объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P5-87-528

А.М.Курбатов*, В.Н.Нескоромный

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ В ТЕОРИИ ТОЧНО РЕШАЕМОЙ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА ТИПА KDP

Направлено в журнал "Ferroelectrics"
и в Оргкомитет III Советско-итальянского
симпозиума по математическим проблемам
статистической физики, Италия, 27 июня-5 июля 1987 г.

*Математический институт АН СССР, Москва

1987

Одной из основных задач неравновесной статистической механики является получение макроскопических кинетических уравнений для модельных систем исходя из микроскопической гамильтоновой динамики составляющих эти системы частиц. При изучении вопросов о происхождении необратимости в макроскопической эволюции, стремлении систем к равновесному состоянию, возникновению хаоса в детерминированных системах и т.п., большую роль играют открытые системы, взаимодействующие с термостатом. В общем случае для произвольной динамической системы S, взаимодействующей с термостатом Σ, гамильтониан имеет вид /1/:

$$H(t,S,\Sigma)=\Gamma(S)+H(\Sigma)+H_{int}(t,S,\Sigma). \tag{1}$$

Отличительной чертой точного эволюционного уравнения для приведенного статистического оператора системы S, определяемого как

$$\rho_t(S)=Sp_{\Sigma}\,\mathcal{D}_t(S,\Sigma), \tag{2}$$

является его немарковский вид. Эти уравнения, получаемые обычно методом проекционного оператора Цванцига /2/, либо методом Боголюбова исключения бозе-операторов термостата /3/, имеют очень сложную интегро-дифференциальную структуру и не поддаются решению в явном виде для большинства физически нетривиальных моделей. Поэтому весьма насущной является проблема построения марковских приближенных кинетических уравнений, оправданием чему служит тот факт, что большинство кинетических уравнений статистической механики, полученных полуфеноменологическим путем, являются марковскими уравнениями /4/.

Известно, что адекватной математической процедурой получения марковских уравнений в теории открытых систем является предел Ван Хова слабой связи с термостатом /5/. Доказательство корректности такого предела представляет собой сложную математическую проблему. Впервые такое доказательство было дано Дэвисом /6/ в рамках техники проекторов Цванцига. Одним из существенных пунктов, на котором базируется доказательство, является ограниченность по норме оператора взаимодействия $H_{int}(t,S,\Sigma)$. Это условие, справедливое в случае фермионного термостата, как правило, нарушается, если термостат описывается бозе-полем. А ведь для целого класса модельных систем, описываемых гамильтонианом (1), таких, как полярон, электрон-фононная система, модели лазера и сверхизлучения, термостатом является фононная или фотонная подсистемы, описываемые неограниченными по норме бозе-операторами.

Так, если мы выберем гамильтониан (I) в виде

$$\Gamma(S) = -2\Omega\sum_{j=1}^{N} S_j^x - \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij} S_i^z S_j^z ; \tag{3.1}$$

$$H(\Sigma) = \sum_k \omega_k b_k^+ b_k ; \tag{3.2}$$

$$H_{int}(S,\Sigma) = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=1}^{N}\sum_k g_k S_j^z (b_k + b_{-k}^+), \tag{3.3}$$

то получим модель Кобаяши[7] сегнетоэлектрика типа KDP; $\Gamma(S)$ представляет собой гамильтониан протонной подсистемы; каждый протон на связи находится в потенциале с двумя минимумами и описывается спином I/2; Ω – частота туннелирования между минимумами, J_{ij} – константа диполь-дипольного взаимодействия. Термостатом служит фононная подсистема, описываемая операторами рождения b_k^+ и уничтожения b_k; $H_{int}(S,\Sigma)$ отвечает взаимодействию протонной подсистемы с длинноволновыми оптическими фононами, при этом $\omega_{k=0} \neq 0$.

В работе[8] рассматривался вариант модели Кобаяши, в котором учитывалась только дальнодействующая часть диполь-дипольного взаимодействия протонов на связях, т.е. $J_{ij} = I/N$. Тогда, переходя к коллективным N-частичным операторам квазиспина

$$S_N^\alpha = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} S_j^\alpha , \quad \alpha = \{x, y, z\}, \tag{4}$$

можем переписать гамильтониан (3) в виде:

$$\Gamma(S) = -2\Omega N S_N^x - \frac{I}{2} N (S_N^z)^2 ; \tag{5.1}$$

$$H_{int}(S,\Sigma) = -\sqrt{N} S_N^z \sum_k g_k (b_k + b_{-k}^+). \tag{5.2}$$

В [8] методом аппроксимирующего гамильтониана Боголюбова /мл./[9] были найдены точные в термодинамическом пределе выражения для равновесных средних, а также получено уравнение для критической температуры фазового перехода в сегнетоэлектрическое состояние, характеризующееся ненулевым значением параметра порядка $z = \langle S_N^z \rangle$ при $N \to \infty$.

Данная работа посвящена выводу асимптотически при $N \to \infty$ точных в пределе Ван Хова кинетических уравнений для подсистемы протонов в двух-

ямном потенциале, взаимодействующих с оптическими фононами, находящимися в начальный момент времени в равновесном состоянии. Для случая бозонного термостата предел слабой связи с термостатом был получен в [10] и сформулирован в виде следующего утверждения:

Теорема. Пусть динамическая система S взаимодействует с термостатом Σ, причем взаимодействие линейно по бозе-операторам:

$$H(t,S,\Sigma) = \Gamma(S) + \sum_k \hbar\omega_k b_k^+ b_k + \lambda\sum_k \{C_k(t,S) b_k + C_k^+(t,S) b_k^+\}$$

и выполнены следующие условия:

а/ оператор $\Gamma(S)$ имеет только дискретный спектр;

б/ операторы $C_k(t,S)$ и $C_k^+(t,S)$ ограничены по норме;

в/ взаимодействие адиабатически "выключается" при $t \to -\infty$:

$$C_k(t,S) = \begin{cases} e^{\varepsilon t} C_k(S), & t \le 0 ; \\ C_k(S), & t > 0 , \quad (\varepsilon > 0) ; \end{cases}$$

г/ статистический оператор $\mathcal{D}_t$ при $t = t_0$ удовлетворяет начальным условиям вида:

$$\mathcal{D}_{t_0} = \rho(S) \otimes \mathcal{D}_{eq}(\Sigma), \quad Sp_S\, \rho(S) = 1,$$

$$\mathcal{D}_{eq}(\Sigma) = Z_\Sigma^{-1} \exp\{-\beta H(\Sigma)\}, \quad Z_\Sigma = Sp_\Sigma \exp\{-\beta H(\Sigma)\}.$$

Тогда точное эволюционное уравнение для приведенного статистического оператора $\rho_t(S)$ в пределе $\lambda \to 0$, $\lambda^2 t = \tau = const$ переходит в уравнение марковского типа.

Обозначив $\{Q_\alpha\}$ набор проекторов на собственные состояния оператора $\Gamma(S)$ с собственными энергиями $\{E_\alpha\}$ и вводя частоты $\Omega_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)$, для гейзенберговской эволюции оператора $A(S)$ по свободному гамильтониану $\Gamma(S)$ можем записать:

$$\widetilde{A}(S_t) = \sum_{\alpha\alpha'} Q_\alpha A(S) Q_{\alpha'} e^{i\Omega_{\alpha\alpha'} t} .$$

Обозначив далее c-числовые функции температуры термостата

$$N_k = (\exp(\beta\hbar\omega_k) - 1)^{-1},$$

для произвольного ограниченного оператора $f(S)$ системы S имеем эволюционное уравнение марковского типа:

$$Sp_S\, f(S)\frac{\partial}{\partial\tau}\rho_\tau(S) =$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_{k}\sum_{\alpha\beta}\frac{i}{\omega_k-\Omega_{\alpha\beta}-i\varepsilon}\, Sp_S\{N_k Q_\beta C_k^+(S)Q_\alpha[f(S);c_k(S)]+$$

$$+(1+N_k)[C_k(S);f(S)]Q_\beta C_k^+(S)Q_\alpha\}\rho_\tau(S)+$$

$$+\frac{1}{\hbar^2}\sum_{k}\sum_{\alpha\beta}\frac{i}{\omega_k-\Omega_{\alpha\beta}+i\varepsilon}\, Sp_S\{(1+N_k)Q_\alpha C_k(S)Q_\beta[f(S);c_k^+(S)]+$$

$$+N_k[C_k^+(S);f(S)]Q_\alpha C_k(S)Q_\beta\}\rho_\tau(S). \qquad (6)$$

Поскольку для модели (5) условия а/ – г/ выполнены, нам необходимо только определить спектр и вычислить эволюцию интенсивных операторов типа (4) по гамильтониану $\Gamma(S)$ (5.I).

Уравнения движения Гейзенберга для гамильтониана (5.I) имеют вид:

$$\begin{cases} \dot S_N^x(t) = \frac{I}{2}\left(S_N^z(t)S_N^y(t)+S_N^y(t)S_N^z(t)\right); \\ \dot S_N^y(t) = 2\Omega S_N^z(t) - \frac{I}{2}\left(S_N^z(t)S_N^x(t)+S_N^x(t)S_N^z(t)\right); \\ \dot S_N^z(t) = -2\Omega S_N^y(t). \end{cases} \qquad (7)$$

Решить операторные уравнения (7) точно не удается. Обычно работают в рамках определенных приближений, наиболее употребительным из которых является приближение хаотических фаз /II/. Согласно этому приближению, вектор квазиспина прецессирует вокруг вектора молекулярного поля, определяемого из термодинамических соображений, а частота прецессии определяется исходя из условия совместности уравнений типа (7).

В данной работе исследована эволюция, задаваемая системой уравнений (7), в пределе $N\to\infty$. При этом нам необходимо иметь в виду, что только в случае дискретного спектра мы можем пользоваться эволюционным уравнением (6), что, как будет видно ниже, не имеет места в переходной области от пара- к сегнетоэлектрическому состоянию.

Воспользуемся тем фактом, что все коммутаторы интенсивных операторов $[S_N^\alpha; S_N^\beta]\sim O(\frac{1}{N})$. Определим /I2/ последовательность ρ_N макроскопических относительно S_N^α состояний согласно следующему условию:

$$\lim_{N\to\infty} Sp\prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N = \prod_{i=1}^{n} S^{\alpha_i}, \qquad (8)$$

где

$$S^\alpha = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^\alpha,$$

а σ_j^α – некоторые c-числовые функции узла решетки j.

Один из способов реализации такой последовательности макроскопических состояний приведен в работе /I2/, где принято $\rho_N = \tilde{\bigotimes}_{j=1}\rho_j$ / ρ_j – матрица плотности в $\mathbb{C}^2$ /. Тогда можно записать:

$$Sp\prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N = \frac{1}{N^n}\sum_{j_1\ldots j_n=1}^{N} Sp\, S_{j_1}^{\alpha_1}\ldots S_{j_n}^{\alpha_n}\rho_N =$$

$$= \frac{1}{N^n}\sum_{\substack{j_1\ldots j_n=1\\(\forall j_k\neq j_l)}}^{N} Sp\, S_{j_1}^{\alpha_1}\ldots S_{j_n}^{\alpha_n}\rho_N + \frac{1}{N^n}\sum_{\substack{j_1\ldots j_n=1\\(\exists j_k=j_l)}}^{N} Sp\, S_{j_1}^{\alpha_1}\ldots S_{j_n}^{\alpha_n}\rho_N,$$

где во второй сумме совпадает хотя бы пара индексов. В силу ограниченности средних $Sp\, S_{j_1}^{\alpha_1}\ldots S_{j_n}^{\alpha_n}\rho_N$ имеем оценку для второй суммы $O(N^{n-1})$, следовательно,

$$Sp\prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N = \prod_{i=1}^{n}\left[\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} Sp\, S_j^{\alpha_j}\rho_j\right] + O\left(\frac{1}{N}\right) = \prod_{i=1}^{n} S^{\alpha_i} + O\left(\frac{1}{N}\right).$$

Устремив $N\to\infty$, получим условие (8).

Для модели с гамильтонианом (5.I) справедливо следующее

Предложение. Если ρ_N – последовательность макроскопических относительно S_N^α состояний, тогда $\rho_N(t)$, эволюционирующая в соответствии с гамильтонианом $\Gamma(S)$. (5.I) – также последовательность макроскопических состояний. Более того, в представлении Гейзенберга,

$$Sp\prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}(t_i)\rho_N = \prod_{i=1}^{n} S^{\alpha_i}(t_i), \qquad (9)$$

где $S^{\alpha_i}(t)$ удовлетворяют системе уравнений (7) с заменой операторов на c-числовые функции и начальным условиям, отвечающим (8).

Доказательство. Воспользуемся вспомогательным утверждением, доказанным в /I2/: пусть $F(S_N)=\sum_{n=0}^{\infty} c_n\prod_{i=0}^{n} S_N^{\alpha_i}$ – функция S_N, определяемая равномерно по N сходящимся рядом. Тогда $\lim_{N\to\infty} Sp\, F(S_N)\rho_N = F(S)$.

Действительно,

$$Sp\, F(S_N)\rho_N - F(S) = \sum_{n=0}^{M} c_n\left\{Sp\prod_{i=0}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N - \prod_{i=0}^{n} S^{\alpha_i}\right\} +$$

$$+\operatorname{Sp}\sum_{n=M+1}^{\infty} c_n \prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N - \sum_{n=M+1}^{\infty} c_n \prod_{i=1}^{n} S^{\alpha_i}.$$

Для последних слагаемых справедлива оценка:

$$\Big|\operatorname{Sp}\sum_{n=M+1}^{\infty} c_n \prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N\Big| \leq \Big\|\sum_{n=M+1}^{\infty} c_n \prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\Big\| \leq \sum_{n=M+1}^{\infty} |c_n|$$

и, выбирая M достаточно большим, мы можем сделать их сколь угодно малыми равномерно по N. Первое же слагаемое в пределе $N\to\infty$ стремится к нулю согласно (8).

Разложим решения уравнений Гейзенберга (7) в ряд Тейлора по t:

$$S_N^{\alpha}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!}\, S_N^{\alpha(n)}\Big|_{t=0},$$

сходящийся равномерно по N в силу непрерывности и ограниченности равномерно по N всех производных $S_N^{\alpha(n)}(t)$. Из уравнений (7) далее следует, что n-я производная $S_N^{\alpha(n)}(t)$ представляет собой полином $S_N^{\alpha_i}(t)$ степени $n+1$, т.е. мы можем записать:

$$S_N^{\alpha(n)}(t) = \sum_{k=1}^{n+1} a_k \prod_{i=1}^{k} S_N^{\alpha_i}(t).$$

Подставляя выражение для производной в ряд Тейлора, получим равномерно по N сходящийся ряд

$$S_N^{\alpha}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i},$$

что для любых конечных t в силу вспомогательного утверждения ведет к

$$\lim_{N\to\infty} \operatorname{Sp} S_N^{\alpha}(t)\rho_N = \lim_{N\to\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)\operatorname{Sp}\prod_{i=1}^{n} S_N^{\alpha_i}\rho_N = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)\prod_{i=1}^{n} S^{\alpha_i} = S^{\alpha_i}(t).$$

Аналогично доказывается утверждение для многовременных средних (9).

Рассмотрим теперь эволюционное уравнение (6) при $\tau = 0$ и потребуем, чтобы $\rho_N(S)$ в начальный момент времени принадлежал последовательности макроскопических состояний. Тогда временную эволюцию операторов под знаком средних в пределе $N\to\infty$ можно заменить эволюцией, найденной из соответствующих квазиклассических уравнений движения. В нашем случае необходимо решить систему уравнений

$$\begin{cases} \dot S^{x}(t) = I S^{z}(t) S^{y}(t); \\ \dot S^{y}(t) = 2\Omega S^{z}(t) - I S^{z}(t) S^{x}(t); \\ \dot S^{z}(t) = -2\Omega S^{y}(t). \end{cases} \qquad (10)$$

Учитывая наличие двух независимых интегралов движения: энергии

$$-2\Omega S^{x}(t) - \frac{I}{2}[S^{z}(t)]^2 = E \qquad (11)$$

и полного спина

$$[S^{x}(t)]^2 + [S^{y}(t)]^2 + [S^{z}(t)]^2 = s^2, \qquad (12)$$

можно систему уравнений свести к единственному нелинейному дифференциальному уравнению для $S^{z}(t)$:

$$[\dot S^{z}(t)]^2 + \frac{I^2}{4}[S^{z}(t)]^4 + (4\Omega^2 + IE)[S^{z}(t)]^2 + E^2 - 4\Omega^2 s^2 = 0. \quad (13)$$

Соответствующее стационарное уравнение

$$\frac{I^2}{4} y^4 + (4\Omega^2 + IE) y^2 + E^2 - 4\Omega^2 s^2 = 0$$

имеет корни

$$y_1^2 = \frac{8}{I^2}\left(-4\Omega^2 - IE - 2\Omega\sqrt{4\Omega^2 + I(2E + Is^2)}\right);$$

$$y_2^2 = \frac{8}{I^2}\left(-4\Omega^2 - IE + 2\Omega\sqrt{4\Omega^2 + I(2E + Is^2)}\right).$$

Описание динамики, задаваемой уравнениями (10), можно существенно упростить, если ввести следующий интеграл движения:

$$\Delta^2 = \frac{1}{I^2}\left(4\Omega^2 + I(2E + Is^2)\right) = \left(S^{x}(t) - \frac{2\Omega}{I}\right)^2 + \left(S^{y}(t)\right)^2. \quad (14)$$

Тогда используя вместо E и s^2 интегралы движения Δ^2 и s^2, получим траекторию движения вектора спина как пересечение сферы (12) с цилиндром (14). Для y_1 и y_2 имеем теперь выражения:

$$y_1^2 = s^2 - \left(\frac{2\Omega}{I} + \Delta\right)^2; \qquad (15)$$

$$y_2^2 = s^2 - \left(\frac{2\Omega}{I} - \Delta\right)^2. \qquad (16)$$

В зависимости от начальных данных возможны 2 варианта пересечения сферы цилиндром:

а/ если $s > \frac{2\Omega}{I} + \Delta$, то траектория распадается на две несвязные части: $y_1 < S^z(t) < y_2$, либо $-y_2 < S^z(t) < -y_1$ /в зависимости от начальных условий/. Эту область параметров естественно связывать с сегнетоэлектрическим состоянием. В данной области имеются 2 неподвижные точки:

$$\vec{S}_1 = \left\{\frac{2\Omega}{I}, 0, S^z\right\} \quad \text{и} \quad \vec{S}_2 = \left\{\frac{2\Omega}{I} + \Delta, 0, 0\right\}. \tag{17}$$

При $\Delta \neq 0$ /т.е. $\vec{S}(t) \neq \vec{S}_1$ / решение уравнения (13) выражается через эллиптические функции Якоби:

$$S^z(t) = \pm y_2 \, dn\left(\frac{I}{2} y_2 t\right), \quad S^z(0) = \pm y_2 \tag{18.1}$$

с модулем

$$k = \frac{1}{y_2}\sqrt{y_2^2 - y_1^2} = \frac{2}{y_2}\sqrt{\frac{2\Omega\Delta}{I}} .$$

Для остальных компонент из (10) получим

$$S^x(t) = \frac{2\Omega}{I} + \Delta\left\{2\, sn^2\left(\frac{I}{2} y_2 t\right) - 1\right\}, \quad S^x(0) = \frac{2\Omega}{I} - \Delta; \tag{18.2}$$

$$S^y(t) = \pm 2\Delta\, sn\left(\frac{I}{2} y_2 t\right) cn\left(\frac{I}{2} y_2 t\right), \quad S^y(0) = 0. \tag{18.3}$$

Если отклонение Δ от стационарного состояния $\vec{S}_1$ мало, то $k \ll 1$, и эллиптические функции переходят в тригонометрические, отвечающие прецессии вектора квазиспина вокруг молекулярного поля, равного $\vec{S}_1$, однако движение при этом происходит не по круговым орбитам, а по эллиптическим. Обозначая $S^z_{st} = \pm\sqrt{s^2 - (2\Omega/I)^2}$, для которого в дальнейшем можно брать его термодинамическое значение, вычисленное в работе /8/, получим в первом порядке по Δ:

$$S^z(t) = S^z_{st} + \frac{2\Omega\Delta}{I S^z_{st}} \cos\tilde{\Omega} t;$$

$$S^x(t) = \frac{2\Omega}{I} - \Delta\cos\tilde{\Omega} t;$$

$$S^y(t) = \pm\Delta\sin\tilde{\Omega} t \tag{19}$$

с зависимостью частоты прецессии от амплитуды отклонения

$$\tilde{\Omega} = I\left(S^z_{st} + \frac{2\Omega\Delta}{I S^z_{st}}\right), \tag{20}$$

что при $\Delta \to 0$ переходит в формулу, полученную в приближении хаотических фаз.

Другой предельный случай $k = 1$ реализуется при $y_1 = 0$, тогда $y_2 = \sqrt{2}\, S^z_{st}$ и имеем экспоненциально релаксирующее к S_2 решение:

$$S^z(t) = \sqrt{2}\, S^z_{st} \operatorname{sech}\frac{t}{\tau};$$

$$S^x(t) = \frac{2\Omega}{I} + \Delta\left(1 - 2\operatorname{sech}^2\frac{t}{\tau}\right);$$

$$S^y(t) = \pm 2\Delta \operatorname{th}\frac{t}{\tau} \operatorname{sech}\frac{t}{\tau}, \tag{21}$$

где $\tau^{-1} = \frac{I}{\sqrt{2}} S^z_{st}$.

б/ $s < \frac{2\Omega}{I} + \Delta$. При этом $y_1^2 < 0$, и траектория становится односвязной: $-y_2 < S^z(t) < y_2$, движение – симметричным относительно инверсии $z \to -z$. Имеется только одно стационарное состояние $\vec{S}_2$. Эту область естественно считать параэлектрической. Для нее также имеем точное решение:

$$S^z(t) = y_2\, cn\sqrt{2I\Omega\Delta}\, t, \quad S^z(0) = y_2;$$

$$S^x(t) = -\frac{E}{2\Omega} - \frac{I y_2^2}{4\Omega} cn^2\sqrt{2I\Omega\Delta}\, t, \quad S^x(0) = \frac{2\Omega}{I} - \Delta;$$

$$S^y(t) = y_2\sqrt{\frac{I\Delta}{2\Omega}}\, sn\sqrt{2I\Omega\Delta}\, t\, dn\sqrt{2I\Omega\Delta}\, t, \quad S^y(0) = 0 \tag{22}$$

с модулем эллиптических функций

$$k = \frac{y_2}{\sqrt{y_2^2 - y_1^2}} = \frac{y_2\sqrt{I}}{2\sqrt{2\Omega\Delta}} .$$

Предельный случай $k = 1$ соответствует по-прежнему $y_1 = 0$ и имеет тот же вид, что и (21). Он разделяет области а/ и б/, являясь, таким образом, критической областью. Спектр гамильтониана $\Gamma(S)$ в этой области параметров при $N \to \infty$ переходит в непрерывный, нарушая условие а/ Теоремы. Это делает невозможным описание области фазового перехода марковским кинетическим уравнением типа (6), что вполне согласуется с положением о критическом замедлении релаксации в окрестности точки фазового перехода и существованием длинновременных релаксационных "хвостов", неучтенных в марковском приближении.

В окрестности стационарного состояния $\vec{S}_2$ модуль $k \ll 1$ снова, и вновь возможна аппроксимация в виде прецессирующего по эллипсу вектора квазиспина:

$$S^z(t)=m\cos\tilde{\Omega}t\ ;$$

$$S^x(t)=\frac{2\Omega}{I}-\Delta+O(m^2);$$

$$S^y(t)=m\sqrt{\frac{I\Delta}{2\Omega}}\sin\tilde{\Omega}t, \qquad (23)$$

где для частоты вращения получаем обычное выражение

$$\tilde{\Omega}^2=2I\Omega\Delta=2\Omega(2\Omega-I\langle S^x\rangle)+\frac{I^2}{4}m^2, \qquad (24)$$

отвечающее появлению "мягкой моды" при $\langle S^x\rangle\to\frac{2\Omega}{I}$.

Перед подстановкой найденных решений в эволюционное уравнение (6) необходимо разложить решения в ряд Фурье:

$$S^z(t)=\frac{Z_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}Z_n\cos\tilde{\Omega}_n t, \qquad (25)$$

где в случае а/:

$$Z_0=\pm\frac{\pi y_2}{K}\ ;\ Z_n=\pm\frac{2\pi y_2}{K}\cdot\frac{q^n}{1+q^{2n}}\ ;\ \tilde{\Omega}_n=\frac{Iy_2}{2K}\pi n, \qquad (26)$$

а в случае б/:

$$Z_0=0\ ;\ Z_n=\frac{4\pi}{K}\sqrt{\frac{2\Omega\Delta}{I}}\cdot\frac{q^{n-1/2}}{1+q^{2n-1}}\ ;\ \tilde{\Omega}_n=\frac{\sqrt{I\Omega\Delta}}{K\sqrt{2}}\pi(2n-1),$$

где $K=K(k)$ - полный эллиптический интеграл I-го рода и $q=\exp(-\pi\frac{K'}{K})$, $K'=K(k')=K(\sqrt{1-k^2})$.

Уравнение (6) для модели (5) перепишется в следующем виде:

$$Sp_{S}\, f_N(S)\frac{\partial}{\partial\tau}\tilde{\rho}_\tau(S)=$$

$$=-\sum_k|g_k|^2\sum_{\alpha\beta}\frac{i}{\omega_k-\Omega_{\alpha\beta}-i\varepsilon}\,Sp_S\{N_k Q_\beta S^z_N Q_\alpha[f_N(S);NS^z_N]+$$

$$+(1+N_k)[NS^z_N;f_N(S)]Q_\beta S^z_N Q_\alpha\}\tilde{\rho}_\tau(S)+$$

$$+\sum_k|g_k|^2\sum_{\alpha\beta}\frac{i}{\omega_k-\Omega_{\alpha\beta}+i\varepsilon}\,Sp_S\{(1+N_k)Q_\alpha S^z_N Q_\beta[f_N(S);NS^z_N]+$$

$$+N_k[NS^z_N;f_N(S)]Q_\alpha S^z_N Q_\beta\}\tilde{\rho}_\tau(S).$$

Введем далее следующие обозначения:

$$[f_N(S);NS^z_N]=iP_N\ ;$$

$$[P_N\ ;\ S^z_N]=\frac{i}{N}F'_N\ .$$

Тогда, учитывая (25), имеем

$$\lim_{N\to\infty}NSp[Q_\alpha S^z Q_\beta\ ;P_N]\rho_N=\lim_{N\to\infty}\frac{N\cdot Z_n}{2S^z}Sp[S^z_N;P_N]\rho_N=$$

$$=-\frac{iZ_n}{2S^z}F'_N \qquad \text{с}\ \ \Omega_{\alpha\beta}=\pm\tilde{\Omega}_n$$

и окончательно, после предельного перехода $N\to\infty$ и замены $\sum_k\ldots\to\frac{V}{(2\pi)^3}\int\ldots d^3k$ и $\varepsilon\to 0$, имеем марковское точное в пределе Ван Хова кинетическое уравнение для модели сегнетоэлектрика типа KDP:

$$\left.\frac{\partial f(\tau)}{\partial\tau}\right|_{\tau=0}=-\frac{VP}{(2\pi)^3}\int d^3k|g_k|^2\sum_{n=0}^{\infty}Z_n\cdot\frac{\omega_k}{\omega_k^2-\tilde{\Omega}_n^2}+$$

$$+\frac{\pi F'}{(2\pi)^3}\int d^3k\,|g_k|^2N_k\sum_{n=0}^{\infty}\frac{Z_n}{S^z}\delta(\omega_k-\tilde{\Omega}_n). \qquad (27)$$

Уравнение (27) описывает релаксацию интенсивной переменной протонной подсистемы в фононном термостате в представлении взаимодействия. Если $[f_N(S);\Gamma(S)]\neq 0$, то к нему необходимо добавить еще член, отвечающий невозмущенному движению. Первое слагаемое (27) соответствует процессам кооперативной релаксации; оно имеет место и во многих других моделях, описываемых многочастичными квазиспиновыми гамильтонианами, например, в модели сверхизлучения Дикке /I3/. Представляет большой интерес дальнейшее исследование этого уравнения, например получение из него в случае отсутствия когерентной релаксации и слабой неравновесности кинетических уравнений типа уравнений Блоха-Вангснесса /I4/ в теории сегнетоэлектриков.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боголюбов Н.Н. О стохастических процессах в динамических системах.- ЭЧАЯ, 1978, т.8, вып.4.
2. Zwanzig R.- Physica, 1964, v.30, p.1109.
3. Bogolubov N.N. Kinetic equation for the electron-phonon system. Communication JINR E17-11822.- Dubna, 1978.
4. Spohn H.- Rev.Mod.Phys., 1980, v.53, p.569.
5. Van Hove L.- Physica, 1957, v.23, p.441.
6. Davies E.B.- Commun.Math.Phys., 1974, v.39, p.91.
7. Kobayashi K.- J.Phys.Soc.Jap., 1968, v.24, p.497.
8. Курбатов А.М., Плечко В.Н.- ТМФ, т.26, с.109.
9. Боголюбов Н.Н./мл./ и др. Метод аппроксимирующего гамильтониана в статистической физике.- София: Изд-во БАН, 1981.
10. Bogolubov N.N. Jr., Kurbatov A.M., Neskoromnyi V.N. The Van Hove weak coupling limit in the theory of open systems interacting with boson heat bath. Preprint NIP 86-16.- Diliman, 1986.
11. Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики.- М.: Мир, 1975.
12. Martin Ph.A., Buffet E.- J.Stat.Phys., 1978, v.18, p.585.
13. Боголюбов Н.Н./мл./, Казарян А.Р., Курбатов А.М., Нескоромный В.Н.- Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Д17-84-850, Дубна, 1984, с.96.
14. Wangsness R.K.- Phys.Rev., 1955, v.98, p.927.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 июля 1987 года.

Курбатов А.М., Нескоромный В.Н. Р5-87-528
Кинетические уравнения в теории точно решаемой модели сегнетоэлектрика типа KDP

Рассматривается вариант модели Кобаяши сегнетоэлектрика типа KDP с дальнодействием. Исследован вопрос о применимости предела Ван Хова слабой связи протонной подсистемы с фононным термостатом. В термодинамическом пределе $N \to \infty$ на основе свободной динамики макроскопических состояний протонной подсистемы получены точные в пределе Ван Хова кинетические уравнения марковского типа для произвольной интенсивной наблюдаемой протонной подсистемы.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Kurbatov A.M., Neskoromnyi N.N. P5-87-528
Kinetic Equations in the Theory of Exactly Solvable Model for KDP-Type Ferroelectrics

The long-range Kobayashi-type Hamiltonian for the KDP-type ferroelectrics is considéred. The application of the Van Hove weak coupling of protons to phonon heat bath limit is studied. On the basis of obtained in thermodynamical limit $N \to \infty$ free dynamics of microscopic states of proton subsystem the exact in Van Hove limit Markovian kinetic equations for an arbitrary intensive variable of proton subsystem are derived.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987