Изв. АН Армянской ССР, Физика, 15, 257—266 (1980)

О КИНЕТИКЕ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Т. К. МЕЛИК-БАРХУДАРОВ

Излагается метод, позволяющий описывать эволюцию открытых систем, т. е. систем, взаимодействующих с тепловым окружением (термостатом). В качестве модели термостата используется система независимых гармонических осцилляторов с начальными планковскими числами заполнений. Для простых моделей систем, испытывающих переход в конденсированную фазу, найдены уравнения, описывающие процесс установления теплового равновесия.

В настоящей работе с помощью метода, разработанного для описания поведения открытых систем, т. е. систем, слабо взаимодействующих с макроскопическим окружением (термостатом), на примере простых моделей исследуется кинетика систем, испытывающих переход в конденсированную фазу. В основе метода лежит представление о термостате как о системе независимых гармонических осцилляторов с начальными планковскими числами заполнений. Почти сплошной характер спектра термостата, обусловленный его макроскопичностью, в конечном итоге приводит к характерному для открытых систем необратимому поведению их в течение конечных интервалов времени.

Будем исходить из уравнения для статистического оператора полной системы, решение которого может быть представлено в виде

$$\mathrm{P}(t)=\mathrm{P}(0)-i\int_0^t U(t,\ t')\,[V^{\mathrm{T}},\ \mathrm{P}(0)]_-\,U(t',\ t)\,dt', \tag{1}$$

$U(t,\ t')$ — оператор эволюции полной системы, удовлетворяющий уравнению

$$\left(i\frac{d}{dt}-H\right)U(t,\ t')=0,\ H=H_0+V^{\mathrm{T}}+H^{\mathrm{T}}$$

с начальным условием $U(t,\ t)=1$, H^{T} — гамильтониан термостата, V^{T} — оператор взаимодействия его с исследуемой системой, зависимость которого от переменных термостата предполагается в дальнейшем линейной:

$$V^{\mathrm{T}}=\sum_{\mathbf{q}}(b_{\mathbf{q}}\,C_{\mathbf{q}}+b_{\mathbf{q}}^{+}\,C_{\mathbf{q}}^{+}),$$

$\mathrm{P}(0)$—начальное значение статистического оператора всей системы, выбираемое в виде $\mathrm{P}(0)=\rho(0)\rho_{\mathrm{T}}$, где $\rho(0)$—произвольное, но диагональное в представлении невозмущенного гамильтониана распределение исследуемой системы, удовлетворяющее условию нормировки

$$\sum_n \rho_n(0) = 1.$$

Переходя в (1) к представлению взаимодействия по термостату

$$U(t, t') = \exp(-iH^{\mathrm{T}}t)\,\hat{U}(t, t')\exp(iH^{\mathrm{T}}t')$$

и вводя опережающую и запаздывающую функции Грина с помощью соотношений

$$G^R(t, t') = \begin{cases} -i\hat{U}(t, t') & \text{при } t > t' \\ 0 & \text{при } t < t', \end{cases}$$

$$G^A(t, t') = \begin{cases} 0 & \text{при } t > t' \\ i\hat{U}(t, t') & \text{при } t < t', \end{cases}$$

для приведенной матрицы плотности $\rho(t) = \mathrm{Tr}_b\, \mathrm{P}(t)$ получим уравнение

$$\rho_n(t) = \sum_{n'} \rho_{n'}(0)\, P_{n'n}(t), \tag{2}$$

где вероятностная матрица P определяется соотношением

$$P_{n'n} = \delta_{nn'} - i\sum_{n''}\int \Big\langle G^A_{n'n}(t', t)\, G^R_{nn''}(t, t')\, V^{\mathrm{T}}_{n''n'}(t') -$$

$$- V^{\mathrm{T}}_{n'n''}(t')\, G^A_{n''n}(t', t)\, G^R_{nn'}(t, t') \Big\rangle dt', \tag{3}$$

$$\langle \cdots \rangle = \mathrm{Tr}_b\{\rho_{\mathrm{T}} \cdots\}.$$

Будем вычислять P по теории возмущений. Разлагая входящие в (3) гриновские функции по константе связи с термостатом с помощью уравнения

$$G(t, t') = G^{(0)}(t, t') + \int G^{(0)}(t-t')\, V^{\mathrm{T}}(t'')\, G(t'', t')\, dt''$$

и используя теорему Вика для среднего по тепловому распределению от произведения произвольного числа бозонных операторов, придем к диаграммной форме теории возмущений.

Некоторые из получающихся диаграмм изображены на рис. 1, где сплошным линиям соответствуют усредненные гриновские функции

$$\langle G_{nn'}(t, t') \rangle = \frac{\delta_{nn'}}{2\pi}\int g_n(\varepsilon)\, e^{-i\varepsilon(t-t')}\, d\varepsilon, \tag{4}$$

а пунктирным линиям — термостатные функции

$$\langle V^{\mathrm{T}}_{nn'}(t)\, V^{\mathrm{T}}_{n'n}(t') \rangle = \frac{1}{2\pi}\int D_{nn'}(\varepsilon)\, e^{-i\varepsilon(t-t')}\, d\varepsilon,$$

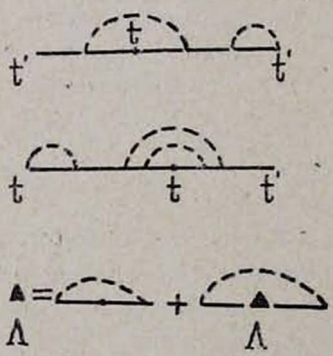

Рис. 1.

$$D_{nn'}(\varepsilon) = 2\pi \sum_{q} [|C^{q}_{nn'}|^2 (N_q + 1)\,\delta(\varepsilon - \omega_q) + |C^{q}_{n'n}|^2 N_q\,\delta(\varepsilon + \omega_q)], \quad (5)$$

$$N_q = \left[\exp\left(\frac{\omega_q}{T}\right) - 1\right]^{-1}.$$

Вычисляя собственно-энергетическую часть, для $g_n(\varepsilon)$ получаем

$$\left(g^{A\,(R)}_{n\,(\varepsilon)}\right)^{-1} = \varepsilon - E_n - \sum\nolimits^{A\,(R)}_{n}, \quad \sum\nolimits^{A\,(R)}_{n} = (\overset{+}{-})\,\frac{i}{2}\gamma_n,$$

$$\gamma_n = \sum_{n'} \gamma^{n'}_{n}, \quad \gamma^{n'}_{n} = D_{nn'}(E_n - E_{n'}). \quad (6)$$

Из вида диаграмм для P нетрудно видеть, что интегрирование по t' при $t \geqslant 1/\gamma_n$ компенсирует малость параметра связи, что приводит к необходимости суммирования «лестницы» диаграмм, в результате чего вероятностная матрица выражается через вершинную функцию:

$$P_{n'n}(t) = \frac{1}{2\pi}\int d\chi\, e^{-i\chi t}\left(\frac{\Lambda_{n'n} + \delta_{n'n}}{\gamma_{n'} - i\chi}\right). \quad (7)$$

$\Lambda_{n'n}$, в свою очередь, удовлетворяет уравнению, диаграммная форма которого представлена на рис. 1, а аналитический вид следующий:

$$\Lambda_{n'n} = \sum_{n''} \gamma^{n''}_{n}\left(\frac{\delta_{n''n} + \Lambda_{n''n}}{\gamma_{n''} - i\chi}\right). \quad (8)$$

Для двухуровневой системы подробное рассмотрение получающихся уравнений проведено в [1].

С помощью (7) и (8) нетрудно получить, что вероятностная матрица удовлетворяет уравнению Колмогорова

$$\frac{dP_{n'n}}{dt} = \sum_{n''} A_{n'n''} P_{n''n} \quad (9)$$

либо

$$\frac{d}{dt} P_{n'n} = \sum_{n''} P_{n'n''} A_{n''n}, \quad A_{n'n} = \gamma^{n}_{n'} - \gamma_{n'}\,\delta_{nn'}$$

с начальным условием

$$P_{n'n}(0) = \delta_{n'n}. \quad (10)$$

Из общей теории таких процессов известно, что предельное распределение не зависит от начального. Нетрудно убедиться, что при $\gamma^{n'}_{n}$ из (6), которые отличны от нуля лишь для переходов между ближайшими, соседними уровнями (процесс «гибели и рождения»), возникающее распределение при температуре термостата является каноническим. Этот же результат имеет место, если можно классифицировать спектр системы по термам, состоящим из произвольного числа компонент с максимальной разностью уровней внутри каждого терма, меньшей температуры термостата, и ограничиться переходами между ближайшими термами.

Перейдем к рассмотрению самого процесса установления теплового равновесия на примере систем, допускающих фазовый переход, простейшей из которых является модель Изинга сильно анизотропного ферромагнетика.

Запишем гамильтониан этой модели в несколько более общем, чем это обычно принято, виде

$$H = 2\sum_{k} \xi_{\mathbf{k}} s_k^z - \frac{1}{2\nu}\sum_{kk'} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} s_k^z s_{k'}^z,$$
$$k = (\mathbf{k}, \varkappa),\ \varkappa = 1,\ 2, \cdots \nu. \tag{11}$$

Мы считаем, что систему спинов можно распределить по ячейкам, так что изменением магнитного поля $2\xi_{\mathbf{k}}$ и обменного интеграла $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ внутри каждой ячейки можно пренебречь, ν — число спинов в ячейке.

Разобьем теперь все состояния системы (11) на «макросостояния» (термы), энергия которых задается указанием совокупности значений проекций полных моментов ячеек $(\cdots M_{\mathbf{k}} \cdots)$:

$$S_{\mathbf{k}}^z = \sum_{\varkappa} s_{\mathbf{k}}^z,\ S_{\mathbf{k}}^z = M_{\mathbf{k}} = \nu/2,\ \nu/2-1, \cdots, -\nu/2,$$

каждое из которых состоит из $\prod_k \binom{\nu}{\frac{\nu}{2}+M_k}$ состояний („микросостояний").

Рассмотрим сначала релаксационный процесс при операторе взаимодействия с термостатом вида

$$C_{\mathbf{q}} = \sum_{k} c_k^{\mathbf{q}} s_k^+.$$

Вычисляя параметры $\gamma_{n,\alpha_n}^{n',\alpha_{n'}}$, легко заметить, что $\gamma_n^{n'} = \sum_{\alpha_{n'}} \gamma_{n,\alpha_n}^{n',\alpha_{n'}}$ не зависит от α_n (через α_n обозначены состояния, составляющие соответствующее n-„макросостояние"). Независимость $\gamma_n^{n'}$ от начального состояния означает, что процесс можно „укрупнить", т. е. следить за поведением во времени только величины $\rho_n = \sum_{\alpha_n} \rho_{n,\alpha_n}$. Возвращаясь к первоначальным обозначениям макросостояний, для $\rho(\cdots M_{\mathbf{k}} \cdots)$ имеем уравнение

$$\frac{d}{dt}\rho(\cdots M_{\mathbf{k}} \cdots) = \sum_{\mathbf{k}'} \{\gamma_{M_{\mathbf{k}'}+1}^{M_{\mathbf{k}'}} \rho(\cdots M_{\mathbf{k}'}+1 \cdots) +$$
$$+ \gamma_{M_{\mathbf{k}'}-1}^{M_{\mathbf{k}'}} \rho(\cdots M_{\mathbf{k}'}-1 \cdots) - \gamma_{M_{\mathbf{k}'}}^{M_{\mathbf{k}'}+1} \rho(\cdots M_{\mathbf{k}'} \cdots) - \tag{12}$$
$$- \gamma_{M_{\mathbf{k}'}}^{M_{\mathbf{k}'}+1} \rho(\cdots M_{\mathbf{k}'} \cdots)\}$$

с релаксационными параметрами

$$\gamma_{M_k}^{M_k+1} = \left(\frac{\nu}{2} - M_k\right)\gamma_k\left(-\varepsilon_k + \frac{J_{kk}}{2\nu}\right),$$

$$\gamma_{M_k}^{M_k-1} = \left(\frac{\nu}{2} + M_k\right)\gamma_k\left(\varepsilon_k + \frac{J_{kk}}{2\nu}\right),$$

$$\gamma_k(\varepsilon) = (N_\varepsilon + 1)\, 2\pi \sum_q |c_k^q|^2 [\delta(\varepsilon - \omega_q) - \delta(\varepsilon + \omega_q)], \tag{13}$$

$$\varepsilon_k = 2\xi_k - \frac{1}{\nu}\sum_{k''} J_{kk''} M_{k''}, \quad N_\varepsilon = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon}{T}\right) - 1\right]^{-1}.$$

Для среднего момента k-ячейки из (12) и (13) имеем

$$\frac{d}{dt}\langle S_k^z\rangle = \left\langle\left(\frac{\nu}{2} - S_k^z\right)\gamma_k\left(-\hat{\varepsilon}_k + \frac{J_{kk}}{2\nu}\right) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{\nu}{2} + S_k^z\right)\gamma_k\left(\hat{\varepsilon}_k + \frac{J_{kk}}{2\nu}\right)\right\rangle, \tag{14}$$

$$\hat{\varepsilon}_k = 2\xi_k - \frac{1}{\nu}\sum_{k''} J_{kk''} S_{k''}^z.$$

Здесь символ $\langle\cdots\rangle$ используется для обозначения среднего по распределению в момент t.

Уравнения вида (12) были постулированы Глаубером [2], а релаксационные параметры были определены из принципа детального равновесия выбором наиболее простейшего их вида. Поскольку уравнение (12) нами было получено из микроскопической теории, величина γ может быть найдена без привлечения дополнительных предположений:

$$\gamma_k(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2\alpha_k}\left(1 + \operatorname{cth}\frac{\varepsilon}{2T}\right), \quad \frac{1}{\alpha_k} = \frac{|c_k^q|^2}{\pi}\, q\Big|_{q=\varepsilon}. \tag{15}$$

Кубо и Сузуки [3] решили уравнения работы [2] в приближении самосогласованного поля, т. е. предположив, что имеет место

$$\langle f(s_k^z)\rangle = f(\langle s_k^z\rangle),$$

где f — произвольная функция. Выясним конкретнее, что означает такого типа приближение.

Уравнение (12) с параметрами (15) имеет в качестве предельного решения каноническое распределение, так что равновесное значение k-ой ячейки определяется соотношением

$$\langle S_k^z\rangle_0 = \sum_{(\cdots M_k \cdots)} M_k \prod_{k'}\binom{\nu}{\frac{\nu}{2} + M_{k'}} e^{-E(\cdots M_{k'}\cdots)/T} \times$$

$$\times\left\{\sum_{(\cdots M_{k'}\cdots)}\prod_{k'}\binom{\nu}{\frac{\nu}{2} + M_{k'}} e^{-E(\cdots M_{k'}\cdots)/T}\right\}^{-1}. \tag{16}$$

Суммирование ведется по всем возможным значениям $\cdots M_{k'} \cdots$.

При $\nu = 1$ решение удается получить лишь в двухмерном случае с известными ограничениями на параметры модели (решение Онзагера), и поэтому обратимся к другому предельному случаю $\nu \gg 1$.

Вводя энтропию системы как логарифм числа состояний, входящих в данное макросостояние,

$$S(\cdots M_k \cdots) = \sum_k \ln \binom{\nu}{\nu/2 + M_k},$$

и определяя свободную энергию макросостояния $\nu F = E - TS$, для $\langle S_k^z \rangle_0$ получим соотношение

$$\langle S_k^z \rangle_0 = \int \cdots \int M_k \prod_{k'} dM_{k'} e^{-\nu F/T} \Big/ \int \cdots \int \prod_{k'} dM_{k'} e^{-\nu F/T}. \qquad (17)$$

В (17) выполнен переход от суммирования к интегрированию, поскольку где $\nu \gg 1$ существенные значения M_k велики и можно пренебречь их дискретностью. Используя метод перевала, находим $\langle S_k^z \rangle_0 = \nu m_k^0$ с $m_{k'}^0$, определяемой из уравнения

$$m_k^0 = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{1}{2T} \left(\sum_{k'} J_{kk'} m_{k'}^0 - 2\xi_k \right). \qquad (18)$$

В итоге получаем, что при $\nu \gg 1$ статистический оператор системы отбирает состояния, в которых значения M_k мало отличаются от их средних значений, другими словами, флюктуации S_k^z в пределе $\nu \gg 1$ обращаются в нуль в состоянии теплового равновесия. Мы сделаем предположение, что в релаксационном процессе система в основном проходит через состояния с малыми флюктуациями, например, будем считать, что система в каждый момент времени описывается каноническим распределением и релаксационный процесс заключается в изменении со временем ее температуры. При таком предположении для среднего момента имеем уравнение

$$\begin{gathered} -\alpha_k \frac{dm_k}{dt} = \varepsilon_k \left(1 + m_k \operatorname{cth} \frac{\varepsilon_k}{2T} \right), \\ \varepsilon_k = 2\xi_k - \sum_{k'} J_{kk'} m_{k'}, \end{gathered} \qquad (19)$$

которое вблизи критической температуры принимает вид уравнения Ландау—Халатникова с известным решением при $\xi_k = 0$:

$$\begin{gathered} \frac{1}{\mu_t^2} = -\frac{1}{3a} + \left(\frac{1}{\mu_0^2} + \frac{1}{3a} \right) \exp\left(\frac{2at}{\beta} \right), \quad \mu_t = \frac{mT_0}{T}, \\ a = \frac{T - T_0}{T}, \quad T_0 = \frac{1}{2} \sum_{k'} J_{kk'}, \quad \beta = \frac{\alpha}{2T_0}. \end{gathered} \qquad (20)$$

Вид уравнений релаксационного процесса, а следовательно, и его характер зависят от типа взаимодействия системы с термостатом. Рассмотрим, например, эволюцию системы (11) при взаимодействии с термостатом вида $C_q = N^{-1} \sum_{kk'} c^q_{kk'} s_k s_{k'}$. С помощью оператора перестановки $U_{kk'}$ представим

$$s_k s_{k'} = \frac{1}{2}\left(U_{kk'} - \frac{1}{2} \right), \quad U_{kk'} |\alpha>_k |\beta>_{k'} = |\alpha>_{k'} |\beta>_k.$$

Учитывая, что в релаксационном процессе принимают участие лишь переходы между разными состояниями, оператор V^T запишем в виде

$$V^T = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \varphi_{kk'} U_{kk'}, \quad \varphi_{kk'} = N^{-1} \sum_q (c^q_{kk'} b_q + c^{*q}_{k'k} b^+_q). \tag{21}$$

Замечая, что $U_{kk'}$ изменяет макросостояние системы только при $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, принадлежащих разным ячейкам, так что правила отбора имеют вид $\delta M_k = 0, \pm 1$, $\delta M_{k'} = -\delta M_k$, получаем для вероятностей переходов выражения

$$\gamma^{\delta M_k, \delta M_{k'}}_{M_k, M_{k'}} = \left(\frac{\nu}{2} - \delta M_k \cdot M_k \right) \left(\frac{\nu}{2} - \delta M_{k'} \cdot M_{k'} \right) \gamma_{kk'} [E(\cdots M_k \cdots M_{k'} \cdots) -$$
$$- E(\cdots M_k + \delta M_k \cdots M_{k'} + \delta M_{k'} \cdots)], \tag{22}$$

а вместе с ними уравнения для средней проекции момента

$$-\frac{dm_k}{dt} = \sum_{k'} \left[\left(\frac{1}{2} + m_k \right) \left(\frac{1}{2} - m_{k'} \right) \gamma_{kk'} (\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) - \right.$$
$$\left. - \left(\frac{1}{2} - m_k \right) \left(\frac{1}{2} + m_{k'} \right) \gamma_{kk'} (\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \right], \tag{23}$$

$$\varepsilon_k = 2\xi_k - \sum_{k''} J_{kk''} m_{k''}.$$

В заключение рассмотрим эволюцию системы, описываемой гамильтонианом

$$H = \sum_k 2\xi_k S^z_k - \frac{1}{2\nu} \sum_{kk'} J_{kk'} S^\perp_k S^\perp_{k'},$$
$$(S^\perp_k)^2 = (S_k)^2 - (S^z_k)^2, \tag{24}$$

при операторе взаимодействия с термостатом (21).

О происхождении этой модели, имеющей отношение к гамильтониану однородного сверхпроводника, мы поговорим в конце статьи, а сейчас отметим, что макросостояние системы задается указанием как проекции момента, так и полного момента каждой ячейки.

Нетрудно найти правила отбора для матричных элементов. Для этого прежде всего заметим, что полная группа симметрии оператора квадрата момента системы ν спинов есть $SU(2) \times \pi_\nu$, где π_ν — симметрическая

группа ν-го порядка, так что векторы состояний преобразуются по неприводимым представлениям этой группы. Размерность соответствующего представления этой группы определяет кратность вырождения состояния с определенными M и S:

$$G(S)=\frac{\nu!\,(2S+1)}{\left(\frac{\nu}{2}+S+1\right)!\left(\frac{\nu}{2}-S\right)!}.$$

Поскольку оператор перестановки, действуя на спины, входящие только в одну ячейку, не меняет значений M и S, необходимо рассматривать матричные элементы с k и k' из разных ячеек. Выяснив, по какому представлению преобразуется оператор $U_{kk'}$, мы с помощью формулы Эккарта—Вигнера определим правила отбора. Полный анализ хотя и не сложен, но длителен, поэтому мы ограничимся приведением результатов:

$$\begin{gathered}\delta S_k=0,\ \pm 1,\ \delta S_{k'}=0,\ \pm 1,\\ \delta M_k=-\delta M_{k'}=0,\ \pm 1.\end{gathered}\tag{25}$$

Непосредственное вычисление матричных элементов при произвольных ν не представляется возможным ввиду отсутствия общих формул для ортонормированных векторов $|S,\ M>$. Мы приведем выражения для γ, полученные вычислением при $\nu\leqslant 5$ с последующей экстраполяцией их в область больших ν:

$$\begin{gathered}\gamma_{S_k,\,S_{k'}}^{\delta S_k,\,\delta S_{k'}}=(16\,S_k^2\,S_{k'}^2)^{-1}f_{S_k}^{\delta S_k}f_{S_{k'}}^{\delta S_{k'}}\gamma_{kk'}(\varepsilon_{kk'}),\ \mathbf{S}_k=(M_k,\ S_k),\\ \varepsilon_{kk'}=-2\,\xi_k\,\delta M_k-2\,\xi_{k'}\,\delta M_{k'}+\delta S_k^{\perp}\Delta_k+\delta S_{k'}^{\perp}\Delta_{k'},\\ \Delta_k=\frac{1}{\nu}\sum_{k'}J_{kk'}\,S_{k'}^{\perp},\\ f_S^{\delta S}=\begin{cases}(\nu/2-S\delta S)\,(M\delta M+S\delta S)^2 & \text{при } \delta S\neq 0,\ \delta M\neq 0\\ (\nu/2-S\delta S)\,(S^2-M^2) & \text{при } \delta S\neq 0,\ \delta M=0\\ \nu\,(S^2-M^2) & \text{при } \delta S=0,\ \delta M\neq 0\\ \nu M^2 & \text{при } \delta S=0,\ \delta M=0.\end{cases}\end{gathered}\tag{26}$$

При выводе соотношений (26) мы считали, что фаза $c_{kk'}^{q}$ при изменении k в пределах одной ячейки меняется быстро, так что по ней можно произвести усреднение.

Уравнения для изменяющихся со временем средних значений имеют вид

$$\frac{d}{dt}<S_k>=\sum_k\delta\,S_{k'}<\gamma_{S_k,\,S_{k'}}^{\delta S_k,\,\delta S_{k'}}>.\tag{27}$$

Предельное распределение системы при значениях γ из (26) является каноническим и равновесные значения $<S_k>_0$ можно определить ранее изложенным способом.

Составляя свободную энергию системы с энтропией

$$S=\sum_k \ln \frac{\nu!\,(2\,S_k+1)}{\left(\frac{\nu}{2}+S_k+1\right)!\left(\frac{\nu}{2}-S_k\right)!},$$

для стационарных точек находим уравнения

$$\frac{\partial F}{\partial s_k^{\perp}}=-\sum_{k'} J_{kk'}\, s_{k'}^{\perp}+T\ln\frac{\left(\frac{1}{2}+s_k\right)}{\left(\frac{1}{2}-s_k\right)}\cdot\frac{s_{k\perp}}{s_k}=0,$$

$$\frac{\partial F}{\partial s_k^{z}}=2\,\xi_k+T\ln\left(\frac{\frac{1}{2}+s_k}{\frac{1}{2}-s_k}\right)\cdot\frac{s_k^{z}}{s_k}=0,$$

$$s_k=\frac{1}{2}\,\mathrm{th}\,\frac{E_k}{T},\quad s_k^{z}=-\frac{\xi_k}{E_k}\,s_k,\quad s_{k\perp}=\frac{\Delta_k}{E_k}\,s_k, \tag{28}$$

$$\Delta_k=\sum_{k'} J_{kk'}\, s_{k'\perp},\quad E_k=\sqrt{\xi_k^2+\Delta_k^2}\,.$$

Наконец, рассмотрим вопрос о происхождении модели (24). Гамильтониан однородного сверхпроводника в форме Андерсона [4] может быть приведен к виду

$$H=2\sum_k \xi_k\,\tilde{S}_k^{z}-\frac{J}{\nu N}\left[\left(\sum_k \tilde{S}_k^{x}\right)^2+\left(\sum_k \tilde{S}_k^{y}\right)^2\right]. \tag{29}$$

Здесь уже произведено разбиение на ячейки. Операторы $\tilde{S}_k^{x}$, $\tilde{S}_k^{y}$ и $\tilde{S}_k^{z}$ представляют собой суммы соответствующих «псевдоспинов». Суммирование по $\mathbf{k}$ во втором члене (29) проводится по области значений импульсов электронов, в которой энергия электронов, отсчитанная от фермиевской энергии, меньше дебаевской частоты фононов.

Произведем в гамильтониане замену $\left(\sum_k \tilde{S}_k^{\perp}\right)^2\to\sum_{kk'}\tilde{S}_{k\perp}\,\tilde{S}_{k'\perp}$ и рассмотрим получившуюся форму

$$H=2\sum_k \xi_k\,\tilde{S}_k^{z}-\frac{J}{\nu N}\sum_{kk'}\tilde{S}_{k\perp}\,\tilde{S}_{k'\perp}. \tag{30}$$

Вместе с формулой для кратности состояний

$$G=\prod_k \frac{2\,(2\,\nu+1)\,(2\,S_k+1)}{(\nu+2\,S_k+2)!\,(\nu-2\,S_k)!}$$

методом перевала можно вычислить равновесные значения величин s_k^{z} и $s_k^{\perp}$:

$$s_k^{z}=-\frac{\xi_k}{E_k}\,s_k,\quad s_{k\perp}=\frac{\Delta}{E_k}\,s_k,\quad s_k=\mathrm{th}\,\frac{E_k}{2T},$$

$$\Delta = \frac{J}{2N} \sum_{k} \frac{\operatorname{th} \frac{E_k}{2T}}{E_k}, \quad E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2},$$

которые совпадают с известными значениями, полученными в приближении самосогласованного поля. И поскольку в нашей картине мы представляем релаксационный процесс как изменение температуры системы, оба гамильтониана могут считаться тождественными.

В настоящей работе, интересуясь только общей картиной кинетики конденсированной фазы, мы для упрощения модели заменили «псевдоспин» спином.

НИИ физики конденсированных
сред ЕГУ, г. Ереван

Поступила 18.III.1980

ЛИТЕРАТУРА

1. *Т. К. Мелик-Бархударов.* ЖЭТФ, 75, 97 (1978).
2. *R. J. Glauber.* J. Math. Phys., 4, 294 (1963).
3. *M. Suzuki, R. Kubo.* J. Phys. Soc. Jap., 24, 51 (1968).
4. *P. W. Anderson.* Phys. Rev., 112, 1900 (1958).

ԿՈՆԴԵՆՍԱՑՎԱԾ ՍԻՍՏԵՄՆԵՐԻ ԿԻՆԵՏԻԿԱՅԻ ՎԵՐԱԲԵՐՅԱԼ

Թ. Կ. ՄԵԼԻՔ-ԲԱՐԽՈՒԴԱՐՈՎ

Աշխատանքում շարադրվում է մեթոդ, որը հնարավորություն է տալիս նկարագրել թերմոստատի հետ փոխազդող սիստեմների (բաց սիստեմների) էվոլյուցիան։ Մեթոդը հիմնված է խոտորումների տեսության դիագրամմային ձևի վրա և որպես թերմոստատի մոդել օգտագործում է սկզբնական մոմենտում ըստ կանոնիկ անսամբլի բաշխված հարմոնիկ օսցիլյատորների սիստեմը։

ON THE KINETICS OF CONDENSED SYSTEMS

T. K. MELIK-BARKHUDAROV

The method is presented for description of the evolution of open systems, i. e. systems interacting with thermal surroundings (heat bath). The model of heat bath is the assembly of independent, harmonic oscillators initially distributed according to the canonical ensemble. The equation describing the relaxation process of some simple models of condensed systems is given.