

Ю. Л. КЛИМОНТОВИЧ и В. П. СИЛИН

К ТЕОРИИ СПЕКТРОВ ВОЗБУЖДЕНИЙ
МАКРОСКОПИЧЕСКИХ СИСТЕМ

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 1 XII 1951)

§ 1. В классической физике рассмотрение макроскопических систем взаимодействующих частиц проводится с помощью функции распределения в фазовом пространстве координат и импульсов. В квантовой физике описание состояний макроскопических тел проводится с помощью матрицы плотности ⁽¹⁾. Наиболее полная аналогия квантового описания с классическим может быть получена при использовании смешанного представления для матрицы плотности:

$$f(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int \overline{\psi^*(\mathbf{q} - 1/2 \hbar \vec{\tau})} e^{-i\vec{\tau} \cdot \mathbf{p}} \psi(\mathbf{q} + 1/2 \hbar \vec{\tau}) (d\vec{\tau}). \quad (1)$$

Черта означает усреднение по различным ψ -состояниям; N равно числу компонент векторов \mathbf{p} и \mathbf{q} . Уравнение, определяющее изменение $f(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ во времени, имеет вид ((2), ср. также ⁽³⁻⁵⁾):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & \frac{1}{(2\pi)^N} \frac{i}{\hbar} \int [H(\vec{\eta}_1 + 1/2 \hbar \mathbf{k}, \mathbf{r} - 1/2 \hbar \vec{\tau}) - H(\vec{\eta}_1 - 1/2 \hbar \mathbf{k}, \mathbf{r} + 1/2 \hbar \vec{\tau})] \times \\ & \times f(\mathbf{r}, \vec{\eta}_1) e^{i[\vec{\tau} \cdot (\vec{\eta}_1 - \mathbf{p}) + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{q})]} (d\vec{\tau}) (d\mathbf{k}) (d\vec{\eta}_1) (d\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2)$$

где H — функция Гамильтона соответствующей системы. Если

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{q}), \quad (3)$$

то

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{(2\pi)^3} - \frac{i}{\hbar} \int [U(\mathbf{r} - 1/2 \hbar \vec{\tau}) - U(\mathbf{r} + 1/2 \hbar \vec{\tau})] \times \\ \times f(\mathbf{q}, \vec{\eta}_1) e^{i\vec{\tau} \cdot (\vec{\eta}_1 - \mathbf{p})} (d\vec{\tau}) (d\vec{\eta}_1) = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнение (2) при $\hbar \rightarrow 0$ переходит в уравнение классической статистической механики, поэтому функцию $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, определяемую соотношением (1), можно назвать «квантовой функцией распределения».

Отметим, что квантовое уравнение для функции распределения (2) может быть получено из соответствующего уравнения классической статистической механики для функции распределения $f(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = [H, f], \quad (5)$$

если учесть конечность ячейки фазового пространства. Для этого необходимо в уравнении (5) заменить производные по импульсам (или координатам) конечными разностями, производя предварительно разложение в интервале Фурье по сопряженным переменным,

$$\frac{\partial f(p, q, t)}{\partial p} = \frac{1}{(2\pi)^N} \int (dk) e^{ikq} \frac{\bar{f}(p + 1/2\hbar k, k, t) - \bar{f}(p - 1/2\hbar k, k, t)}{\hbar k}, \quad (6)$$

$f(p, k)$ — амплитуда Фурье разложения функции $f(p, q)$.

Используя метод Н. Н. Боголюбова (6), из (4) легко получить уравнение для квантовой функции распределения комплекса s молекул. Например, при $s = 1$ имеем (для случая парного взаимодействия)

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{i}{\hbar} \int (d\mathbf{q}_2) (d\vec{\tau}) (d\vec{\gamma}_1) (d\mathbf{p}_2) e^{i\vec{\tau}(\vec{\gamma}_1 - \mathbf{p})} \times \\ \times f_2(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \vec{\gamma}_1, \mathbf{p}_2) [U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_2 - 1/2\hbar\vec{\tau}|) - U(|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 + 1/2\hbar\vec{\tau}|)] = 0. \quad (7)$$

В предположении мультипликативности f_2 получаем квантовое кинетическое уравнение с самосогласованным полем

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{i}{\hbar} \int (d\mathbf{q}_2) (d\vec{\tau}) (d\vec{\gamma}_1) (d\mathbf{p}_2) e^{i\vec{\tau}(\vec{\gamma}_1 - \mathbf{p})} \times \\ \times f(\mathbf{q}, \vec{\gamma}_1) f(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2) [U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_2 - 1/2\hbar\vec{\tau}|) - U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_2 + 1/2\hbar\vec{\tau}|)] = 0, \quad (8)$$

которое при $\hbar \rightarrow 0$ переходит в известное классическое кинетическое уравнение с самосогласованным полем (7).

Из уравнения для квантовой функции распределения комплекса s молекул можно получить квантовое кинетическое уравнение, учитывающее столкновения частиц (подобные вычисления для матрицы плотности проведены в работе (8)). Соответствующие вычисления приводят к следующему уравнению второго приближения:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{i}{\hbar} \int [U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_2 - 1/2\hbar\vec{\tau}|) - U(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_2 + 1/2\hbar\vec{\tau}|)] e^{i\vec{\tau}(\vec{\gamma}_1 - \mathbf{p})} \times \\ \times P f(\mathbf{q}, \vec{\gamma}_1) f(\mathbf{q}_2, \mathbf{p}_2) (d\mathbf{q}_2) (d\vec{\tau}) (d\vec{\gamma}_1) (d\mathbf{p}_2) = I(f), \quad (9)$$

где I — интеграл столкновений и P — оператор симметризации.

§ 2. Рассмотрим решение уравнения (8). Положим

$$f = f_0(\mathbf{p}) + \varphi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), \quad \varphi \ll f_0; \quad (10)$$

f_0 удовлетворяет уравнению

$$I(f_0) = 0, \quad (11)$$

и, следовательно,

$$f_0 = \frac{g}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{Ae^{p^2/2mkT} \pm 1}. \quad (12)$$

Подставляя (10) в уравнение (7) и пренебрегая членами, квадратичными относительно φ , получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{q}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{i}{\hbar} \int [U(|\mathbf{q} - \vec{x} - 1/2\hbar\vec{\tau}|) - U(|\mathbf{q} - \vec{x} + 1/2\hbar\vec{\tau}|)] \times \\ \times e^{i\vec{\tau}(\vec{\gamma}_1 - \mathbf{p})} f_0(\vec{\gamma}_1) \varphi(\vec{x}, \vec{\gamma}_2) (d\vec{\tau}) (d\vec{x}) (d\vec{\gamma}_1) (d\vec{\gamma}_2) = 0. \quad (13)$$

Введем

$$\rho(\mathbf{q}, t) = \int \varphi(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) (d\mathbf{p}); \quad (14)$$

$\rho(\mathbf{q}, t)$ ищем в виде суперпозиции функций $\rho_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Для $\rho_{\mathbf{k}}(t)$ имеем уравнение

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \int \varphi_{\mathbf{k}}(0, \mathbf{p}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}t}{m}} (d\mathbf{p}) + \\ + \frac{i}{\hbar} \nu(k) \int_0^t d\theta \int (d\mathbf{p}) [f_0(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})] \rho_{\mathbf{k}}(\theta) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{k}(t-\theta)}{m}}, \quad (15)$$

где

$$\nu(k) = \int U(|\vec{\xi}|) e^{i\mathbf{k}\vec{\xi}} (d\vec{\xi}). \quad (16)$$

Решение уравнения (15), полученное с помощью преобразования Лапласа — Меллина, имеет следующий вид:

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int e^{st} \rho(s) ds, \quad (17)$$

где

$$\rho(s) = \left\{ \int \frac{\varphi_{\mathbf{k}}(0, \mathbf{p})}{s + i\mathbf{k}\mathbf{p}/m} (d\mathbf{p}) \right\} : \left\{ 1 - \frac{\nu(k)}{\hbar} \int \frac{f_0(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})}{\mathbf{k}\mathbf{p}/m + s/i} (d\mathbf{p}) \right\}. \quad (18)$$

Полюсы $\rho(s)$ являются либо полюсами числителя, вызванными особенностями начального состояния, либо нулями знаменателя

$$1 - \frac{\nu(k)}{\hbar} \int \frac{f_0(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})}{\mathbf{k}\mathbf{p}/m + s/i} (d\mathbf{p}). \quad (19)$$

Нули знаменателя определяют спектр рассматриваемой системы независимо от ее начального состояния.

Отметим, что уравнение (19), определяющее возможный спектр рассматриваемой системы, является общим, справедливым как для систем, подчиняющихся статистике Бозе, так и статистике Ферми. При $\hbar \rightarrow 0$ уравнение (19) переходит в соответствующее классическое уравнение (7, 9).

Для систем заряженных частиц (например, электронной плазмы) $\nu(k) = 4\pi e^2 / k^2$, и уравнение (19) принимает вид:

$$1 - \frac{4\pi e^2}{\hbar k^2} \int \frac{f_0(\mathbf{p} + \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{p} - \frac{1}{2}\hbar\mathbf{k})}{\mathbf{k}\mathbf{p}/m + s/i} (d\mathbf{p}). \quad (20)$$

При учете движения ионов вместо уравнения (8) имеем систему уравнений для квантовых функций распределения электронов и ионов.

Для электронной плазмы в случае полного вырождения вычисления приводят к следующему выражению для спектра:

$$\frac{2}{3} \frac{p_0^2 k^2}{m^2 \omega^2} = -1 + \frac{1}{2\hbar k p_0} \left\{ \left[\left(\frac{m\omega}{k} + \frac{1}{2}\hbar k \right)^2 - p_0^2 \right] \ln \frac{m\omega/k + \frac{1}{2}\hbar k + p_0}{m\omega/k + \frac{1}{2}\hbar k - p_0} - \right. \\ \left. - \left[\left(\frac{m\omega}{k} - \frac{1}{2}\hbar k \right)^2 - p_0^2 \right] \ln \frac{m\omega/k - \frac{1}{2}\hbar k + p_0}{m\omega/k - \frac{1}{2}\hbar k - p_0} \right\}, \quad (21)$$

где $\omega_0^2 = 4\pi e^2 n_0 / m$, а $p_0 = (3\pi^2 n_0)^{1/3} \hbar$ — граничный импульс распределения Ферми. При $\hbar k \ll p_0$ из (21) получаем выражение для спектра

$$\frac{k^2 p_0^2}{3\omega_0^2 m^2} = -1 + \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar k p_0} \ln \frac{\omega + p_0 \hbar k / m}{\omega - p_0 \hbar k / m}, \quad (22)$$

которое совпадает с выражением, полученным в работе (10). Для длинных волн из (21) получается

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{3}{5} \frac{k^2 p_0^2}{m^2} + \left(\frac{\hbar k^2}{2m} \right)^2. \quad (23)$$

В формулах (21) и (22) мы положили $s = -i\omega$, поскольку эти выражения удовлетворяются при чисто мнимых s . При $T \neq 0$ s будет, вообще говоря, комплексным. Мы не останавливаемся здесь на этом вопросе, так как подробному исследованию спектров будет посвящено отдельное сообщение.

Для систем, подчиняющихся статистике Бозе, в случае полного вырождения $f_0 = n_0 \delta(\mathbf{p})$. Подставляя это выражение в уравнение (21), получим спектр ($s = -i\omega$)

$$\omega^2 = \frac{v(k) n_0}{m} k^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{4m^2}, \quad (24)$$

который совпадает со спектром, полученным Н. Н. Боголюбовым (11) для почти идеального газа Бозе путем применения теории возмущений в методе вторичного квантования. Следует отметить, что такой спектр получен при пренебрежении свойствами симметрии бинарной матрицы плотности.

Методом, подобным вышеизложенному, можно провести также квантовое рассмотрение поперечных волн в плазме.

В заключение авторы приносят благодарность проф. Н. Н. Боголюбову за интерес к настоящей работе.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР и
Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
9 X 1951

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Статистическая физика, М., 1951.
² J. E. Mayer, Proc. Camb. Phil. Soc., **45**, 95 (1949). ³ E. Wigner, Phys. Rev., **40**, 749 (1932). ⁴ Я. П. Терлецкий, ЖЭТФ, **7**, 1290 (1937). ⁵ Д. И. Блохинцев, Journ. of Phys., **2**, 71 (1940); Д. И. Блохинцев и П. Э. Немировский, *ibid.*, **3**, 191 (1940). ⁶ Н. Н. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, 1946. ⁷ А. А. Власов, Теория многих частиц, 1950. ⁸ Н. Н. Боголюбов и К. П. Гуров, ЖЭТФ, **17**, 614 (1947). ⁹ Л. Д. Ландау, ЖЭТФ, **16**, 574 (1946). ¹⁰ И. И. Гольдман, ЖЭТФ, **17**, 681 (1947). ¹¹ Н. Н. Боголюбов, Изв. АН СССР, сер. физич., **11**, № 1, 77 (1947); ЖЭТФ, **18**, 622 (1948).