Vol. A40 (1971) *ACTA PHYSICA POLONICA* Fasc. 2

ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МАГНОНОВ МЕТОДОМ НЕРАВНОВЕСНОГО СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПЕРАТОРА

Derivation of the Kinetic Equation for Magnons by the Nonequilibrium Statistical Operator Method

А. Л. Куземский, Т. Пашкевич

Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория теоретической физики, Дубна*

(Поступила в редакцию 11 декабря 1970)

Выводятся кинетические уравнения для магнонов в ферромагнитных кристаллах, описывающихся моделью Гейзенберга, с помощью метода неравновесного статистического оператора Зубарева. Рассматриваемая задача является характерным примером построения кинетических уравнений в системах с малым взаимодействием, не сохраняющем числа возбуждений, например для фононов в ангармоническом кристалле, либронов в твердом ортоводороде и т.п.

Abstract: The magnon kinetic equations for the Heisenberg ferromagnet have been derived by the Zubarev's method of the nonequilibrium statistical operator. The problem considered is a characteristic example of construction of the kinetic equations for the system with small interactions not conserving the number of excitations, for example phonons in the anharmonic crystals, librons in the solid ortho-hydrogen with the dipol-dipol interactions and so on.

1. *Введение*

В настоящей работе рассматривается вывод кинетических уравнений для магнонов в ферромагнитных кристаллах методом неравновесного статистического оператора, развитого в работах Зубарева [1—3]. Этот простой пример интересен с точки зрения применения к конкретной задаче теории обобщенных кинетических уравнений развитой в работах Покровского [4].

Как известно, обобщенные кинетические уравнения, т.е. уравнения для некоторого набора средних характеризующих неравновесное состояние системы с малым взаимодействием были получены Пелетминским и Яценко [5] их методом и Покровским [4] с помощью метода неравновесного статистического оператора [1—3]. Кинетические уравнения для магнонов в ферромагнитном кристалле, описывающемся моделью Гейзенберга, были получены и подробно исследованы в работах [6—10]. Недавно Яценко [11] и Петров [12] изучали вопросы, связанные с выводом кинетических уравнений для магнонов на основе метода [5].

* Адрес: Объединенный институт ядерных исследований, Москва, п/я 79, СССР.

В предлагаемой работе показано, что с помощью метода обобщенных кинетических уравнений Покровского можно очень просто вывести кинетические уравнения для магнонов. Заметим, что рассматриваемый пример интересен не только для ферромагнитной системы, но является примером построения кинетических уравнений в системах, не сохраняющих числа возбуждений, например, для фононов при учете ангармонизма для либронов в твердом ортоводороде [13] и т.п.

2. Построение неравновесного статистического оператора и обобщенные кинетические уравнения

Обобщенные кинетические уравнения для системы с малым взаимодействием были получены в работах [4] с помощью метода неравновесного статистического оператора [1—3]. Основная идея этого метода состоит в том, что если для описания неравновесного состояния системы достаточно сокращенного набора средних значений некоторых операторов P_m или сопряжённых им параметров $F_m(t)$, то можно найти такое частное решение уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial \varrho}{\partial \mathrm{t}} + \frac{1}{i\hbar}[\varrho(t, 0), \mathrm{H}] = 0,$$

которое зависит от времени лишь через $F_m(t)$. Первый аргумент у неравновесного статистического оператора $\varrho(t, 0)$ указывает на эту неявную зависимость его от времени, а второй через представление Гейзенберга.

Основная идея метода построения неравновесного статистического оператора становится особенно ясной, если воспользоваться представлением о квазисредних введенных Боголюбовым [14]. Для того, чтобы построить неравновесный статистический оператов рассматриваются бесконечно малые возмущения (или источники), нарушающие симметрию уравнения Лиувилля относительно обращения времени, которые устремляются к нулю после термодинамического предельного перехода при вычислении средних [3]. При построении неравновесного статистического оператора используется также известная концепция Боголюбова иерархии времен релаксации, согласно которой предполагается, что в процессе временной эволюции неравновесного статистического ансамбля происходит сокращение в описании неравновесного процесса.

Введем бесконечно малый источник, нарушающий симметрию отражения времени в уравнение Лиувилля для $\ln \varrho(t, 0)$ поскольку хорошо известно, что логарифм статистического оператора, удовлетворяющего уравнению Лиувилля также удовлетворяет этому уравнению. Будем иметь

$$\frac{\partial \ln \varrho(t, 0)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\ln \varrho(t, 0), H] = -\varepsilon(\ln \varrho(t, 0) - \ln \varrho_q(t, 0)), \tag{1}$$

где

$$\varrho_q(t, 0) = \exp\{-\Phi(t) - \sum_m P_m F_m(t)\} \equiv \exp\{-S(t, 0)\} \tag{2}$$

— квазиравновесный статистический оператор, а

$$\Phi(t) = \ln Sp \exp \{- \sum_m F_m(t) P_m(0)\} \tag{3}$$

— функционал Масье-Планка. Оператор $S(t, 0)$ можно назвать оператором энтропии, так как

$$S(t) = \langle S(t, 0) \rangle_q = \sum_m F_m(t) \langle P_m \rangle_q + \Phi(t), \tag{4}$$

где $\langle \ldots \rangle_q = Sp\, (\ldots\, \varrho_q)$. Величина $\varepsilon \to 0^+$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних. Граничные условия, аналогичные (1) используются в формальной теории рассеяния в форме Геллмана-Голдбергера [15].

Запишем уравнение (1) в виде

$$\frac{d}{dt} (e^{\varepsilon t} \ln \varrho(t, t)) = \varepsilon e^{\varepsilon t} \ln \varrho_q(t, t), \tag{5}$$

где

$$\ln \varrho(t, t) = U^+(t, 0) \ln \varrho(t, 0)\, U(t, 0),$$

$U(t, 0)$ — оператор эволюции, равный $U(t, 0) = \exp \left\{ \frac{iHt}{\hbar} \right\}$, если гамильтониан H не зависит от времени. Интегрируя (5) в пределах от $-\infty$ до 0 и предполагая, что $\lim\limits_{\varepsilon \to 0^+} e^{\varepsilon t} \ln \varrho(t, t) = 0$, получим

$$\ln \varrho(t, t) = \varepsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \ln \varrho_q(t + t_1, t + t_1).$$

Следовательно, неравновесный статистический оператор равен

$$\varrho(t, 0) = \exp \{-\varepsilon \int\limits_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \ln \varrho_q(t + t_1, t_1)\} = \exp \widetilde{\{\ln \varrho_q(t, 0)\}} \equiv \exp \widetilde{\{-S(t, 0)\}}. \tag{6}$$

Волнистая черта сверху обозначает операцию взятия квазиинвариантной части относительно эволюции с полным гамильтонияном. Среднее значение любой динамической переменной A равно

$$\langle A \rangle = \lim_{\varepsilon \to 0^+} Sp(\varrho(t, 0) A), \tag{7}$$

т.е. фактически является квазисредним. Заметим, что нормировка квазиравновесного распределения (2) после взятия квазиинвариантной части сохраняется, если потребовать выполнение условий

$$\langle P_m \rangle_q = \langle P_m \rangle, \quad \langle P_m \rangle = Sp(P_m \varrho(t, 0)). \tag{8}$$

Величины $F_m(t)$ и $\langle P_m \rangle$ являются сопряженными в смысле неравновесной термодинамики:

$$\langle P_m \rangle = - \frac{\delta \Phi}{\delta F_m(t)}; \qquad F_m(t) = \frac{\delta S}{\delta \langle P_m \rangle}. \tag{9}$$

Обобщенные кинетические уравнения переноса, описывающие эволюцию переменных $\langle P_m \rangle$ и $F_m(t)$ во времени, получаются усреднением уравнений движений для P_m с неравновесным статистическим оператором (6), с учетом (8)

$$\langle \dot{P}_m \rangle = -\sum_n \frac{\delta^2 \Phi}{\delta F_m(t)\,\delta F_n(t)} \dot{F}_n(t) \tag{10}$$

$$\dot{F}_m = \sum_n \frac{\delta^2 S}{\delta \langle P_m \rangle \delta \langle P_n \rangle} \langle \dot{P}_n \rangle . \tag{11}$$

Эти уравнения взаимно обратны и вместе с уравнениями (9) сбразуют полную систему уравнений для вычисления функций $\langle P_m \rangle$ и $F_m(t)$.

Производство энтропии имеет вид

$$\dot{S}(t) = \langle \dot{S}(t, 0) \rangle = \sum_m \langle \dot{P}_m \rangle F_m(t) = -\sum_{n,m} \frac{\delta^2 \Phi}{\delta F_m(t)\,\delta F_n(t)} \dot{F}_n(t) F_m(t) \tag{12}$$

откуда следует, что величины $F_m(t)$ и $\langle \dot{P}_m \rangle$ имеют смысл сопряженных термодинамических сил и потоков соответственно.

При практическом решении задач по этой схеме приходится прибегать к разложению средних величин по тому или иному малому параметру, например, по параметру близости к статистическому равновесию [16], или по параметру малости взаимодействия в системе [4] или же по параметру малости взаимодействия между системой и термостатом [17]. Так в работах Покровского [4] рассматривалась система частиц с малым взаимодействием с гамильтонианом

$$H = H_0 + V,$$

где H_0 — гамильтониан сводных частиц, V — оператор взаимодействия. В качестве набора операторов P_m выбирались операторы $P_k = a_k^+ a_k$, характеризующие кинетическую стадию неравновесного процесса, поскольку их средние соответствуют функции распределения частиц.

Уравнения движения для операторов имеют вид:

$$\frac{dP_k}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [P_k, H_0 + V]. \tag{13}$$

В работах [4] следуя работе [5] принимается, что

$$[P_k, H_0] = \sum_l a_{kl} P_l. \tag{14}$$

Усреднение уравнения (13) с неравновесным статистическим оператором (6) с точностью до второго порядка по возмущению приводит к обобщенным кинетическим уравнениям вида [4]

$$\frac{d\langle P_k \rangle}{dt} = L_k^{(0)} + L_k^{(1)} + L_k^{\prime(2)} + L_k^{\prime\prime(2)} \tag{15}$$

где

$$L_k^{(0)} = \frac{1}{i\hbar} \sum_l a_{kl} \langle P_l \rangle_q \tag{16a}$$

$$L_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, V] \rangle_q \tag{16b}$$

$$L_k^{\prime(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \langle [V(t_1), [P_k, V]] \rangle_q \tag{16c}$$

$$L_k^{\prime\prime(2)} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{0} dt_1 e^{\varepsilon t_1} \left\langle \left[V(t_1), i\hbar \sum_m P_m \frac{\partial L_k^{(1)}(\dots \langle P_m \rangle \dots)}{\partial \langle P_m \rangle} \right] \right\rangle_q . \tag{16d}$$

В следующем разделе на основе выражения (15) мы получим кинетические уравнения для магнонов.

3. Кинетические уравнения для магнонов

Будем исходить из следующего выражения для гамильтониана ферромагнитного кристалла (6)

$$H = -\tfrac{1}{2} \sum_{l' \neq l} J(\boldsymbol{R}_{ll'}) \boldsymbol{S}_l \boldsymbol{S}_{l'} + 2\mu_0 h_0 \sum_l S_l^z +$$

$$+ 2\mu_0^2 \sum_{l \neq l'} \frac{1}{R_{ll'}^5} \{ R_{ll'}^2 \boldsymbol{S}_l \boldsymbol{S}_{l'} - 3(\boldsymbol{R}_{ll'} \boldsymbol{S}_l)(\boldsymbol{R}_{ll'} \boldsymbol{S}_{l'}) \}, \tag{17}$$

где первые два слагаемых — гамильтониан Гейзенберга ферромагнетика во внешнем поле h_0, а третий член — оператор магнитного диполь-дипольного взаимодействия. Перейдем от операторов $S_l^{\pm}$, S_l^z к бозевским операторам a_l^+, a_l с помощью преобразования Гольштейна-Примакова [6],

$$S_l^+ = S_l^x + iS_l^y = \sqrt{2S}\, a_l^+ \sqrt{1 - \frac{a_l^+ a_l}{2S}}$$

$$S_l^- = S_l^x - iS_l^y = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a_l^+ a_l}{2S}}\, a_l$$

$$S_l^z = -S + a_l^+ a_l, \tag{18}$$

компоненты фурье которых определяются следующим образом

$$a(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l a_l \exp(-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{R}_l).$$

Как показано в работе [6], гамильтониан ферромагнетика (17) можно представить в виде бесконечной суммы членов, содержащих произведения различного числа бозевских операторов $a(\boldsymbol{k})$ и $a^+(\boldsymbol{k})$

$$H = H^{(2)} + H^{(3)} + H^{(4)} + \ldots, \tag{19}$$

где $H^{(n)}(n = 2, 3, 4 \ldots)$ — форма, содержащая произведения n операторов $a^+(\boldsymbol{k})$ и $a(\boldsymbol{k})$. Можно произвести унитарное преобразование [6], диагонализирующее форму $H^{(2)}$, т.е. представить ее в виде

$$H^{(2)} = \sum_{\boldsymbol{k}} \varepsilon(\boldsymbol{k}) c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{k}} \tag{20}$$

где $c_{\boldsymbol{k}}^+$, $c_{\boldsymbol{k}}$ — операторы рождения и уничтожения магнонов. Тогда члены $H^{(3)}$ и $H^{(4)}$ можно записать в этих операторах в следующем виде, справедливом для кристаллов, у которых имеется по крайней мере одна плоскость симметрии перпендикулярная оси z

$$H^{(3)} = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}} \Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{l}; \boldsymbol{m})\, c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{l}}^+ c_{\boldsymbol{m}} \Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m}) + \text{h.c.} \tag{21}$$

$$H^{(4)} = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{l},\boldsymbol{m},\boldsymbol{n}} \Phi(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{l}; \boldsymbol{m}, \boldsymbol{n}) c_{\boldsymbol{k}}^+ c_{\boldsymbol{l}}^+ c_{\boldsymbol{m}} c_{\boldsymbol{n}} \Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{l}-\boldsymbol{m}-\boldsymbol{n}) + \text{h.c.} \tag{22}$$

(обозначения см. в [6]).

При выводе кинетических уравнений для магнонов возьмем в качестве операторов P_k, характеризующих неравновесное состояние системы, операторы чисел заполнения магнонов $P_{\boldsymbol{k}} = a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} = n_{\boldsymbol{k}}$. Предполагается, что равновесное распределение чисел заполнения магнонов нарушается с помощью внешнего воздействия, например, с помощью параллельной накачки [10]. Затем источник внешнего воздействия отключается и система релаксирует к равновесному распределению.

Согласно (2) квазиравновесный статистический оператор при таком выборе имеет вид

$$\varrho_q = Q_q^{-1} \exp\{-\sum_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}}(t) n_{\boldsymbol{k}}\} \tag{23}$$

$$Q_q = Sp \exp\{-\sum_{\boldsymbol{k}} F_{\boldsymbol{k}}(t) n_{\boldsymbol{k}}\}, \tag{24}$$

где параметры $F_{\boldsymbol{k}}(t)$ определяются из условий (8). Кинетическое уравнение для $\langle n_{\boldsymbol{k}} \rangle$ согласно (15) запишется в форме

$$\frac{d\langle n_{\boldsymbol{k}}\rangle}{dt} = L_{\boldsymbol{k}}^{(0)} + L_{\boldsymbol{k}}^{(1)} + L_{\boldsymbol{k}}^{\prime(2)} + L_{\boldsymbol{k}}^{\prime\prime(2)}, \tag{25}$$

причем и для (21) и для (22)

$$L_{\boldsymbol{k}}^{(0)} = L_{\boldsymbol{k}}^{(1)} = L_{\boldsymbol{k}}^{\prime\prime(2)} = 0. \tag{25a}$$

Выражение $L_{\boldsymbol{k}}^{\prime(2)}$ при учете только тройного члена (21) имеет вид

$$L_{\boldsymbol{k}}^{\prime(2)} = -\frac{8\pi}{\hbar} \sum_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}} \{|\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{u};\boldsymbol{v})|^2 \delta(\omega(\boldsymbol{k}) + \omega(\boldsymbol{u}) - \omega(\boldsymbol{v})) \Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}) \times$$
$$\times [(n_{\boldsymbol{k}}+1)(n_{\boldsymbol{u}}+1)n_{\boldsymbol{v}} - n_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{u}}(n_{\boldsymbol{v}}+1)] - \tfrac{1}{2}|\Phi(\boldsymbol{k};\boldsymbol{u}\boldsymbol{v})|^2 \delta(\omega(\boldsymbol{k}) - \omega(\boldsymbol{u}) - \omega(\boldsymbol{v})) \Delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}) \times$$
$$\times [(n_{\boldsymbol{k}}+1)n_{\boldsymbol{u}} n_{\boldsymbol{v}} - n_{\boldsymbol{k}}(n_{\boldsymbol{u}}+1)(n_{\boldsymbol{v}}+1)]\}, \quad \varepsilon(\boldsymbol{k}) = \hbar\omega(\boldsymbol{k}). \tag{26}$$

Выражение $L_k'^{(2)}$ при учете четверного члена (22), описывающего процессы рассеяния магнонов магнонами, имеет вид

$$L_k'^{(2)} = -\frac{16\pi}{\hbar}\sum_{u;x,v}|\Phi(\boldsymbol{k},\boldsymbol{u};\boldsymbol{v},\boldsymbol{x})|^2\delta(\omega(\boldsymbol{k})+\omega(\boldsymbol{u})-\omega(\boldsymbol{v})-\omega(\boldsymbol{x}))\times$$
$$\times\Delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}-\boldsymbol{x})\{(n_{\boldsymbol{k}}+1)(n_{\boldsymbol{u}}+1)n_{\boldsymbol{v}}n_{\boldsymbol{x}}-n_{\boldsymbol{k}}n_{\boldsymbol{u}}(n_{\boldsymbol{v}}+1)(n_{\boldsymbol{x}}+1)\}. \tag{27}$$

Выражения для интегралов столкновений (26), (27) совпадают с полученными в работе [7]. Таким образом видно, что на основе работ [1—4] можно довольно просто строить кинетические уравнения для конкретных систем с малыми взаимодействиями. Можно убедиться, что этим же методом можно получить известные кинетические уравнения для магнонов при учете процессов испускания и поглощения магноном фонона, а также кинетическое уравнение для фононов при учете поглощения и испускания фонона магноном [6]. Можно получить также уравнение Пайерлса для фононов [18].

В заключение заметим, что представляет интерес возможность получения кинетических уравнений для магнонов, используя представление Дайсона-Малеева [6] для спиновых операторов. Хотя гамильтониан (17) в этом представлении не является эрмитовым, он содержит конечное число членов и соответствующий интеграл столкновений также будет состоять из конечного числа слагаемых. Из-за трудностей исключения нефизических состояний строгий вывод кинетического уравнения довольно затруднителен. Однако хорошо известно, что при низких температурах, пренебрежение неэрмитовостью для различных задач магнетизма и ферромагнитной релаксации приводит к разумным результатам.

4. *Обсуждение*

Итак, с помощью метода неравновесного статистического оператора можно довольно просто построить кинетические уравнения для магнонов в ферромагнитном кристалле. Рассмотренная задача является характерным примером построения кинетических уравнений для системы бозонов при учете взаимодействия, не сохраняющего числа возбуждений. Построение кинетических уравнений для таких систем, позволяет исследовать характерное время релаксаций, что является важной характеристикой системы при рассмотрении процессов релаксации одних степеней свободы кристалла на других его степенях свободы. Выведенные уравнения (25) для средних плотностей можно легко получить методом баланса. Однако следует отметить, что использование метода обобщенных кинетических уравнений [4] становится существенным, если мы интересуемся, например, кинетическими уравнениями для недиагональных средних $\langle a_k^+ a_l\rangle$ или для средних амплитуд $\langle a_k\rangle$, $\langle a_k^+\rangle$ или же, если мы хотим получить связанную систему уравнений для средних плотностей и средних амплитуд. В следующих работах мы подробно рассмотрим кинетические уравнения для фононов в ангармоническом кристалле и кинетические уравнения для либрационных возбуждений при учете диполь-дипольных сил в твердом молекулярном ортоводороде.

В заключение выражаем благодарность Д. Н. Зубареву за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Д. Н. Зубарев, *ДАН СССР*, **140**, 92 (1961); **162**, 532, 794 (1965); **164**, 65 (1965); *Lectures of VI-th Winter School in Karpacz*, Poland, 1969; *Проблемы теоретической физики*, Наука, Москва 1969; *Forschr. Phys.*, **18**, 125 (1970).
[2] Д. Н. Зубарев, В. П. Калашников, *Теоретическая и математическая физика*, **1**, 137 (1969); **3**, 126 (1970); *Physica*, **46**, 550 (1970).
[3] Д. Н. Зубарев, *Препринт ОИЯИ Р4-4886*, Дубна 1970; *Теоретическая и математическая физика*, **3**, 276 (1970).
[4] Л. А. Покровский, *ДАН СССР*, **183**, 806 (1968); *Препринт ИТФ*-68-78, Киев 1968.
[5] С. В. Пелетминский, А. А. Яценко, *ЖЭТФ*, **53**, 1327 (1967).
[6] А. И. Ахиезер, В. Г. Барьяхтар, С. В. Пелетминский, *Спиновые волны*, Наука 1967.
]7] E. Schlömann, *Phys. Rev.*, **121**, 1312 (1961).
[8] M. Sparks, *Ferromagnetic relaxation theory*, Mc Graw Hill, New York 1964.
[9] F. Keffer, *Handbuch der Physik*, **28**, 2 (1966).
[10] T. G. Philips, H. M. Rosenberg, *Rep. Progr. Phys.* **26**, 285 (1966).
[11] А. А. Яценко, *УФЖ*, **13**, 1118 (1968).
[12[Э. Г. Петров, *Препринт ИТФ*-6-68, 1968.
[13] J. C. Raich, R. D. Etters, *Phys. Rev.*, **168**, 425 (1968).
[14] Н. Н. Боголюбов, *Препринт ОИЯИ Р*-788, Дубна 1961.
[15] M. Gell-Mann, M. L. Goldberger, *Phys. Rev.*, **91**, 398 (1953).
[16] Д. Н. Зубарев, *Препринт ИТФ*-70-3, Киев 1970.
[17] К. Валясек, А. Л. Куземский, *Теоретическая и математическая физика*, **4**, 267 (1970).
[18] Р. Пайерлс, *Квантовая теория твердых тел*, ИЛ 1956.