

откуда (уже в операторной форме, не зависящей от выбора базиса  $\{\psi_n(x)\}$ ) имеем достаточно компактную формулу

$$\rho_0 = \frac{e^{-\hat{H}/\theta}}{\text{Sp} \{e^{-\hat{H}/\theta}\}},$$

представляющую собой операторную запись канонического распределения Гиббса.

## 6) Классическая система $N$ тел

С помощью общих формул можно, конечно, с использованием квазиклассического приближения перейти к классическому варианту теории. Но это, во-первых, довольно сложная процедура, а во-вторых, это долго. Если не интересоваться квазиклассическими поправками, то проще сразу рассмотреть классическую систему (как это, естественно, и делалось в доквантовую эпоху).

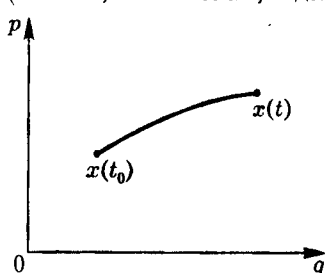


Рис. 189. Фазовое пространство и изображение в нем эволюции классической системы

Чистое механическое состояние системы  $N$  тел ( $N$  материальных точек) для наших целей удобно представить как точку  $x$  в  $6N$ -мерном пространстве координат и импульсов

$$x = (q, p) = (r_1, \dots, r_N; p_1, \dots, p_N) = (x_1, \dots, x_{6N}),$$

которое называют *фазовым пространством*. На рис. 189 оно по «техническим причинам» условно изображено как двумерное. Эволюция системы будет отображаться двигающейся в фазовом пространстве точкой  $x(t)$ . Для определения этой траектории (каждая точка которой, напомним еще раз, фиксирует координаты и импульсы всех  $N$  частиц в момент времени  $t$ ) не-

обходимо решить дифференциальные уравнения ньютоновской механики, которые нам удобнее будет представлять в форме уравнений Гамильтона (W. Hamilton, 1834)

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q},$$

где  $H = H(q, p)$  — классическая функция Гамильтона системы. Это система  $6N$  уравнений (каждая координата и импульс в этой условной записи должна нести индекс частицы  $i = 1, 2, \dots, N$  и индекс компоненты  $\alpha = (x, y, z)$ ), которая решается в редких простейших случаях. Для нас сейчас будет важно то, что решение  $x(t)$  этих уравнений существует и что оно при заданном начальном условии  $x(t_0) = x_0$  единственно. В наглядной интерпретации это означает, что траектории  $x(t; x_0)$  движения точек в фазовом пространстве, соответствующие разным начальным условиям  $x_0$ , не пересекаются ни при каких значениях  $t$ .

Смешанное состояние в классическом случае задается непрерывной функцией распределения  $w(x, t)$  такой, что величина  $w(x, t) dx$  определяет вероятность обнаружить микроскопическое состояние системы  $x = (q, p)$  в  $6N$ -мерном бесконечно малом кубике  $(q, q + dq; p, p + dp)$  (условно обозначаемом как  $dx = dq dp$ ) в момент времени  $t$ .

Прежде чем исследовать вопрос о характере эволюции плотности вероятности  $w(x, t)$ , напомним вспомогательную для нас теорему классической механики — теорему Лиувилля (J. Liouville, 1838), сформулировав ее в наиболее рациональной для наших целей форме: если  $V_0$  — объем некоторой фиксированной в момент  $t_0 = 0$  области  $\mathfrak{V}_0$  фазового пространства  $(q, p)$ , то с течением времени фазовые точки,

образующие ее поверхность (рис. 190), двигаются в соответствии с эволюцией данной системы так, что объем, ограниченный этой поверхностью, все время сохраняет свою величину, т. е.

$$V \equiv \int_{\mathfrak{W}} dx = V_0 \equiv \int_{\mathfrak{W}_0} dx_0.$$

Эту известную теорему проще доказать, чем разыскивать в учебниках по механике. Отметим сначала, что каждая точка  $x_0 = (q_0, p_0)$  из области  $\mathfrak{W}_0$  к моменту времени  $t$  переходит в  $\mathfrak{W}$ ,  $x_0 \rightarrow x(t, x_0)$ , причем это соответствие однозначное. Это позволяет произвести замену переменной интегрирования  $x \rightarrow x_0$ . Определив якобиан этого преобразования как

$$J(t) = \frac{\partial(q, p)}{\partial(q_0, p_0)} = \det \left\| \frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right\|, \quad J(0) = \frac{\partial(q_0, p_0)}{\partial(q_0, p_0)} = 1$$

( $x_j^{(0)}$ , где  $j = 1, \dots, 6N$ , — одна из компонент  $x_0 = (q_0, p_0)$ ), мы можем записать объем  $V$  в виде интеграла по исходным переменным  $x_0$ :

$$V = \int_{\mathfrak{W}_0} J(t) dx_0.$$

Для доказательства теоремы достаточно показать, что  $J(t) = \text{const}$  (тогда  $J(t) = J(0) = 1$  и автоматически  $V = V_0$ ), или что тоже самое, показать, что полная его производная по времени  $\dot{J}(t) = 0$ .

Для этого, во-первых, заметим, что якобиан  $J$  обладает свойством

$$\sum_j \frac{\partial J}{\partial \left( \frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial x_j^{(0)}} = \delta_{ik} \cdot J.$$

Действительно, так как детерминант является линейной функцией элементов какой-либо из своих строк, то в случае  $i = k$ , дифференцируя его по элементам строки, умножая на них же и суммируя по всей строке, мы полностью восстановим структуру якобиана, а в случае  $i \neq k$  «восстановленным» окажется детерминант с двумя одинаковыми строчками (а он всегда равен нулю).

Во-вторых, в силу уравнений движения в форме уравнений Гамильтона  $6N$ -мерная дивергенция «скорости»  $\dot{x}$  равна нулю.

$$\sum_{i=1}^{6N} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \dot{\mathbf{p}}_i \right) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = 0.$$

Наконец, выпишем  $\dot{J}$ , взяв производную от сложной функции и учитывая, что зависимость от  $x_0$  входит через зависимость  $x = x(t, x_0)$ :

$$\dot{J} = \sum_{ij} \frac{\partial J}{\partial \left( \frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \cdot \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j^{(0)}} = \sum_{ijk} \frac{\partial J}{\partial \left( \frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \cdot \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial x_j^{(0)}}.$$

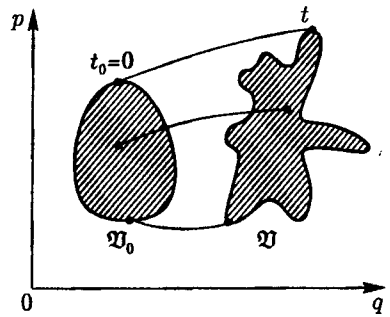


Рис. 190. Движение области  $\mathfrak{W}$  в фазовом пространстве, происходящее в соответствии с эволюцией рассматриваемой механической системы

Замечая, что сумма по  $j$  в тройной сумме дает  $\delta_{ik} \cdot J$ , получаем

$$\dot{J} = \sum_{ik} J \cdot \delta_{ik} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_k} = J \sum_i \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = 0,$$

что и требовалось доказать.

Непосредственным следствием теоремы о сохранении фазового объема является уравнение движения для плотности вероятности  $w(q, p, t)$ . Чтобы нагляднее сформулировать его, договоримся сначала о способе изображения функции  $w(q, p, t)$  в фазовом пространстве. Обычно мы привыкли рисовать графики, вводя кроме осей, по которым откладывается аргумент функции (в нашем случае  $x = (q, p)$ ), еще и ось изображаемой величины  $w$ . Но мы уже использовали плоскость чертежа для изображения  $6N$ -мерного пространства  $(q, p)$  как двумерного. Этот хотя и двумерный «простор» в фазовом пространстве нам хотелось бы сохранить, чтобы рисовать траектории движения точек, изображающих состояния системы, и т. д. Так что для «изображения» функции  $w(q, p, t)$  придется использовать другой (но ничуть не худший) способ: плотность вероятности  $w(q, p, t)$  для данного момента будет фиксироваться в пространстве  $(q, p)$  плотностью фиктивных точек в этом пространстве. Тогда «газ» этих точек (или « $w$ -жидкость») вследствие теоремы Лиувилля ведет себя в  $6N$ -мерном фазовом пространстве как несжимаемая жидкость.

Действительно, с течением времени  $V = V_0$ , траектории точек  $x = x(t, x_0)$  не пересекаются, граничные точки первоначальной области переходят в граничные, внутренние — во внутренние, поэтому число «точек» (или «количество  $w$ -жидкости») в области  $\mathfrak{V}$  все время остается постоянным. Таким образом, имеем, переходя во втором интеграле к интегрированию по  $x_0$ ,

$$\int_{x_0} w(x_0, t_0) dx_0 = \int_{\mathfrak{V}} w(x, t) dx = \int_{x_0} w(x(t, x_0), t) \cdot J dx_0.$$

Учитывая, что  $J = 1$ , имеем для любого  $t$  (включая случай  $t = t_0 + dt$ ) и любой области  $\mathfrak{V}_0$  (включая бесконечно малую)

$$\int_{\mathfrak{V}_0} [w(x(t, x_0), t) - w(x_0, t_0)] dx_0 = 0,$$

откуда следует, что полная производная по времени от плотности вероятности  $w(x, t)$  равна нулю:

$$\frac{dw}{dt} = \frac{\partial w}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial w}{\partial r_i} \dot{r}_i + \frac{\partial w}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0.$$

Выражая производные  $\dot{r}_i$  и  $\dot{p}_i$  с помощью уравнений Гамильтона, получим замкнутое относительно функций  $w$  линейное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial H}{\partial r_i} \cdot \frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial w}{\partial r_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) = \{H, w\}_{\text{кл}},$$

которое и есть собственно уравнение Лиувилля (т. е. настоящее, а уравнение движения для статистического оператора  $\rho$  называют уравнением Лиувилля уже в силу аналогии — в его правой части вместо классических скобок Пуассона стоят квантовые скобки  $\{H, \rho\}_{\text{кв}}$ ).

Сделаем по поводу полученных выше результатов несколько общих замечаний.

а) Полученное уравнение является следствием уравнений движения классической механики, и эволюция системы  $N$  тел оно описывает хотя и с помощью функции распределения  $w(q, p, t)$ , но тоже в понимании механического движения. Если бы мы захотели решать его стандартным методом, то сначала необходимо было бы решить  $6N$  уравнений для характеристик: коэффициент при  $\partial w / \partial p_i$  приравнять  $-\dot{p}_i$ , при  $\partial w / \partial q_i$  соответственно  $-\dot{q}_i$  (при этом, как нетрудно заметить, мы вновь вернулись бы к системе уравнений Гамильтона), затем выразить все  $6N$  констант, возникающих при интегрировании этих уравнений, через  $q, p$  и  $t$ ,  $c_i = c_i(q, p, t)$  и составить произвольную функцию этих комбинаций. Это и будет решением уравнения Лиувилля:

$$w(q, p, t) = w(c_1(q, p, t), \dots, c_{6N}(q, p, t)).$$

Для полного определения функции  $w$  необходимо располагать еще дополнительными сведениями о ней (например, в задаче с начальными условиями эту функцию  $6N$  аргументов можно задать в некоторый момент времени  $t_0$ , см. задачу 1). Конечно, для физически интересных случаев это фантастически сложная задача (в разделе задачи мы рассмотрим всю эту процедуру на примере одномерной системы из невзаимодействующих друг с другом частиц). Но нам такое общее решение, включающее сведения о траекториях (в обычном пространстве) каждой из  $N$  частиц системы (напомним, что  $N \sim 10^{23}$ ), и не требуется — это слишком большая информация о системе, которую необходимо еще как-то доработать (усреднить, «сгладить» и т. п.), чтобы довести до уровня, позволяющего сопоставлять теоретические выводы с экспериментом.

б) Помимо технических трудностей выявляется еще и общая проблема, касающаяся описания системы с помощью функции  $w(q, p, t)$ . Мы показали, что вдоль траектории движения точки в фазовом пространстве  $\dot{w}(q, p, t) = 0$ , и плотность функции распределения является константой,

$$w(x(t, x_0), t) = w(x_0, 0) = \text{const},$$

и наша «программа» описывать эволюцию статистической системы со всеми характерными для нее релаксационными процессами с помощью функции  $w(q, p, t)$  как бы повисает в воздухе. И здесь, как и в главах 2 и 3, существенным моментом вновь оказывается огрубление чисто механического рассмотрения системы. Эту процедуру можно представить в разных вариантах. Мы остановимся здесь только на одном примере, в котором это огрубление предстает наиболее наглядно.

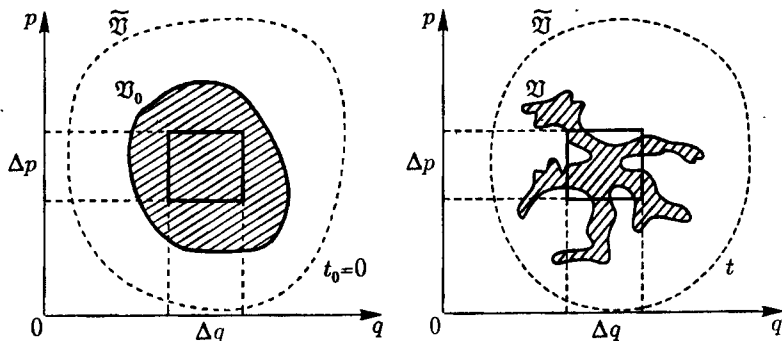


Рис. 191. Схема размешивания в фазовом пространстве области  $\mathcal{Q}_0$  с течением времени

Пусть в момент времени  $t_0 = 0$  функция  $w(q, p, 0)$  всюду была равна нулю, кроме области  $\mathfrak{V}_0$ , в которой она имела постоянное значение  $w_0 = 1/V$  (на рис. 191 эта плотность обозначена равномерной штриховкой). Выберем некоторый элемент фазового пространства  $\Delta x = \Delta p \Delta q$ , для определенности находящийся внутри  $\mathfrak{V}_0$  (можно и вне), и будем интересоваться, как меняется вероятность  $\Delta W(t)$  обнаружить систему в данном  $\Delta x$  с течением времени,

$$\Delta W(0 | \Delta x) = w_0 \Delta p \Delta q, \quad \Delta W(t | \Delta x) = \int_{(\Delta x)} dq dp w(q, p, t).$$

С течением времени область  $\mathfrak{V}_0$  деформируется, происходит своеобразное *размешивание* области в фазовом пространстве и, несмотря на то, что плотность  $w$ -жидкости в ней все время остается постоянной и равной  $w_0$ , количество этой «жидкости» в  $\Delta p \Delta q$  меняется (на рис. 191 уменьшается). Этот процесс можно описать с помощью огрубленной функции распределения  $\tilde{w}$  (часто не вполне удачно называемой «крупнозернистой»):

$$\Delta W(t | \Delta x) = \tilde{w}(q, p, t | \Delta x) \cdot \Delta p \Delta q.$$

Эта функция будет описывать эволюцию смешанного состояния уже не по механическим законам (не в «механической шкале»), производная по времени от нее, указывающая скорость изменения количества  $w$ -жидкости в данном фиксированном  $\Delta p \Delta q$ , в общем случае уже не равна нулю:

$$\dot{\tilde{w}} = \frac{1}{\Delta p \Delta q} \int_{(\Delta p \Delta q)} dp dq \frac{\partial w(q, p, t)}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x} \int_{(\Delta x)} dx \{H, w\}_{\text{кл}},$$

информация о деталях движения внутри  $\Delta x$  вообще теряется и т. д., но в этом огрубленном описании появляется возможность рассматривать релаксационные процессы. Например, если движение системы в фазовом пространстве финитно, скажем, ограничено некоторой областью  $\tilde{\mathfrak{V}}$  с объемом  $\tilde{V}$ , изображенной на рис. 191 пунктиром (это вполне реалистическое предположение, так как изменение всех  $q_i$  ограничено 3-мерным сосудом, в который помещена система, а область  $p_i$  ограничена заданием общей ее энергии  $\mathcal{E}$ ), и процесс размешивания будет все время продолжаться, то будет существовать и предельное значение огрубленной плотности вероятности

$$\tilde{w}(q, p, t | \Delta x) \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{w_0 V}{\tilde{V}}$$

(несмотря на то, что плотность первоначальной  $w$ -жидкости все время остается постоянной и равной  $w_0$ ).

Естественно, что от высказанной выше «идеи» до конструктивного подхода еще очень далеко. Возникает ряд вопросов: всегда ли происходит размешивание  $w$ -жидкости и распространяется ли оно на всю область  $\tilde{\mathfrak{V}}$  или только на ее часть; как выбрать масштаб огрубления  $\Delta x$ , имеются ли какие-либо динамические причины для этого, заложенные в самой системе, или огрубление навязывается извне с помощью «наблюдателя» с его макроскопическими приборами; как связано это огрубление с переходом к описанию по более грубой шкале времени, с динамическим принципом ослабления корреляции и т. д. Эти вопросы в какой-то мере остаются дискуссионными, они далеко выходят за рамки нашего курса, и мы ограничимся только сделанными выше замечаниями. Небольшая модельная задача (достаточно примитивная с физической точки зрения), посвященная проблеме размешивания, приведена с иллюстративной целью в разделе задач (задача 4).

# Задачи и дополнительные вопросы

## § 1. Общие вопросы описания движения системы в фазовом пространстве

**Задача 1.** Пусть уравнения механики для системы  $N$  частиц решены и известны все траектории  $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(t, \mathbf{x}_0)$ ,  $\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_i(t, \mathbf{x}_0)$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Определить плотность вероятности  $w(q, p, t)$ , удовлетворяющую уравнению Лиувилля с начальным условием, фиксирующим в момент  $t = 0$  расположение и импульсы всех частиц  $\mathbf{x}_0 = (\mathbf{r}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(0)}, \mathbf{p}_1^{(0)}, \dots, \mathbf{p}_N^{(0)})$ .

**Решение.** Так как траектория  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t, \mathbf{x}_0)$  движения точки, изображающей микроскопическое состояние системы в фазовом пространстве, с начальным условием  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$  при  $t = 0$  (см. с. 288, рис. 189) задана, то соответствующая этому движению функция распределения с учетом условия нормировки выражается как

$$w(\mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}(t, \mathbf{x}_0))$$

или в более подробной записи

$$w(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) = \prod_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i(t, \mathbf{x}_0)) \cdot \delta(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_i(t, \mathbf{x}_0)).$$

В обычном 3-мерном пространстве и пространстве импульсов эта функция прочерчивает траектории всех  $N$  частиц системы и соответствует механическому описанию ее эволюции. >

**Задача 2.** Получить общее решение уравнения Лиувилля для одномерного движения частицы в случаях: а) свободного ее движения; б) движения в поле упругой силы  $F = -kx$ . Нарисовать траектории фазовых точек, изображающих состояния этих систем.

**Решение.** В первом случае  $H = p^2/(2m)$  и уравнение Лиувилля имеет вид

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{p}{m} \cdot \frac{\partial w}{\partial x} = 0.$$

Соответствующие ему уравнения для характеристик

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = 0, \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

решаются сразу

$$p = C_1, \quad x = \frac{p}{m} t + C_2 = \frac{C_1}{m} t + C_2,$$

откуда

$$C_1 = p, \quad C_2 = x - \frac{pt}{m},$$

и общее решение имеет вид произвольной функции от величин  $C_1$  и  $C_2$ :

$$w(\mathbf{x}, p, t) = w\left(p, x - \frac{pt}{m}\right).$$

Во втором случае (гармонический осциллятор)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

и уравнение Лиувилля несколько усложнится:

$$\frac{\partial w}{\partial t} - kx \frac{\partial w}{\partial p} + \frac{p}{m} \cdot \frac{\partial w}{\partial x} = 0.$$

Решить характеристические уравнения

$$\dot{p} = -kx, \quad \dot{x} = \frac{p}{m}$$

особого труда не составляет:

$$p = C_1 \sin(\omega t) + C_2 \cos(\omega t), \quad \frac{kx}{\omega} = -C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t),$$

где  $\omega = \sqrt{k/m}$ , откуда

$$C_1 = p \sin(\omega t) - \frac{kx}{\omega} \cos(\omega t), \quad C_2 = \frac{kx}{\omega} \sin(\omega t) + p \cos(\omega t),$$

и решение уравнения Лиувилля будет иметь вид

$$w(x, p, t) = w \left( p \sin(\omega t) - \frac{kx}{\omega} \cos(\omega t), \frac{kx}{\omega} \sin(\omega t) + p \cos(\omega t) \right).$$

Траектория точки, изображающей в фазовом пространстве свободное движение, представляет собой прямую, параллельную оси  $x$  (рис. 213) и приподнятую над ней на величину  $C_1 = \sqrt{2mE}$ , где  $E = p^2/(2m)$  — энергия частицы.

Во втором случае, исключая  $\cos(\omega t)$  и  $\sin(\omega t)$  из выражений для  $p$  и  $x$ , получаем

$$1 = \frac{1}{C_1^2 + C_2^2} \left[ p^2 + \left( \frac{kx}{\omega} \right)^2 \right].$$

Это уравнение эллипса (рис. 214), полуось которого в направлении  $p$  имеет величину  $\sqrt{2mE}$ , где  $E = p^2/(2m) + kx^2/2$  — энергия осциллятора, сохраняющаяся вдоль всей траектории.  $\triangleright$

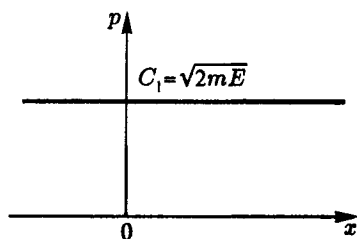


Рис. 213. Траектория фазовой точки для свободного движения частицы

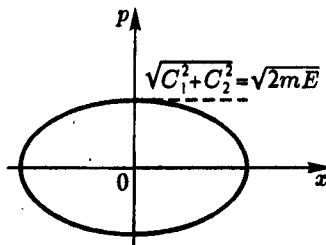


Рис. 214. Траектория фазовой точки для гармонического осциллятора

**Задача 3.** Доказать теорему Пуанкаре о возврате (H. Poincaré, 1890): если движение точки  $x$ , изображающей состояние консервативной (гамильтониан  $H$  не зависит от времени) системы в фазовом пространстве, финитно (т. е. ограничено некоторой областью  $\tilde{W}$ , имеющей конечный объем  $\tilde{V}$ ), то для любой конечной (не нулевой меры) области  $\mathcal{W}$ , включающей начальную точку  $x_0$  этой траектории, существует такое время  $T$ , за которое фазовая точка  $x$  возвращается в эту область.

Если перевести эту задачу на физический язык, то ей соответствует электромагнитное излучение, заключенное между зеркальными стенками, с полосой частот  $\Delta\omega = c\Delta p/\hbar$  около частоты  $\omega_0 = cp_0/\hbar$ . Если же стенки «оттают» и начнут выполнять роль планковской пылинки, то частоты отраженных фотонов начнут меняться, и вся четкая прямоугольная картинка для  $\tilde{w}(\omega)$  расплывется в соответствующее распределение Планка.  $\triangleright$

**Задача 5.** Показать, что если функция  $w(x, t)$  удовлетворяет уравнению Лиувилля, то величина

$$\mathcal{F} = \int_{\mathfrak{W}} f(w(x, t)) dx,$$

где  $f$  — такая функция  $w$ , что интеграл  $\mathcal{F}(t)$  всегда сходится, не зависит от времени (т. е. является интегралом движения).

**Решение.** В § 1 мы установили, что вдоль фазовой траектории функция  $w(x, t)$  не меняется, т. е.

$$w(x(t, x_0), t) = w(x_0, 0).$$

Переходя в выражении для  $\mathcal{F}(t)$  к интегрированию по  $x_0$  и учитывая, что якобиан перехода от переменных  $x$  к  $x_0$  равен единице, получаем требуемое:

$$\mathcal{F}(t) = \int_{\mathfrak{W}_0} f(w(x(t, x_0), t)) dx_0 = \int_{\mathfrak{W}_0} f(w(x_0, 0)) dx_0 = \mathcal{F}(0).$$

В квантовом случае (§ 1-а) теорема тоже является следствием уравнения Лиувилля—Неймана. Вспомним, что в квантовой механике функция от оператора определяется как бесконечный ряд по степеням этого оператора:

$$f(\rho(t)) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(\rho(t))^k.$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned} (\rho(t))^k &= \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} \rho(0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} \rho(0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\} \times \dots \\ &\dots \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} \rho(0) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\} = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} (\rho(0))^k \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\}, \end{aligned}$$

получаем

$$f(\rho(t)) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} f(\rho(0)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\},$$

откуда, учитывая очевидное свойство  $\text{Sp}\{AB\} = \text{Sp}\{BA\}$ , имеем

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(t) &\equiv \text{Sp}\{f(\rho(t))\} = \text{Sp} \left\{ \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} f(\rho(0)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\} \right\} = \\ &= \text{Sp} \left\{ f(\rho(0)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} Ht \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} Ht \right\} \right\} = \text{Sp}\{f(\rho(0))\} = \mathcal{F}(0). \end{aligned}$$

Теорема интересна в связи с достаточно традиционным «микроскопическим» определением понятия энтропии как средней величины от минус логарифма функции распределения. Полагая

$$f(w) = -w \ln w \quad \text{или} \quad f(\rho) = -\rho \ln \rho,$$

получаем, что так определяемая энтропия вообще от времени не зависит,

$$S(t) = - \int w \ln w dx = S(0) \quad \text{или} \quad S(t) = -\text{Sp}\{\rho \ln \rho\} = S(0).$$