УДК 538
© 1993

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ РЕАЛИЗАЦИИ ПРИНЦИПА УСРЕДНЕНИЯ ПРИ ОПИСАНИИ НЕОБРАТИМЫХ ПРОЦЕССОВ В СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ

А. П. Сайко

Предложен метод получения основного кинетического уравнения для описания необратимых процессов в спиновых системах твердых тел, основанный на последовательном применении операторов временнóго усреднения, проецирующих быстрые движения переменных на их средние медленно меняющиеся (макроскопические) значения.

Все методы описания необратимых процессов в системах взаимодействующих спиновых частиц в конечном счете основаны на идее Боголюбова [1] об иерархии времен релаксации, согласно которой можно считать, что на первой стадии релаксационного процесса в течение короткого промежутка времени система приходит в квазиравновесное состояние, характеризующееся некоторыми температурами, соответствующими слабо взаимодействующим подсистемам, а на второй стадии медленно устанавливается стационарное состояние. Для получения уравнений, описывающих медленное изменение температур, Провоторов [2] использовал метод проекционных операторов Цванцига, с помощью которых в матрице плотности системы выделялись «диагональная» и «недиагональная» части; Зубарев [3] разработал метод неравновесного статистического оператора, асимптотически удовлетворяющего уравнению Лиувилля; существует еще ряд более или менее различающихся формализмов. Буишвили и Менабде [4] (см. также [5]) предложили способ получения основного кинетического уравнения, основанный на непосредственном применении метода усреднения Крылова—Боголюбова—Митропольского, который широко используется в нелинейной механике [6].

В настоящей работе мы также будем основываться на идее Боголюбова об иерархии времен и для реализации принципа усреднения введем специальный вид проекционных операторов, проецирующих не интересующие нас быстрые движения переменных на их средние медленно меняющиеся (макроскопические) значения.

Исходим из уравнения Лиувилля для матрицы плотности

$$\frac{d\rho}{dt} = -i\,[H_0 + H_1(t),\ \rho] \equiv -i\,(L_0 + L_1(t))\,\rho, \tag{1}$$

где H_0 — невозмущенный гамильтониан, который состоит из нескольких коммутирующих друг с другом частей, описывающих каждую из подсистем: $H_0 = \sum\limits_j H_j$, $[H_j,\ H_k] = 0$; $H_1(t)$ — оператор возмущения, в общем случае явно зависящий от времени; L_0, L_1 — операторы Лиувилля, соответствующие H_0 и H_1.

В H_0 содержатся члены, которые обусловливают быстропротекающие процессы, приводящие по истечении некоторого короткого промежутка времени к установлению в системе квазиравновесного состояния, характеризуемого матрицей плотности вида [4]

$$\rho_0 = Z^{-1} \exp\,(-\sum_j \beta_j H_j), \tag{2}$$

где β_j — обратные температуры подсистем, $Z = \mathrm{Sp}\,[\exp\,(-\beta_j H_j)\,]$.

Возмущение $H_1(t)$ приводит к медленной эволюции β_j к своим стационарным значениям. Основная задача состоит в том, чтобы найти кинетическое уравнение (master equation) для матрицы плотности, на основании которого можно было бы составить уравнения для медленно меняющихся обратных температур β_j.

Для удобства в (1) перейдем к представлению взаимодействия

$$\rho\,(t) = e^{-iL_0 t}\sigma\,(t),$$

$$L_1\,(t) = e^{-iL_0 t}\,\mathscr{L}_1\,(t)\,e^{iL_0 t},$$

тогда (1) перепишется в виде

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\,i\mathscr{L}_1\,(t)\,\sigma. \tag{3}$$

В соответствии с общими положениями статистической физики систему спинов сначала поместим в конечный объем, а после вычисления средних нужно будет перейти к термодинамическому пределу. В ограниченном объеме система спинов обладает дискретным (и ограниченным) спектром, поэтому $\mathscr{L}_1\,(t)$ будет периодической функцией времени, т. е. она разложима в ряд Фурье

$$\mathscr{L}_1\,(t) = \sum_n \mathscr{L}_1^{(n)} e^{i\omega_n t},$$

$$\mathscr{L}_1^{(n)} = \frac{1}{T}\int_0^T dt\mathscr{L}_1\,(t)\,e^{-i\omega_n t}, \tag{4}$$

где $\omega_n = 2\pi n/T$, T — период.

Так как мы интересуемся не быстрым временным «дрожанием» матрицы плотности, а, наоборот, ее медленной эволюцией, т. е. движением, усредненным по нескольким временным периодам T, то естественно определить операцию следующего вида:

$$\sigma\,(t) \to \langle\sigma\,(t)\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T dt\,\sigma\,(t) \equiv P^t\sigma\,(t), \tag{5}$$

где проекционный оператор P^t осуществляет усреднение быстро изменяющихся величин. Пусть далее $Q^t = 1 - P^t$ (нетрудно видеть, что $P^tP^t = P^t$, $Q^tQ^t = Q^t$, $P^tQ^t = Q^tP^t = 0$), тогда можно записать

$$\sigma = P^t\sigma + Q^t\sigma. \tag{6}$$

Физический смысл преобразования (6) заключается в разложении действительного движения, описываемого матрицей плотности σ, на усредненное систематическое $P^t\sigma$ и быстрое «дрожание», описываемое оператором $Q^t\sigma$.

Подставляя (6) в (3) и действуя на это уравнение слева операторами P^t и Q^t поочередно, получим два связанных уравнения

$$\frac{d\,(P^t\sigma)}{dt} = -\,iP^t\mathscr{L}_1(t)\,P^t\sigma - iP^t\mathscr{L}_1(t)\,Q^t\sigma, \tag{7}$$

$$\frac{d\,(Q^t\sigma)}{dt} = -\,iQ^t\mathscr{L}_1(t)\,Q^t\sigma - iQ^t\mathscr{L}_1(t)\,P^t\sigma. \tag{8}$$

При выводе (7), (8) мы воспользовались следующими соотношениями:

$$P^t\,\frac{d\,(Q^t\sigma)}{dt} = (Q^t\sigma|_{t=T} - Q^t\sigma|_{t=0})/T = 0,$$

$$P_t\,\frac{d\,(P^t\sigma)}{dt} = \frac{d\,(P^t\sigma)}{dt},$$

первое из которых следует из очевидного свойства периодичности функции $Q^t\sigma$, а второе выполняется благодаря тому, что $P^t\sigma$ — медленная функция времени.

Решение уравнения (8) можно формально представить в виде

$$Q^t\sigma\,(t) = -\,i\int^t dt'Q^{t'}\mathscr{L}_1(t')\langle\sigma\,(t')\rangle - i\int^t dt'Q^{t'}\mathscr{L}_1(t')\,Q^{t'}\sigma\,(t'). \tag{9}$$

Отметим, что операторная постоянная интегрирования в (9) положена равной нулю: мы попросту реализовали право произвола в выборе этой константы, так как ранее одно дифференциальное уравнение первого порядка (3) было расщеплено на два уравнения того же порядка. Интегрируя (9), получаем разложение по степеням $\mathscr{L}_1$

$$Q^t\sigma\,(t) = -\,i\int^t dt'Q^{t'}\mathscr{L}_1(t')\langle\sigma\,(t')\rangle - \int^t dt'\int^{t'} dt''Q^{t'}\mathscr{L}_1(t')Q^{t''}\mathscr{L}_1(t'')\langle\sigma\,(t'')\rangle + \ldots \approx$$

$$\approx \{-\,i\int^t dt'Q^{t'}\mathscr{L}_1(t') - \int^t dt'\int^{t'} dt''Q^{t'}\mathscr{L}_1(t')\,Q^{t''}\mathscr{L}_1(t'') + \ldots\}\,\langle\sigma\,(t)\rangle, \tag{10}$$

где медленно изменяющаяся функция $\langle\sigma\,(t)\rangle$ вынесена из-под знака интегрирования.

Так как обычно в теории релаксационных процессов ограничиваются борновским приближением по возмущению, то в правой части (10) достаточно оставить лишь первый член. Тогда

$$Q^t\sigma\,(t) \approx -\,i\int^t dt'\,(\mathscr{L}_1(t') - \langle\mathscr{L}_1(t')\rangle)\,\langle\sigma\,(t)\rangle, \tag{11}$$

откуда, подставляя (11) в (7), имеем искомое уравнение для $\langle\sigma\rangle$ в борновском приближении

$$\frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} = -\,i\langle\mathscr{L}_1(t)\rangle\,\langle\sigma\rangle - \langle\int^t dt'\{\mathscr{L}_1(t)(\mathscr{L}_1(t') - \langle\mathscr{L}_1(t')\rangle)\}\rangle\,\langle\sigma\rangle. \tag{12}$$

С учетом определений (4), (5) уравнение (12) переписывается в виде

$$\frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} = -\, i\mathscr{L}_1^{(0)}\langle\sigma\rangle - i\sum_{n\neq 0}\frac{1}{\omega_n}\mathscr{L}_1^{(n)}\mathscr{L}_1^{(-n)}\langle\sigma\rangle. \qquad (13)$$

После вычисления средних с помощью уравнения (13) необходимо перейти к термодинамическому пределу $T\to\infty$, однако в (13) при этом возникнут расходимости, так как $\omega_n\to 0$ при $T\to\infty$; поэтому для устранения расходимости нужно заменить ω_n на $\omega_n + i\varepsilon$ (см. [4]) и после предельного перехода $T\to\infty$ перейти к пределу $\varepsilon\to 0$. Добавка $i\varepsilon$ делает уравнение (13) необратимым по времени. Следовательно, имеем окончательное выражение для медленно меняющейся части матрицы плотности

$$\frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} = -\, i\,[H_1^{(0)}, \langle\sigma\rangle] - i\sum_{n}\frac{1}{\omega_n + i\varepsilon}\,[H_1^{(n)},\ [H_1^{(-n)},\ \langle\sigma\rangle]], \qquad (14)$$

которое в точности совпадает с уравнением Буишвили и Менабде [4], полученным на основе метода усреднения Крылова—Боголюбова—Митропольского [6].

Уравнения для обратных температур $\beta_j(t)$ (например, уравнения Провоторова [2] для магнитного резонансного насыщения, уравнения для случая спин-решеточной релаксации и т. д.) получаются из (14), если $\langle\sigma\rangle$ взять в виде квазиравновесной матрицы плотности (2) [4].

Таким образом, предложенный здесь способ реализации принципа усреднения позволяет предельно просто строить master equation для широкого круга задач по необратимым процессам в физике твердого тела, причем автоматизм операций (в том числе и построение высших приближений по возмущению) обеспечивается последовательным использованием оператора временнóго усреднения — «временнóго проецирования».

Список литературы

[1] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. Гостехиздат, 1946.
[2] Провоторов Б. Н. // ЖЭТФ. 1961. Т. 41. № 5. С. 1582—1591.
[3] Зубарев Д. Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
[4] Буишвили Л. Л., Менабде М. Г. // ТМФ. 1980. Т. 44. № 3. С. 414—420.
[5] Буишвили Л. Л., Менабде М. Г. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. № 6(12). С. 2435—2442.
[6] Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974.

Институт физики твердого тела
и полупроводников
АН Белоруси
Минск

Поступило в Редакцию
18 июня 1992 г.