СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р17 - 9544

В.П.Калашников, Й.П.Влахов

ВЫЧИСЛЕНИЕ МОЩНОСТИ, ПОГЛОЩЕННОЙ ПОДСИСТЕМОЙ, В ТЕОРИИ РЕАКЦИИ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗМУЩЕНИЕ

1976

P17 - 9544

В.П.Калашников , Й.П.Влахов

ВЫЧИСЛЕНИЕ МОЩНОСТИ, ПОГЛОЩЕННОЙ ПОДСИСТЕМОЙ, В ТЕОРИИ РЕАКЦИИ МАКРОСКОПИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗМУЩЕНИЕ

$$H(t) = H + V(t), \quad V(t) = \sum_j V_j(t), \qquad /1.1/$$

где $V_j(t)$ и $V(t)$ - энергии взаимодействия j-той подсистемы и системы в целом с внешним полем. Будем считать, что взаимодействие $V(t)$ не имеет диагональных матричных элементов в Н-представлении и коммутирует с оператором числа частиц N. Среднее значение энергии подсистемы j во внешнем поле в момент времени t определим как $h_j(t) = \langle H_j(t) \rangle^t = Sp\, H_j(t)\rho(t)$, где

$$H_j(t) = H_j + V_j(t), \qquad /1.2/$$

а $\rho(t)$ - неравновесный статистический оператор /НСО/ системы.

Пусть в отсутствие внешнего поля в системе реализуется равновесное распределение Гиббса ρ_0:

$$\rho_0 = e^{-S_0}; \; S_0 = \Phi_0 + \beta(H - \mu N), \quad \Phi_0 = \ln Sp \exp\{-\beta(H - \mu N)\},$$

где β - обратная температура, а μ - химический потенциал. Мы будем рассматривать слаболинейный режим поглощения, когда неравновесные поправки к средним энергиям подсистем квадратичны по амплитуде поля. В этом случае уравнения баланса энергии подсистем имеют вид

$$\frac{\partial}{\partial t} h_j(t) = Q_j(t) + \sum_{j'} R_{jj'}(t) + R_{j0}(t), \qquad /1.3/$$

где $Q_j(t)$ - мгновенная мощность внешнего поля, поглощенная j-той подсистемой, а $R_{jj'}$ и R_{j0} - скорости релаксации энергии j-той подсистемы при взаимодействии с подсистемой j' и термостатом соответственно. Очевидно, что

$$Q(t) = \sum_j Q_j(t), \quad R(t) = \sum_j R_{j0}(t), \quad \sum_{jj'} R_{jj'}(t) \equiv 0, \qquad /1.4/$$

где $Q(t)$ - полная мощность, поглощенная системой, а $R(t)$ - полная энергия, утекающая в единицу времени при взаимодействии системы с термостатом.

Определим средние значения поглощенных мощностей как

$$Q = Av\, Q(t), \quad Q_j = Av\, Q_j(t), \qquad /1.5/$$

$$Av\, f(t) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{+T/2} dt\, f(t).$$

Целью настоящей работы является вычисление величин Q_j через корреляционные функции по равновесному состоянию системы. Выражения для полных поглощенных мощностей известны в теории реакции на механическое возмущение [5]; для их нахождения достаточно знать разложение НСО по амплитуде поля с точностью до членов первого порядка. Как будет показано ниже, парциальные мощности Q_j выражаются через члены первого и второго порядков в разложении НСО по амплитуде поля.

2. Интегральные уравнения для НСО

Разложения НСО по амплитуде внешнего поля удобно искать с помощью интегрального уравнения, построенного в работе [6]. Если наложить на НСО граничное условие

$$e^{it_1 L}(\rho(t+t_1) - \rho_q(t+t_1)) \to 0 \text{ при } t_1 \to -\infty, \qquad /2.1/$$

где $\rho_q(t) = e^{-S(t)}$ - квазиравновесный статистический оператор, а $S(t)$ - оператор энтропии, то НСО дается решением уравнения

$$\rho(t) = \rho^\circ(t) - \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} e^{it_1 L}\, iL_v(t+t_1)\rho(t+t_1),$$

$$\rho^\circ(t) = \epsilon \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} e^{it_1 L} \rho_q(t+t_1), \quad \epsilon \to +0. \qquad /2.2/$$

Здесь iL, $iL(t) = iL + iL_v(t)$ - операторы Лиувилля, соответствующие гамильтонианам H, $H(t)$, так что для произвольного оператора A

$$iLA = \frac{1}{i\hbar}[A,H], \quad iL_v(t)A = \frac{1}{i\hbar}[A,V(t)],$$

$$e^{itL}A = e^{\frac{itH}{\hbar}} A e^{-\frac{itH}{\hbar}} .$$

Явное выражение для квазиравновесного распределения $\rho_q(t)$ зависит от того, какие макропеременные используются при описании неравновесного состояния подсистем. Если, например, мы составляем уравнения для средних энергий /или эффективных температур/ подсистем, то

$$S(t) = \Phi(t) + \sum_j \beta_j(t) H_j(t), \; \Phi(t) = \ln Sp\exp\{-\sum_j \beta_j(t) H_j(t)\}, \qquad /2.3/$$

где $\beta_j(t)$ - обратная эффективная температура j -той подсистемы. Поскольку отклонения этих параметров $\delta\beta_j(t) = \beta_j(t) - \beta$ должны быть квадратичны по амплитуде поля, то в слабонелинейном режиме, с точностью до членов второго порядка по V,

$$S(t) = S_0(t) + \sum_j \delta\beta_j(t)\Delta H_j, \quad \Delta H_j = H_j - Sp(H_j\rho_0),$$

$$S_0(t) = \Phi_0(t) + \beta(H(t) - \mu N), \quad \Phi_0(t) = \ln Sp\exp\{-\beta(H(t) - \mu N)\}. \qquad /2.4а/$$

Отсюда

$$\rho_q(t) = \rho_0(t) + \Delta\rho_q(t),$$

$$\rho_0(t) = e^{-S_0(t)} = \exp\{-\Phi_0(t) - \beta(H(t) - \mu N)\},$$

$$\Delta\rho_q(t) = -\int_0^1 d\tau\, e^{-\hbar\beta\tau L} \sum_j \Delta H_j \delta\beta_j(t)\rho_0 . \qquad /2.5а/$$

Если определить гамильтониан подсистемы как H_j, то оператор энтропии будет иметь вид

$$S(t) = S_0 + \sum_j \delta\beta_j(t)\Delta H_j, \quad S_0 = \Phi_0 + \beta(H - \mu N), \qquad /2.4б/$$

так что

$$\rho_q(t) = \rho_0 + \Delta\rho_q(t). \qquad /2.5б/$$

В первом случае /2.4а/, /2.5а/ система релаксирует к локально-равновесному состоянию во внешнем поле $V(t)$; во втором случае - к термодинамически-равновесному состоянию. Оба типа граничных условий встречаются в теории отклика на внешние поля различной физической природы. Например, для нахождения реакции на внешнее переменное магнитное поле нужно пользоваться выражениями /2.4а/, /2.5а/, так как в пределе, когда частота поля стремится к нулю, возникает распределение Гиббса с гамильтонианом $H+V$. В случае реакции на внешнее статическое электрическое поле для пространственно-однородной системы электростатический потенциал компенсируется неоднородной добавкой к химическому потенциалу системы, так что квазиравновесное распределение будет относиться к типу /2.5б/.

Ниже будет показано, что в квадратичном приближении по амплитуде внешнего поля общие выражения для поглощенных мощностей оказываются одинаковыми для обоих типов рассмотренных граничных условий. Кроме того, они не зависят от структуры поправки $\Delta\rho_q(t)$ к квазиравновесному распределению, которая определяет лишь релаксационные слагаемые в уравнениях баланса /1.3/.

3. Релаксация к равновесному распределению

Заменяя в интегральном уравнении /2.2/ $\rho_q(t)$ на $\rho_0 + \Delta\rho_q(t)$, будем иметь

$$\rho(t) = \rho_0 + \delta\rho_1(t) + \delta\rho_2(t) + \Delta\rho_2(t) + \dots, \qquad /3.1/$$

где поправка первого порядка по $V(t)$ к НСО имеет вид

$$\delta\rho_1(t) = -\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} e^{it_1 L} \frac{1}{i\hbar}[\rho_0, V(t+t_1)] = \qquad /3.2/$$

$$= -\beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau\, e^{i(t_1 + i\hbar\beta\tau)L}\, \dot V(t+t_1)\rho_0,$$

а поправка второго порядка по явно входящему взаимодействию $V(t)$

$$\delta\rho_2(t) = -\beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \int_0^1 d\tau \int_{-\infty}^{0} dt_2 e^{\epsilon t_2} e^{it_2 L} \frac{1}{i\hbar}[V(t+t_2),$$

$$e^{i(t_1+i\hbar\beta\tau)L}\dot V(t+t_1+t_2)\rho_0]. \qquad /3.3/$$

Здесь мы применили тождество Кубо[7]

$$\frac{1}{i\hbar}[V(t),\rho_0] = -\beta\int_0^1 d\tau\, e^{i(i\hbar\beta\tau)L}\, \dot V(t)\rho_0, \quad \dot V(t) = iLV(t), \qquad /3.4/$$

Далее, $\Delta\rho_2(t)$ есть поправка второго порядка, зависящая от поля через макропараметры /например, через отклонения от равновесия обратных температур подсистем $\delta\beta_i(t)$ /, причем

$$\Delta\rho_2(t) = \epsilon\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} e^{it_1 L}\Delta\rho_q(t+t_1), \quad \epsilon\to+0.$$

Теперь для j -той подсистемы во втором порядке по внешнему полю находим

$$\frac{\partial}{\partial t} h_j(t) = Sp\{\frac{\partial}{\partial t}H_j(t) + iL(t)\, H_j(t)\}\rho(t) = Q_j(t) + R_j(t),$$

$$Q_j(t) = \frac{1}{i\hbar} Sp[V_j(t), V(t)]\rho_0 + Sp(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t} + \dot V_j(t) +$$

$$+ \frac{1}{i\hbar}[H_j, V(t)])\delta\rho_1(t) + Sp\,\dot H_j\delta\rho_2(t),$$

$$R_j(t) = Sp\,\dot H_j\Delta\rho_2(t), \qquad /3.5/$$

где $h_j(t)$ - сумма всех релаксационных членов в уравнении /1.3/. Усредняя каждое слагаемое формулы /3.5/ для $Q_j(t)$ по времени, получаем

$$\frac{1}{i\hbar} Av\, Sp[V_j(t), V(t)]\rho_0 = -\beta\, Av(V_j(t), \dot V(t)), \qquad /3.6/$$

$$Av\, Sp\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}\delta\rho_1(t) = -\beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} Av(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}, e^{it_1 L}\dot V(t+t_1)) =$$

$$= \beta\, Av(V_j(t), \dot V(t)) - \beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} Av(V_j(t), (\epsilon + iL)e^{it_1 L}\dot V(t+t_1)). \qquad /3.7/$$

Здесь

$$(A,B) = \int_0^1 d\tau \langle \Delta A, \Delta B(i\hbar\beta\tau)\rangle_0, \quad \Delta A = A - \langle A\rangle_0, \quad \langle\ldots\rangle_0 = Sp(\ldots\rho_0)$$

- квантовые корреляционные функции; в формуле /3.7/ использовано соотношение

$$Av(\frac{\partial B(t)}{\partial t}, C(t+t_1)) = -Av(B(t), \frac{\partial C(t+t_1)}{\partial t}) \qquad /3.8/$$

и проведено интегрирование по частям. Здесь и далее мы будем считать, что для операторов взаимодействия системы с полем выполняется принцип ослабления корреляций, так что, например,

$$\lim_{\epsilon\to+0}\epsilon\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}(V_j(t), e^{it_1 L}\dot V(t+t_1)) = \qquad /3.9/$$

$$= \lim_{t_1\to-\infty}(V_j(t), e^{it_1 L}\dot V(t+t_1)) = 0.$$

Далее,

$$Av\, Sp\,\dot V_j(t)\delta\rho_1(t) = -\beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} Av(\dot V_j(t), e^{it_1 L}\dot V(t+t_1)). \qquad /3.10/$$

Используя соотношение

$$(\dot A, B) = -(A, \dot B) \qquad /3.11/$$

в формуле /3.7/ и условие ослабления корреляций /3.9/, из /3.6/, /3.7/ и /3.10/ получаем

$$\mathrm{Av}\,\frac{\partial}{\partial t}\langle V_j(t)\rangle^t = \mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\{(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t} + \dot V_j(t))\,\delta\rho_1(t) + \qquad /3.12/$$

$$+ \frac{1}{ih}[V_j(t), V(t)]\rho_0\} = 0.$$

Рассмотрим остальные слагаемые формулы /3.5/. Имеем

$$\frac{1}{ih}\mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}[H_j, V(t)]\delta\rho_1(t) = -\beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\frac{1}{ih}[H_j, V(t)],$$

$$e^{it_1L}\dot V(t+t_1)), \qquad /3.13/$$

$$\mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\,\dot H_j\,\delta\rho_2(t) = -\beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\int_0^1 d\tau\int_{-\infty}^{0} dt_2 e^{\epsilon t_2}\,\mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\,\dot H_j e^{it_2L}\times$$

$$\times\frac{1}{ih}[V(t+t_2), e^{i(t_1+ih\beta\tau)L}\dot V(t+t_1+t_2)\rho_0]. \qquad /3.14/$$

Поскольку

$$\mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\{\ldots[V(t+t_2),\ldots\dot V(t+t_1+t_2)\rho_0]\} =$$

$$= \mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\{\ldots[V(t),\ldots\dot V(t+t_1)\rho_0]\} \qquad /3.15/$$

и

$$\int_{-\infty}^{0} dt_2 e^{\epsilon t_2}\,\mathrm{Sp}\dot H_j e^{it_2L}\{\ldots\} = \int_0^{\infty} dt\,\mathrm{Sp}(e^{t(-\epsilon+iL)}\dot H_j)\{\ldots\} =$$

$$= \mathrm{Sp}(H_j^{\circ} - H_j)\{\ldots\}, \qquad /3.16/$$

где

$$H_j^{\circ} = \epsilon\int_0^{\infty} dt\, e^{-\epsilon t} e^{itL} H_j, \quad \epsilon\to+0 - \qquad /3.17/$$

инвариантная часть оператора H_j по отношению к гамильтониану H, причем

$$\frac{d}{dt}H_j^{\circ} = iLH_j^{\circ} = \epsilon(H_j^{\circ} - H_j), \quad \epsilon\to+0, \qquad /3.18/$$

то выражение /3.14/ принимает вид

$$\mathrm{Av}\,\mathrm{Sp}\,\dot H_j\,\delta\rho_2(t) =$$

$$= \beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}\{(\frac{1}{ih}[H_j, V(t)], e^{it_1L}\dot V(t+t_1)) -$$

$$-(\frac{1}{ih}[H_j^{\circ}, V(t)], e^{it_1L}\dot V(t+t_1))\}. \qquad /3.19/$$

Собирая вклады /3.12/, /3.13/ и /3.19/, находим выражение для средней мощности Q_j, поглощенной j-той подсистемой:

$$Q_j = \beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\frac{1}{ih}[V(t), H_j^{\circ}], e^{it_1L}\dot V(t+t_1)). \qquad /3.20/$$

Удобно переписать это выражение в другой форме. Введем операторы Λ_j, действующие согласно правилу

$$\Lambda_j A = \int_0^{\infty} dt\, e^{t(-\epsilon+iL)}\frac{1}{ih}[H_j^{\circ}, A]. \qquad /3.21/$$

Из уравнения движения /3.18/ и определения /3.21/ следует, что в случае выполнения условия ослабления корреляций /3.9/ под знаком шпура выполняется соотношение

$$iL\Lambda_j A = \Lambda_j iLA = \Lambda_j\dot A.$$

Теперь формулу /3.20/ можно переписать в виде

$$Q_j = \beta\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\Lambda_j\dot V(t), e^{it_1L}\dot V(t+t_1)). \qquad /3.22/$$

Пользуясь соотношением /3.8/ и интегрируя формулу /3.22/ дважды по частям, будем иметь

$$Q_j = \beta\, Av\,(iL\,\Lambda_j V(t), V(t)) - \beta\, Av\left(\Lambda_j \frac{\partial V(t)}{\partial t},\; V(t)\right) + \qquad /3.23/$$

$$+ \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, Av\left(\Lambda_j \frac{\partial V(t)}{\partial t},\; e^{it_1 L} \frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t}\right).$$

Покажем, что два первых слагаемых в этой формуле равны нулю. Действительно, например,

$$Av\left(\Lambda_j \frac{\partial V(t)}{\partial t}, V(t)\right) = -Av\left(\Lambda_j V(t), \frac{\partial V(t)}{\partial t}\right) =$$

$$= -Av\left(V(t), \bar{\Lambda}_j \frac{\partial V(t)}{\partial t}\right) = -Av\left(\bar{\Lambda}_j \frac{\partial V(t)}{\partial t}, V(t)\right). \qquad /3.24/$$

Здесь мы снова воспользовались соотношением /3.8/ и свойством

$$(A, B) = (B, A)$$

симметрии корреляционных функций. В формуле /3.24/ оператор $\bar{\Lambda}_j$ действует согласно правилу

$$\bar{\Lambda}_j A = -\int_0^{\infty} dt\, e^{-t(\epsilon + iL)} \frac{1}{ih} [H_j^{\circ}, A]. \qquad /3.25/$$

Найдем матричные элементы операторов $\Lambda_j V(t)$ и $\bar{\Lambda}_j V(t)$ в представлении полного гамильтониана H:

$$\{\Lambda V(t)\}_{nn'} = \langle n|V(t)|n'\rangle \frac{\epsilon_n^{\circ} - \epsilon_{n'}^{\circ}}{\epsilon_n - \epsilon_{n'} + ih\epsilon}, \qquad /3.26/$$

$$\{\bar{\Lambda} V(t)\}_{nn'} = \langle n|V(t)|n'\rangle \frac{\epsilon_n^{\circ} - \epsilon_{n'}^{\circ}}{\epsilon_n - \epsilon_{n'} - ih\epsilon}.$$

Здесь $\langle n|V(t)|n'\rangle$- матричные элементы взаимодействия с внешним полем в H -представлении; ϵ_n - собственные значения оператора H, а ϵ_n° - собственные значения оператора H_j°. Поскольку, по предположению, имеем $\langle n|V(t)|n\rangle = 0$, а $\epsilon \to +0$, то оба выражения /3.26/ совпадают. Отсюда следует, что под знаком шпура в формуле /3.24/ можно не различать операторы Λ_j и $\bar{\Lambda}_j$; поэтому выражение /3.24/ равно нулю. Аналогично

$$Av(iL\Lambda_j V(t), V(t)) = Av(\Lambda_j \dot{V}(t), V(t)) = Av(\dot{V}(t), \bar{\Lambda}_j V(t)) =$$

$$= -Av(V(t), \bar{\Lambda}_j \dot{V}(t)) = -Av(iL\bar{\Lambda}_j V(t), V(t)) =$$

$$= -Av(iL\Lambda_j V(t), V(t)) = 0. \qquad /3.27/$$

4. *Релаксация к локально-равновесному распределению*

Пусть в интегральном уравнении /2.2/ $\rho_q(t) = \rho_0(t) + \Delta\rho_q(t)$. Тогда, итерируя /2.2/, находим

$$\rho(t) = \rho_0(t) - \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} e^{it_1 L} \frac{\partial}{\partial t} \rho_0(t+t_1) +$$

$$+ \frac{1}{ih} \int_{-\infty}^{0} dt_1\, e^{\epsilon t_1} \int_{-\infty}^{0} dt_2\, e^{\epsilon t_2} e^{it_1 L} [e^{it_2 L} \frac{\partial}{\partial t} \rho_0(t + t_1 + t_2),$$

$$V(t+t_1)] + \Delta\rho_2(t) + \dots, \qquad /4.1/$$

где $\Delta\rho_2(t)$ - поправка второго порядка, неявно зависящая от поля; она имеет тот же вид, что и в предыдущем случае. Разложим локально-равновесное распределение $\rho_0(t)$ до второго порядка по явно входящему взаимодействию $V(t)$:

$$\rho_0(t) = \rho_0 + \delta\rho_{01}(t) + \delta\rho_{02}(t) + \dots, \qquad /4.2/$$

причем

$$\delta\rho_{01}(t) = -\beta\int_0^1 d\tau\, e^{i(ih\beta\tau)L}\, V(t)\rho_0 . \qquad /4.3/$$

Пусть

$$\rho(t) = \rho_0(t) + \delta\rho_1'(t) + \delta\rho_2'(t) + \Delta\rho_2(t) + \dots \,. \qquad /4.4/$$

Тогда из разложения /4.1/ находим

$$\delta\rho_1'(t) = \beta\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\int_0^1 d\tau\, e^{i(t_1+ih\beta\tau)L}\,\frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t}\rho_0 . \qquad /4.5/$$

Здесь мы воспользовались формулой

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_0(t) \simeq -\beta\int_0^1 d\tau\, e^{i(ih\beta\tau)L}\,\frac{\partial V(t)}{\partial t}\rho_0 . \qquad /4.6/$$

Далее,

$$\delta\rho_2'(t) = \beta\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\int_{-\infty}^0 dt_2\, e^{\epsilon t_2}\int_0^1 d\tau\, e^{it_2L}\,\frac{1}{ih}\Big[V(t+t_2),$$

$$e^{i(t_1+ih\beta\tau)L}\,\frac{\partial V(t+t_1+t_2)}{\partial t}\rho_0\Big] -$$

$$-\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\, e^{it_1L}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\delta\rho_{02}(t+t_1) . \qquad /4.7/$$

Теперь при вычислении среднего

$$\frac{\partial}{\partial t}h_j(t) = \mathrm{Sp}\{\frac{\partial}{\partial t}H_j(t) + iL(t)H_j(t)\}\rho(t) = Q_j(t) + R_j(t)$$

будем иметь во втором порядке по амплитуде внешнего поля

$$\mathrm{Sp}\,\frac{\partial H_j(t)}{\partial t}\rho(t) = \mathrm{Sp}\,\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}(\delta\rho_{01}(t) + \delta\rho_1'(t)) \qquad /4.8/$$

и, поскольку $iL(t)\rho_0(t) \equiv 0$,

$$\mathrm{Sp}\{iL(t)H_j(t)\}\rho(t) = \mathrm{Sp}\{iL(t)H_j(t)\}(\rho(t) - \rho_0(t)) = \qquad /4.9/$$

$$= \mathrm{Sp}\{(\dot V_j(t) + \frac{1}{ih}[H_j, V(t)])\delta\rho_1'(t) + \dot H_j\,\delta\rho_2'(t) + \dot H_j\,\Delta\rho_2(t)\}.$$

Используя формулы /4.3/, /4.5/, /4.8/, находим

$$\mathrm{Av\,Sp}\,\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}(\delta\rho_{01}(t) + \delta\rho_1'(t)) = -\beta\,\mathrm{Av}(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}, V(t)) +$$

$$+\beta\,\mathrm{Av}\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}, e^{it_1L}\frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t_1}) =$$

$$= -\beta\,\mathrm{Av}\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}, e^{it_1L}(\epsilon + iL)V(t+t_1)), \qquad /4.10/$$

$$\mathrm{Av\,Sp}\,\dot V_j(t)\,\delta\rho_1'(t) = \beta\,\mathrm{Av}\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}(iLV_j(t), e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)) =$$

$$= \beta\,\mathrm{Av}\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}(\frac{\partial V_j(t)}{\partial t}, e^{it_1L}\, iLV(t+t_1)). \qquad /4.11/$$

Таким образом, как и в предыдущем разделе,

$$\mathrm{Av}\frac{\partial}{\partial t}\langle V_j(t)\rangle^t = -\beta\lim_{\epsilon\to+0}\epsilon\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\frac{\partial}{\partial t}V_j(t), e^{it_1L}V(t+t_1)) = 0.$$

Далее,

$$\frac{1}{ih}\mathrm{Av\,Sp}[H_j, V(t)]\delta\rho_1'(t) = \beta\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\frac{1}{ih}[H_j, V(t)],$$

$$e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)), \qquad /4.12/$$

$$\mathrm{Av\,Sp}\,\dot H_j\,\delta\rho_2'(t) = \beta\int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av}(\frac{1}{ih}\int_{-\infty}^0 dt_2\, e^{\epsilon t_2}[\dot H_j(-t_2), V(t)],$$

$$e^{it_1L}\frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t}) - \int_{-\infty}^0 dt_1\, e^{\epsilon t_1}\,\mathrm{Av\,Sp}\,\dot H_j(-t_1)\times$$

$$\times\frac{\partial}{\partial t}\delta\rho_{02}(t+t_1). \qquad /4.13/$$

Учитывая, что

$$Av\,\frac{\partial}{\partial t}\,Sp\,\dot H_j(-t_1)\,\delta\rho_{02}\,(t+t_1)=0$$

и используя формулу /3.16/, находим

$$Q_j = Av\,Q_j(t)=\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,Av\Big(\frac{1}{i\hbar}[H^{\circ}_j, V(t)],\, e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}\dot V(t+t_1)\Big)=$$

$$=-\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,Av\Big(\Lambda_j\dot V(t),\, e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)\Big), \qquad /4.14/$$

где оператор Λ_j определяется выражением /3.21/. Применяя соотношение /3.11/ и интегрируя формулу /4.14/ по частям, получаем

$$Q_j=\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,Av\Big(\Lambda_j V(t),\, iL\,e^{it_1L}\,\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)\Big)=$$

$$=\beta\,Av\Big(\Lambda_j V(t),\,\frac{\partial}{\partial t}V(t)\Big)-\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,Av\Big(\Lambda_j V(t),$$

$$e^{it_1L}\Big(\epsilon+\frac{\partial}{\partial t_1}\Big)\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)\Big). \qquad /4.15/$$

Первое слагаемое в этой формуле равно нулю по соотношению /3.24/; член во втором слагаемом, пропорциональный ϵ, исчезает согласно принципу ослабления корреляций. Поскольку

$$Av\Big(\Lambda_j V(t),\, e^{it_1L}\frac{\partial^2}{\partial t^2}V(t+t_1)\Big)=-Av\Big(\Lambda_j\frac{\partial}{\partial t}V(t),$$

$$e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)\Big), \qquad /4.16/$$

то формула /4.15/ принимает вид

$$Q_j=\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\,Av\Big(\Lambda_j\frac{\partial}{\partial t}V(t),\, e^{it_1L}\frac{\partial}{\partial t}V(t+t_1)\Big), \qquad /4.17/$$

что совпадает с результатом, полученным в предыдущем разделе. Таким образом, в слабонелинейном режиме общие выражения для поглощенных мощностей оказываются одинаковыми для обоих типов граничных условий.

5. Полная поглощенная мощность. Примеры

Выражения для полных поглощенных мощностей можно найти с помощью аналогичных вычислений. Скорость изменения средней энергии системы

$$h(t)=\sum_j h_j(t)=Sp\,H(t)\rho(t), \qquad \frac{\partial}{\partial t}h(t)=Q(t)+R(t),$$

где мгновенная поглощенная системой мощность

$$Q(t)=Sp\,\frac{\partial H(t)}{\partial t}\,\delta\rho_1(t), \qquad /5.1/$$

выражается через поправку к НСО первого порядка по полю. В случае релаксации к равновесному распределению $\delta\rho_1(t)$ дается выражением /3.2/; в случае релаксации к локально-равновесному распределению

$$\delta\rho_1(t)=\delta\rho_{01}(t)+\delta\rho_1'(t)=-\beta\int_0^1 d\tau\,e^{i(i\hbar\beta\tau)L}\,V(t)\rho_0\,+$$

$$+\,\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\int_0^1 d\tau\,e^{i(t_1+i\hbar\beta\tau)L}\,\frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t}\,\rho_0=$$

$$/5.2/$$

$$=-\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\int_0^1 d\tau\,e^{i(t_1+i\hbar\beta\tau)L}\,(\dot V(t+t_1)+\epsilon V(t+t_1))\rho_0\,.$$

Здесь мы использовали формулы /4.3/, /4.5/ и выполнили интегрирование по частям. В силу принципа ослабления корреляций в обоих случаях из выражения /5.1/ получаем одно и то же:

$$Q(t)=-\beta\int_{-\infty}^{0}dt_1\,e^{\epsilon t_1}\Big(\frac{\partial V(t)}{\partial t},\, e^{it_1L}\,\dot V(t+t_1)\Big), \qquad /5.3/$$

откуда

$$Q = \mathrm{Av}\,Q(t) = \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \mathrm{Av}\left(\frac{\partial V(t)}{\partial t}, e^{it_1 L} \frac{\partial V(t+t_1)}{\partial t}\right), \qquad /5.4а/$$

или

$$Q = \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \mathrm{Av}(\dot V(t), e^{it_1 L} \dot V(t+t_1)). \qquad /5.4б/$$

Интересно отметить, что этот же результат получается, если определить среднюю энергию системы как $h(t) = \mathrm{Sp}\, H\rho(t)$. Тогда

$$Q(t) = \mathrm{Sp}(iL(t)H)\delta\rho_1(t) = -\mathrm{Sp}\,\dot V(t)\delta\rho_1(t) = \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} (\dot V(t), e^{it_1 L} \dot V(t+t_1)), \qquad /5.5/$$

откуда сразу получается формула /5.4б/.

Таким образом, и парциальные, и полные поглощенные мощности выражаются через равновесные корреляционные функции от операторов взаимодействия системы с полем. Операторы Λ_j, входящие в выражения для парциальных мощностей, выделяют эффективную часть этого взаимодействия, относящуюся к j-той подсистеме. Нетрудно видеть, что общие формулы для Q_j согласуются с выражениями /5.4/ для полной поглощенной мощности Q. Действительно, суммируя мощности Q_j по подсистемам, будем иметь

$$\sum_j Q_j = \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \mathrm{Av}\left(\sum_j \Lambda_j \dot V(t), e^{it_1 L} \dot V(t+t_1)\right) = Q. \qquad /5.6/$$

Поскольку

$$\sum_j H_j = H - U, \quad U = \sum_{i<j} U_{ij}, \quad \sum_j H_j^{\circ} = \epsilon \int_0^{\infty} dt\, e^{t(-\epsilon + iL)} (H-U) = H - U^{\circ},$$

то

$$\sum_j \Lambda_j = \int_0^{\infty} dt\, e^{t(-\epsilon+iL)} \frac{1}{ih}[H - U^{\circ}, \ldots] = 1 - \int_0^{\infty} dt\, e^{t(-\epsilon+iL)} \left\{\epsilon + \frac{1}{ih}[U^{\circ}, \ldots]\right\}. \qquad /5.7/$$

При $\epsilon \to +0$ вклад в шпур /5.6/ члена, пропорционального ϵ, исчезает согласно принципу ослабления корреляций. Слагаемое, содержащее оператор U°, также не вносит вклада в корреляционную функцию /5.6/, поскольку в Н-представлении

$$U^{\circ}_{nn'} = \langle n'|U|n\rangle \frac{ih\epsilon}{\epsilon_n - \epsilon_{n'} + ih\epsilon}, \quad \epsilon \to +0.$$

При $n = n'$ это выражение равно нулю, так как $\langle n|U|n\rangle = 0$; если же $n \neq n'$, то оно исчезает вместе с $\epsilon \to +0$. Таким образом, под знаком шпура в формуле /5.6/ $\sum_j \Lambda_j = 1$.

В случае, если подсистемы не взаимодействуют между собой, имеем, очевидно, $H_j^{\circ} = H_j$, $\Lambda_j = 1 + O(\epsilon)$ и каждая из парциальных мощностей Q имеет вид /5.4/, где величины $H, V(t)$ нужно заменить на H_j, $V_j(t)$. Если же, как это обычно имеет место, подсистемы взаимодействуют между собой, то полная поглощенная мощность не равна сумме выражений типа /5.4/

$$Q \neq \beta \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\epsilon t_1} \sum_j \mathrm{Av}(\dot V_j(t), e^{itL} \dot V_j(t+t_1)),$$

поскольку сумма в правой части этой формулы не содержит вклада в поглощение от динамических переменных, входящих в гамильтонианы взаимодействий между подсистемами. Эти вклады учитываются в полученных выше выражениях /3.22/ или /4.17/.

Если гамильтониан взаимодействия системы с полем можно разложить в ряд Фурье по времени, то средние по времени в выражениях для поглощенных мощностей можно вычислить в общем виде. Пусть

$$V(t) = -\sum_a A^a F^a(t), \qquad F^a(t) = \sum_\omega F^a(\omega) e^{-i\omega t},$$

где $F(t)$ - с-числовая амплитуда поля. Тогда

$$\mathrm{Av}\, F^a(t) F^\gamma(t+t_1) = \sum_\omega F^\gamma(\omega) F^a(-\omega) e^{-i\omega t_1},$$

так что

$$Q_j = \beta \sum_{a\gamma\omega} \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{t(\epsilon - i\omega)} (\Lambda_j \dot A^a, \dot A^\gamma(t)) F^\gamma(\omega) F^a(-\omega) \qquad /5.8/$$

или

$$Q_j = \beta \sum_{\alpha\gamma\omega} \omega^2 \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{t(\epsilon - i\omega)} (\Lambda_j A^\alpha, A^\gamma(t)) F^\gamma(\omega) F^\alpha(-\omega),$$

где $A^\gamma(t) = e^{itL} A^\gamma$, $\dot{A}^\gamma = iLA^\gamma$. Полные поглощенные мощности даются формулами /5.8/, если Λ_j заменить на единицу.

В качестве примера рассмотрим поглощение ультразвука электронами проводимости проводящего кристалла в постоянном магнитном поле. В отсутствие звуковой волны гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_k + H_s + H_\ell + H_{e\ell},$$
$$H_k = \sum_j \frac{1}{2m} P_j^2, \quad H_s = -h\omega_s \sum_j S_j^z, \qquad /5.9/$$

где H_k и H_s - операторы кинетической и зеемановской энергии электронов; $\vec{P}_j$ и $\vec{S}_j$ - операторы кинетического импульса и спина j-того электрона; m - электронная масса, а ω_s - зеемановская частота; H_e и $H_{e\ell}$ - гамильтонианы решетки и взаимодействия электронов с решеткой. Взаимодействие электронов со звуком описывается гамильтонианом [8]

$$V(t) = \sum_{inq} \Phi_{-i}^{-n}(\vec{q}) u^i(\vec{q}) e^{i\omega t} T^n(\vec{q}) \equiv \sum_{nq} \Lambda^{-n}(\vec{q}) T^n(\vec{q}) e^{i\omega t}, \quad /5.10/$$

где $\vec{u}(\vec{q})$ - амплитуда звуковой волны с волновым вектором $\vec{q}$, $\Phi_i^n(\vec{q})$ - интенсивность взаимодействия, а $T^n(\vec{q})$ - операторы, зависящие от электронных динамических переменных, например,

$$T^n(\vec{q}) = \sum_j \{ S_j^\mu P_j^{\alpha_1} P_j^{\alpha_2} \ldots, \; e^{i\vec{q}\vec{x}_j} \};$$

скобки $\{\ldots,\ldots\}$ означают симметризованное произведение. Полная звуковая мощность, поглощенная системой, равна

$$Q = \beta \sum_{nn'q} \omega^2 \Lambda^{-n}(\vec{q}) \Lambda^{n'}(-\vec{q}) \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{t(\epsilon - i\omega)} (T^n(\vec{q}), T^{-n'}(-\vec{q}, t)). \qquad /5.11/$$

Как найти мощности, поглощенные подсистемами кинетических и спиновых степеней свободы электронов в отдельности? Согласно разделу 3, нужно построить операторы Λ_k и Λ_s, где

$$\Lambda_{k,s} = \int_0^\infty dt\, e^{t(-\epsilon + iL)} \frac{1}{ih} [H^\circ_{k,s}, \ldots]. \qquad /5.12/$$

Тогда

$$Q_{k,s} = \beta \sum_{nn'q} \omega^2 \Lambda^{-n}(\vec{q}) \Lambda^{n'}(-\vec{q}) \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{t(\epsilon - i\omega)} (\Lambda_{k,s} T^n(q), T^{-n'}(-q,t)).$$

Эти выражения использовались в работах [8] для построения уравнений баланса подсистем кинетических и спиновых степеней свободы электронов при насыщении акустического спинового резонанса.

Литература

1. *А.Абрагам. Ядерный магнетизм. ИИЛ, Москва, 1963.*
2. *M.Gueron, I.Solomon. Phys.Rev.Lett., 15, 667 /1965/.*
3. *Х.М.Биккин, Й.П.Влахов, В.П.Калашников. ФТТ, 15, 2791 /1973/.*
4. *W.Clark, G.Feher. Phys.Rev.Lett., 10, 134 /1963/.*
5. *Д.Н.Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. "Наука", Москва, 1971.*
6. *В.П.Калашников. ТМФ, 9, 94 /1971/.*
7. *R.Kubo. Journ.Phys.Soc.Japan, 12, 570 /1957/.*
8. *Й.П.Влахов, В.П.Калашников. Сообщения ОИЯИ, Р4-7709, Р4-8923, Р4-8924, Дубна, 1975.*

Рукопись поступила в издательский отдел 16 февраля 1976 года.