**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА**
Том 4, № 2
август
1970

КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ СИСТЕМЫ В ТЕРМОСТАТЕ

К. Валясек, А. Л. Куземский

Выводятся кинетические уравнения для системы в термостате. Показано, что член столкновений имеет такой же вид, как в обобщенных кинетических уравнениях для системы с малым взаимодействием. Получены уравнения типа Редфилда для спиновой матрицы плотности и основное кинетическое уравнение (master equation). В качестве примера рассмотрена продольная ядерная спин-решеточная релаксация и получено соотношение Гортера. В работе используется метод неравновесного статистического оператора Д. Н. Зубарева.

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая статья посвящена исследованию релаксационных процессов в двух слабо взаимодействующих подсистемах, одна из которых находится в неравновесном состоянии, а другая играет роль термостата. Нас будет интересовать задача получения кинетических уравнений для некоторого набора средних, характеризующих неравновесное состояние системы. Как известно, обобщенные кинетические уравнения, т. е. уравнения для некоторого набора средних (например, средних от операторов чисел заполнения спинов и т. п.), описывающих неравновесное состояние системы с малым взаимодействием, были получены С. В. Пелетминским и А. А. Яценко [1] и другим методом Л. А. Покровским [2]. Задача о системе в термостате, подобная изучаемой здесь, рассматривалась в работе Л. А. Покровского [3]. При этом предполагалось, что на неравновесную систему действует внешнее переменное поле.

При выводе кинетических уравнений мы пользуемся методом неравновесного статистического оператора, развитого в работах Д. Н. Зубарева [4, 5]. В следующем разделе рассматривается построение неравновесного статистического оператора и выводятся кинетические уравнения для системы в термостате. Показано, что выражение для члена столкновений имеет такую же форму, как и в обобщенных кинетических уравнениях в работах [1, 2], но отличается тем, что при усреднении в нем учтены состояния среды. В разделе 3 на основе полученных уравнений в определенном приближении выводятся уравнения, по структуре подобные уравнениям Редфилда [7] для спиновой матрицы плотности. Для частного случая получено основное кинетическое уравнение (master equation). В качестве примера в разделе 4 рассмотрена задача о продольной ядерной спин-решеточной релаксации и получено соотношение Гортера.

Отметим, что уравнения типа Редфилда с помощью метода неравновесного статистического оператора при учете внешнего переменного поля были получены в работе [3].

2. ПОСТРОЕНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА И ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим релаксацию малой подсистемы, помещенной в равновесную среду. Гамильтониан полной системы запишем в виде

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 + \mathscr{H}_2 + V, \tag{1}$$

где

$$\mathscr{H}_1 = \sum_{\alpha} E_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha,$$

$$V = \sum_{\alpha,\beta} \Phi_{\alpha\beta} a_\alpha^+ a_\beta, \quad \Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\beta\alpha}^+.$$

Здесь $\mathscr{H}_1$ — гамильтониан малой подсистемы, E_α — энергии квазичастиц, a_α^+ и a_α — операторы рождения и уничтожения квазичастиц в малой подсистеме, V — гамильтониан взаимодействия между малой подсистемой и термостатом, $\mathscr{H}_2$ — гамильтониан термостата, который мы не выписываем явно. $\Phi_{\alpha\beta}$ считаем операторами, действующими только на переменные среды.

Мы интересуемся *кинетической стадией* неравновесного процесса в системе, слабо взаимодействующей с термостатом. Поэтому предполагаем, что состояние этой системы полностью определяется набором средних $\langle P_{\alpha\beta}\rangle = \langle a_\alpha^+ a_\beta\rangle$, а термостата — $\langle \mathscr{H}_2\rangle$, где $\langle \ldots \rangle$ обозначает усреднение с неравновесным статистическим оператором, который будет определен ниже.

Будем следовать методу неравновесного статистического оператора [4, 5]. Введем квазиравновесное распределение

$$\rho_q(t) = e^{-S(t,\,0)}, \tag{2}$$

где

$$S(t, 0) = \Omega(t) + \sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta}(0) F_{\alpha\beta}(t) + \beta\mathscr{H}_2(0)$$

— оператор энтропии,

$$\Omega(t) = \ln \operatorname{Sp} \exp\left\{-\sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) - \beta\mathscr{H}_2\right\},$$

$F_{\alpha\beta}(t)$ — термодинамические параметры, сопряженные $\langle P_{\alpha\beta}\rangle$, β — обратная температура среды; все операторы берутся в представлении Гайзенберга.

Неравновесный статистический оператор полной системы строим следующим образом:

$$\rho(t) = e^{-\widetilde{S}(t,\,0)}, \tag{3}$$

где

$$\widetilde{S}(t, 0) = \varepsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \Big(\Omega(t+t_1) + \sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta}(t_1) F_{\alpha\beta}(t+t_1) + \beta\mathscr{H}_2(t_1)\Big)$$

— квазиинвариантная часть оператора энтропии и ε — бесконечно малая величина, которая устремляется к нулю после термодинамического предельного перехода. Параметры $F_{\alpha\beta}(t)$ определяются из условия [4, 5]

$$\langle P_{\alpha\beta}\rangle = \langle P_{\alpha\beta}\rangle_q, \tag{4}$$

где $\langle\ldots\rangle_q$ — усреднение с квазиравновесным статистическим оператором ρ_q. Условие (4) гарантирует сохранение нормировки после взятия инвариантной части. При выводе кинетических уравнений будем пользоваться теорией возмущений по малости взаимодействия и будем считать, что $\langle\Phi_{\alpha\beta}\rangle_q = 0$, а другие члены могут быть отнесены к перенормированной энергии подсистемы.

Неравновесный статистический оператор (3) можно записать в виде

$$\rho(t) = Q^{-1} e^{-L(t)}, \tag{5}$$

где

$$L(t) = \varepsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \Big\{\sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta}(t_1) F_{\alpha\beta}(t+t_1) + \beta\mathscr{H}_2(t_1)\Big\} \tag{6}$$

и Q — нормирующий множитель. Интегрируя в (6) по частям, получим

$$L(t) = \sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) + \beta\mathscr{H}_2 - \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \Big\{\sum_{\alpha,\beta} \dot{P}_{\alpha\beta}(t_1) F_{\alpha\beta}(t+t_1) + \\ + \beta\dot{\mathscr{H}}_2(t_1) + \sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta}(t_1) \frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial t_1}\Big\}. \tag{7}$$

Для дальнейшего удобно также представить ρ_q в виде

$$\rho_q = \rho_1 \cdot \rho_2 = Q_q^{-1} e^{-A}, \tag{8}$$

где

$$\rho_1 = Q_1^{-1} \exp\Big\{-\sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t)\Big\}, \quad Q_1 = \mathrm{Sp}\exp\Big\{-\sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t)\Big\},$$

$$\rho_2 = Q_2^{-1} \exp\{-\beta\mathscr{H}_2\}, \qquad Q_2 = \mathrm{Sp}\exp\{-\beta\mathscr{H}_2\},$$

$$Q_q = Q_1 \cdot Q_2, \quad A = \sum_{\alpha,\beta} P_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}(t) + \beta\mathscr{H}_2.$$

Будем исходить из кинетических уравнений для $\langle P_{\alpha\beta}\rangle$ в неявной форме:

$$\frac{d\langle P_{\alpha\beta}\rangle}{dt} = -i\langle[P_{\alpha\beta}, \mathscr{H}]\rangle = -i(E_\beta - E_\alpha)\langle P_{\alpha\beta}\rangle - i\langle[P_{\alpha\beta}, V]\rangle, \tag{9}$$

и ограничимся при вычислении правой части (9) вторым порядком по взаимодействию, для чего $\rho(t)$ необходимо получить в первом порядке по V.

Учитывая это, вычислим

$$\frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial t_1} = i(E_\beta - E_\alpha)F_{\alpha\beta}(t+t_1) - i\sum_{\alpha_1, \beta_1}\frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial\langle P_{\alpha_1\beta_1}\rangle}\times$$
$$\times\langle[P_{\alpha_1\beta_1}(t_1), V(t_1)]\rangle = i(E_\beta - E_\alpha)F_{\alpha\beta}(t+t_1) -$$
$$-i\sum_{\alpha_1, \beta_1, \alpha_2}\frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial\langle P_{\alpha_2\beta_1}\rangle}(\langle\Phi_{\beta_1\alpha_1}P_{\alpha_2\alpha_1}\rangle - \langle\Phi_{\alpha_2\alpha_1}P_{\alpha_2\beta_1}\rangle). \tag{10}$$

Ограничиваясь в (10) первым порядком по взаимодействию, получим

$$\frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial t_1} \approx i(E_\beta - E_\alpha)F_{\alpha\beta}(t+t_1) - i\sum_{\alpha_1, \beta_1, \alpha_2}\frac{\partial F_{\alpha\beta}(t+t_1)}{\partial\langle P_{\alpha_1\beta_1}\rangle}\times$$
$$\times\{\langle\Phi_{\alpha_1\alpha_2}\rangle_q\langle P_{\alpha_1\alpha_2}\rangle - \langle\Phi_{\alpha_2\alpha_1}\rangle_q\langle P_{\alpha_2\alpha_1}\rangle\} = i(E_\beta - E_\alpha)F_{\alpha\beta}(t+t_1). \tag{11}$$

Величины $\dot P_{\alpha\beta}(t_1)$ и $\dot{\mathscr{H}}_2(t_1)$ в первом порядке по взаимодействию имеют вид

$$\dot P_{\alpha\beta}(t_1) = -i(E_\beta - E_\alpha)P_{\alpha\beta}(t_1) - i[P_{\alpha\beta}(t_1), V(t_1)],$$
$$\dot{\mathscr{H}}_2(t_1) = -i[\mathscr{H}_2(t), V(t_1)]. \tag{12}$$

Здесь и ниже все операторы взяты в представлении взаимодействия.

Используя (11) и (12), найдем

$$L(t) = A + i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}\Big[\sum_{\alpha, \beta} P_{\alpha\beta}(t_1)F_{\alpha\beta}(t+t_1) + \beta\mathscr{H}_2(t_1), V(t_1)\Big]. \tag{13}$$

Следуя [3], нетрудно убедиться, что в нулевом порядке по взаимодействию выражение

$$\sum_{\alpha, \beta} P_{\alpha\beta}(t_1)F_{\alpha\beta}(t+t_1) + \beta\mathscr{H}_2(t_1)$$

не зависит от t_1, и следовательно, равно A. Тогда для $\rho(t)$ в линейном приближении по взаимодействию имеем

$$\rho(t) = \rho_q - i\rho_q\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}\int_0^1 d\lambda e^{\lambda A}[A, V(t_1)]e^{-\lambda A}. \tag{14}$$

Используя соотношение [2]

$$e^{\lambda A}[A, V(t_1)]\,e^{-\lambda A} = \frac{d}{d\lambda}\,e^{\lambda A}\,V(t_1)\,e^{-\lambda A}$$

и интегрируя по λ, получим

$$\rho(t) = \rho_q - i\int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}[V(t_1), \rho_q]. \tag{15}$$

Используя (15), кинетические уравнения для $\langle P_{\alpha\beta}\rangle$ окончательно запишем в виде

$$\frac{d\langle P_{\alpha\beta}\rangle}{dt} = -i(E_\beta - E_\alpha)\langle P_{\alpha\beta}\rangle - \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1}\langle[[P_{\alpha\beta}, V]\,V(t_1)]\rangle_q. \tag{16}$$

Последний член в правой части (16) можно назвать обобщенным *«интегралом столкновений»*. Таким образом, мы видим, что для системы в термостате член столкновений имеет удобную форму двойного коммутатора, как и для системы с малым взаимодействием [1, 2].

Следует отметить, что предположение о модельном виде гамильтониана несущественно. Будем исходить из гамильтониана (1), в котором уже не будем конкретизировать $\mathscr{H}_1$ и V. Предполагаем, что состояние неравновесной системы полностью характеризуется некоторым набором средних $\langle P_k\rangle$, а термостата — $\langle\mathscr{H}_2\rangle$. Мы ограничимся только такими системами, для которых $[\mathscr{H}_1, P_k] = \sum_l a_{kl}P_l$, где a_{kl} — некоторые c-числа. Далее, будем считать выполненным условие $\langle V\rangle_q \approx 0$, где $\langle\ldots\rangle_q$ — усреднение с квазиравновесным статистическим оператором $\rho_q = Q_q^{-1}\exp\{-\sum_k P_k F_k(t) - \beta\mathscr{H}_2\}$ и $F_k(t)$ — параметры, сопряженные $\langle P_k\rangle$. Тогда, следуя методу, использованному выше при выводе уравнений (16), получим *обобщенные кинетические уравнения для* $\langle P_k\rangle$ с точностью до членов, квадратичных по взаимодействию, в форме

$$\frac{d\langle P_k\rangle}{dt} = i\sum_l a_{kl}\langle P_l\rangle - \int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t_1}\langle[[P_k, V]\,V(t_1)]\rangle_q\,dt_1. \tag{16a}$$

Заметим, что если построить неравновесный статистический оператор, положив $\mathscr{H}_2 \to \mathscr{H}_2 + V$, который в пределе переходит в распределение Гиббса, возможно также получить уравнения (16) несколько более сложным образом.

3. ПОЛУЧЕНИЕ ОСНОВНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ И УРАВНЕНИЯ ТИПА РЕДФИЛДА

В предыдущем разделе мы получили кинетические уравнения для $\langle P_{\alpha\beta}\rangle$ в общем виде. Запишем теперь уравнение (16) в развернутой форме.

Заметим, что

$$V(t_1)=\sum_{\alpha,\beta}\widetilde{\Phi}_{\alpha\beta}(t_1)\,a_\alpha^+a_\beta,$$

где

$$\widetilde{\Phi}_{\alpha\beta}(t_1)=e^{i\mathcal{H}_2t_1}\Phi_{\alpha\beta}e^{-i\mathcal{H}_2t_1}e^{i(E_\alpha-E_\beta)t_1}.$$

Вычислим теперь двойной коммутатор в правой части уравнения (16):

$$\langle[[P_{\alpha\beta},V]\,V(t_1)]\rangle_q=\sum_{\alpha_1,\beta_1}{}'\{\langle\Phi_{\beta\alpha_1}\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\beta_1}(t_1)\rangle_q\langle P_{\alpha\beta_1}\rangle+\langle\widetilde{\Phi}_{\beta_1\alpha_1}(t_1)\,\Phi_{\alpha_1\alpha}\rangle_q\langle P_{\beta_1\beta}\rangle-$$
$$-(\langle\Phi_{\alpha_1\alpha}\widetilde{\Phi}_{\beta\beta_1}(t_1)\rangle_q+\langle\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\alpha}(t_1)\,\Phi_{\beta\beta_1}\rangle_q)\langle P_{\alpha_1\beta_1}\rangle\},\qquad(17)$$

где мы ограничились членами, линейными по концентрации квазичастиц.

Корреляционные функции $\langle\Phi_{\alpha_1\beta_1}\widetilde{\Phi}_{\alpha_2\beta_2}(t)\rangle_q$ и $\langle\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\beta_1}(t)\,\Phi_{\alpha_2\beta_2}\rangle_q$ выражаются через спектральные интенсивности следующим образом [6]:

$$\langle\Phi_{\alpha_1\beta_1}\widetilde{\Phi}_{\alpha_2\beta_2}(t_1)\rangle_q=\int_{-\infty}^{\infty}J_{\alpha_2\beta_2,\,\alpha_1\beta_1}(\omega)\,e^{-i(\omega-E_{\alpha_2}-E_{\beta_2})t}\,d\omega,$$

$$\langle\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\beta_1}(t)\,\Phi_{\alpha_2\beta_2}\rangle_q=\int_{-\infty}^{\infty}J_{\alpha_2\beta_2,\,\alpha_1\beta_1}(\omega)\,e^{i(\omega+E_{\alpha_1}-E_{\beta_1})t}\,d\omega.\qquad(18)$$

Подставляя (17) и (18) в уравнение (16) и принимая во внимание обозначения

$$\sum_{\alpha_1}\int_{-\infty}^{0}\langle\Phi_{\beta\alpha_1}\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\beta_1}(t_1)\rangle_q\,e^{\varepsilon t_1}dt_1=i\sum_{\alpha_1}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,\frac{J_{\alpha_1\beta_1,\,\beta\alpha_1}(\omega)}{\omega-E_{\alpha_1}+E_{\beta_1}+i\varepsilon}=K_{\beta\beta_1},$$

$$\int_{-\infty}^{0}\{\langle\Phi_{\alpha_1\alpha}\widetilde{\Phi}_{\beta\beta_1}(t_1)\rangle_q+\langle\widetilde{\Phi}_{\alpha_1\alpha}(t_1)\,\Phi_{\beta\beta_1}\rangle_q\}\,e^{\varepsilon t_1}dt_1=$$
$$=i\int_{-\infty}^{\infty}d\omega J_{\beta\beta_1,\,\alpha_1\alpha}(\omega)\left\{\frac{1}{\omega-E_\beta+E_{\beta_1}+i\varepsilon}-\frac{1}{\omega-E_\alpha+E_{\alpha_1}-i\varepsilon}\right\}=K_{\alpha\beta,\,\alpha_1\beta_1},$$

перепишем кинетические уравнения для $\langle P_{\alpha\beta}\rangle$ в виде

$$\frac{d\langle P_{\alpha\beta}\rangle}{dt}=i(E_\alpha-E_\beta)\langle P_{\alpha\beta}\rangle-\sum_{\beta_1}\{K_{\beta\beta_1}\langle P_{\alpha\beta_1}\rangle+K^*_{\alpha\beta_1}\langle P_{\beta_1\beta}\rangle\}+$$
$$+\sum_{\alpha_1,\beta_1}{}'K_{\alpha\beta,\,\alpha_1\beta_1}\langle P_{\alpha_1\beta_1}\rangle.\qquad(19)$$

По структуре эти уравнения аналогичны уравнениям Редфилда для спиновой матрицы плотности [7], когда нет внешнего переменного поля.

Если возможно ограничиться только диагональными средними $\langle P_{\alpha\alpha}\rangle$, то мы приходим к уравнению

$$\frac{d\langle P_{\alpha\alpha}\rangle}{dt} = \sum_{\beta} K_{\alpha\alpha,\beta\beta}\langle P_{\beta\beta}\rangle - (K_{\alpha\alpha} + K^{*}_{\alpha\alpha})\langle P_{\alpha\alpha}\rangle,$$

где

$$K_{\alpha\alpha} + K^{*}_{\alpha\alpha} = 2\pi\sum_{\beta} J_{\beta\alpha,\alpha\beta}(E_{\beta} - E_{\alpha}) = \sum_{\beta} W_{\alpha\to\beta}.$$

Здесь $W_{\beta\to\alpha}$ и $W_{\alpha\to\beta}$ — вероятности переходов, выраженные в терминах спектральных интенсивностей. Используя свойства спектральных интенсивностей, нетрудно убедиться, что вероятности переходов удовлетворяют соотношению детального баланса

$$\frac{W_{\beta\to\alpha}}{W_{\alpha\to\beta}} = \frac{e^{-\beta E_{\alpha}}}{e^{-\beta E_{\beta}}}.$$

Окончательно получим

$$\frac{d\langle P_{\alpha\alpha}\rangle}{dt} = \sum_{\beta} W_{\beta\to\alpha}\langle P_{\beta\beta}\rangle - \sum_{\beta} W_{\alpha\to\beta}\langle P_{\alpha\alpha}\rangle. \tag{20}$$

Это уравнение имеет обычную форму основного кинетического уравнения (master equation).

4. ЯДЕРНАЯ СПИН-РЕШЕТОЧНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ

В качестве примера рассмотрим задачу о продольной ядерной спин-решеточной релаксации.

Рассмотрим поведение неравновесной спиновой системы с гамильтонианом $\mathcal{H}_s$, слабо связанной посредством независящего от времени возмущения V с тепловым резервуаром или кристаллической решеткой, описываемой гамильтонианом $\mathcal{H}_L$.

Полный гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_L + V, \tag{21}$$

где $\mathcal{H}_s = -a\sum_{i} I_i^z$, $a = \gamma H_0$ и I_i^z — оператор z-компоненты спина в положении i, H_0 — не зависящее от времени внешнее поле, направленное по оси z, γ — гиромагнитный коэффициент.

Введем операторы $a_{i\lambda}^{+}$ и $a_{i\lambda}$ — рождения и уничтожения спина в положении i с z-компонентой, равной λ, где $-I \leqslant \lambda \leqslant I$. Тогда имеем

$$I_i^z = \sum_{\lambda} \lambda a_{i\lambda}^{+} a_{i\lambda} = \sum_{\lambda} \lambda n_{i\lambda},$$

и следовательно,

$$\mathcal{H}_s = \sum_{\lambda,\, i} E_\lambda n_{i\lambda}, \quad E_\lambda = -a\lambda.$$

Гамильтониан взаимодействия V запишем в виде

$$V = \sum_i \sum_{\mu,\,\lambda} \Phi_{i\lambda,\, i\mu} a_{i\lambda}^{+} a_{i\mu}, \quad \Phi_{i\lambda,\, i\mu} = \Phi_{i\mu,\, i\lambda}^{+}.$$

Здесь $\Phi_{i\lambda, i\mu}$ — операторы, действующие только на переменные среды.

Следуя (8), построим квазиравновесный статистический оператор

$$\rho_q = \rho_L \cdot \rho_s, \tag{22}$$

где

$$\rho_L = Q_L^{-1} e^{-\beta \mathcal{H}_L}, \quad Q_L = \operatorname{Sp} e^{\beta \mathcal{H}_L}$$

и

$$\rho_s = Q_s^{-N} e^{-\beta_s(t) H_s}, \qquad Q_s = \frac{\operatorname{sh} \dfrac{\beta_s(t)}{2} a (2I+1)}{\operatorname{sh} \dfrac{\beta_s(t)}{2} a}.$$

Здесь β_s — обратная спиновая температура и N — полное число спинов в системе.

Средним $\langle n_{i\lambda} \rangle = \langle a_{i\lambda}^{+} a_{i\lambda} \rangle$ соответствует уравнение (см. (20))

$$\frac{d \langle n_{i\lambda} \rangle}{dt} = \sum_{\mu} W_{\mu\to\lambda}(ii) \langle n_{i\mu} \rangle - \sum_{\mu} W_{\lambda\to\mu}(ii) \langle n_{i\lambda} \rangle, \tag{23}$$

где

$$W_{\lambda\to\mu}(ii) = 2\pi J_{\Phi_{\mu i,\, \lambda i},\, \Phi_{\lambda i,\, \mu i}} (E_\mu - E_\lambda),$$

$$W_{\mu\to\lambda}(ii) = 2\pi J_{\Phi_{\lambda i, \mu i},\, \Phi_{\mu i \lambda i}} (E_\lambda - E_\mu).$$

Заметим, что $\langle n_{i\lambda} \rangle = \langle n_\lambda \rangle = Q_s^{-1} e^{-\beta_s E_\lambda}$. Далее имеем

$$\frac{d \langle n_\lambda \rangle}{dt} = \sum_{\mu} W_{\mu\to\lambda} \langle n_\mu \rangle - \sum_{\mu} W_{\lambda\to\mu} \langle n_\lambda \rangle.$$

Здесь

$$W_{\lambda\to\mu} = \frac{1}{N} \sum_i W_{\lambda\to\mu}(ii)$$

и

$$W_{\mu\to\lambda} = \frac{1}{N}\sum_i W_{\mu\to\lambda}(ii).$$

Нетрудно проверить, что $W_{\mu\to\lambda} = e^{\beta(E_\mu - E_\lambda)}W_{\lambda\to\mu}$. Окончательно для β_s получим уравнение

$$\frac{d\beta_s}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{\mu,\lambda}(\lambda-\mu)\,W_{\lambda\to\mu}\,[1-e^{-(\beta-\beta_s)(E_\lambda-E_\mu)}]\,e^{-\beta_s E_\lambda}\left[\frac{Q_s}{a}\frac{\partial^2 \ln Q_s}{\partial\beta_s^2}\right]^{-1}. \quad (24)$$

При выводе (24) мы учли, что

$$\langle I^z\rangle = \sum_\lambda \lambda\langle n_\lambda\rangle$$

и

$$\frac{d\langle I^z\rangle}{dt} = -\frac{1}{a}\frac{d\beta_s}{dt}\frac{\partial^2\ln Q_s}{\partial\beta_s^2} = -\frac{1}{a}\frac{d\beta_s}{dt}(\langle(I^z)^2\rangle - \langle I^z\rangle^2).$$

В высокотемпературном приближении имеем

$$\frac{d\beta_s}{dt} = \frac{\beta-\beta_s}{T_1},$$

где T_1 — время продольной спин-решеточной релаксации:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{2}\frac{\sum_{\lambda,\mu}(\lambda-\mu)^2 W_{\lambda\to\mu}}{\sum_\lambda \lambda^2}.$$

Таким образом, мы получили соотношение Гортера [7].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты предыдущих разделов показывают, что метод неравновесного статистического оператора хорошо приложим для описания релаксационных процессов. Наше рассмотрение достаточно просто и его можно применить к ряду конкретных задач. Заметим, что подобным образом можно получить уравнение типа Шредингера для средних амплитуд $\langle a_\alpha^+\rangle$ и $\langle a_\alpha\rangle$ для системы в термостате. Эту задачу мы рассмотрим в следующей работе.

В заключение нам хотелось бы поблагодарить Д. Н. Зубарева за помощь в работе и Н. М. Плакиду и Л. А. Покровского за обсуждения.

Объединенный институт
ядерных исследований

Поступила в редакцию
29 декабря 1969 г.

Литература

[1] С. В. Пелетминский, А. А. Яценко, ЖЭТФ, 53, 1327, 1967.
[2] Л. А. Покровский. ДАН СССР, 183, 806, 1968.
[3] Л. А. Покровский. Препринт 68—78, ИТФ, Киев, 1968.

[4] Д. Н. Зубарев. ДАН СССР, **140**, 92, 1961; ДАН СССР, **162**, 532, 1965; ДАН СССР, **162**, 1794, 1965; ДАН СССР, **164**, 537, 1965.
[5] Д. Н. Зубарев. Препринт 69-6, ИТФ, Киев, 1969.
[6] С. В. Тябликов. Методы квантовой теории магнетизма, «Наука», 1965.
[7] Ч. Сликтер. Основы теории магнитного резонанса, «Мир», 1967.

DERIVATION OF THE KINETIC EQUATIONS FOR THE SYSTEM WEAKLY COUPLED TO A THERMAL BATH

K. Walasek, A. L. Kuzemsky

Kinetic equations are derived for a system weakly coupled to a thermal bath. It is shown that the «collision term» has the same form as in the generalized kinetic equations for the system with small interaction. Redfield's type equations for the spin density matrix and the master equation have been obtained. As an example, the nuclear spin-lattice relaxation is considered and the Gorther's relation is derived. The treatment is based on the method of the non-equilibrium statistical operator developed by D. N. Zubarev.