ВЕСТНИК ПЕРМСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

2025 • ФИЗИКА • Вып. 1

УДК 536.75
PACS 03.65.Ca, 03.65.Yz

Квазикинетические квантовые уравнения

В. С. Кирчанов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия
kirchanv@yandex.ru

Получены уравнения Шредингера и Неймана для открытых квантовых систем, типа квантовых газов, которые описывают зависимость их от температуры. Далее получены модифицированные уравнения Линдблада, описывающие экспоненциальную релаксацию и диффузионное затухание из-за медленных блужданий в конфигурационном пространстве. Единое точное уравнение Неймана содержит слагаемые из уравнения Колмогорова, которые характеризуют случайные движения квантовых частиц в импульсном пространстве. Его решение приводит к диффузионному затуханию сигналов спиновой намагниченности в импульсном пространстве по экспоненте со временем $t^3/3$ и сложным осцилляциям произведений импульсов и координат.

Ключевые слова: открытая квантовая система; диффузионное затухание сигналов в конфигурационном и импульсном пространствах; квантовая термодинамика

Поступила в редакцию 20.11.2024; принята к опубликованию 17.03.2025

Quasi-kinetic quantum equations

V. S. Kirchanov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russia
kirchanv@yandex.ru

The Schrödinger and Neumann equations for open quantum systems of the quantum gas type were obtained, these describing their temperature dependence. Then modified Lindblad equations were obtained, describing exponential relaxation and diffusion damping due to slow wandering in the configuration space. The solution of a single exact Neumann equation with terms from the Kolmogorov equation, which describes random motions of quantum particles in momentum space, leads to diffusion damping of spin magnetization signals in momentum space exponentially with time $t^3/3$ and complex oscillations of products of momenta and coordinates.

Keywords: open quantum system; diffusion damping of signals in configuration and momentum spaces; quantum thermodynamics

Received 20 November 2024; accepted 17 March 2025

doi: 10.17072/1994-3598-2025-1-44-51

1. Введение

Целью работы является получение квантовых уравнений, которые могут описывать неравновесные процессы, происходящие с открытыми квантовыми системами, типа диффузии или теплопроводности. Уравнения Шредингера и Неймана (Лиувилля) применяют для описания поведения замкнутых квантовых систем. Уравнения Линдблада используют для описания открытых квантовых систем с линейной диссипацией энергии, в этом случае их решения описывают релаксацию экспоненциального вида. Если классические переменные, связанные с квантовыми переменными системы, подчиняются уравнению Фоккера-Планка, или уравнению Колмогорова, тогда такие точные квантовые уравнения могут описывать некоторые кинетические процессы.

2. Температурное уравнение Шредингера

Уравнения Шредингера и Неймана можно использовать для описания температурной динамики квантовой системы путем введения в волновую функцию нового параметра – температуры. Как известно, длина тепловой волны де Бройля или (тепловая длина волны де Бройля) для квантовых газов имеет вид [1, 2] (здесь и далее индекс T обозначает величины, зависящие от температуры):

$$\lambda_T = \frac{h}{p_T} = \frac{h}{mv_T} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}. \tag{1.1}$$

Повторим путь Шредингера от длины волны к волновой функции и волновому уравнению, и далее в иерархию квантовых уравнений. Принимаем, что координата $x(t)$ и температура $T(t)$ зависят от времени t, тогда для свободной частицы в одномерном случае волновая функция следующая:

$$\begin{gathered}\psi\left(t,x,T\right) = \psi_0 \exp\left(-i\frac{E_T}{\hbar}t + i\frac{p_T}{\hbar}x\right) = \\ = \psi_0 \exp\left(-i\frac{3\alpha k_B T}{2\hbar}t + i\frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{\hbar}x\right),\end{gathered} \tag{1.2}$$

где

$$E_T = \frac{p_T^2}{2m} = \pi k_B T = \hbar\omega_T.$$

Тепловая энергия примерно в два раза больше классической

$$E_T = \pi k_B T = \frac{3}{2}\alpha k_B T, \quad \alpha = \frac{2}{3}\pi \approx 2.1. \tag{1.3}$$

Циклическая частота тепловой волны де Бройля:

$$\omega_T = 2\pi f_T = \frac{\pi k_B T}{\hbar}. \tag{1.4}$$

Из формулы для импульса

$$p_T = \sqrt{2\pi m k_B T} = \hbar\kappa_T$$

получаем волновое число тепловой волны де Бройля

$$\kappa_T = \frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{\hbar}. \tag{1.5}$$

Фазовая скорость тепловой волны де Бройля

$$\upsilon_T = \frac{\omega_T}{\kappa_T} = \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2m}}. \tag{1.6}$$

Групповая скорость тепловой волны де Бройля равна скорости частицы

$$v_T = \frac{d\omega_T}{d\kappa_T} = \frac{p_T}{m} = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{m}}. \tag{1.7}$$

Обычное уравнение Шредингера для свободной частицы в одномерном движении

$$\frac{\partial\psi\left(x,t\right)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi = -\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}. \tag{1.8}$$

Найдем все производные от тепловой волновой функции (1.2), содержащей дополнительно координату и температуру:

$$\frac{\partial\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{\partial x} = \psi\cdot\left(i\frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{\hbar}\right), \tag{1.9}$$

$$\frac{\partial^2\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{\partial x^2} = \psi\cdot\left(-\frac{2\pi m k_B T}{\hbar^2}\right), \tag{1.10}$$

$$\frac{\partial\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{\partial T} = i\psi\left(-\frac{3\alpha k_B t}{2\hbar} + \frac{\sqrt{2\pi m k_B}}{2\hbar\sqrt{T}}x\right), \tag{1.11}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{\partial t} = \\ = i\psi\cdot\left(-\frac{3\alpha k_B T}{2\hbar} - \frac{3\alpha k_B t}{2\hbar}\frac{dT}{dt} + \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{2\pi m k_B T}}{\hbar}\frac{dx}{dt} + \frac{\sqrt{2\pi m k_B}}{\hbar}\frac{x}{2\sqrt{T}}\frac{dT}{dt}\right).\end{gathered} \tag{1.12}$$

Подставляя производные по координате (1.9), (1.10) и производную по температуре (1.11) справа в производную по времени (1.8), получаем уравнение Шредингера для тепловой волновой функции в квантовой термодинамике

$$\begin{gathered}\frac{\partial\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{\partial t} = \\ = -\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial T}\frac{dT}{dt}.\end{gathered} \tag{1.13}$$

Подобное уравнение можно получить формально через полный дифференциал тепловой волновой функции, учитывая квантовую производную по времени

$$\begin{gathered}\frac{d\psi\left(t,x(t),T\left(t\right)\right)}{dt} = \\ = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi\right)\frac{dt}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial T}\frac{dT}{dt}.\end{gathered} \tag{1.14}$$

Для трехмерного случая получаем уравнение Шредингера для тепловых волн:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\psi\left(t,\vec{r}(t),T\left(t\right)\right)}{\partial t} = \\ = -i\hbar^{-1}\hat{H}\psi + \frac{\partial\psi}{\partial\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial\psi}{\partial T}\frac{dT}{dt}.\end{gathered} \tag{1.15}$$

где гамильтониан:

$$\begin{gathered}\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\left(x,y,z\right) = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U\left(x,y,z\right).\end{gathered} \tag{1.16}$$

Уравнение Неймана для статистического оператора $\rho = \psi\psi^\dagger$ в случае неизотермического процесса:

$$\begin{gathered}\frac{\partial\rho\left(t,\vec{r}(t),T\left(t\right)\right)}{\partial t} = \\ = -i\hbar^{-1}\left[\hat{H},\rho\right] + \frac{\partial\rho}{\partial\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial\rho}{\partial T}\frac{dT}{dt}.\end{gathered} \tag{1.17}$$

Для теплового уравнения Линдблада для квантовой системы с линейной диссипацией энергии

$$\frac{d\rho\big(t,\vec{r}(t),T(t)\big)}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+i\hbar^{-1}\big[\hat{H},\rho\big]+ \\ +\frac{\partial\rho}{\partial\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt}+\frac{\partial\rho}{\partial T}\frac{dT}{dt}=\hat{\Omega}\rho, \tag{1.18}$$

где $\hat{\Omega}$ – *диссипатор* – оператор диссипации [3]. Мы используем каноническую форму диссипативных операторов $\hat{L}=\hat{A}+i\hat{B}$, $\hat{L}^{+}=\hat{A}-i\hat{B}$, выражая их через пару эрмитовых операторов, например, импульса и координаты $\hat{A}=\hat{p}$, $\hat{B}=\hat{q}$, коммутатор $[\hat{q},\hat{p}]=\hat{q}\hat{p}-\hat{p}\hat{q}=i\hbar$ [4]:

$$\hat{\Omega}\rho=\frac{1}{2\hbar^2}\sum_{j=1}^{n}\Big(\Big[\hat{A}_j,\big[\hat{A}_j,\rho\big]_-\Big]_-+ \\ +\Big[\hat{B}_j,\big[\hat{B}_j,\rho\big]_-\Big]+ \\ +i\Big[\hat{B}_j,\big\{\hat{A}_j,\rho\big\}\Big]-i\Big[\hat{A}_j,\big\{\hat{B}_j,\rho\big\}\Big]\Big). \tag{1.19}$$

Здесь для $j=1$ коммутатор оператора A и статистического оператора $\big[\hat{A},\rho\big]_-=\hat{A}\rho-\rho\hat{A}$, и антикоммутатор $\big\{\hat{A},\rho\big\}_+=\hat{A}\rho+\rho\hat{A}$.

Тогда уравнение Линдблада, которое учитывает зависимость координат и температуры, от времени принимает вид:

$$\frac{\partial\rho\big(t,\vec{r}(t),T(t)\big)}{\partial t}=-i\hbar^{-1}\big[\hat{H},\rho\big]+ \\ +\frac{\partial\rho}{\partial\vec{r}}\cdot\frac{d\vec{r}}{dt}+\frac{\partial\rho}{\partial T}\cdot\frac{dT}{dt}-\hat{\Omega}\rho. \tag{1.20}$$

Введение оператора диссипации энергии приводит к экспоненциальному затуханию. Это квазикинетическое уравнение (1.20) квантовой термодинамики можно сравнить с кинетическим уравнением Больцмана (Улинга–Уленбека) [1] для вероятности f:

$$\frac{\partial f\big(t,\vec{r}(t),\vec{p}(t)\big)}{\partial t}+\frac{\partial f}{\partial\vec{r}}\frac{d\vec{r}}{dt}+\frac{\partial f}{\partial\vec{p}}\frac{\partial\vec{p}}{\partial t}=-St(f)\,. \tag{1.21}$$

В линеаризованном простейшем случае с интегралом столкновений

$$St(f)\sim-\frac{g}{\tau},$$

где τ – время релаксации вследствие столкновений [5].

В представлении Гейзенберга уравнение Линдблада для операторов наблюдаемых величин $\hat{D}$ имеет вид [4]

$$\frac{d\hat{D}}{dt}=-\frac{\partial\hat{D}}{\partial t}+i\hbar^{-1}\big[\hat{H},\hat{D}\big]=\hat{\Xi}\hat{D}, \tag{1.22}$$

где диссипатор

$$\hat{\Xi}\hat{D}=\frac{1}{2\hbar^2}\sum_{j=1}^{n}\Big(\Big[\hat{A}_j,\big[\hat{A}_j,\hat{D}\big]\Big]+\Big[\hat{B}_j,\big[\hat{B}_j,\hat{D}\big]\Big]+ \\ +i\Big\{\hat{B}_j,\big[\hat{A}_j,\hat{D}\big]\Big\}-i\Big\{\hat{A}_j,\big[\hat{B}_j,\hat{D}\big]\Big\}\Big). \tag{1.23}$$

Видно, что в уравнениях Неймана (1.17) и Линдблада (1.20) знаки коммутаторов гамильтониана с статистическим оператором ρ и с оператором наблюдаемой величины $\hat{D}$ противоположны. Кроме того, диссипаторы (1.19) и (1.23) имеют различные косоэрмитовые части (с мнимой единицей).

В случае зависимости операторов наблюдаемых величин от дополнительных параметров можно использовать уравнение

$$\frac{\partial\hat{D}\big(t,\vec{r}(t),T(t)\big)}{\partial t}=i\hbar^{-1}\big[\hat{H},\hat{D}\big]+ \\ +\frac{\partial\hat{D}}{\partial\vec{r}}\cdot\frac{d\vec{r}}{dt}+\frac{\partial\hat{D}}{\partial T}\cdot\frac{dT}{dt}=\hat{\Xi}\hat{D}. \tag{1.24}$$

Заметим, что соотношение неопределенностей для энергии и обратной температуры в квантовой термодинамике, согласно Суханову [6]

$$\Delta E\cdot\Delta\beta\geq k_B \tag{1.25}$$

аналогично соотношению в квантовой механике $\Delta E\cdot\Delta t\geq h$. Здесь $\beta=1/T$ – обратная температура, её дисперсия

$$\Delta\beta=\Delta\left(\frac{1}{T}\right)=\frac{1}{T_0^2}\cdot\Delta T\,,$$

ΔE – дисперсия энергии, T_0 – температура термостата, $\Delta T=T\pm T_0$. Полагая приближенно, что $\Delta E\sim k_BT$, $\Delta T\sim T_0$, получаем соотношение Эйнштейна для флуктуаций

$$\Delta E\cdot\Delta T\geq k_BT_0^2\,. \tag{1.26}$$

С другой стороны, в тепловом излучении постоянную Больцмана можно выразить через постоянные Планка h, Стефана–Больцмана σ и скорость света c [7]:

$$\sigma=\frac{2\pi^5k_B^4}{15h^3c^2},$$

тогда

$$k_B\approx 0.297h^{3/4}c^{2/4}\sigma^{1/4}\sim h^{3/4}c^{2/4}\sigma^{1/4}. \tag{1.27}$$

Говоря о «длине тепловой волны де Бройля», согласно редакторам Д. Н. Зубареву и А. Г. Башкирову перевода книги А. Исихары «Статистическая механика» [1], мы скажем «о де бройлевской длине *волны тепла*», и вспомним о принципе корпускулярно-волнового дуализма «волна–частица». Из соотношения

$$\exp\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right)=\exp\left(\frac{E}{Q}\right)$$

в распределении Планка видим, что это отношение двух квантов энергии, т.е. можно *формально* ввести «квант» тепловой энергии $Q=k_BT$ – квазичастицу «*теплон*», который эквивалентен кванту электромагнитной энергии $E=h\nu$ частицы-фотона. Тогда, постоянная Больцмана k_B в квантовой термодинамике для импульсных тепловых волн соответствует роли постоянной Планка h для единичных фотонов в квантовой оптике и фотонике. Теплон значительно крупнее фотона. Для температур 1–10^4 К частоты тепловых волн лежат в ТГц диапазоне

3. Диффузия в квантовой системе

Уравнения Линдблада хорошо описывают в открытых квантовых системах линейную диссипацию экспоненциального вида с постоянным временем релаксации. Однако существует диссипация энергии из квантовых систем, обусловленная более медленными диффузионными процессами. Это случайные блуждания частицы в конфигурационном пространстве. В этом случае динамика системы описывается в методе случайных траекторий единым точным уравнением для неполного квантового статистического оператора $\langle\rho\rangle$ в рамках замены теплового резервуара случайным временным процессом для классической переменной $q(t)$ уравнением Эйнштейна–Фоккера (УЭФ), а квантовая переменная – уравнением Неймана (Лиувилля) [8], где $\langle\rho\rangle$ – многомерный интеграл, аналог фейнмановского интеграла по траекториям:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho\langle(t,q,s)\rangle}{\partial t}&=-iL_{sq}\langle\rho\rangle+L_q\langle\rho\rangle=\\&=-i\hbar^{-1}\left[\hat H(s,q),\langle\rho\rangle\right]-a\frac{\partial\langle\rho\rangle}{\partial q}+b\frac{\partial^2\langle\rho\rangle}{\partial q^2}.\end{aligned}\tag{2.1}$$

где введён оператор Лиувилля

$$\hat{\hat L}_{s,q}\rho=\hbar^{-1}\left[\hat H(s,q),\rho\right],$$

$\hat H(s,q)$ – гамильтониан, b –коэффициент диффузии.

Используя замену

$$\langle\rho(t,q,s)\rangle=\exp\left(-it\hat L_{s,q}\right)\langle\rho^*(t)\rangle,\tag{2.2}$$

и подставляя производные (2.3)–(2.5) в (2.1)

$$\frac{\partial\langle\rho(t,q,s)\rangle}{\partial t}=-i\hat L_{sq}e^{-iL_{sq}t}\langle\rho^*(t)\rangle+e^{-i\hat L_{sq}t}\frac{\partial\langle\rho^*(t)\rangle}{\partial t},\tag{2.3}$$

$$\frac{\partial\langle\rho(t,q,s)\rangle}{\partial q}=-it\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}e^{-iL_{sq}t}\langle\rho^*(t)\rangle,\tag{2.4}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\langle\rho(t,q,s)\rangle}{\partial q^2}&=\left(-it\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}\right)^2e^{-iL_{sq}t}\langle\rho^*(t)\rangle-\\&-it\frac{\partial^2\hat L_{sq}}{\partial q^2}e^{-iL_{sq}t}\langle\rho^*(t)\rangle,\end{aligned}\tag{2.5}$$

получаем уравнение для неполного среднего

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\rho^*(t)\rangle}{\partial t}&=it\left[a\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}-b\frac{\partial^2\hat L_{sq}}{\partial q^2}\right]\langle\rho^*(t)\rangle-\\&-bt^2\left(\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}\right)^2\langle\rho^*(t)\rangle.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Его решение следующее:

$$\begin{aligned}\langle\rho^*(t)\rangle=\exp\Bigg\{&i\frac{t^2}{2}\left[a\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}-b\frac{\partial^2\hat L_{sq}}{\partial q^2}\right]-\\&-b\frac{t^3}{3}\left(\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}\right)^2\Bigg\}\langle\rho_0^*\rangle.\end{aligned}\tag{2.7}$$

Окончательно частное решение уравнения (2.1) принимает вид

$$\begin{aligned}\langle\rho(t,q,s)\rangle=\exp\Bigg\{&-i\hat L_{sq}t+\\&+i\frac{t^2}{2}\left[a\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}-b\frac{\partial^2\hat L_{sq}}{\partial q^2}\right]-\\&-b\frac{t^3}{3}\left(\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}\right)^2\Bigg\}\langle\rho(0,q,s)\rangle.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Первый сомножитель в формуле (2.8) – это стандартные осцилляции с частотой, равной разности уровней энергии системы. Второй сомножитель в (2.8) – это временные осцилляции производных интегралов Френеля [9]:

$$\exp\left(i\frac{t^2}{2}\hat A\right)=\cos\left(\frac{t^2}{2}\hat A\right)+i\sin\left(\frac{t^2}{2}\hat A\right),\tag{2.9}$$

где введен супероператор

$$\begin{aligned}\hat A\langle\rho\rangle&\equiv a\frac{\partial\hat L_{sq}}{\partial q}\langle\rho\rangle-b\frac{\partial^2\hat L_{sq}}{\partial q^2}\langle\rho\rangle=\\&=a\left[\frac{\partial\hat H_{sq}}{\partial q},\langle\rho\rangle\right]_--b\left[\frac{\partial^2\hat H_{sq}}{\partial q^2},\langle\rho\rangle\right]_-,\end{aligned}$$

q – координата, t – время.

Используя правило Лейбница дифференцирования интегралов Френеля по параметру z

$$\begin{aligned}C\left(\frac{\pi}{2}z^2\right)&=\int_0^z\cos\frac{\pi}{2}\tau^2d\tau,\\S\left(\frac{\pi}{2}z^2\right)&=\int_0^z\sin\frac{\pi}{2}\tau^2d\tau,\end{aligned}\tag{2.11}$$

получаем

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz}C\left(\frac{\pi}{2}z^2\right)&=\frac{d}{dz}\int_0^z\cos\frac{\pi}{2}\tau^2d\tau=\\&=\cos\frac{\pi}{2}z^2=\cos\frac{t^2}{2}\hat A.\end{aligned}\tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dz}S\left(\frac{\pi}{2}z^2\right)&=\frac{d}{dz}\int_0^z\sin\frac{\pi}{2}\tau^2d\tau=\\&=\sin\frac{\pi}{2}z^2=\sin\frac{t^2}{2}\hat A.\end{aligned}\tag{2.13}$$

В формулах интегралов Френеля τ – немая переменная интегрирования, t – время. Последний сомножитель в показателе экспоненты (2.8) – это диффузионное затухание, пропорциональное кубу времени с коэффициентом диффузии пропорциональном двойному коммутатору, т.е. квадрату производной гамильтониана по координате. Он отличается от релаксационного затухания, где время и гамильтониан – в первой степени:

$$\left(\frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q}\right)^2 \rho = \hbar^{-2}\left[\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q}, \left[\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q}, \rho\right]\right] = $$
$$= \hbar^{-2}\left\{\left(\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q}\right)^2 - 2\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q}\rho\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q} + \right. \tag{2.14}$$
$$\left. +\rho\left(\frac{\partial \hat{H}_{s,q}}{\partial q}\right)^2\right\}.$$

При вычислении используется формула выражения двойного коммутатора через интеграл по немой переменной x от обыкновенного коммутатора

$$\exp\left\{-b^2\left(\frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q}\right)^2\right\}\rho =$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-\pi x^2 - i2\sqrt{\pi}xb\frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q}\right\}\rho, \tag{2.15}$$

здесь

$$\frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q}\rho \equiv \hbar^{-1}\left[\frac{\partial \hat{H}(\hat{s},q)}{\partial q}, \rho\right]_-, \tag{2.16}$$

где $\hat{H}(\hat{s},q)$ – гамильтониан, зависящий от спиновой s и классической q переменных.

В качестве примера конкретной задачи рассмотрим диффузионное затухание сигнала ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) за счет вращательных качаний молекулы, содержащей квадрупольное ядро [10]. Гамильтониан сверхтонкого электрического квадрупольного расщепления для ядер со спином больше 1 имеет вид

$$\hat{\mathrm{H}}(I,q(t)) = \frac{eQq_{zz}(t)}{4I(2I-1)}[3I_z^2 - I(I+1)],$$

где $q_{zz}(t) \approx q_{zz}\left(1 - 3\theta^2(t)/2\right)$ – z-компонента тензора градиента электрического поля аксиальной симметрии на ядре, Q – электрический квадрупольный момент ядра, θ – угол между осями z подвижной и неподвижной систем координат тензора градиента.

Высокочастотные качания молекулы в шумовой параболической яме после усреднения по их периоду приводят с помощью процедуры, описанной в книге Кляцкина [11], к уравнению Фоккера–Планка, которое описывает медленные движения, с коэффициентами диффузии, зависимыми от произведения мощности тепловых шумов, квадрата частоты вращательных качаний и квадрата амплитуды вращательных качаний. Далее, используя решение уравнения (2.8) для импульсной программы ЯКР, получают выражение для спиновой намагниченности, содержащей множитель экспоненциального диффузионного затухания амплитуды сигнала ЯКР-эхо со временем в степени $t^3/3$. Вращательные качания квадрупольного ядра непосредственно влияют на компоненты тензора градиента электрического поля квадрупольного ядра, которые связаны со спином ядра в гамильтониане квадрупольного взаимодействия. Диффузии квадрупольных ядер в твердом теле практически нет, а диффузионное затухания сигнала ЯКР-эхо есть. Оно пропорциональное третьей степени времени, что подтверждается экспериментально.

Диффузионное затухание сигнала ЯМР в жидкостях было обнаружено ещё в первых экспериментах за счет диффузии резонансных ядер [12]. В ЭПР затухание возникало за счет спиновой диффузии и переходов флик-фляк в дипольном гамильтониане [8]. Если спиновой гамильтониан парамагнитного иона содержит квадрупольный гамильтониан, тогда в амплитуде ЭПР-эхо в твердом теле может наблюдаться дополнительное диффузионное затухание пропорциональное третьей степени времени между импульсами.

4. Случайные движения квантовых частиц в импульсном пространстве

В открытых квантовых системах (например, газ атомарного водорода в шумовых переменных магнитных полях на частоте 1.42 ГГц) может наблюдаться диффузионное затухание сигнала электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) в 6-мерном фазовом пространстве за счет *случайных движений* [12] ядер в импульсном пространстве в отличие от случайных блужданий в конфигурационном пространстве [12]. В этом случае вместо уравнения Фоккера–Планка (УФП) нужно использовать уравнение Колмогорова [13] для классических переменных – координат q_i и импульсов p_i атомов – в методе случайных траекторий [9], записывая точное уравнение Неймана–Колмогорова для спиновых переменных электронов атомов s_k:

$$\frac{\partial\left\langle \rho(t,q_i,p_i,s_i)\right\rangle}{\partial t} = -i\hbar^{-1}\hat{L}_{sq}\langle\rho\rangle -$$
$$-i\hbar^{-1}H_p\langle\rho\rangle + \hat{L}_{q,p}\langle\rho\rangle =$$
$$= -i\hbar^{-1}\left[\hat{H}(s_i,q_i),\langle\rho\rangle\right] - i\hbar^{-1}\frac{p_i^2}{2m_i}\langle\rho\rangle - \tag{3.1}$$
$$-p_k\frac{\partial\langle\rho\rangle}{\partial q_k} + D\frac{\partial^2\langle\rho\rangle}{\partial p_k^2}.$$

Гамильтониан магнитного сверхтонкого взаимодействия электрона с ядром в атоме водорода [15] следующий:

$$\hat{\mathrm{H}}_{IS,q} = \frac{8\pi}{3}\gamma_e\gamma_n\hbar^2\hat{\vec{I}}\cdot\hat{\vec{S}}\delta(q),$$

где I – спин ядра, S – спин электрона, $\delta(q)$ – дельта функция Дирака, q – координата ядра, γ_e - гиромагнитное отношение для электрона, γ_n - гиромагнитное отношение для протона. Для электронов в основном состоянии $n = 1$ и нулевым орбитальным моментом $l = 0$ (s-электроны) магнитный дипольный квантовый переход

$$(F = 1, m_F = 0) \to (F = 0, m_F = 0)$$

между магнитными подуровнями сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода. Квантовые числа полного момента атома водорода $F = I + S = 1$, $F = I - S = 0$ при $I = 1/2$ (спин ядра водорода), и $S = \pm 1/2$ (спиновые квантовые числа электронного спинового момента в атоме водорода). Разность уровней энергии сверхтонкого магнитного расщепления

$$\Delta E = E_{F=1} - E_{F=0} = \hbar\omega,$$

где частота излучения спектральной радиолинии атомарного водорода во Вселенной $\nu = \omega / 2\pi = 1.42$ ГГц, длина волны 21.1 см.

Это спонтанное излучение между пара- и орто-состоянием атома водорода в основном энергетическом состоянии возникает в результате перехода между подуровнями сверхтонкой структуры атома водорода. Причиной расщепления электронного уровня в основном состоянии является взаимодействие спинов ядра и электрона.

Далее решаем модельную задачу в двумерном фазовом пространстве (q_1, p_1) при $i = k = 1$, опуская индексы. Решение уравнения (3.1) будет принципиально отличаться от известного фундаментального решения классического уравнения Колмогорова [14] наличием осциллирующего слагаемого в уравнении (3.1). Используя подстановку

$$\left\langle \rho(t,s,q,p) \right\rangle = \exp\left\{ -i\hbar^{-1} t \left(\hat{L}_{s,q} + H_p \right) \right\} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle, \quad (3.2)$$

находим производные по времени t, координате q, импульсу p частицы:

$$\frac{\partial \left\langle \rho(t,q,s) \right\rangle}{\partial t} = -i\hbar^{-1} [\hat{L}_{sq} + H_p] e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle + + e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \cdot \frac{\partial \left\langle \rho^*(t) \right\rangle}{\partial t}, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial \left\langle \rho(t,q,s) \right\rangle}{\partial q} = -i\hbar^{-1} t \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \left\langle \rho(t,q,s) \right\rangle}{\partial p} = - i\hbar^{-1} t \frac{\partial H_p}{\partial p} e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial^2 \left\langle \rho(t,s,q,p) \right\rangle}{\partial p^2} = = -i\hbar^{-1} t \frac{\partial^2 H_p}{\partial p^2} e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle + + \left(-i\hbar^{-1} t \frac{\partial H_p}{\partial p} \right)^2 e^{-i\hbar^{-1} t [\hat{L}_{sq} + H_p]} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle. \quad (3.6)$$

После подставления производных (3.3), (3.4), (3.6) в (3.1) получаем уравнение:

$$\frac{\partial \left\langle \rho^*(t) \right\rangle}{\partial t} = -pi\hbar^{-1} t \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle - - Di\hbar^{-1} t \frac{\partial^2 H_p}{\partial p^2} \left\langle \rho^*(t) \right\rangle + + D \left(-i\hbar^{-1} t \frac{\partial H_p}{\partial p} \right)^2 \left\langle \rho^*(t) \right\rangle. \quad (3.7)$$

Разделяя переменные в (3.7), получаем:

$$\partial (\ln \left\langle \rho^*(t) \right\rangle) = \frac{\partial \left\langle \rho^*(t) \right\rangle}{\left\langle \rho^*(t) \right\rangle} = = -pi\hbar^{-1} t \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} - Di\hbar^{-1} t \frac{\partial^2 H_p}{\partial p^2} + + D \left(-i\hbar^{-1} t \frac{\partial H_p}{\partial p} \right)^2 \partial t. \quad (3.8)$$

После интегрирования (3.8) находим частное решение уравнения (3.7) в виде

$$\left\langle \rho^*(t) \right\rangle = \exp\left\{ -i\hbar^{-1} p \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} \frac{t^2}{2} - i\hbar^{-1} D \frac{\partial^2 H_p}{\partial p^2} \frac{t^2}{2} - -\hbar^{-2} D \left(\frac{\partial H_p}{\partial p} \right)^2 \frac{t^3}{3} \right\} \left\langle \rho^*(0) \right\rangle. \quad (3.9)$$

С учетом формулы (3.2) решение уравнения (3.1) принимает вид

$$\left\langle \rho(t,s,q,p) \right\rangle = = \exp\left\{ -i\hbar^{-1} t \left(\hat{L}_{s,q} + H_p \right) - i\hbar^{-1} p \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} \frac{t^2}{2} - - i\hbar^{-1} D \frac{\partial^2 H_p}{\partial p^2} \frac{t^2}{2} - - \hbar^{-2} D \left(\frac{\partial H_p}{\partial p} \right)^2 \frac{t^3}{3} \right\} \left\langle \rho(0,s,q,p) \right\rangle. \quad (3.10)$$

Окончательно, частное решение уравнения (3.1) запишется следующим образом:

$$\left\langle \rho(t,s,q,p) \right\rangle = \exp\left\{ -i\hbar^{-1} t \left(\hat{L}_{s,q} + \frac{p^2}{2m} \right) - - i\hbar^{-1} p \frac{\partial \hat{L}_{sq}}{\partial q} \frac{t^2}{2} - i\hbar^{-1} D \frac{1}{m} \frac{t^2}{2} - \hbar^{-2} D \frac{p^2}{m^2} \frac{t^3}{3} \right\} \left\langle \rho(0,s,q,p) \right\rangle. \quad (3.11)$$

Первый сомножитель в (3.11) соответствует гармоническим осцилляциям на частоте 1.42 ГГц, длина волны 21.1 см, второй сомножитель – это осцилляции Френеля, последний – диффузионное затухание сигнала в импульсном пространстве со временем $t^3/3$.

5. Заключение

1. Получено уравнение Шредингера, зависящее от температуры, для квантовой термодинамики. Показано, что тепловая энергия квантуется с момента введения постоянной Больцманом, где $Q = k_B T$ – квант тепловой энергии. Получено квазикинетическое уравнение Неймана для неизотермических процессов. Приведено уравнение Линдблада для статистического оператора, зависящего от температуры.

2. Диффузионные процессы в кантовой системе описываются единым точным уравнением Неймана для спиновых переменных совместно со слагаемыми из уравнения Фоккера и Планка. Случайные блуждания частиц со спином в конфигурационном пространстве приводят к диффузионному затуханию средней спиновой намагниченности, пропорциональному экспоненте с показателем времени в третьей степени, в отличие от релаксационного затухания, где время – в первой степени.

3. Комбинация уравнения Неймана с уравнением Колмогорова, которое описывает случайные движения частиц в импульсном пространстве, приводит к диффузионному затуханию сигналов спиновой намагниченности в импульсном пространстве по экспоненте со временем $t^3/3$ и сложным осцилляциям произведений импульсной переменной и координатной.

Квазикинетические квантовые уравнения, включающие температуру и координаты, зависимые от времени, могут быть применены также для построения квантовой теории термического анализа [16] путем задания специальных программ для изменения температуры образца по любому временному закону, например, термоциклирования точек фазовых переходов для построения гистерезисных кривых.

Список литературы

1. *Исихара А.* Статистическая физика. М.: Мир, 1973. 471 с.
2. *Стишов С. М.* К термодинамике простых систем // Успехи физических наук. 2024. Т. 194. № 9. С. 967–973.
3. *Бройер Х.-П., Петруччионе Ф.* Теория открытых квантовых систем. М., Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010. 824 с.
4. *Кирчанов В.С.* Применение уравнения Линдблада к квантовым диссипативным системам // Теоретическая и математическая физика. 2006. Т. 148. № 2. С. 288–294.
5. *Кубо Р.* Статистическая механика. М.: Мир, 1967. 453 с.
6. *Суханов А. Д.* Концепции современного естествознания М.: Агар, 2000. 251 с.
7. *Яворский Б. М., Детлаф А. А.* Справочник по физике. М.: Наука, 1965. 848 с.
8. *Александров И. В.* Теория магнитной релаксации. М.: Наука, 1975. 400 с.
9. *Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф.* Специальные функции, формулы. графики, таблицы. М.: Наука, 1968. 344 с.
10. *Кирчанов В. С.* Диффузия в ЯКР // Известия Вузов. Физика. 1985. № 6. С.14–16.
11. *Кляцкин В. И.* Статистические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах. М.: Наука, 1980. 426 с
12. *Hahn E. L.* Spin Echoes // Phys. Rev. 1950. Vol. 80. P. 580–594.
13. *Голицин Г. С.* Работа А. Н. Колмогорова 1934 г. – основа для объяснений статистики природных явлений макромира // Успехи физических наук. 2024. Т. 194. № 1. С. 86–95.
14. *Монин А. С., Яглом А. М.* Статистическая гидромеханика турбулентности. Ч. 2. М.: Наука, 1967. 720 с.
15. *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1981. 448 с.
16. *Шестак Я.* Теория термического анализа: Физико-химические свойства твердых неорганических веществ. М.: Мир, 1987. 456 с.

References

1. Isihara A. *Statistical Physics*. New York: Academic Press, 1971. 461 p.
2. Stishov S. M. On the thermodynamics of simple systems. *Physics Uspekhi*, 2024, vol. 67, pp. 912–918.
3. Breuer H.-P., Pettrucione F. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press, 2002. 625 p.
4. Kirchanov V. S. Applying the Lindblad equation to quantum dissipative systems. *Theor. Math. Phys.*, 2006, vol. 148, pp. 1117–1122.
5. Kubo R. *Statistical Mechanics*. Amsterdam: Elsevier, 1965. 425 p.
6. Sukhanov A. D. *Kontseptsii sovremennogo estestvoznaniia* [Concepts of modern natural science] Moscow: “Agar” Publ., 2000. 251 p. (In Russian)
7. Yavorskii B., Detlaf A. *Handbook of Physics*. Moscow: Mir Publ., 1972. 970 p.
8. Alexandrov I. V. *Theory of Magnetic Relaxation*. Moscow: Nauka, 1975. 400 p. (In Russian).
9. Yanke E., Emde F., Lesh F. *Special Functions. Formulas, Graphs, Tables*. Moscow: Nauka, 1964. 344 p. (In Russian)
10. Kirchanov V. S. Diffusion in nuclear quadrupole resonance. *Russian Physics Journal*, 1985, vol. 28, no. 6, pp. 449–451.

11. Klyatskin V. I. *Statisticheskie uravneniia i volny v sluchaino-neodnorodnykh sredakh* [Statistical equations and waves in randomly inhomogeneous media]. Moscow: Nauka, 1980. 426 p. (In Russian)
12. *Hahn E. L.* Spin Echoes. *Phys. Rev.*, 1950, vol. 80, pp. 580–594.
13. Golitsyn G. S. A N Kolmogorov's 1934 paper is the basis for explaining the statistics of natural phenomena of the macrocosm. *Physics Uspekhi*, 2024, vol. 67, no. 1, pp. 80–90.
14. Monin A. S., Yaglom A. M. *Statisticheskaia gidromekhanika turbulentnosti* [Statistical fluid mechanics of turbulence], vol. 2. Moscow: Nauka, 1967. 720 p. (In Russian).
15. Slichter P. D. *Principles of Magnetic Resonance*. New York: Springer. 1990. 658 p.
16. Shestak Ya. *Theory of Thermal Analysis: Physico-chemical Properties of Solid Inorganic Substances*. Moscow: Mir, 1987. 456 p. (In Russian).

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:
Кирчанов В. С. Квазикинетические квантовые уравнения // Вестник Пермского университета. Физика. 2025. № 1. С. 44–51. doi: 10.17072/1994-3598-2025-1-44-51

Please cite this article in English as:
Kirchanov V. S. Quasi-kinetic quantum equations. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2025, no. 1, pp. 44–51, 10.17072/1994-3598-2025-1-44-51

Сведения об авторах
Вячеслав Сергеевич Кирчанов, канд. физ.-мат. наук, доцент; доцент кафедры общей физики, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Комсомольский проспект, 29, Пермь, 614990

Author information
Vyacheslav S. Kirchanov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of General Physics, Perm National Research Polytechnic University; 29, Komsomolsky prospekt, Perm, 614990, Russia