

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 538.941

О РЕЛАКСАЦИИ НОРМАЛЬНОЙ СКОРОСТИ В КРИСТАЛЛЕ

М. Ю. Ковалевский, В. А. Красников

(кафедра квантовой статистики и теории поля)

На основе двух фундаментальных идей Н. Н. Боголюбова — концепции квазисредних и метода сокращенного описания — в рамках микроскопического рассмотрения учтено влияние кристаллической решетки на динамику сверхтекучей жидкости. Коэффициент торможения нормальной скорости выражен через корреляционную функцию. Найдены уравнения движения для плотностей аддитивных интегралов движения и сверхтекучего импульса. Доказана положительная определенность произведения энтропии.

Хорошо известно, какое огромное влияние оказали идеи и методы Н. Н. Боголюбова на развитие самых различных областей современной теоретической физики и математики. Для данной работы основополагающее значение имеют две из них: концепция квазисредних [1, 2], тесно связанная с представлениями о спонтанно нарушенной симметрии, и функциональная гипотеза, основанная на иерархии времен релаксации и сформулированная в монографии [3]. Эти идеи использованы для описания состояния равновесия и динамики систем с нарушенной фазовой инвариантностью, к которым принадлежат, например, сверхтекучий ⁴He и сверхпроводящие ферми-системы. Несмотря на близкую аналогию в описании явлений сверхтекучести и сверхпроводимости, в том и другом случае эффективно используются двухжидкостные представления, между ними существуют принципиальные отличия, связанные с дальнедействующим характером кулоновских сил и наличием кристаллической решетки. Последнее обстоятельство приводит к нарушению инвариантности относительно группы непрерывных трансляций, а значит, и к нарушению закона сохранения импульса. Таким образом, наличие кристаллической решетки сверхпроводника приводит к диссипации, отсутствующей у сверхтекучего гелия и связанной с процессами переброса и рассеяния на примесях. В феноменологическом подходе [4, 5] это учитывается введением в уравнение движения для плотности импульса слагаемого $-\tau_s^{-1} \rho_n \mathbf{v}_n \equiv -\gamma \mathbf{v}_n$, где τ_s — время релаксации нормальной скорости \mathbf{v}_n , ρ_n — нормальная плотность массы, γ — коэффициент торможения.

В данной работе мы покажем, как можно учесть влияние кристаллической решетки в рамках микроскопического рассмотрения. Будем считать, что гамильтониан электронов $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}$ содержит слагаемое \hat{V} , описывающее взаимодействие электронов с периодическим полем решетки и обладающее следующими свойствами симметрии:

$$[\hat{V}, \hat{N}] = 0, [\hat{V}, \hat{\mathcal{P}}_a] \neq 0, \exp\{i\hat{\mathcal{P}}_a\} \hat{V} \exp\{-i\hat{\mathcal{P}}_a\} = \hat{V}. \quad (1)$$

Здесь N , $\vec{\mathcal{P}}$ — операторы числа частиц и импульса, \mathbf{a} — вектор прямой решетки; оператор \mathcal{H}_0 включает кинетическую энергию электронов и

их потенциальную энергию взаимодействия друг с другом. Эволюция системы во времени определяется уравнением Лиувилля

$$\dot{\rho}(t) = i[\rho(t), \mathcal{H}]. \quad (2)$$

Рассмотрим сначала случай, когда неравновесный начальный статистический оператор ρ удовлетворяет соотношению

$$\exp\{i\widehat{\mathbf{P}}\mathbf{a}\}\rho\exp\{-i\widehat{\mathbf{P}}\mathbf{a}\} = \rho, \quad \widehat{\mathbf{P}} = \widehat{\mathcal{P}} - \nu\widehat{\mathbf{N}}, \quad (3)$$

где \mathbf{p} — сверхтекучий импульс (импульс конденсата куперовских пар). Подчеркнем, что в случае сверхтекучих систем именно оператор $\widehat{\mathbf{P}}$, а не $\widehat{\mathcal{P}}$ является генератором трансляций [6]. Тогда за время релаксации τ_r сразу происходит переход системы в состояние статистического равновесия:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \exp\{-i\mathcal{H}t\}\rho\exp\{i\mathcal{H}t\} \xrightarrow{t \gg \tau_r} W(t), \\ b(x, t) &\equiv \text{Sp } W(t) \widehat{b}(x) = \lim_{\nu \rightarrow 0} \lim_{\mathcal{V} \rightarrow \infty} \text{Sp } W_\nu(t) \widehat{b}(x), \\ W_\nu(t) &= \exp\{\Omega_\nu - Y_0 \mathcal{H} - Y_4 N - \nu Y_0 \widehat{f}(t)\}, \\ \widehat{f}(t) &= \int d^3x (\widehat{\Delta}(x) \exp\{-2i\varphi(x, t)\} + \text{э. с.}). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\widehat{b}(x)$ — произвольный квазилокальный оператор, Ω_ν — термодинамический потенциал, определяемый из условия $\text{Sp } W_\nu = 1$, \mathcal{V} — объем системы, Y_α — термодинамические силы и $\varphi(x, t)$ — асимптотическая фаза оператора порядка $\widehat{\Delta}(x) \equiv \psi_+(x)\psi_-(x)$. В эргодическом соотношении (4) учтено, что интегралами движения по отношению к гамильтониану \mathcal{H} являются только операторы $\widehat{\gamma}_{\alpha'} \equiv (\mathcal{H}, \widehat{\mathbf{N}})$; $\alpha' = 0, 4$. Средние $\zeta_{\alpha'}(x, t)$ операторов плотностей $\widehat{\zeta}_{\alpha'}(x)$, $(\widehat{\gamma}_{\alpha'} = \int d^3x \widehat{\zeta}_{\alpha'}(x))$ в силу условий (1) — (4) являются периодическими функциями координат \mathbf{x} и не зависят от времени t : $\zeta_{\alpha'}(x, t) = \zeta_{\alpha'}(x + a, t) = \zeta_{\alpha'}(x, 0)$.

Для произвольного трансляционно-инвариантного оператора $\widehat{b}(x)$ введем усреднение по элементарной ячейке решетки:

$$\bar{b}(x) \equiv \frac{1}{v_0} \int_{v_0} d^3x' \text{Sp } \rho \widehat{b}(x + x') \equiv \overline{\text{Sp } \rho \widehat{b}(x)}, \quad (5)$$

где v_0 — объем элементарной ячейки. Если оператор ρ удовлетворяет условию (3), то $d\bar{b}(x)/dx_k = 0$. В соответствии с уравнением Лиувилля (2) и с учетом эргодического соотношения (4) имеем

$$\begin{aligned} \text{Sp } \rho(t) \widehat{\gamma}_{\alpha'} &= \text{Sp } \rho(0) \widehat{\gamma}_{\alpha'} = \mathcal{V} \cdot \overline{\text{Sp } \rho \widehat{\zeta}_{\alpha'}(0)}, \\ \text{Sp } \rho(t) \widehat{\gamma}_{\alpha'} &= \text{Sp } W(t) \widehat{\gamma}_{\alpha'} = \mathcal{V} \cdot \overline{\text{Sp } W \widehat{\zeta}_{\alpha'}(0)}. \end{aligned}$$

Отсюда следует связь термодинамических сил $Y_{\alpha'}$ с начальным статистическим оператором ρ :

$$\bar{\zeta}_{\alpha'} = \overline{\text{Sp } \rho \zeta_{\alpha'}(0)} = \bar{\zeta}_{\alpha'}(Y) = \overline{\text{Sp } W \zeta_{\alpha'}(0)}. \quad (6)$$

Учитывая условие (3) и формулы (2), (4), найдем асимптотическую структуру параметра порядка:

$$\bar{\Delta}(x, t) = \overline{\text{Sp}} W(t) \widehat{\Delta}(x) = \bar{\eta} \exp \{2i \bar{\varphi}(x, t)\}, \quad \bar{\varphi}(x, t) = \mathbf{p}x + \frac{Y_4}{Y_0} t + \bar{\varphi}, \quad (7)$$

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{2} \text{Im} \ln \overline{\text{Sp}} \rho \widehat{\Delta}(0) + \int_0^{\infty} d\tau \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \text{Im} \ln \text{Sp} \rho(\tau) \widehat{\Delta}(0) - \frac{Y_4}{Y_0} \right),$$

$$\bar{\eta} = \text{Re} \overline{\text{Sp}} W \widehat{\Delta}(x).$$

При получении (7) мы предположили, что $|\mathbf{p}| |a| \ll 1$. Формулы (6), (7) полностью определяют эргодическое соотношение (4).

Пусть теперь начальный статистический оператор ρ не удовлетворяет условию (3). В этом случае среднее $\bar{b}(x)$ (5) зависит от координаты x . Будем считать, что отклонения от пространственной структуры (3), связанные с неоднородностями, малы, т. е. средние $\bar{b}(x)$ слабо зависят от x (в этом смысле состояния являются слабо неоднородными).

Исследуем эволюцию слабо неоднородных состояний в предположении малости взаимодействия V . В соответствии с функциональной гипотезой при временах $t \gg \tau_r$ статистический оператор $\rho(t)$ зависит от времени только через параметры сокращенного описания — плотности аддитивных интегралов движения $\bar{\xi}_\alpha(x, t)$ ($\alpha=0, k, 4$) и фазы $\bar{\varphi}(x, t)$ [3, 7]:

$$\rho(t) \xrightarrow{t \gg \tau_r} \rho(\bar{\xi}(t), \bar{\varphi}(t)), \quad (8)$$

$$\bar{\xi}_\alpha(x, t) = \overline{\text{Sp}} \rho(\bar{\xi}(t), \bar{\varphi}(t)) \widehat{\xi}_\alpha(x),$$

$$\bar{\varphi}(x, t) = \frac{1}{2} (\text{Im} \ln \overline{\text{Sp}} \rho(\bar{\xi}(t), \bar{\varphi}(t)) \widehat{\Delta}(x)).$$

Используя метод, развитый в [7, 8], нетрудно сформулировать замкнутое интегральное уравнение для огрубленного статистического оператора $\rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi})$, удобное для его нахождения в теории возмущений по пространственным градиентам и взаимодействию V :

$$\rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) = W(Y, \chi) - \int_{-\infty}^0 d\tau \exp \{iH\tau\} \cdot \left\{ i[\widehat{H}, W(Y, \chi)] + i[\widehat{V}, \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi})] + \right. \\ \left. + \int d^3x \left(\frac{\delta \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi})}{\delta \bar{\xi}_\alpha(x)} \cdot L_\alpha(x) + \frac{\delta \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi})}{\delta \bar{\varphi}(x)} \cdot (L_\varphi(x) - L_\varphi^{(0)}) \right) \right\} \exp \{-iH\tau\}, \quad (9)$$

$$W(Y, \chi) = \exp \left\{ \Omega_V - \int d^3x Y_\alpha(x) (\widehat{\xi}_\alpha(x) + v \delta_{\alpha 0} (\widehat{\Delta}(x) \exp[-i\chi(x)] + \text{э. с.})) \right\},$$

$$\widehat{H} \equiv \widehat{\mathcal{H}} + L_\varphi^{(0)} \widehat{N}.$$

Здесь $W(Y, \chi)$ — локально-равновесный статистический оператор, в котором Y_α, χ определяются условиями (8). Величины L_α и L_φ , определяющие эволюцию параметров $\bar{\xi}_\alpha$ и $\bar{\varphi}$ ($\alpha=0, k, 4; k=1, 2, 3$):

$$\dot{\bar{\xi}}_\alpha = L_\alpha, \quad \dot{\bar{\varphi}} = L_\varphi \quad (10)$$

имеют вид

$$L_{\alpha}(x) = -\nabla_k \bar{\text{Sp}} \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) \widehat{\xi}_{\alpha k}(x) + i \bar{\text{Sp}} \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) [\widehat{V}, \widehat{\xi}_{\alpha}(x)], \quad (11)$$

$$L_{\bar{\varphi}}(x) = \frac{1}{2} \text{Re} \frac{\bar{\text{Sp}} \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) [\mathcal{X}_0 + \widehat{V}, \widehat{\Delta}(x)]}{\text{Sp} \rho(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) \widehat{\Delta}(x)},$$

где операторы плотности потоков $\widehat{\xi}_{\alpha k}$ определяются формулой $i[\mathcal{X}_0, \widehat{\xi}_{\alpha}(x)] = -\nabla_k \widehat{\xi}_{\alpha k}(x)$. В соответствии с определением сверхтекучего импульса $\mathbf{p} = \nabla \varphi$ и формулами (10), (11) получим

$$\mathbf{p} = \nabla L_{\bar{\varphi}} = \mathbf{L}_p. \quad (12)$$

Найдем величины L_{α} и \mathbf{L}_p в главном приближении теории возмущений по пространственным градиентам и взаимодействию \widehat{V} :

$$L_{\alpha} = \sum_{n,m} L_{\alpha(m)}^{(n)}, \quad \mathbf{L}_p = \sum_{n,m} \mathbf{L}_{p(m)}^{(n)}.$$

Здесь верхний индекс означает порядок разложения по степеням взаимодействия, а нижний — по степеням неоднородностей. Величины $L_{\alpha(1)}^{(0)}$ и $\mathbf{L}_{p(1)}^{(0)}$ найдены в [6] и имеют вид

$$L_{\alpha(1)}^{(0)} = -\nabla_k \bar{\xi}_{\alpha k}, \quad \mathbf{L}_{p(1)}^{(0)} = \nabla p_0, \quad (13)$$

где плотности потоков $\bar{\xi}_{\alpha k}$ и p_0 определяются формулами

$$\bar{\xi}_{\alpha k} = -\frac{\partial}{\partial Y_{\alpha}} \frac{\omega Y_k}{Y_0} + \frac{\partial \omega}{\partial p_k} \frac{\partial p_0}{\partial Y_{\alpha}}, \quad p_0 = (Y_4 + Y_p) Y_0^{-1} = L_{\bar{\varphi}}^{(0)}$$

и $\omega(Y, \mathbf{p}) = \lim_{v \rightarrow 0} \lim_{\mathcal{T} \rightarrow \infty} \frac{\Omega_v}{\mathcal{T}}$ — плотность термодинамического потенциала.

Поэтому достаточно найти в главном приближении только величины $L_{\alpha(0)}^{(n)}$, $n=1, 2$. Поправки, связанные с взаимодействием, в уравнении для сверхтекучего импульса (12) начинаются со слагаемых $\mathbf{L}_{p(1)}^{(n)}$, $n \geq 1$, так что в главном приближении их учитывать не нужно. Согласно (5), (9), (11) величина $L_{\alpha(0)}^{(1)}$ обращается в нуль:

$$L_{\alpha(0)}^{(1)}(x) = i \bar{\text{Sp}} \rho^{(0)}(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) [\widehat{V}, \widehat{\xi}_{\alpha}(x)] = \frac{i}{\mathcal{T}} \text{Sp} W^{(0)}[\widehat{V}, \widehat{\gamma}_{\alpha}] = 0.$$

Здесь $\rho^{(0)} = W^{(0)}$ имеет вид

$$W^{(0)}(Y, \varphi) = \exp(\Omega_v - Y_{\alpha} \widehat{\gamma}_{\alpha} - v Y_0 \int d^3x (\widehat{\Delta}(x) \exp\{-i\bar{\varphi}(x)\} + \text{э. с.})), \quad \varphi = \chi.$$

В следующем приближении по \widehat{V} , учитывая (9), (11), найдем

$$L_{\alpha(0)}^{(2)} = i \bar{\text{Sp}} \rho_{(0)}^{(1)}(\bar{\xi}, \bar{\varphi}) [\widehat{V}, \widehat{\xi}_{\alpha}(x)] = -\frac{1}{\mathcal{T}} \int_{-\infty}^0 d\tau \text{Sp} [W^{(0)}, \widehat{V}(\tau)] [\widehat{V}, \widehat{\gamma}_{\alpha}]. \quad (14)$$

Замечая, что $[\widehat{V}, \mathcal{N}] = 0$, получим $L_{\alpha(0)}^{(2)} = 0$. При $\alpha=0$ формула (11) эквивалентна следующему выражению:

$$L_{0(0)}^{(2)}(x) = -\frac{i}{\mathcal{T}^2} \int_{-\infty}^0 d\tau \frac{\partial}{\partial \tau} \text{Sp} [W^{(0)}, \widehat{V}(\tau)] \widehat{V},$$

откуда легко видеть, что $L_{\alpha(0)}^{(2)}=0$ и, таким образом,

$$L_{\alpha(0)}^{(2)}(x) = -\frac{\delta_{\alpha k}}{\mathcal{V}^0} \int_{-\infty}^0 dt \operatorname{Sp} [W^{(0)}, \widehat{V}(\tau)] [\widehat{V}, \widehat{\mathcal{F}}_k]. \quad (15)$$

Учитывая соотношение

$$[W^{(0)}, \widehat{V}(\tau)] = -Y_{\beta} W^{(0)} \int_0^1 d\lambda W^{(0)-\lambda} [\widehat{Y}_{\beta}, \widehat{V}(\tau)] W^{(0)\lambda},$$

можно увидеть, что слагаемые с $\beta=0,4$ в этом выражении не дают вклад в (15). Тогда

$$L_{\alpha(0)}^{(2)} = -\frac{\delta_{\alpha k}}{\mathcal{V}^0} Y_l \int_{-\infty}^0 dt \int_0^1 d\lambda \operatorname{Sp} W^{(0)} [\widehat{V}(\tau, \lambda), \widehat{\mathcal{F}}_l] [\widehat{V}, \widehat{\mathcal{F}}_k].$$

Эту формулу можно упростить с помощью условия $\widehat{T}\widehat{P}$ -инвариантности, где \widehat{T} и \widehat{P} — операторы временной и пространственной инверсии, действующие на полевой оператор $\psi(x)$ согласно соотношению $\widehat{T}\widehat{P}\psi(x) \times (\widehat{T}\widehat{P})^+ = \psi(-x)$. Тогда

$$\operatorname{Sp} W^{(0)} [\widehat{V}(\tau, \lambda), \widehat{\mathcal{F}}_k] [\widehat{V}, \widehat{\mathcal{F}}_l] = \operatorname{Sp} W^{(0)} [\widehat{V}(-\tau, \lambda), \widehat{\mathcal{F}}_k] [\widehat{V}, \widehat{\mathcal{F}}_l],$$

и если воспользоваться условием $\widehat{T}\widehat{P}\widehat{V}(\widehat{T}\widehat{P})^+ = \widehat{V}$ и формулой

$$\int_{-\infty}^0 dt \int_0^1 d\lambda \operatorname{Sp} W^{(0)} (\widehat{A}(\tau, \lambda)\widehat{B} + \widehat{B}(\tau, \lambda)\widehat{A}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{Sp} W^{(0)} \widehat{A}(\tau)\widehat{B},$$

можно представить $L_{\alpha(0)}^{(2)}$ в виде

$$L_{\alpha(0)}^{(2)} = -\delta_{\alpha k} \gamma_{kl} v_{nl}, \quad (16)$$

где

$$\gamma_{kl} = -\frac{Y_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3x \operatorname{Sp} W^{(0)} [\widehat{V}(\tau), \widehat{\pi}_k(x)] [\widehat{V}, \widehat{\pi}_l(0)] \quad (17)$$

— коэффициент торможения нормальной скорости. Если пренебречь анизотропией статистического оператора $W^{(0)}$, положив в формуле (17) $v_n=0$ и $p=0$, получим $\gamma_{kl} = \gamma\delta_{kl}$. Сравнение выражения (17) с формулой для τ_s [4, 5] приводит к следующему выражению для времени релаксации:

$$\tau_s^{-1} = -\frac{Y_0}{6\mathcal{V}^0\rho_n} \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{Sp} W^{(0)} [\widehat{V}(\tau), \widehat{\mathcal{F}}_k] [\widehat{V}, \widehat{\mathcal{F}}_k]. \quad (18)$$

Докажем положительность τ_s . Для этого выпишем среднее (18) в системе собственных векторов операторов $A, \widehat{\mathcal{F}}_k$:

$$\tau_s^{-1} = \frac{Y_0}{6\mathcal{V}^0\rho_n} \sum_{n,m} \delta(E_n - E_m) W_n (\widehat{\mathcal{F}}_n - \widehat{\mathcal{F}}_m)^2 |V_{nm}|^2 \geq 0.$$

Здесь E_n, \vec{P} — собственные значения операторов \hat{H}, \hat{P} ; $W_n = \langle n | W^{(0)} | n \rangle, V_{nm} = \langle n | \hat{V} | m \rangle$.

Нетрудно показать, что положительность величины τ_s обеспечивает положительную определенность производства энтропии. Действительно, с учетом (16) уравнения движения для плотностей аддитивных интегралов движения ξ_α и сверхтекучего импульса \mathbf{p} имеют вид

$$\dot{\xi}_\alpha = -\nabla_k \bar{\xi}_{\alpha k} - \delta_{\alpha k} \frac{\rho_n v_{nk}}{\tau_s}, \quad \dot{\mathbf{p}} = \nabla p_0.$$

Тогда для плотности энтропии σ , определяемой формулой $\sigma = -\omega + Y_\alpha \bar{\xi}_\alpha$, получим уравнение

$$\dot{\sigma} + \text{div } \sigma v_n = \frac{Y_k^2}{Y_0 \tau_s} \rho_n \geq 0.$$

В заключение авторы выражают глубокую благодарность акад. Н. Н. Боголюбову и чл.-корр. АН УССР С. В. Пелетминскому за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bogoliubov N. N. // Physica, 1960. S26. P. 1. [2] Боголюбов Н. Н. Препринт ОИЯИ № Д781. Дубна, 1961; Избр. труды. Киев, 1971. Т. 3. С. 174. [3] Боголюбов Н. Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М.; Л., 1946. [4] Гинзбург В. Л. // ЖЭТФ. 1961. 41, № 3. С. 828. [5] Epz С. P. // Rev. Mod. Phys. 1974. 46, N 4. P. 705. [6] Боголюбов Н. Н. (мл.), Ковалевский М. Ю., Пелетминский С. В. и др. // ЭЧАЯ. 1985. 16, № 4. С. 875. [7] Ахиезер А. И., Пелетминский С. В. Методы статистической физики. М., 1977. [8] Ковалевский М. Ю., Лавриненко Н. М., Пелетминский С. В., Соколовский А. И. // ТМФ. 1982. 50, № 3. С. 450.

Поступила в редакцию
04.11.89

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1990. Т. 31. № 4

УДК 517.9

О НЕКОТОРЫХ АПРИОРНЫХ ОЦЕНКАХ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИИ

А. В. Щепетилев

(кафедра математики)

Рассматривается краевая задача для квазилинейного параболического уравнения, описывающая процесс цементации при закалке стального образца. Проведено сравнение ее решения с решением аналогичной линейной задачи. Показано, что за счет выбора коэффициента диффузии, граничных и начальных условий в линейном случае можно получить двухстороннюю оценку решения нелинейной задачи через решения линейной.

1. Одной из составных частей процесса термической обработки стали является цементация, представляющая собой диффузионное проникновение углерода внутрь железного образца при температурах порядка 1000°C [1]. Задача, описывающая этот процесс, имеет вид