С. В. Борисёнок, А. С. Кондратьев, В. М. Уздин

ВИГНЕРОВСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В СОВРЕМЕННОЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ

Вигнеровское представление функций распределения весьма важно для современной физической теории: оно допускает формулировку квантовой механики и статистики в виде, который формально совпадает с классической теорией. В таком подходе физические величины представляются соответствующими преобразованиями Вейля. В статье показано, что вигнеровское представление может быть использовано как в равновесном, так и в неравновесном случаях. В рамках такого подхода демонстрируется эквивалентность техник Каданова – Бейма и Келдыша в неравновесной статистической механике.

Развитие классической и квантовой механики показало, что возможны различные эквивалентные математические схемы формулировки основных положений этих областей знания. В классической механике это формулировки Лагранжа, Гамильтона, уравнение Гамильтона – Якоби, канонические преобразования, метод интегральных инвариантов. В квантовой механике это уравнение Шредингера, матричная механика Гейзенберга, метод функционального интегрирования по траекториям. Большое значение имеет возможность использования схожего языка при рассмотрении классических и квантовых явлений, обеспечиваемая так называемым вигнеровским, или смешанным, представлением, основанным на свойствах квантовых функций распределения, введенных Е. Вигнером. На языке вигнеровских функций распределения макроскопические квантово-механические законы имеют такой же вид, как и классические.

Квантовая механика обычно формулируется в терминах операторов и векторов состояний в гильбертовом пространстве. Однако можно ввести эквивалентный формализм, который использует функции в фазовом пространстве. Тогда физические величины будут представлены преобразованиями Вейля, в то время как роль оператора плотности играет функция Вигнера.

Преобразование Вейля является операцией, инвариантной относительно линейных канонических преобразований динамических переменных. Такая инвариантность обеспечивается линейным характером показателей экспоненты в преобразовании Вейля.

Переход к смешанному представлению осуществляется следующим образом. Рассматривая для простоты одночастичную матрицу плотности в координатном представлении, совершаем переход к новым пространственным переменным

$$\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2\,,\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2\,,$$

$$\left\langle \vec{r}_1,\sigma_1 \middle| \rho \middle| \vec{r}_2,\sigma_2 \right\rangle \to \left\langle \vec{R}+\vec{r}/2,\sigma_1 \middle| \rho \middle| \vec{R}-\vec{r}/2,\sigma_2 \right\rangle.$$

Здесь σ_1 и σ_2 – спиновые переменные. Далее совершается преобразование Фурье по переменной $\vec{r}$:

$$f_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{p},\vec{R}) = \int d\vec{r}\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right\} \left\langle \vec{R}+\vec{r}/2,\sigma_1 \middle| \rho \middle| \vec{R}-\vec{r}/2,\sigma_2 \right\rangle.$$

Функция $f_{\sigma_1\sigma_2}(\vec{p},\vec{R})$ называется равновесной квантовой функцией распределения Вигнера. Формула обратного преобразования имеет вид:

$$\left\langle \vec{r}_1,\sigma_1 \left|\rho\right| \vec{r}_2,\sigma_2 \right\rangle = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right\} f_{\sigma_1\sigma_2}\left(\vec{p},\frac{\vec{r}_1+\vec{r}_2}{2}\right).$$

Все фигурирующие величины в смешанном представлении остаются матрицами в спиновом пространстве. Спиновые индексы при использовании функции распределения Вигнера часто в явном виде не выписываются.

В неравновесном случае при учете межчастичного взаимодействия в приближении самосогласованного поля кинетическое уравнение для функции распределения Вигнера получается из уравнения Неймана и имеет вид

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\vec{p}}{m}\nabla_{\vec{R}}\right] f(\vec{R},\vec{p},t) = \frac{1}{i\hbar}\int \frac{d\vec{\tau}d\vec{p}\,'}{(2\pi)^3}\left[U\left(\vec{R}+\frac{\hbar}{2}\vec{\tau}\right)-U\left(\vec{R}-\frac{\hbar}{2}\vec{\tau}\right)\right]\times$$
$$\times\exp\left\{i(\vec{p}\,'-\vec{p})\cdot\vec{\tau}\right\} f(\vec{R},\vec{p}\,',t),$$

где U — оператор потенциальной энергии (потенциал самосогласованного поля), для которого не предполагается медленность изменения в пространстве и во времени.

При учете корреляционной части межчастичного взаимодействия удобно исходить из уравнений для квантовых функций Грина в варианте, предложенном Кадановым и Беймом [1]. В ходе изучения алгебраических свойств объектов, входящих в кинетические уравнения, метод Каданова—Бейма позволяет представить точные уравнения для квантовых корреляционных и гриновских функций в более компактном виде.

В технике Каданова—Бейма используются гриновская функция g и корреляционные функции $g^{>}$ и $g^{<}$, а четвертая функция $\overline{g}$ является их комбинацией:

$$g+\overline{g} = g^{>}+g^{<}.$$

Отметим, что нетрудно установить связь этих функций с запаздывающими и опережающими функциями Грина $g^{r,a}$, определяемыми соотношениями:

$$g^{r} = g-g^{<} = -\overline{g}+g^{>},$$

$$g^{a} = g-g^{>} = -\overline{g}+g^{<}.$$

В уравнении для корреляционной функции $g^{<}$ можно перейти к смешанному представлению не только по пространственным, но и по временным переменным. После преобразования Фурье по разности временных аргументов это уравнение принимает вид [2]:

$$\left\{\omega-h(\vec{p})-U(\vec{R},T)-\mathrm{Re}\,\sigma(\vec{p}\omega;\vec{R}T)+\frac{i}{2}\Gamma(\vec{p}\omega;\vec{R}T), g^{<}(\vec{p}\omega;\vec{R}T)\right\}-$$
$$-\left\{\sigma^{<}(\vec{p}\omega;\vec{R}T),\mathrm{Re}\,g^{<}(\vec{p}\omega;\vec{R}T)+\frac{i}{2}a(\vec{p}\omega;\vec{R}T)\right\}=0, \quad (1)$$

где использованы обозначения

$$\left\{A(\vec{p}\omega;\vec{R}T),B(\vec{p}\omega;\vec{R}T)\right\}=\exp\left[\frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial\omega}\frac{\partial}{\partial T}-\frac{\partial}{\partial\omega_1}\frac{\partial}{\partial T_1}+\nabla_{\vec{p}_1}\cdot\nabla_{\vec{R}_1}-\nabla_{\vec{p}}\cdot\nabla_{\vec{R}}\right)\right]\times$$

$$\times A(\vec{p}\omega;\vec{R}_1T_1),B(\vec{p}_1\omega_1;\vec{R}T)\Big|_{\omega_1=\omega,\vec{p}_1=\vec{p},T_1=T,\vec{R}_1=\vec{R}};$$

$$g(\vec{p}z;\vec{R}T)=\int\frac{d\omega}{2\pi}\frac{a(\vec{p}\omega,\vec{R}T)}{z-\omega}, \qquad (2)$$

и введен массовый оператор:

$$\sigma(\vec{p}z;\vec{R}T)=\sigma^{\mathrm{HF}}(\vec{p};\vec{R}T)+\int\frac{d\omega}{2\pi}\frac{\Gamma(\vec{p}\omega,\vec{R}T)}{z-\omega}, \qquad (3)$$

в формуле (3) под σ^{HF} подразумевается массовый оператор в приближении Хартри—Фока. Мнимая часть массового оператора Γ связана с энергетическими функциями $\sigma^{<,>}$ соотношением:

$$\Gamma=\sigma^{>}+\sigma^{<}.$$

Корреляционная функция $g^{<}$, через которую выражаются физические характеристики системы, равна произведению спектральной функции $a(\vec{p}\omega,\vec{R}T)$ на вигнеровскую функцию распределения $f(\vec{p}\omega,\vec{R}T)$. Согласно формуле (2), спектральная функция a определяется скачком функции Грина g при переходе через вещественную ось. Для нее из формул (1)–(3) можно получить выражение [3]

$$a(\vec{p}\omega,\vec{R}T)=\frac{\Gamma}{(\omega-h-U-\mathrm{Re}\,\sigma)^2+\Gamma^2/4}\times$$

$$\times\left[1+i\left(\frac{\omega-h-U-\mathrm{Re}\,\sigma}{\Gamma}-\frac{i}{2}\right)\Phi\left(\omega-h-U-\mathrm{Re}\,\sigma+\frac{i}{2}\Gamma\right)-\right. \qquad (4)$$

$$\left.-i\left(\frac{\omega-h-U-\mathrm{Re}\,\sigma}{\Gamma}+\frac{i}{2}\right)\Phi\left(\omega-h-U-\mathrm{Re}\,\sigma-\frac{i}{2}\Gamma\right)\right],$$

где использовано обозначение

$$\Phi(x)=\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j\sum_{k_1,\ldots,k_j=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k_1+\ldots+k_j}}{4^{k_1+\ldots+k_j}(2k_1)!\ldots(2k_j)!}\left[x,\ldots,\frac{1}{x}\left[x,\frac{1}{x}\right]_{\mathrm{P}}\ldots\right]_{\mathrm{P}},$$

а квадратными скобками с индексом «р» обозначены обобщенные квантовые скобки Пуассона [1]:

$$[A,B]_{\mathrm{P}}=\frac{\partial A}{\partial\omega}\frac{\partial B}{\partial T}-\frac{\partial A}{\partial T}\frac{\partial B}{\partial\omega}-\nabla_{\vec{p}}A\cdot\nabla_{\vec{R}}B+\nabla_{\vec{R}}A\cdot\nabla_{\vec{p}}B.$$

Соотношение (4) является точным, поскольку при его выводе не накладывается никаких предположений о скорости изменения внешнего возмущения в пространстве и во времени и о силе межчастичного взаимодействия. С помощью этого выражения в каждом конкретном случае можно получить более простые приближенные соотношения со строгой оценкой условий, при которых эти соотношения являются справедливыми.

При явном учете матричного характера функции Грина в спиновом пространстве (например, при наличии внешнего магнитного поля) разложение операторной экспоненты приводит к появлению коммутаторов и антикоммутаторов [4]. Преобразования Вейля для коммутаторов и антикоммутаторов раскладываются в ряд по $\hbar^2$. При этом ряд для преобразований Вейля от антикоммутатора $\frac{1}{2}\{A,B\}$ начинается с произведения преобразований Вейля A и B, а ряд для преобразования Вейля от коммутатора $-\frac{i}{\hbar}[A,B]$ начинается со скобок Пуассона преобразований Вейля операторов A и B.

Классический предел физической величины выступает как предел при $\hbar \to 0$ преобразования Вейля соответствующего оператора. Для оператора плотности ситуация несколько иная, поскольку в квантовой механике существуют физические состояния, которые не имеют классического аналога. Это означает, что функция Вигнера в пределе $\hbar \to 0$ не всегда переходит в классическую функцию распределения.

В заключение отметим, что, как показано в работе [5], уравнения для корреляционных функций в смешанном представлении в методе Каданова—Бейма полностью эквивалентны диаграммной технике Келдыша для произвольных неравновесных систем [6]. Отметим, что в рамках метода Каданова—Бейма имеются возможности как к обобщению результатов на более сложные случаи, так и к строгой оценке условий справедливости используемого приближения, в то время как диаграммная техника Келдыша, как правило, более удобна для выполнения конкретных расчетов в определенных приближениях.

В настоящее время техника Каданова—Бейма активно используется в самых разных областях физики, таких как исследование неравновесных функций Грина бозе–эйнштейновского конденсата в гармонических пучках [7], полупроводниковых гетероструктур [8], вычисление немарковских интегралов столкновений для инфинитных ферми-жидкостей [9] и т. п.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. *Каданов Л., Бейм Г.* Квантовая статистическая механика. М., 1964.
2. *Кондратьев А. С., Кучма А. Е.* Лекции по теории квантовых жидкостей. Л., 1989.
3. *Кондратьев А. С., Люблинская И. Е., Уздин В. М.* Теор. мат. физ. 1990. Т. 84. № 1. С. 141–145
4. *Гроот С. Р., Сатторп Л. Г.* Электродинамика. М., 1982.
5. *Кондратьев А. С., Люблинская И. Е., Уздин В. М.* О технике Келдыша и Каданова—Бейма при описании неравновесных явлений. Деп. ВИНИТИ № 2528-В90. Л., 1990.
6. *Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П.* Статистическая физика. Ч. 2. Физическая кинетика. М., 1978.
7. *Wachter J., Walser R., Cooper J., Holland M.* Phys. Rev. 2001. A 64, 053612.
8. *Wacker A.* Phys. Rev. 2002. B 66, 085326.
9. *Plujko V. A., Ezrov S. N., Gorbachenko A. N., Kavatsyuk M. O.* Phys. Condens. Matter 14. 2002. 1–11.

S. Borisenok, A. Kondratyev, V. Uzdin

THE WIGNER REPRESENTATION IN MODERN THEORETICAL PHYSICS

Wigner representation for distribution functions is very important in modern physical theory: it allows the formulation of quantum mechanics and statistics in terms of classical theory. Under this approach, physical values are easily represented by appropriate Weyl transformations. It is demonstrated how the Wigner *representation can be used both in equilibrium and non-equilibrium cases. Using this approach we demonstrate the equivalence between the Kadanoff—Baym and the Keldysh techniques in the non-equilibrium statistical mechanics.*