим:

$$\begin{gathered}\rho(P(t,t'),t') = \rho_q(P(t,0),0) - i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} K_q(P(t,0)) L_{1'}(t'+t_1)\times \\ \rho(P(t,t'+t_1),t'+t_1) + \\ +\sum_{m=1}^{\infty}(-i)^{m+1}\int_{-\infty}^{0} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{0} dt_{m+1}\exp[\varepsilon(t_1+\dots+t_{m+1})] D(t'+t_1)\times \\ D(t'+t_1+t_2)\dots D(t'+t_1+\dots+t_m) K_q(P(t,0)) L_{1'}(t'+t_1+\dots+t_{m+1})\times \\ \rho(P(t,t'+t_1+\dots+t_{m+1}),t'+t_1+\dots+t_{m+1}).\end{gathered} \tag{23}$$

Преобразуем (23) к виду

$$\rho\left(P(t,t'),t'\right)=\rho_q\left(P(t,0),0\right)-i\int_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}L_{1'}(t'+t_1)\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)+$$
$$+(-i)\int_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}D(t'+t_1)\Big\{\rho_q\left(P(t,0),0\right)+(-i)\int_{-\infty}^{0}d\tau_1e^{\varepsilon\tau_1}K_q\left(P(t,0)\right)\times$$
$$L_{1'}(t'+t_1+\tau_1)\rho\left(P(t,t'+t_1+\tau_1),t'+t_1+\tau_1\right)+$$
$$+\sum_{m=1}^{\infty}(-i)^{m+1}\int_{-\infty}^{0}d\tau_1\ldots\int_{-\infty}^{0}d\tau_{m+1}\exp\left[\varepsilon(\tau_1+\ldots+\tau_{m+1})\right]D(t'+t_1+\tau_1)\times \tag{24}$$
$$D(t'+t_1+\tau_1+\tau_2)\ldots D(t'+t_1+\tau_1+\ldots+\tau_m)K_q\left(P(t,0)\right)\times$$
$$L_{1'}(t'+t_1+\tau_1+\ldots+\tau_{m+1})\times$$
$$\rho\left(P(t,t'+t_1+\tau_1+\ldots+\tau_{m+1}),t'+t_1+\tau_1+\ldots+\tau_{m+1}\right)\Big\},$$

где использовано равенство $\Pi_q(P(t,0))L_1(t_1)\rho(P(t,t_1),t_1)=-D(t_1)\rho_q(P(t,0),0)$.

Замечая, что выражение в фигурных скобках в (24) равно $\rho(P(t,t'+t_1),t'+t_1)$ и полагая $D(t)\rho(P(t,\tau),\tau)=-\Pi(P(t,\tau),\tau)L_1(\tau)\rho(P(t,\tau),\tau)$, где $\Pi(\ldots,\tau)=\exp(i\tau L_0)\Pi(\ldots,0)\exp(-i\tau L_0)$,

$$\Pi\left(P(t,\tau),0\right)\ldots=\sum_{\nu}\frac{\partial\rho\left(P(t,\tau),0\right)}{\partial P_\nu(t,\tau)}Sp(P_\nu\ldots), \tag{25}$$

перепишем уравнение (24) в виде

$$\rho\left(P(t,t'),t'\right)=\rho_q\left(P(t,0),0\right)-$$
$$-i\int_{-\infty}^{0}dt_1e^{\varepsilon t_1}\left[1-\Pi\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)\right]L_{1'}(t'+t_1)\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right). \tag{26}$$

Это и есть искомое интегральное уравнение.

Уравнение (26) является точным и не содержит запаздывания по переменным $P(t,0)$, в отличие от уравнения (7). Кроме того, уравнение (26) оказывается нелинейным. Нелинейность его обусловлена учетом эффектов запаздывания в схеме марковского описания, выражающимся формально в замене проекционного оператора Π_q модифицированным оператором (25), зависящим от НСО. Оператор (25), так же, как и Π_q, обладает свойством:

$$\Pi_q(P(t,\tau'),0)\Pi(P(t,\tau),0)=\Pi(P(t,\tau'),0),$$

характерным для проекционных операторов. В этом нетрудно убедиться с помощью непосредственной проверки, учитывая, что $P_\nu(t, \tau) = Sp[P_\nu \rho(P(t, \tau), 0)]$. Последнее равенство вытекает из соотношений

$$\rho(P(t, \tau), 0) = \exp[i\tau D_0(P(t, 0))]\rho(P(t, 0), 0),$$

$$P_\nu(t, \tau) = \exp\left[i\tau D_0\left(P(t, 0)\right)\right]P_\nu(t, 0),$$

где $D_0\left(P(t,0)\right) = \frac{1}{h}\sum_{\nu\mu} a_{\nu\mu}P_\mu(t,0)\frac{\partial}{\partial P_\nu(t,0)}$,

справедливых, вообще говоря, для любого функционала $\Phi\{P(t, \tau)\}$. Действительно, функционал $\Phi\{P(t, \tau)\}$ удовлетворяет очевидному уравнению

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\Phi\left\{P(t,\tau)\right\} = iD_0\left(P(t,0)\right)\Phi\left\{P(t,\tau)\right\},$$

решение которого при начальном условии $\Phi\{P(t, \tau)\}|_{\tau=0} = \Phi\{P(t, 0)\}$ имеет вид

$$\Phi\left\{P(t,\tau)\right\} = \exp\left[i\tau D_0\left(P(t,0)\right)\right]\Phi\left\{P(t,0)\right\}. \tag{27}$$

Из (27) следует, что оператор $\exp[i\tau D_0]$, действуя на любой функционал от $P(t, 0)$, приводит к сдвигу второго аргумента в $P(t, 0)$ на величину τ.

Уравнение для марковского НСО в дифференциальной форме

Найдем дифференциальное уравнение, эквивалентное интегральному уравнению (26). Для этого продифференцируем (26) по t'. Учитывая затем соотношение $\frac{\partial}{\partial t'}\rho\left(P(t,t'),t'\right) = i\left[D_0\left(P(t,0)\right) + L_0\right]\rho\left(P(t,t'),t'\right)$, а также тот факт, что дифференцирование по t' под интегралом в (26) можно заменить дифференцированием по t_1, получим:

$$\begin{aligned} &i\left[D_0\left(P(t,0)\right) + L_0\right]\rho\left(P(t,t'),t'\right) = \\ &= -i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}\frac{\partial}{\partial t_1}\left[1 - \Pi\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)\right]L_{1}(t'+t_1)\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right). \end{aligned} \tag{28}$$

Вычисляя интеграл в (28) по частям, будем иметь

$$i\left\{D_0\left(P(t,0)\right)+L_0+\left[1-\Pi\left(P(t,t'),t'\right)\right]L_{1'}(t')\right\}\rho\left(P(t,t'),t'\right)=$$
$$=i\varepsilon\int_{-\infty}^{0}dt_1 e^{\varepsilon t_1}\left[1-\Pi\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)\right]L_{1'}(t'+t_1)\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right). \quad (29)$$

Исключая интегральный член в (29) с помощью уравнения (26) и полагая затем $t' = 0$, получим:

$$i\left\{D_0\left(P(t,0)\right)+L_0+\left[1-\Pi\left(P(t,0),0\right)\right]L_{1'}\right\}\rho\left(P(t,0),0\right)=$$
$$=-\varepsilon\left[\rho\left(P(t,0),0\right)-\rho_q\left(P(t,0),0\right)\right],$$

откуда, замечая, что $P(t, 0) = \langle P\rangle'$, $L_0 + L_{1'} = L$,

$$D_0\left(\langle P\rangle'\right)\rho\left(\langle P\rangle',0\right)=-\Pi\left(\langle P\rangle',0\right)L_0\rho\left(\langle P\rangle',0\right), \quad (30)$$

будем иметь

$$i\left[1-\Pi\left(\langle P\rangle',0\right)\right]L\rho\left(\langle P\rangle',0\right)=-\varepsilon\left[\rho\left(\langle P\rangle',0\right)-\rho_q\left(\langle P\rangle',0\right)\right]. \quad (31)$$

Уравнение (31) преобразуется к виду

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+iL\right)\rho\left(\langle P\rangle',0\right)=-\varepsilon\left[\rho\left(\langle P\rangle',0\right)-\rho_q\left(\langle P\rangle',0\right)\right], \quad (32)$$

если учесть, что для НСО, зависящего от t через $\langle P\rangle'$, взятые в момент времени t, выполняется неравенство

$$\Pi\left(\langle P\rangle',0\right)iL\rho\left(\langle P\rangle',0\right)=-\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(\langle P\rangle',0\right). \quad (33)$$

Таким образом, уравнение (26) для НСО в марковской форме и уравнение (7) для НСО в форме немарковского функционала эквивалентны одному и тому же уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником. Это обстоятельство свидетельствует об эквивалентности марковской и немарковской форм НСО и позволяет утверждать, что наличие запаздывания по переменным $<P>^t$ или, наоборот, его отсутствие в интегральном уравнении для НСО полностью зависят от способа перехода к интегральному уравнению. Действительно, если следовать способу, предложенному в работе [3], то из (32) получается уравнение запаздывающего (немарковского) типа:

$$\rho\left(<P>^t,0\right)=\rho_q\left(<P>^t,0\right)-i\int_{-\infty}^{0}dt_1\exp\left[t_1\left(\varepsilon+iL_0\right)\right]K_q\left(<P>^{t+t_1}\right)L_1\rho\left(<P>^{t+t_1},0\right),\quad(34)$$

совпадающее с уравнением (7). Вывод уравнения (34) полностью повторяет вывод уравнения (7) в работе [3] и здесь поэтому не приводится. С другой стороны, непосредственно из (32) можно получить и марковское уравнение. Покажем это.

Перепишем уравнение (32) в виде

$$\begin{gathered}\left[\varepsilon+iL_0+iD_0\left(P(t,0)\right)\right]\rho\left(P(t,0),0\right)=\\=\varepsilon\rho_q\left(P(t,0),0\right)-i\left[1-\Pi\left(P(t,0),0\right)\right]L_1\rho\left(P(t,0),0\right),\end{gathered}\quad(35)$$

исключив $\frac{\partial}{\partial t}\rho$ и $\Pi L_0\rho$ в (32) с помощью соотношений (33) и (30). Действуя на уравнение (35) оператором $\exp\{(t'+t_1)[\varepsilon+iL_0+iD_0(P(t,\ 0))]\}$ слева и учитывая соотношение (27), а также перестановочность операторов L_0 и D_0, будем иметь:

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial t_1}e^{\varepsilon t_1}\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)=e^{\varepsilon t_1}\left\{\varepsilon\rho_q\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)-\right.\\\left.-i\left[1-\Pi\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)\right]L_1\left(t'+t_1\right)\rho\left(P(t,t'+t_1),t'+t_1\right)\right\}.\end{gathered}\quad(36)$$

Наконец, интегрируя уравнение (36) по t_1 в пределах от $-\infty$ до 0 и замечая, что $\rho_q(P(t,\ \tau),\ \tau)=\rho_q(P(t,\ 0),\ 0)$, получим интегральное уравнение марковского типа, совпадающее с уравнением (26). Такой способ обладает очевидными преимуществами по сравнению со способом, основанным на марковизации рекуррентного соотношения (8), однако следует иметь в виду, что его использование уже предполагает эквивалентность марковской и немарковской форм НСО, а не доказывает ее.

Подведем итоги.

1. В случае систем со слабым взаимодействием сокращенному описанию в терминах средних значений $\langle P\rangle'$ операторов P, образующих замкнутый набор в смысле соотношений (2), можно поставить в соответствие НСО, параметризованный в каждый момент времени мгновенными значениями переменных $\langle P\rangle'$, т. е. НСО в марковской форме.

2. НСО, выраженный в марковской форме, удовлетворяет тому же самому уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником, что и НСО в форме (6). Это обстоятельство свидетельствует об их эквивалентности. В таком случае можно считать, что различие в характере уравнений (7) и (26), эквивалентных одному и тому же дифференциальному уравнению, имеет процедурное происхождение, т. е. из уравнения Лиувилля с бесконечно малым источником можно получить и немарковское интегральное уравнение, и марковское – результат зависит от способа перехода к интегральному уравнению.

3. Заключение об эквивалентности марковской и немарковской форм НСО является конструктивным, так как его использование позволяет простым образом перейти к схеме марковского описания в рамках метода [1–5].

Сделаем ряд замечаний.

1. Существуют и другие подходы, такие, ведущие к локальным по времени кинетическим уравнениям для $\langle P\rangle'$, в которых марковский характер зависимости НСО от $\langle P\rangle'$ постулируется с самого начала. В работе [10], например, используется предположение (справедливость которого подтверждается в данной работе), что НСО марковского типа удовлетворяет уравнению Лиувилля с бесконечно малым источником, и ставится задача о построении его формального решения в виде ряда по степеням V. В работе [9] предполагается, что НСО, будучи марковским функционалом, удовлетворяет уравнению Лиувилля. Уравнение Лиувилля дополняется специальным граничным условием, выделяющим его частное решение в виде марковского функционала, и преобразуется затем в интегральное уравнение, не содержащее запаздывания по макроскопическим переменным. Это уравнение, переписанное в обозначениях данной работы, совпадает с уравнением (26), полученным в рамках метода [1–5], т. е. применительно к системам со слабым взаимодействием методы НСО в формах [1–5] и [9] оказываются эквивалентными.

2. Уравнение (26) определяет НСО непосредственно в виде марковского функционала от $<P>^t$. Его решение итерациями по V дает более удобную форму теории возмущений по сравнению с громоздкой процедурой марковизации частичных сумм ряда (9), предложенной в работе [7]. Разложение НСО по степеням V следует считать формальным, поскольку свойства его сходимости недостаточно изучены. В работах [10; 13] установлено, что в высших порядках после интегрирования по времени поправки $\delta\rho^{(n)}$ (12) в разложении НСО содержат члены, пропорциональные обратным степеням ε, которые должны расходится при $\varepsilon \to +0$. Однако предел $\varepsilon \to +0$ в выражении для НСО не вполне определен. Предел $\varepsilon \to +0$ можно вычислять только после термодинамического предельного перехода в выражениях для средних. Расчеты интегралов столкновений (в тех случаях, когда при усреднении с ρ_q можно использовать теорему Вика) показывают, что в каждом порядке по V слагаемые $\sim \varepsilon^{-1}$ входят с противоположными знаками, так что поправки в разложении интеграла столкновений в действительности не содержат расходящихся выражений. По данным работы [2], разложение интеграла столкновений для системы невзаимодействующих электронов, рассеиваемых хаотически расположенными неподвижными примесными центрами, не содержит расходящихся ($\sim\varepsilon^{-k}$, $k = 1, 2$) выражений вплоть до членов $\sim V^6$. В работе [14] для квантового газа с парным взаимодействием установлено отсутствие расходящихся выражений в разложении интеграла столкновений вплоть до членов $\sim V^4$. Учитывая это, можно ожидать отсутствия расходимостей в интеграле столкновений и в членах более высокого порядка по V.

Библиографический список

1. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М., 1971.

2. *Зубарев Д. Н., Калашников В. П.* Построение статистических операторов для неравновесных процессов // Теорет. и мат. физика. 1970. Т. 3.

3. *Зубарев Д. Н., Калашников В. П.* Теория возмущений и интегральные уравнения для неравновесных статистических операторов // Там же. Т. 5, № 3.

4. *Зубарев Д. Н., Калашников В. П.* Эквивалентность некоторых методов в статистической механике необратимых процессов // Там же. 1971. Т. 7, № 3.

5. *Зубарев Д. Н.* Неравновесные статистические операторы и квазисредние в теории необратимых процессов // Статистическая физика и квантовая теория поля: Сб. науч. тр. М., 1973.

6. *Покровский Л. А.* Получение обобщенных кинетических уравнений с помощью неравновесного статистического оператора // Докл. Акад. наук СССР. 1968. Т. 183, № 4.

7. *Верещагин В. П., Кащенко М. П.* Выделение марковского приближения в методе неравновесного статистического оператора // Физические методы исследования твердого тела: Сб. науч. ст. Свердловск, 1979. Вып. 3.

8. *Верещагин В. П., Кащенко М. П.* Марковская форма неравновесного статистического оператора для систем со слабым взаимодействием // Теорет. и мат. физика. 1980. Т. 42, № 1.

9. *Пелетминский С. В., Яценко А. А.* К квантовой теории кинетических и релаксационных процессов // Журн. эксперим. и теорет. физики. 1967. Т. 53, № 4 (10).

10. *Балабанян Г. О.* Построение кинетических уравнений для неравновесных квантовых систем // Теорет. и мат. физика. 1974. Т. 20, № 2.

11. *Верещагин В. П., Кащенко М. П.* Построение кинетических уравнений для неравновесных квантовых систем. Свердловск, 1979. Деп. в ВИНИТИ 02.08.79.

12. *Vereshchagin V. P., Kashchenko M. P.* The markov-form integral equation for the non-equilibrium statistic operator with the precise account of the memory effects // Phys. Lett. A. 1982. V. 85A, № 1.

13. *Ахиезер А. И., Пелетминский С. В.* Методы статистической физики. М., 1977.

14. *Барьяхтар В. Г., Пелетиминский С. В., Яценко А. А.* К теории неравновесных процессов в статистической механике: В 2 ч. Киев: Препр. ИТФ – 68–4. 1968. Ч. 2.