Доклады Академии наук СССР
1970. Том 191, № 1

УДК 530.145:536.75 *ФИЗИКА*

Л. Л. БУИШВИЛИ, М. Д. ЗВИАДАДЗЕ

ОБ УЧЕТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ ПОСТРОЕНИИ НЕРАВНОВЕСНОЙ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

(Представлено академиком Н. Н. Боголюбовым 18 VII 1969)

При построении стационарной неравновесной матрицы плотности [1] для макросистемы, состоящей из нескольких слабо связанных подсистем, может возникнуть неясность с вопросом о правильном учете взаимодействия $\mathcal{H}'$ между подсистемами. Обычно этому взаимодействию или приписывается температура одной из подсистем [2], или же отмечается, что конечные результаты не зависят от приписываемой температуры β' до тех пор, пока $\mathcal{H}'$ может быть рассмотрено как малое возмущение [3].

В стационарном случае имеет место закон сохранения энергии

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{d\mathcal{H}_k}{dt} + \frac{d\mathcal{H}'}{dt} = 0, \tag{1}$$

где $\mathcal{H}_k$ — гамильтониан k-й подсистемы; $\dfrac{d\mathcal{H}_k}{dt} = \dfrac{1}{i}[\mathcal{H}_k, \mathcal{H}]$, $\mathcal{H} = \sum\limits_k \mathcal{H}_k + \mathcal{H}'$ — гамильтониан системы, n — число подсистем.

Из (1) следует, что при разбиении системы на n подсистем лишь $n-1$ независимы. При рассмотрении конкретных процессов энергию взаимодействия часто не учитывают в балансе энергии и используют [3, 4] вместо (1) приближенный закон сохранения

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{d\mathcal{H}_k}{dt} \simeq 0. \tag{2}$$

Тем самым отбрасывается член $d\mathcal{H}' / dt$, который, вообще говоря, того же порядка, что и член $\sum\limits_{k=1}^{n} \dfrac{dH_k}{dt}$. Нетрудно убедиться, что по крайней мере в приближении высоких температур ни β', ни $d\mathcal{H}' / dt$ в (1) не дают вклада в средние значения

$$\overline{\mathcal{H}}_k = \mathrm{Sp}\, \rho \mathcal{H}_k, \quad d\overline{\mathcal{H}}_k / dt = \mathrm{Sp}\, \rho \, d\mathcal{H}_k / dt,$$

которые используются при выводе уравнений для обратных температур подсистем. Но иногда приходится вычислять средние значения $\bar{A}_j = \mathrm{Sp}\, \rho A_j$ таких величин A_j, которые пропорциональны $\mathcal{H}'$. При этом заранее не очевидно, что и в этом случае конечный результат не будет зависеть от β', и законно использование (2).

В данной заметке обсуждается этот вопрос на примере вычисления действительной части комплексной восприимчивости χ для спин-системы во внешних постоянном и переменном магнитных полях. Гамильтониан системы во вращающейся системе координат имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_x, \quad \mathcal{H}_z = (\omega_0 - \omega) S_z, \quad \mathcal{H}_x = \omega_1 S_x, \tag{3}$$

$\mathcal{H}_d$ — секулярная часть диполь-дипольного взаимодействия спинов; $\omega_0 = \gamma H_0$; $\omega_1 = \gamma H_1$; H_0 — постоянное магнитное поле; ω, H_1 — частота и полуамплитуда переменного поля; $S_\alpha = \sum\limits_i S_{i\alpha}$, $\alpha = x, y, z$ — спиновые операторы.

Согласно ([1]) составляем обобщенные интегралы движения

$$\tilde{\mathcal{H}}_z = \mathcal{H}_z - \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t} \dot{\mathcal{H}}_z(t)\, dt, \quad \tilde{\mathcal{H}}_d = \mathcal{H}_d - \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t} \dot{\mathcal{H}}_d(t)\, dt,$$
$$\tilde{\mathcal{H}}_x = \mathcal{H}_x - \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t} \dot{\mathcal{H}}_x(t)\, dt = \mathcal{H}_x + \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t} \{\dot{\mathcal{H}}_x(t) + \dot{\mathcal{H}}_d(t)\}\, dt. \tag{4}$$

Заметим, что, в отличие от работ ([2–4]), здесь вводится рассмотрение также и $\tilde{\mathcal{H}}_x$. В последнем выражении (4) использован точный закон сохранения

$$\dot{\mathcal{H}}_x = -\dot{\mathcal{H}}_z - \dot{\mathcal{H}}_d. \tag{5}$$

Квазиравновесная матрица плотности в приближении высоких температур имеет вид

$$\rho = \frac{1}{\mathrm{Sp}\, 1} \Big\{1 - \beta_z \mathcal{H}_z - \beta_d \mathcal{H}_d - \beta_x \mathcal{H}_x + (\beta_z - \beta_x) \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t}\, \dot{\mathcal{H}}_z(t)\, dt +$$
$$+ (\beta_d - \beta_x) \int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t} \dot{\mathcal{H}}_d(t)\, dt \Big\}, \tag{6}$$

где β_z и β_d — обратные температуры зеемановской подсистемы и диполь-дипольного резервуара, а β_x — обратная температура, приписываемая инвариантной части взаимодействия $\tilde{\mathcal{H}}_x$. Временная зависимость у операторов означает гайзенберговское представление.

С помощью матрицы плотности (6) и феноменологического учета спин-решеточной релаксации аналогично ([4], [5]) легко получить уравнения

$$\frac{d\beta_z}{dt} = -2W(\omega - \omega_0)(\beta_z - \beta_d) - \left(\beta_z - \frac{\omega_0}{\omega_0 - \omega} \beta_L\right) \Big/ T_z,$$
$$\frac{d\beta_d}{dt} = -2W(\omega - \omega_0) \frac{(\omega_0 - \omega)^2}{\omega_d^2} (\beta_d - \beta_z) - \frac{\beta_a - \beta_L}{T_d}, \tag{7}$$
$$\frac{d\beta_x}{dt} = -\frac{\beta_x - \beta_L}{T_x'} - \frac{\beta_x}{T_x''},$$

где $W(\omega - \omega_0) = \frac{\pi \omega_1^2}{2} \varphi(\omega - \omega_0)$ — обычная вероятность переходов, индуцированных переменным полем; $\varphi(\omega - \omega_0)$ — форма линии поглощения; $\omega_d^2 = \mathrm{Sp}\, \mathcal{H}_d^2 / \mathrm{Sp}\, S_z^2$; T_z и T_d — времена спин-решеточной релаксации зеемановской подсистемы и ДДР; T_x' и T_x'' — времена релаксации, обусловленные соответственно секулярной и несекулярной частями спин-решеточного взаимодействия ([6]); β_L — обратная температура решетки. Следует отметить, что те же уравнения для β_z и β_d получаются и в том случае, если не учитывать $\tilde{\mathcal{H}}_x$ и использовать вместо (5) приближенный закон сохранения

$$\dot{\mathcal{H}}_d + \dot{\mathcal{H}}_z = 0. \tag{8}$$

Отсюда следует, что учет $\tilde{\mathcal{H}}_x$ не меняет также и мнимой части комплексной восприимчивости χ''. Вычислим теперь χ'. Имеем ([5])

$$\chi' = M_x / 2H_1, \tag{9}$$

где M_x — среднее значение x-й компоненты намагниченности во вращающейся системе координат, которое в нашем случае равно

$$M_x = \gamma \overline{S}_x = \gamma \operatorname{Sp} \rho S_x. \tag{10}$$

С помощью (6) и (10) получаем $(\langle\cdots\rangle \equiv \operatorname{Sp}(\cdots)/\operatorname{Sp}1)$

$$\overline{S}_x = -\beta_x\omega_1\langle S_x^2\rangle + (\beta_z - \beta_x)\int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t}\langle S_x\dot{\mathscr{H}}_z(t)\rangle\,dt + (\beta_d - \beta_x)\int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t}\langle S_x\dot{\mathscr{H}}_d(t)\rangle\,dt. \tag{11}$$

Вычисление входящих в (12) интегралов с точностью до первого порядка $\mathscr{H}_x$ дает

$$\int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t}\langle S_x\dot{\mathscr{H}}_z(t)\rangle\,dt = \langle S_x^2\rangle\,\omega_1(\omega-\omega_0)\,J_1(\omega-\omega_0),$$

$$\int\limits_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t}\langle S_x\dot{\mathscr{H}}_d(t)\rangle\,dt = -\langle S_x^2\rangle\,\omega_1[1+(\omega-\omega_0)\,J_1(\omega-\omega_0)], \tag{12}$$

$$J_1(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\varphi(y)\,dy}{y-x} = -J_1(-x)$$

(последний интеграл $\int\limits_{-\infty}^{\infty}$ берется в смысле главного значения).

Для χ' получаем окончательно

$$\chi' = {}^1/{}_2\chi_0\left\{(\omega-\omega_0)\,J_1(\omega-\omega_0)\,\frac{\beta_z-\beta_d}{\beta_L} - \frac{\beta_d}{\beta_L}\right\}, \tag{13}$$

где $\chi_0 = N\gamma^2\langle S_z{}^2\rangle\beta_L$ — статическая восприимчивость. Таким образом, члены с β_x не входят и в χ', так что приписывание отдельной температуры взаимодействию $\widetilde{\mathscr{H}}_x$ или же произвольное его включение в какую-либо из подсистем не влияет на окончательный результат. Однако использование приближенного выражения (8) вместо точного (5) оказывается некорректным при нахождении χ', так как при этом теряется последний член в (13).

Разобранный пример показывает, что по крайней мере в низшем порядке теории возмущений учет инвариантной части взаимодействия $\widetilde{\mathscr{H}}'$ при построении неравновесной матрицы плотности не влияет на выражения χ' и χ''. Вместе с тем использование приближенного закона сохранения (2) может оказаться некорректным при вычислении величин, пропорциональных возмущению $\mathscr{H}'$, как это имеет место для χ'. Последнее обстоятельство необходимо учитывать при рассмотрении конкретных задач.

Поступило
11 VII 1969

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Д. Н. Зубарев, ДАН, 140, 92 (1961); 164, 537 (1965). [2] Д. Н. Зубарев, Препринт ИТФ, 69-6, Киев, 1969. [3] Р. Кубо, Сборн. Термодинамика необратимых процессов, ИЛ, 1962. [4] Л. Л. Буишвили, Д. Н. Зубарев, ФТТ, 7, 723 (1965); Л. Л. Буишвили, ЖЭТФ, 49, 1868 (1965). [5] Б. Н. Провоторов, ЖЭТФ, 41, 1582 (1961). [6] I. Solomon, J. Ezratty, Phys. Rev., 127, 78 (1962); Н. С. Бендиашвили, Л. Л. Буишвили, М. Д. Звиададзе, Препринт ИТФ, 68-70, Киев, 1968.