ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

4 - 5455

А.Л. Куземский

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА К ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ОРТОВОДОРОДА

Специальность 041 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1970

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель
доктор физико-математических наук Д.Н. Зубарев

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук Л.Л. Буишвили,
кандидат физико-математических наук В.П. Калашников.

Ведущее научно-исследовательское учреждение: Институт химической физики АН СССР.

Автореферат разослан " " 1970 года.

Защита диссертации состоится " " 1970 года.
на заседании Ученого совета Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Адрес: г. Дубна, Московской области,
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория теоретической физики.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Р.А. Асанов

А.Л. Куземский

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА К ТЕОРИИ ТВЕРДОГО ОРТОВОДОРОДА

Специальность 041 - теоретическая и математическая физика

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Диссертация посвящена дальнейшей разработке некоторых вопросов метода неравновесного статистического оператора и его применению к теории релаксационных процессов и процессов уширения зеемановских уровней ядерных спинов в твердом ортоводороде.

За последнее время метод неравновесного статистического оператора, предложенный в работах /1-5/, стал находить довольно широкое применение в ряде задач статистической физики. Неравновесное состояние в большинстве случаев является следствием наложения возмущений на систему, которая первоначально находилась в тепловом равновесии. Для разработки неравновесной статистической механики, которая включала бы и термические возмущения, строго говоря, необходимо построение статистических ансамблей, представляющих макроскопические условия, в которых находятся неравновесные системы. На этом пути, при определенных условиях, удается построить неравновесный статистический оператор как функционал локальных квазиинтегралов движения механических величин /1-3/.

Основная идея метода неравновесного статистического оператора состоит в следующем. Если для описания неравновесного состояния системы достаточно набора средних значений некоторых операторов P_m или термодинамически сопряженных им параметров $F_m(t)$, то можно найти такое частное решение квантового уравнения Лиувилля, которое будет зависеть от времени лишь через $F_m(t)$. Обобщенные кинетические уравнения переноса, описывающие эволюцию переменных $\langle P_m \rangle$ и $F_m(t)$ во времени, получаются путем усреднения уравнений движения для P_m с найденным неравновесным статистическим оператором.

При практическом решении задач по этой схеме необходимо прибегать к разложению средних величин по тому или иному малому параметру, например, по параметру близости к статистическому равновесию [3] или по параметру малости взаимодействия в системе [6]. В настоящей работе выводятся обобщенные кинетические уравнения для системы в термостате, причём малым параметром этой задачи является малость взаимодействия между рассматриваемой системой и термостатом. Эти уравнения применяются для построения микроскопической теории релаксации ядерных спинов на либронах [7,8] и теории ширины зеемановских ядерных уровней в твердом ортоводороде. Твердый водород представляет собой систему, особенности поведения которой получили качественное и отчасти количественное объяснение лишь в самое недавнее время и которая продолжает интенсивно исследоваться и сейчас [7,8]. Помимо самостоятельного физического значения, эта система интересна с точки зрения теории многих тел и как еще одна модель, в которой возможен фазовый переход. Этот фазовый переход [9] обусловливает наличие особенности типа λ -точки в кривой теплоемкости и изменение формы линии ЯМР в области $1{,}5^0$ K в кристалле с высокой концентрацией ортомолекул ($> 60\%$). Физически фазовый переход связан со снятием трехкратного вырождения ротационного состояния ортомолекул и упорядочением их ротационного движения. Важным следствием этого упорядочения является существование ниже точки фазового перехода коллективных ротационных возбуждений, описываемых при низких температурах в терминах либрионов [7,8]. Взаимодействуя с ядерными спинами благодаря диполь-дипольным силам, либроны приводят к уширению зеемановских ядерных уровней и к установлению термодинамического равновесия в системе ядерных спинов твердого ортоводорода. В диссертации, на основе выведенных обобщенных кинетических уравнений, получены явные аналитические выражения для температурной и структурной зависимости обратного времени

спин-решеточной релаксации и ширины зеемановских уровней в твердом ортоводороде.

В главе I изложен метод неравновесного статистического оператора и получены обобщенные кинетические уравнения для системы в термостате.

В §1 производится построение неравновесного статистического оператора с помощью формулировки граничных условий для него. Граничные условия задаются введением в уравнение Лиувилля для статистического оператора бесконечно малых источников, нарушающих симметрию относительно отражения времени [5]. Полученный статистический оператор удовлетворяет уравнению Лиувилля в смысле квазисредних [4]. Устанавливаются общие выражения, связывающие величины $\langle P_m \rangle$ и $F_m(t)$, которые играют роль обобщенных термодинамических координат и термодинамических сил соответственно. Записываются обобщенные кинетические уравнения переноса для $\langle P_m \rangle$.

В §2 эти обобщенные кинетические уравнения раскрываются для конкретной задачи, когда возможно введение малого параметра. В этом параграфе изучаются релаксационные процессы в двух слабо взаимодействующих подсистемах, одна из которых находится в неравновесном состоянии, а другая играет роль термостата. Гамильтониан полной системы записывается в виде:

$$H = H_1 + H_2 + V , \qquad (1)$$

где

$$H_1 = \sum_{\alpha} E_\alpha \, a_\alpha^+ \, a_\alpha \qquad (2)$$

$$V = \sum_{\alpha,\beta} \phi_{\alpha\beta} \, a_\alpha^+ \, a_\beta , \qquad \phi_{\alpha\beta} = \phi_{\beta\alpha}^+ . \qquad (3)$$

Здесь H_1 – гамильтониан малой подсистемы, a^+_α, a_α – операторы рождения и уничтожения квазичастиц с энергиями E_α, H_2 – гамильтониан термостата, который мы не выписываем явно, и $\phi_{\alpha\beta}$ – операторы, действующие только на переменные термостата. Для случая кинетического режима, т.е. когда в качестве $< P_m >$ выбирались величины $<P_{\alpha\beta}> = <a^+_\alpha a_\beta>$ и $<H_2>$, получены обобщенные кинетические уравнения вида [10]:

$$\frac{d<P_{\alpha\beta}>}{dt} = -i\,(E_\beta - E_\alpha)<P_{\alpha\beta}> - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} <[[P_{\alpha\beta}, V], V(t_1)]>_q, \quad (4)$$

где $< \dots >_q$ – усреднение с квазиравновесным статистическим оператором [1-3], $\epsilon \to +0$ после термодинамического предела при вычислении средних. Из (4) видно, что выражение для члена столкновений имеет такую же форму, как и в обобщенных кинетических уравнениях для системы с малым взаимодействием [6,11], но отличается тем, что при усреднении в нем учтены состояния среды. Раскрывая двойной коммутатор в (4) с учетом (3), получим в приближении слабовозбужденных состояний квазичастиц уравнения, по структуре подобные редфилдовским уравнениям для спиновой матрицы плотности [12]. Когда возможно ограничиться только $< P_{\alpha\alpha} >$, получено основное кинетическое уравнение, на основе которого получено соотношение Гортера для обратного времени продольной ядерной спин-решеточной релаксации. Это соотношение записано через "тепловые" вероятности переходов, удовлетворяющих соотношению детального баланса.

В §3 этот подход распространяется на динамическую систему, слабо взаимодействующую с термостатом. В качестве набора параметров $< P_m >$ выбираются $<a_\alpha>$, $<a^+_\alpha>$, $<a^+_\alpha a_\alpha>$ и $<H_2>$. Для средних величин $<a_\alpha>$ устанавливается уравнение типа Шредингера с затуханием, которое имеет вид [13]

$$i\hbar \frac{d<a_\alpha>}{dt} = E_\alpha <a_\alpha> + \sum_\beta K_{\alpha\beta} <a_\beta>, \quad (5)$$

где

$$K_{\alpha\beta} = \frac{1}{i\hbar} \sum \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} <\phi_{\alpha\alpha_1}\, \tilde{\phi}_{\alpha_1\beta}(t_1)>_q \quad (6)$$

и

$$\tilde{\phi}_{\alpha\beta}(t) = \phi_{\alpha\beta}(t) \exp\left\{\frac{(E_\beta - E_\alpha)t}{i\hbar}\right\}.$$

Уравнение (5) позволяет очень просто вычислять сдвиг энергии и затухание из-за взаимодействия частиц со средой. Интересно отметить, что уравнение (5) является линейным приближением более общего нелинейного уравнения типа Шредингера, которое в общем случае связано с нелинейным уравнением кинетического типа (для случая статистики Бозе). Рассматриваются три примера вычисления сдвига энергии и затухания: экситонная и электронная системы, взаимодействующие с фононным полем, а также вычисление естественной ширины спектральных линий атомной системы. Во всех случаях найдено полное согласие с предыдущими результатами.

Имея в виду применение развитой теории к изучению релаксационных процессов в твердом ортоводороде, в главе II мы изучаем его либронную подсистему.

В §4 описывается модель твердого ортоводорода [8] и выделяется тип взаимодействия, играющего основную роль в явлении ориентационного упорядочения. Оценки показывают [9], что таким взаимодействием является электрическое квадруполь-квадрупольное взаимодействие между молекулами ортоводорода. Гамильтониан этого взаимодействия записывается в операторах углового момента количества движения. На простой модели показывается, что этот гамильтониан описывает фазовый переход, и оценивается критическая температура перехода.

В §5 кратко излагаются результаты бозевской теории либронов по работам [8,14].

В шестом параграфе теория либрационных возбуждений строится в приближении хаотических фаз /15/. Эти возбуждения распространяются в виде волн, связанных с возбуждением ротационных степеней свободы кристалла. Однако, так как в области низких температур среднее значение углового момента молекулы равно нулю, скорее нужно говорить о либрационном движении. Физически это связано с тем, что при температурах, когда тепловая энергия решетки становится сравнимой с энергией электрического квадруполь-квадрупольного взаимодействия (1^0 K), последнее начинает слабо затормаживать вращение молекул таким образом, что полный угловой момент молекулы остается неизменным, т.е. равным J = 1 , но z – компонента углового момента меняется. С помощью метода двухвременных температурных функций Грина /16/ найдены спектр либрационных возбуждений и получено уравнение для "параметра упорядочения",

$$\langle O^0 \rangle = \langle 3 (J^z)^2 - 2 \rangle , \qquad (7)$$

где J^z – z – компонента углового момента количества движения с осью квантования, совпадающей с направлением [111] ГЦК решетки. Это уравнение совпадает с полученным в работе /7/, но отличается от соответствующего работы /8/.

Глава III посвящена исследованию релаксационных процессов и ширины зеемановских уровней ядерных спинов в твердом ортоводороде.

В §7 показывается, что основным взаимодействием, определяющим процессы спин-либронной релаксации и процессы уширения дискретных зеемановских уровней в твердом ортоводороде, являются внутримолекулярное диполь-дипольное и спин-орбитальное взаимодействия. Межмолекулярное диполь-дипольное взаимодействие в жесткой решетке можно не учитывать.

В § 8 на основе результатов §2 вычислено время продольной ядерной спин-либронной релаксации и найдена в аналитическом виде его структурная и температурная зависимость /15/. Либронная подсистема здесь рассматривалась в приближении хаотических фаз. При вычислении времени релаксации предполагалось, что главный вклад дают рамановские процессы, а прямые процессы запрещены, поскольку энергетическая щель в спектре либронов много больше расстояния между ядерными зеемановскими уровнями.

В §9 вычисляется ширина зеемановских ядерных уровней в твердом ортоводороде /17,18/. Для упрощения расчётов ограничиваемся упругим рассеянием либронов на ядерных спинах. Либронная подсистема рассматривается в бозевском приближении, изложенном в §5. Найдено расстояние между пиками тонкой структуры резонансной линии поглощения, совпадающее с известным результатом /12/.

В Заключении обсуждаются основные результаты исследований, описание которых содержится в диссертации.

Таким образом, полученные с помощью метода неравновесного статистического оператора обобщенные кинетические уравнения для системы в термостате позволяют относительно просто исследовать релаксационные процессы и процессы уширения уровней в различных конкретных системах и могут быть полезными в ряде задач статистической физики.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах /10,13,15,17,18/.

Литература

1. Д.Н. Зубарев. ДАН, 140, 92, 1961; 162, 532, 794, 1965; 164 , 65, 1965.
2. Д.Н. Зубарев. Fortschritte der Physik, 18, 125, 1970.
3. Д.Н. Зубарев. Препринт ИТФ-70-3, Киев, 1970.
4. Д.Н. Зубарев. Препринт ОИЯИ Р4-4886, Дубна 1970.
5. Д.Н. Зубарев. Теоретическая и математическая физика, 3, 276, 1970.

6. Л.А. Покровский. ДАН, 186, 806, 1968.
7. T. Matsubara, H. Ueyama. Progr.Theor. Phys., 38, 784, 1967.
8. J.C. Raich, R.D. Etters. Phys.Rev., 168, 425, 1968.
9. T. Nakamura. Progr.Phys.Theor., 14, 135, 1955.
10. К. Валясек, А.Л. Куземский. Теоретическая и математическая физика, 4, 267, 1970.
11. С.В. Пелетминский, А.А. Яценко. ЖЭТФ, 53, 1327, 1967.
12. А. Абрагам. Ядерный магнетизм. ИЛ, 1963.
13. Д.Н. Зубарев, А.Л. Куземский, К. Валясек. Препринт ОИЯИ Р4-5022, Дубна, 1970; Теоретическая и математическая физика, 5, 280, 1970.
14. К. Валясек. Препринт ОИЯИ Р4-5089, Дубна, 1970.
15. К. Валясек, А.Л. Куземский. Препринт ОИЯИ Р4-4893, Дубна, 1970; Теоретическая и математическая физика, 4, 383, 1970.
16. Д.Н. Зубарев. УФН, 71, 71, 1960.
17. К. Валясек, А.Л. Куземский. Physics Letters., 32A, 399, 1970.
18. К. Валясек, А.Л. Куземский. Теоретическая и математическая физика, 6, №1, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел
13 ноября 1970 года.