

К КИНЕТИКЕ ДВУХУРОВНЕВЫХ ТУННЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

Приведен общий анализ двухямной модельной системы в поле термостата. С помощью метода кумулянтных разложений получены кинетическое уравнение для матрицы плотности. В приближении второго порядка по взаимодействию с термостатом найдены выражения для продольного и поперечного времени туннельной релаксации систем, действительные во всем интервале температур.

1. Введение

Представление о подбарьерном туннелировании в общем случае не симметричного двухямного потенциала использовалось для модельного описания целого ряда физических явлений (например, квантовой диффузии, низкочастотных свойств аморфных систем [1,2]). Теоретическое исследование кинетических свойств соответствующей модельной системы было выполнено в работе [1], где при вычислении кинетических коэффициентов использовались приближения высоких и низких температур, соответствующие выражения для всего температурного интервала получались с помощью процедуры шивки. Однако, как оказывается, возможны общие решение этой задачи без применения приближения высоких и низких температур.

2. Кинетические уравнения

Рассматриваемая система представляется квантовой системой с двухямным несимметричным потенциалом, со слабо сдвинутыми энергетическими уровнями (ξ – величина этого сдвига). Предполагается, что энергия взаимодействия системы с термостатом значительно меньше энергии квантовых переходов в ближайшие возбужденные состояния. Тогда в представлении волновых функций ψ_l и ψ_r состояний в каждой из ям гамильтониан туннелирующей подсистемы может быть представлен в виде

$$H_s = \frac{1}{2}(\xi\sigma_z + \Delta\sigma_x),$$

где

$$\Delta = 2H_{lr} = \omega J,$$

где J – обменный интеграл. Потенциалом; σ_z и σ_x – матрицы Паули.

Собственные волновые функции гамильтониана H_s имеют вид линейной комбинаций

$$\psi_l = u\psi_l + v\psi_r, \quad \psi_r = u\psi_l - v\psi_r.$$

Поэтому гамильтониан всей системы, состоящей из подсистемы, туннелирующей между двумя состояниями, и термостата в виде фононного поля H_p принимает вид

$$H = H_s + H_p + V,$$

где V – оператор взаимодействия подсистемы с термостатом. Если принять основное кинетическое приближение, т. е. предположить, что функция распределения термостата с течением времени не изменяется, то матрица плотности туннелирующей подсистемы будет задаваться выражением

$$\rho_s^t = \left\langle e^{iHt} \rho_s(0) e^{-iHt} \right\rangle, \quad \langle \dots \rangle_p = \frac{(\text{Spe}^{-\beta H_p} \dots)}{\text{Spe}^{-\beta H_p}}, \quad (1)$$

где принята система единиц $\hbar = 1$.

Выполняя здесь усреднение по состояниям термостата. Для этого удобно ввести эволюционный оператор Лиувилля L , определяемый соотношением (см.[3])

$$e^{iHt} A e^{-iHt} = e^{iLt} A,$$

(A – произвольный оператор), откуда следует, что равенство

$$LA = [H, A]$$

Тогда выражение (1) для матрицы плотности состояний преобразуется к виду

$$\rho_s^t = \left\langle e^{i(L_s + L_p + L_{sp})t} \right\rangle_p \rho_s(0). \quad (2)$$

Выражение (2) в представлении взаимодействия принимает вид

$$\rho_s^t = e^{iL_s t} \left\langle S(t) \right\rangle_p, \quad S(t) = T_t e^{i \int_0^t L_{sp}(t') dt'},$$

где

$$L_{sp}(t') = e^{i(L_s + L_p)t'} L_{sp}(0) e^{-i(L_s + L_p)t'}.$$

Используя кумулянтное разложение

$$g(t) = \ln \langle S_\tau(t) \rangle_p = \sum_n \frac{1}{n!} \partial_\tau^n \ln \langle S_\tau(t) \rangle_p \Big|_{\tau=0},$$

где $S_\tau(t)$ содержит множитель в экспоненте множитель τ , который в конечном выражении принимает значение 1. Выполняя в получаемом равенстве $\rho_s^t = e^{iL_s t} e^{g(t)}$ дифференцирование, можно получить кинетическое уравнение вида

$$\partial_t \rho_s^t = iL_s \rho_s^t + M \rho_s^t, \quad M = e^{iL_s t} \partial_t g(t) e^{-iL_s t}, \quad (3)$$

где введено обозначение $\partial_t \equiv d/dt$. Это уравнение представляет собой общее уравнение Лиувилля исследуемой подсистемы, усредненное по состояниям термостата (см. [4]). Если предположить, что характерные времена изменения состояний подсистемы значительно меньше характерных времен взаимодействия с термостатом, то в пределе больших времен, в марковском пределе, в приближении второго порядка по взаимодействию получим, что

$$M = -e^{iL_s t} \int_0^{\infty} \langle L_{sp}(t) L_{sp}(t') \rangle_p dt' e^{-L_s t'},$$

или

$$M = -e^{iL_s t} \int_0^{\infty} \langle L_{sp} e^{i(L_s + L_p)t'} L_{sp} \rangle_p dt' e^{-L_s t'}.$$

Последовательное применение формулы (2) в правой части уравнении (3), первоначально раскрывая действие оператора Лиувилля на оператор плотности состояний, кинетическое уравнение может быть выражено через парные корреляционные функции оператора взаимодействия V в следующем виде:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_s^t = & i[H_s, \rho_s^t] + \int_0^{\infty} dt' \left(\langle V V^t \rangle_p \rho_s^t + \rho_s^t \langle V^t V \rangle_p \right) - \\ & - \int_0^{\infty} dt' \left(\langle V \rho_s^t V^t \rangle_p + \rho_s^t \langle V^t \rho_s^t V \rangle_p \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Это уравнение является общим кинетическим уравнением Лиувилля в приближении второго порядка по взаимодействию туннельной подсистемы с термостатом.

3. Туннельная релаксация

Времена релаксации исследуемой туннельной подсистемы описываются корнями характеристического многочлена матрицы R алгебраического уравнения вида $R \bar{\rho} = c$, которое является преобразованием Лапласа из уравнения (3). Эта матрица может быть представлена в виде

$$R = \begin{pmatrix} (p + 2W) & (A - i\Delta/2) & (A + i\Delta/2) \\ 2(A - i\Delta/2) & (p + \Omega + W + i\xi) & -W \\ 2(A + i\Delta/2) & -W & (p + \Omega + W - i\xi) \end{pmatrix},$$

где введены обозначения

$$\Omega = \int_0^{\infty} dt \langle (V_{ll}^t - V_{rr}^t)(V_{ll} - V_{rr}) \rangle_p, \quad W = 2 \int_0^{\infty} dt \langle V_{lr} (V_{rl}^t + V_{lr}^t) \rangle_p$$

и

$$2 \int_0^{\infty} dt \langle V_{lr} (V_{rl}^t - V_{lr}^t) \rangle_p .$$

Вычисление корней соответствующего полинома третьей степени относительно переменной p приводит к двум временам туннельной релаксации: времени продольной релаксации системы

$$\tau_{\parallel} = \left(\frac{\Delta^2 \Omega}{\varepsilon^2 + \Omega^2 + 2W} + 2W \left(1 - \frac{\Delta^2}{\varepsilon^2 + \Omega^2} \right) \right)^{-1}$$

и времени поперечной релаксации

$$\tau_{\perp} = \left(\Omega \left(1 + \frac{\Delta^2 / 2}{\varepsilon^2 + \Omega^2} \right) \frac{\Delta^2 \Omega}{\varepsilon^2 + \Omega^2 + 2W} + 2W \left(1 + \frac{\Delta^2}{\varepsilon^2 + \Omega^2} \right) \right)^{-1} ,$$

где $\varepsilon^2 = \xi^2 + \Delta^2$. Здесь коэффициенты W и A первого, а Ω нулевого порядка по интегралу междумного перекрытия J , соответственно. Эти выражения действительны во всем интервале температур.

1. *Kagan Yu., Klinger M.I.*, Phys.C. Solid State Phys., 7 2791 (1974).
2. *Anderson P.W., Halperin B.I., Yarma C.*, The Phil. Mag., 25 1 (1972).
3. *Зубарев Д.Н.* Неравновесная статистическая термодинамика.-М.:Наука, 1971.