

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Национальный проект «Образование»

Инновационная образовательная программа ННГУ. Образовательно-научный центр

«Информационно-телекоммуникационные системы:
физические основы и математическое обеспечение»

Г.Ф. Ефремов, В.В. Шарков

Физика открытых информационных систем

*Учебно-методические материалы по программе повышения
квалификации «Новые подходы к проблемам генерации, обработки,
передачи, хранения, защиты информации
и их применения»*

Нижний Новгород

2007

Учебно-методические материалы подготовлены в рамках инновационной образовательной программы ННГУ: Образовательно-научный центр «Информационно-телекоммуникационные системы: физические основы и математическое обеспечение»

Ефремов Г.Ф., Шарков В.В. Физика открытых информационных систем. Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Новые подходы к проблемам генерации, обработки, передачи, хранения, защиты информации и их применения». Нижний Новгород, 2007, 84 с.

Учебно-методический материал посвящен вопросам интенсивно развивающейся в последнее время теории открытых квантовых систем, являющихся одной из новых областей статистической физики. Потребность углубленного изучения современных методов квантовой статистической физики обусловлена широким спектром ее применений в самых различных областях: теории информации, квантовой радиофизике и нелинейной оптике и т.д.

© Ефремов Г.Ф., Шарков В.В.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие

Глава 1. Введение в теорию тепловых флуктуаций в макроскопических системах

- § 1.1. Основы классического и квантового статистического описания систем 7
- § 1.2. Физическая природа тепловых флуктуаций и процессов диссипации 9

Глава 2. Основные статистические принципы и их следствия

- § 2.1. Временные характеристики флуктуаций (классическая область) 15
- § 2.2. Временные характеристики флуктуаций (квантовая область) 17
- § 2.3. Спектральные характеристики флуктуаций 18
- § 2.4. Корреляция флуктуаций нескольких величин 21
- § 2.5. Микроскопическая обратимость во времени и ее следствия 22
- § 2.6. Распределение Гиббса. Физические следствия для флуктуаций 28

Глава 3. Динамические характеристики нелинейных систем

- § 3.1. Поведение системы при наличии произвольного возмущения.
S – матрица 31
- § 3.2. Линейные и нелинейные временные характеристики сред для динамических возмущений 37
- § 3.3. Обобщенные восприимчивости и их свойства 46
- § 3.4. Методы расчета кинетических коэффициентов (коэффициентов переноса) 51

Глава 4. Вывод стохастических уравнений для открытой динамической подсистемы. Простые модели физических систем.

- § 4.1. Осциллятор, взаимодействующий с термостатом 54
- § 4.2. Нелинейное стохастическое уравнение для открытой динамической системы 58
- § 4.3. Гауссова модель термостата. Броуновское движение двухуровневой системы 63
- § 4.4. Феноменологическая теория флуктуаций и флуктуационно-диссипационная теорема (ФДТ) 67
- § 4.5. Теорема Найквиста-Каллена-Велтона 71
- § 4.6. Микроскопическая обратимость во времени и соотношения

взаимности Онсагера для линейных восприимчивостей	73
§ 4.7. Простые применения ФДТ	76
§ 4.8. ФДТ и простые статистические модели физических систем	77

ПРЕДИСЛОВИЕ

Теория информации как самостоятельная научная дисциплина возникла в середине XX века и сразу же получила заметное развитие. Физическую и математическую основу теории информации составляют статистическая физика и теория вероятностей.

Значительные успехи теории информации, её бурное развитие обусловлены как общетеоретической, так и практической значимостью. В свою очередь, теория информации послужила толчком для развития математической статистики, нелинейной статистической термодинамики и т.д.

Теория информации, также как и современная физика, условно делится на классическую и квантовую. Квантовая теория информации, опираясь прежде всего на квантовую статистику и теорию измерений, приобретает всё большую практическую значимость. Она служит теоретической основой новых принципов и технологий информационных систем, которая, в свою очередь, опирается на современную элементную базу: полупроводниковую наноэлектронику и квантовую оптоэлектронику.

Как известно, понятие динамической системы, обладающей малым числом степеней свободы, является идеализацией. Строго говоря, в природе их не существует. Поясним сказанное на простом примере. Рассмотрим атом водорода: электрон движущийся в кулоновском поле ядра. Согласно нерелятивистской квантовой теории атом может находиться (как угодно долго) в любом из стационарных состояний. На самом деле строго стационарным является только основное состояние. С любого возбужденного уровня происходят спонтанные переходы с излучением фотона. Физическая причина этих переходов - взаимодействие с электромагнитным вакуумом, имеющим бесконечное число степеней свободы. Таким образом, атом представляет собой открытую квантовую систему.

Взаимодействие квантовой системы, обладающей малым числом степеней свободы, с системой, имеющей бесконечное число степеней свободы, приводит к процессам релаксации и флуктуации в динамической подсистеме. Единство физических причин релаксации и флуктуаций в системе настоятельно требует развития единого способа рассмотрения этих явлений. Адекватным этим целям является метод стохастических уравнений (ланжевенский метод), восходящий к классическим работам Ланжевена, Смолуховского, Эйнштейна, начала двадцатого века. До определенного момента времени этот метод оставался феноменологическим. С помощью ланжевенского метода получены существенные результаты С.М. Рыловым, М.И. Левиным при построении

теории электромагнитных флуктуаций в термодинамически равновесных “линейных” средах; Л.Д. Ландау, Е.Н. Лифшицем при рассмотрении теории гидродинамических и термических флуктуаций. Развитие радиофизики (в особенности лазерной физики и нелинейной оптики) стимулировало применение этого метода к неравновесным и нелинейным системам. Основная роль статистического обоснования феноменологической теории стохастических уравнений Ланжевена принадлежит флуктуационно-диссипационным соотношениям и теоремам. Полуфеноменологический метод ланжевенских уравнений использовался М. Лэксом и Г. Хаккенем с соавторами для построения статистической теории лазера.

Первостепенное значение в современной теории релаксации и флуктуаций неравновесных и нелинейных системах принадлежит последовательному микроскопическому выводу стохастических уравнений и их последующему анализу. Этим вопросам и посвящено данный учебно-методический материал.

ГЛАВА 1. ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ТЕПЛОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ В МАКРОКОПИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

В данном разделе из качественных физических соображений на простом физическом примере продемонстрируем связь между флуктуациями и диссипативными свойствами системы, показывая их единую статистическую природу. Одновременно на физических примерах введем простейшие временные и спектральные характеристики флуктуаций и рассмотрим взаимосвязь между ними.

§ 1.1. Основы классического и квантового статистического описания систем

Флуктуационно-диссипационная теория макросистем опирается на постулаты классической или квантовой статистической механики микрочастиц, образующих исследуемые системы. Остановимся кратко на общих вопросах статистического описания макроскопических систем.

В классической механике состояние системы, состоящей из N – частиц, определяется заданием всех обобщенных координат и импульсов $\{q_i, p_i\}$, ($i = 1, 2, \dots, 3N$). Если обобщенные координаты и импульсы в момент времени t_0 имеют некоторые значения $\{q_i^0, p_i^0\}$, то их значения в последующий момент определяются из канонических уравнений Гамильтона: $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$, где $H = H(q_1, p_1, \dots, q_{3N}, p_{3N})$ – есть гамильтониан данной системы.

В квантовой механике состояние может быть задано, например, волновой функцией или вектором состояния Ψ . По своей сути квантовая механика есть статистическая теория.

Состоянию Ψ – отвечает определенный статистический ансамбль. Заданием состояния Ψ , тем самым, определяются вероятности измерения любой физической величины. Изменение состояния Ψ с течением времени происходит согласно уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi(t),$$

где H есть оператор Гамильтона системы.

Важно отметить, что, как классические, так и квантовые уравнения микроскопического движения обратимы во времени.

Перейдем к статистическому описанию макроскопических систем. В классической статистике система, состоящая из N – частиц описывается (N -частичной) функцией распределения:

$$W_N(q_1, p_1, \dots, q_{3N}, p_{3N}, t) = W_N, \quad (1.1)$$

которая подчиняется уравнению Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial W_N}{\partial t} = \{H, W_N\}, \quad (1.2)$$

где $\{H, W_N\}$ - классические скобки Пуассона.

Задание статистического ансамбля, характеризуемого функцией распределения (1.1), позволяет вычислить средние значения любых физических величин, зависящих от координат и импульсов частиц. В квантовой статистической механике состояние системы задается оператором матрицы плотности ρ , который изменяется во времени согласно уравнению фон Неймана:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho], \quad (1.3)$$

где $\frac{1}{i\hbar} [H, \rho] = \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H)$ есть квантовая скобка Пуассона.

Средние значения физических величин в некотором состоянии определяются согласно

$$\langle x \rangle = Sp(\rho x),$$

где оператор физической величины есть x .

В классическом пределе матрица плотности переходит в классическую функцию распределения и, соответственно, квантовое уравнение (1.3) переходит в классическое (1.2).

В статистической механике также выполняются принципы причинности, и обратимости во времени. Отметим, что статистическое описание с помощью ρ (или W), как в квантовой, так и в классической теории является более общим, чем динамическое.

Вместе с тем более общее описание не ведет к усложнению теории. На самом деле, в силу колоссально-большого числа частиц, образующих макроскопические системы, возможно их упрощенное описание. В термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$) возникают специфические статистические закономерности. В результате для описания наиболее существенных свойств макроскопических тел оказывается достаточным меньшее число параметров, представляющих собой некоторые средние по статистическому ансамблю.

Венцом статистической теории является распределение Гиббса, которое описывает состояние замкнутой макроскопической системы или какой-то ее макроскопической части в термодинамическом равновесии

$$\mathbf{r} = e^{b(F-H)}, \quad (1.4)$$

где H – гамильтониан системы; $\beta = 1/T$ – есть обратная температура (постоянная Больцмана $k = 1$); F – свободная энергия, определяемая из условия нормировки

$$\text{Sp } \mathbf{r} = 1. \quad (1.5)$$

Основное свойство распределения (ансамбля) Гиббса (1.4) состоит в том, что оно зависит от интегралов движения системы (в данном случае от энергии).

Распределение Гиббса (1.4) есть наиболее вероятное распределение при заданном среднем значении энергии системы.

§ 1.2. Физическая природа тепловых флуктуаций и процессов диссипации

Поясним на примере, каким образом статистические закономерности, возникающие в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty$), приводят к тому, что оказывается возможным упрощенное описание свойств макроскопических тел.

Рассмотрим одну из наиболее простых моделей макросистемы – осциллятор, находящийся в тепловом равновесии с диссипативным окружением. На данном простом примере мы покажем физический смысл и значимость установления связи между «динамическими» и «флуктуационными» характеристиками системы. Впоследствии мы не раз еще вернемся к этому примеру (последовательно усложняя его), как к наглядной иллюстрации развиваемой флуктуационно-диссипационной теории. Эта модель соответствует, например, механическому маятнику, электрическому колебательному контуру и т.д.

Если взаимодействие осциллятора с внешней средой, которую мы условно будем называть «термостатом», слабое то состояние осциллятора при термодинамическом равновесии определяется распределением Гиббса (1.4)

$$\mathbf{r} = e^{b(F-H)},$$

где H_0 – гамильтониан невзаимодействующего осциллятора

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

По данному распределению (1.4) (соответствующему статистическому ансамблю) могут быть вычислены средние значения любых физических величин, характеризующих осциллятор. Например, среднее значение энергии осциллятора будет равно

$$\bar{E} = Spr_0 H_0. \quad (1.6)$$

Поскольку уровни энергии осциллятора известны

$$E_N = \mathbf{h}w_0 \left(n + \frac{1}{2}\right); n = 0, 1, 2, \dots,$$

то не составляет особого труда по формуле (1.6) вычислить среднее значение энергии. В частности, средняя энергия осциллятора в классической области $\mathbf{h}w_0 \ll T$ есть

$$\bar{E} = T \quad (k = 1).$$

Принимая во внимание, что средняя потенциальная энергия осциллятора равна средней кинетической, получим средний квадрат флуктуаций координаты осциллятора

$$\left\langle \frac{1}{2} m w_0^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} T$$

или

$$\langle x^2 \rangle = \frac{T}{m w_0^2}. \quad (1.7)$$

Для среднего квадрата флуктуаций заряда на конденсаторе в колебательном контуре имеем соответственно ($x \rightarrow q, m \rightarrow L, w_0^2 \rightarrow \frac{1}{LC}$)

$$\langle q^2 \rangle = \frac{T}{L w_0^2} \quad (1.8)$$

Перейдем к более детальному описанию статистических свойств заряда на конденсаторе. Вследствие теплового движения (обусловленного взаимодействием с термостатом) заряд q на конденсаторе в колебательном контуре будет случайной функцией времени: $q = q(t)$. Если рассматривать $q(t)$ в течение достаточно большого промежутка времени τ , то среднее значение по времени

$$\overline{q(t)}^t = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' q(t') \quad (1.9)$$

окажется равным нулю.

В соответствии с эргодическим принципом статистической физики усреднение во времени (1.9) эквивалентно усреднению по ансамблю Гиббса (1.4). Используя эту эквивалентность, мы сможем на опыте измерить средний квадрат флуктуаций заряда (1.8). Для этого достаточно случайную функцию $q(t)$ времени «подать» на квадратичный детектор, где величина $q(t)$ перемножается, а затем усредняется по времени за характерное время t данного прибора.

$$\overline{q^2(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' q^2(t') = \langle q^2(t) \rangle = \text{Spr}_0 q^2(t).$$

Линией обозначено усреднение по времени, угловыми скобками – усреднение по ансамблю Гиббса (1.4).

Эволюция случайной «координаты» q осциллятора во времени обусловлена как тепловым движением (электроны получают толчки со стороны атомов решетки), так и осцилляторным движением между толчками. Это приводит к тому, что между значениями случайной величины q в различные моменты времени t и $t+t$ возникает статистическая зависимость – значение величины q в момент времени t будет влиять на вероятность ее значения в момент $t+t$.

Рассматривая $q(t)$ и $q(t+t)$ как две случайные величины, усредним их произведение по ансамблю Гиббса

$$M(t, t+t) = \langle q(t)q(t+t) \rangle. \quad (1.10)$$

Эта функция, которая носит название временной функции корреляции, есть важнейшая статистическая характеристика случайной величины $q(t)$ и определяет совместно с корреляциями высших порядков статистику случайного процесса $q(t)$. Эквивалентность усреднения по ансамблю и по времени позволяет свести измерение временной функции корреляции (1.10) на опыте, к измерению среднего значения произведения по времени

$$\overline{q(t)q(t+t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t dt q(t)q(t+t) = \langle q(t)q(t+t) \rangle.$$

Наряду с временными характеристиками флуктуаций случайного процесса будем рассматривать их спектральные свойства. Разложение в спектр случайной величины $q(t)$

$$q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2p} q(w) e^{iwt} \quad (1.11)$$

может быть получено с помощью спектрального прибора, выполняющего операцию

$$q_{\Delta\omega}(t) = \int_{\Delta\omega} \frac{dw}{2p} q(w) e^{iwt} + K.C.,$$

где $\Delta\omega$ - полоса фильтра, определяющая разрешающую способность прибора. Далее, используя детектор, нетрудно измерить величину

$$\overline{q_{\Delta\omega}(t)q_{\Delta\omega'}(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\frac{t}{2}}^{\frac{t}{2}} dt q_{\Delta\omega}(t)q_{\Delta\omega'}(t) = \int_{\Delta\omega} \frac{dw}{2p} \int_{\Delta\omega'} \frac{dw'}{2p} \langle q(w)q^*(w') \rangle e^{i(w-w')t},$$

которая не будет зависеть от времени, если

$$\langle q(w)q^*(w') \rangle = S(w)2p\delta(w-w'). \quad (1.12)$$

Таким образом, на опыте измеряем величину

$$\overline{q_{\Delta w}(t)q_{\Delta w'}(t')} = S(w)\Delta w.$$

Величина $S(w)$ – называемая спектральной плотностью (мощностью) флуктуаций, связанна с полным квадратом флуктуаций

$$\langle q^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2p} S(w).$$

Запишем $S(w)$ в явном виде, воспользовавшись стационарностью распределения Гиббса. В этом случае

$$M(t, t_1) = M(t - t_1) = \langle q(t)q(t_1) \rangle = \langle qq(t - t_1) \rangle,$$

где q - случайная величина в некоторый начальный момент времени. Тогда из определений (1.11) и (1.12) имеем

$$S(w) = \langle qq(w) \rangle.$$

Более детально вопросы описания статистических свойств макроскопических систем описаны в Главе 2.

Подчеркнем, что при вычислении полного квадрата флуктуаций координаты (1.8) существенно использовалась малость взаимодействия осциллятора с термостатом.

Возникает вопрос, каким образом найти более тонкие статистические характеристики флуктуаций – функцию корреляции (1.10) или спектральную плотность флуктуаций $S(w)$? Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо знать эволюцию во времени случайной величины $x(t)$. Известно, как ведет себя осциллятор, выведенный из положения равновесия. В силу взаимодействия с термостатом колебания осциллятора затухают соответственно уравнению движения:

$$m\ddot{x} + mw^2x + g\dot{x} = f^{cm}(t). \quad (1.13)$$

Здесь под x понимается уже среднее значение координаты осциллятора (и имеются в виду большие отклонения по сравнению с тепловыми колебаниями); $f^{cm}(t)$ - внешняя сила, действующая на осциллятор, $g\dot{x}$ - сила трения, обуславливающая взаимодействия с термостатом.

Нетрудно понять микроскопическую природу затухания колебаний осциллятора. Затухание колебаний механического маятника вызвано столкновением груза с хаотически движущимися атомами газа. В случае колебательного контура, затухание колебаний электрического тока обусловлено, например, взаимодействием электронов проводимости

с колебаниями атомов решетки – фононами (возможны и другие механизмы возникновения сопротивления).

Пусть теперь вследствие флуктуации в момент времени t_0 , возникло некоторое значение, превышающее среднеквадратичное отклонение. Такие отклонения маловероятны, но не исключены. Те же самые причины, что и при заданном (внешнем) отклонении, будут приводить к затуханию, «рассасыванию» этой флуктуации. Естественно предположить, что случайная величина будет подчиняться уравнению, аналогичному «для средних значений».

Для того, чтобы правильно описать флуктуации переменной x , и оставить неизменным уравнение «для средних» (1.13), мы должны ввести в правую часть уравнения (1.13) случайный источник $x(t)$ со строго определенными статистическими характеристиками.

$$m\ddot{x} + m\omega^2 x + g\dot{x} = f^{cm}(t) + x(t). \quad (1.14)$$

Как ясно из вышесказанного, для произвольного осциллятора причина затухания и причина (источник) флуктуаций одна и та же. На примере колебательного контура мы подчеркнули, что причина затухания колебаний (сопротивления) обусловлена столкновениями электронов проводимости с фононами. В то же время, электроны получают случайный импульс. Вследствие этого на сопротивлении возникает случайная э.д.с. $e(t)$. Случайные источники будут характеризоваться функциями корреляции

$$M_x(t) = \langle x(t)x(t+t) \rangle; \quad M_e(t) = \langle e(t)e(t+t) \rangle.$$

В каждом конкретном случае времена корреляции флуктуационных источников можно качественно оценить, опираясь на простые физические соображения. Например, характерное время изменения случайной э.д.с. $e(t)$ есть

$$t^* = \frac{l_{es}}{u_l},$$

где $l_{es} \approx 10^{-8}$ см - характерное расстояние, на котором происходит взаимодействие электрона с атомом решетки; $u_l \approx 10^8$ см/с скорость электронов проводимости.

Поэтому характерное время корреляции флуктуационных источников $\tau^* \approx 10^{-16}$ с весьма малая величина. В этом случае часто считают источники d - коррелированными

$$\langle x(t)x(t+t) \rangle = Ad(t),$$

и, соответственно, спектральную плотность их флуктуаций полагают равной

$$S_x(\omega) = (x^2)_\omega = A \quad (1.15)$$

и не зависящей от частоты. В этом случае константа A в (1.15) может быть определена через известное значение $\langle x^2 \rangle$ (см. 1.7).

Запишем стохастическое уравнение (1.14) в спектральной форме (полагая при этом $m = 1, f = 0$)

$$[w_0^2 - w^2 - iw g]x(w) = x(w).$$

Найдем спектральную плотность флуктуаций координаты

$$(x^2)_w = (x^2)_w [(w_0^2 - w^2)^2 + w^2 g]^{-1}.$$

В случае малого затухания ($g \ll w_0^2, (w_0^2 - w^2) \approx 2w_0(w_0 - w)$) и поэтому

$$(x^2)_w = (x^2)_w (2w_0)^{-1} [(w_0 - w)^2 + (\frac{g}{2})^2]^{-1}.$$

Теперь потребуем, чтобы при воздействии случайной силы, для полного квадрата флуктуаций получался результат (1.7)

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2p} (x^2)_w = \frac{(x^2)_w}{(2w_0)^2} \frac{2}{g} = \frac{T}{w_0^2}.$$

Отсюда:

$$(x^2)_w = 2gT \tag{1.16}$$

и для спектральной плотности флуктуаций имеем:

$$(x^2)_w = 2gT [(w - w_0)^2 + (\frac{g}{2})^2]^{-1} \tag{1.17}$$

Соответственно, для спектральной плотности флуктуаций э.д.с. $(e^2)_w$ и заряда в колебательном контуре формулы (1.16) и (1.17) принимают вид

$$(e^2)_w = 2RT; (q^2)_w = 2RT(2Lw_0)^{-2} [(w_0 - w)^2 + (\frac{R}{2L})^2]^{-1}.$$

Именно эти формулы были получены Найквистом в 1927 г. [9]. Таким образом, рассмотренные простые примеры говорят о том, что в системе, находящейся в равновесии с термостатом, каждый флуктуационный источник, вводимый в рассмотрение в качестве «причины» флуктуаций в системе, одновременно порождает связанную с ним вполне определенную диссипационную характеристику.

ГЛАВА 2. ОСНОВНЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ И ИХ СЛЕДСТВИЯ

Данный раздел посвятим вопросам описания статистических свойств макроскопических систем. В начале основное внимание сосредоточим на физическом смысле временных и спектральных характеристик флуктуаций. Затем рассмотрим общие физические принципы: микроскопическую обратимость во времени, экстремальные свойства распределения Гиббса, и установим следствия из них для флуктуаций произвольных характеристик макросистем. Полученные свойства в дальнейшем мы используем при выводе общих флуктуационно-диссипационных соотношений и построении макроскопической теории открытых систем.

§ 2.1. Временные характеристики флуктуаций (классическая область)

Рассмотрим какую-либо макроскопическую систему в некотором заданном состоянии равновесия при температуре T . Пусть x – некоторая, интересующая нас, физическая величина, характеризующая данную систему. Будем считать вначале величину классической. Классическое описание величины x справедливо, если выполнено условие

$$\frac{\hbar}{\tau} \ll T$$

где τ – характерный временной масштаб изменения величины x ; T – температура, измеряемая в единицах энергии (постоянная Больцмана $k = 1$).

В классической теории величина x является некоторой функцией динамических переменных, координат и импульсов частиц, образующих данную макроскопическую систему. Среднее значение данной величины мы получим, усреднив величину x по ансамблю Гиббса:

$$\langle x(t) \rangle \equiv \langle x \rangle$$

это среднее в силу стационарности системы в состоянии равновесия не зависит от времени и без ограничения общности может быть положено равным нулю.

Аналогичным образом могут быть вычислены средние значения квадрата величины $\langle x^2 \rangle$ и любой ее функции $\langle f(x) \rangle$, которые также не будут зависеть от времени.

Записанные средние значения не являются достаточными характеристиками статистических свойств величины x , т.к. не отражают эволюции во времени случайной величины $x(t)$. Если в момент времени t , определено некоторое значение величины x , то в дальнейшем это значение будет изменяться согласно уравнениям движения. Поэтому значения случайной величины в различные моменты времени будут взаимосвязаны.

Статистическая связь между значениями величины x в различные моменты времени будет определяться временными корреляционными функциями, которые равны средним значениям произведения величин, взятых в различные моменты времени

$$\begin{aligned} M(t_0, t_1) &= \langle x(t_0)x(t_1) \rangle, \\ M(t_0, t_1, t_2) &= \langle x(t_0)x(t_1)x(t_2) \rangle, \\ M(t_0, t_1, t_2, t_3) &= \langle x(t_0)x(t_1)x(t_2)x(t_3) \rangle. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Совокупность корреляционных функций (2.1) всех порядков содержит полную статистическую информацию о величине $x(t)$. В ряде случаев (для некоторых статистических моделей) оказывается достаточным задание лишь нескольких корреляционных функций для характеристик статистических свойств величины x . Например, для гауссовых флуктуаций достаточно задания парной функции корреляций, поскольку все последующие функции корреляции будут определяться через парную функцию корреляции $M(t_0, t_1)$.

Корреляционная функция третьего порядка и вообще все функции корреляции нечетного порядка для гауссовых флуктуаций равны нулю (поскольку среднее значение мы полагаем равным нулю). Корреляционная функция четвертого порядка будет равна произведению парных функций корреляции

$$M(t_0, t_1, t_2, t_3) = P_{123}^{II} \langle x(t_0)x(t_1) \rangle \langle x(t_2)x(t_3) \rangle,$$

где P_{123}^{II} - есть оператор суммы циклической перестановки индексов 1,2,3.

Аналогичное свойство имеют четные функции корреляции и более высокого порядка.

Как будет показано ниже, для линейных систем в состоянии термодинамического равновесия флуктуации являются гауссовыми. Нелинейные статистические свойства системы, находящейся в равновесии, будут проявляться в корреляциях высших порядков.

Физический смысл и способы измерения временных корреляционных функций ясны из их определения. Для стационарных случайных процессов, обладающих эргодическим свойством, можно указать простые методы экспериментального определения основных статистических характеристик. При этом используется тот важный результат, что эти характеристики могут быть определены посредством временного усреднения одной достаточно длинной реализации.

Основными элементами измерителя парной функции корреляции являются линия задержки, перемножитель (который может быть выполнен на основе детектора с квадратичной характеристикой), интегратор – усреднитель и регистрирующий прибор.

Соответственно, для измерения временных корреляций третьего порядка необходимо перемножить три значения случайного процесса, предварительно осуществив задержку времени на t_1 и t_2 . Тогда схема измерения будет подобна схеме измерения корреляции второго порядка.

§ 2.2. Временные характеристики флуктуаций (квантовая область)

Если величина x изменяется с течением времени достаточно быстро (характерный временной масштаб – мал) или же T достаточно низка, то условие «классичности» $\frac{h}{t} \ll T$ может быть нарушено. В этом случае необходимо перейти к квантовому описанию флуктуаций величины x .

В квантовой теории физической величине x в момент времени t соответствует оператор

$$x(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} x e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \quad (2.2)$$

(в представлении Гейзенберга), где H_0 - гамильтониан системы, x - оператор в представлении Шредингера. Операторы (2.2), взятые в различные моменты времени, вообще говоря, некоммутативны и поэтому произведение операторов $x(t_0)x(t_1)$ не соответствует какой-либо наблюдаемой величине. Это означает, что мы должны видоизменить классическое определение корреляции флуктуаций и вместе с тем указать способ измерения корреляции.

Для того чтобы в функции корреляции величины $x(t_0)$ и $x(t_1)$ вошли равноправным образом, естественно определить квантовую функцию корреляции в виде среднего от симметризованного произведения операторов

$$M(t_0, t_1) = \langle \frac{1}{2} [x(t_0)x(t_1)]_+ \rangle \equiv \frac{1}{2} \langle x(t_0)x(t_1) + x(t_1)x(t_0) \rangle, \quad (2.3)$$

где угловые скобки означают усреднение по матрице плотности ансамбля Гиббса (1.4). В классическом пределе функция (2.3) будет переходить функцию корреляции $M(t_0, t_1) = \langle x(t_0)x(t_1) \rangle$ (ср. с (1.10)). Структурная схема измерителя остается при этом прежней, хотя техническое исполнение отдельных элементов, конечно, имеет определенную специфику (см. например [37]).

Рассмотрим теперь вопрос, как ввести и измерить квантовые функции корреляции высших порядков. Мы привели два способа измерения трехвременных функций корреляции, которые в классической области должны давать одинаковый результат. В квантовой теории эти способы приведут к разным результатам. Способу измерения с

тройным перемножением следует сопоставить функцию, в которую величины входят симметричным образом (полностью симметризованную трехвременную функцию корреляции):

$$M(t_0, t_1, t_2) = \frac{1}{6} (\langle x(t_0)x(t_1)x(t_2) \rangle + \langle x(t_1)x(t_2)x(t_0) \rangle + \langle x(t_2)x(t_0)x(t_1) \rangle + \langle x(t_2)x(t_1)x(t_0) \rangle + \langle x(t_1)x(t_0)x(t_2) \rangle + \langle x(t_0)x(t_2)x(t_1) \rangle).$$

Схеме, с использованием поэтапного перемножения, следует сопоставить функцию, в которую не все величины входят симметричным образом. А именно, на первом этапе симметризируются две величины, а затем полученный результат симметризуется с третьей величиной на втором этапе перемножения.

Такому способу измерения мы должны сопоставить квантовую функцию корреляции вида:

$$M_{|x_0| x_1 x_2 | + | +} = M(t_0, t_1, t_2) \equiv \langle \frac{1}{4} [x(t_0), [x(t_1), x(t_2)]_+]_+ \rangle, \quad (2.4)$$

где $x_i = x(t_i)$, ($i=1,2,3$).

Для фиксированных моментов времени t_0 , t_1 и t_3 мы имеем три различных функции корреляции вида (2.4). Таким образом, способ измерения высших корреляций на основе каскада квадратичных преобразователей будет давать более богатую информацию о статистических свойствах величины x в квантовой области. Это становится особенно явным при обобщении методов на случай измерения взаимных корреляционных функций совокупности нескольких физических величин x_1, x_2, \dots, x_N .

В заключение этого параграфа отметим, что приведенные выше определения квантовых функций корреляции не являются единственно возможными.

В каждом конкретном случае определение корреляционных функций непосредственно связано со способом их измерения. Например, при изучении статистических характеристик электромагнитных полей двумерные корреляции будут определяться функциями

$$\langle \frac{1}{2} (e_{i_1}^+(\mathbf{r}_1, t_1) e_{i_2}^-(\mathbf{r}_2, t_2) + e_{i_2}^+(\mathbf{r}_2, t_2) e_{i_1}^-(\mathbf{r}_1, t_1)) \rangle,$$

где e^+ и e^- есть соответственно рождающая и уничтожающая части оператора напряженности электрического поля. Легко проверить, что эта функция действительна и потому соответствует наблюдаемой величине.

§ 2.3. Спектральные характеристики флуктуаций

Наряду с временными характеристиками случайных величин можно изучать их спектральные свойства. Начнем опять с классической теории.

Любая случайная функция времени $x(t)$ может быть разложена в интеграл Фурье

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi} x(w) e^{iwt} ; \quad (2.5)$$

$$x(w) = \int_{-\infty}^{\infty} dt x(t) e^{-iwt} . \quad (2.6)$$

Разложения (2.5), (2.6) имеют вполне определенный физический смысл. Разложение в спектр случайной функции времени $x(t)$ осуществляет спектральный прибор. Однако, в реальных условиях с точным спектром функции не приходится иметь дело, так как экспериментально нельзя получить строгой гармоники, а можно выделить лишь сумму гармонических составляющих, лежащей в конечной, хотя и малой полосе частот $\Delta\omega$. Величина $\Delta\omega$ характеризует точность (систематическую ошибку), с которой осуществляется разложение в спектр процесса.

На выходе узкополосного фильтра мы также имеем случайную величину. Подавая далее случайные величины с выходов квадратичных перестраиваемых фильтров на схему перемножения после усреднения получим спектральную функцию корреляции.

Временные и спектральные функции корреляции взаимно однозначно определяют друг друга. Действительно, подставляя (2.6) в функцию $\langle x(w) x(w') \rangle$ получим

$$\langle x(w_0) x(w_1) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt_0 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle x(t_0) x(t_1) \rangle e^{-i w_0 t_0 - i w_1 t_1} .$$

В состоянии термодинамического равновесия функция корреляции зависит лишь от разности моментов времени

$$\langle x(t_0) x(t_1) \rangle = M(t_0 - t_1) ,$$

и поэтому

$$\langle x(w_0) x(w_1) \rangle = S(w_1) 2\pi \delta(w_0 - w_1) .$$

Таким образом, при измерении спектров равновесных стационарных процессов схема может быть упрощена и приведена к следующей.

Здесь измеряется величина мощности случайного процесса, приходящаяся на полосу $\Delta\omega_1$:

$$S(w_1) Dw_1 ,$$

пропорциональная величине

$$S(w_1) = \langle x(t=0)x(w_1) \rangle = \langle xx(w_1) \rangle,$$

имеющей смысл спектральной плотности мощности, и связанной преобразованием Фурье с временной функцией корреляции (теорема Хинчина – Винера)

$$S(w) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{iw_1(t_0-t_1)} M(t_0-t_1),$$

$$M(t_0-t_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_1}{2\pi} S(w_1) e^{-iw_1(t_0-t_1)}.$$

Аналогичным образом могут быть определены спектральные функции корреляции высших порядков

$$S(w_1, w_2) = \langle xx(w_1)x(w_2) \rangle, \quad (2.7)$$

$$S(w_1, w_2, w_3) = \langle xx(w_1)x(w_2)x(w_3) \rangle. \quad (2.8)$$

Схемы их измерения будут отличаться от схем измерения временных корреляций лишь тем, что вместо временных задержек будут поставлены спектральные фильтры.

Спектральные функции корреляции (2.7) - (2.8) будут связанные преобразованиями Фурье с соответствующими временными корреляциями. Так, например

$$\langle xx(w_1)x(w_2) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{iw_1 t_1 + iw_2 t_2} \langle x(t_0)x(t_1)x(t_2) \rangle,$$

$$\langle x(t_0)x(t_1)x(t_2) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_2}{2\pi} e^{-iw_1(t_0-t_1) - iw_2(t_0-t_2)} \langle xx(w_1)x(w_2) \rangle.$$

Остановимся на особенностях определения спектральных функций корреляции в квантовой области.

В квантовой теории величинам $x(t)$ и $x(\omega)$, связанным с преобразованием Фурье (2.5) и (2.6) соответствуют операторы $x(t)$ и $x(\omega)$, связь между ними будет определяться аналогичными преобразованиями

$$x(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} x(\omega) e^{i\omega t},$$

$$x(\omega) = \int dt x(t) e^{-i\omega t}. \quad (2.9)$$

Смысл определенного таким образом оператора $x(\omega)$ состоит в том, что любые матричные элементы $(x(\omega))_{mn}$ и $(x(t))_{mn}$ связаны преобразованиями

$$(x(\omega))_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} dt (x(t))_{mn} e^{-i\omega t}.$$

Если воспользоваться определением (2.9) оператора $x(\omega)$, то квантовую спектральную функцию следует определить следующим образом:

$$S(\omega) = \langle \frac{1}{2} [x, x(\omega)]_+ \rangle,$$

причем теорема Хинчина - Винера, связывающая временные и спектральные функции корреляции, сохраняет свою силу.

§ 2.4. Корреляция флуктуаций нескольких величин

До сих пор мы рассматривали статистические характеристики одной физической величины, так называемую автокорреляцию данной величины. Автокорреляционные функции различных порядков характеризовали наличие соответствующих статистических связей в процессе, разнесенных во времени.

Функции автокорреляции, не описывают всех статистических свойств системы. Вообще говоря, в системе имеется статистическая зависимость между различными физическими величинами.

Пусть x_i, x_j, \dots - совокупность физических величин, характеризующих данную систему. Индексы i, j, \dots могут пробегать как дискретный, так и непрерывный ряд значений. В частности, x_i могут быть полевыми величинами, заданными в каждой точке пространства.

Величины x_i, x_j изменяются с течением времени согласно уравнениям движения и являются, вообще говоря, случайными функциями времени.

Аналогично определениям (2.1) статистическую зависимость между величинами $x_i(t_0), x_j(t_1)$, будем характеризовать функциями корреляции

$$M_{ij}(t_0, t_1) = \langle x_i(t_0) x_j(t_1) \rangle,$$

$$M_{ijk}(t_0, t_1, t_2) = \langle x_i(t_0) x_j(t_1) x_k(t_2) \rangle,$$

$$M_{ijkl}(t_0, t_1, t_2, t_3) = \langle x_i(t_0) x_j(t_1) x_k(t_2) x_l(t_3) \rangle.$$

Способ измерения взаимных функций корреляции практически не отличается от измерения функции автокорреляции.

Таким образом, чтобы записать корреляции между величинами $x_i(t_0), x_j(t_1), \dots$ достаточно во всех введенных выше обозначениях функций автокорреляции произвести замену

$$x(t_0), x(t_1), x(t_2), \dots \rightarrow x_i(t_0), x_j(t_1), x_k(t_2), \dots$$

В частности, парные функции корреляции будут иметь вид

$$M_{ij} = \langle \frac{1}{2} [x_i(t_0), x_j(t_1)]_+ \rangle.$$

Наряду с симметризованными и частично-симметризованными функциями корреляции, которые могут быть измерены на опыте (см. § 2.3), введем в рассмотрение несимметризованные функции корреляции

$$M_{ij}(t_0, t_1) = \langle x_i(t_0) x_j(t_1) \rangle, \quad (2.10)$$

$$M_{ijk}(t_0, t_1, t_2) = \langle x_i(t_0) x_j(t_1) x_k(t_2) \rangle, \quad (2.11)$$

Ввиду некоммутативности операторов x_i , x_j , x_k в различные моменты времени средние значения несимметризованных произведений операторов являются комплексными функциями и потому неизмеримы на опыте.

Через определенные комбинации функций корреляции будут определяться не только равновесные симметризованные функции корреляции, но и (как будет показано в следующей главе) кинетические коэффициенты (линейные и нелинейные), определяющие различные явления переноса, такие как теплопроводность, диффузию, электропроводность и т.д.

§ 2.5. Микроскопическая обратимость во времени и ее следствия

С каждым преобразованием симметрии уравнения движения физической системы связан свой, определенный закон сохранения.

Однородность и изотропность пространственно-временной структуры замкнутой системы приводит к законам сохранения энергии, импульса и момента импульса. Преобразования такого типа представляет собой пример непрерывных преобразований симметрии. Наряду с непрерывными существуют так называемые дискретные преобразования симметрии, примером которых служит симметрия системы одинаковых частиц относительно перестановки частиц.

Из симметрии системы тождественных частиц относительно перестановки частиц следует наличие двух статистик в квантовой теории: статистики Бозе-Энштейна и статистики Ферми-Дирака.

В классическом пределе обе статистики совпадают. Это означает, что в классической теории нет каких-либо физических следствий из принципа тождественности частиц.

Единственное дискретное преобразование симметрии, имеющее нетривиальный физический смысл и в классической теории, это обращение времени. Микроскопические

уравнения движения как в классической, так и в квантовой механике инвариантны относительно обращения времени.

Легко видеть, что канонические уравнения классической механики (при отсутствии внешнего магнитного поля и переменных во времени сил)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

будут инвариантны относительно обращения времени, если одновременно с инверсией времени $t \rightarrow (-t)$ изменить знаки импульсов частиц на противоположные.

Обратимость уравнений системы во времени в классической механике имеет простой физический смысл.

Пусть в момент времени t_1 классическая система находится в точке фазового пространства $A\{q_i^{(1)}, p_i^{(1)}\}$ и через некоторое время в момент t_2 попадает в точку $B\{q_i^{(2)}, p_i^{(2)}\}$, двигаясь по некоторой определенной траектории. Тогда обратимость во времени означает, что при смене знаков времени и импульсов система будет двигаться вспядь по той же самой траектории из В в А.

Поскольку классическая теория движения является предельным случаем квантовой теории, то мы подробно остановимся на вопросе обратимости во времени в квантовой теории.

Для простоты будем считать, что состояние системы описывается волновой функцией $Y(t)$.

Эволюция во времени состояния $Y(t)$ определяется уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial Y(t)}{\partial t} = \hat{H} Y(t). \quad (2.12)$$

Предположим, что имеется преобразование \hat{R} , оставляющая инвариантными уравнения движения (2.12). Это означает, что если $Y(t)$ есть решение уравнения (2.12), то и $\hat{R} Y(t)$ также есть решение того же уравнения, т.е.

$$i\hbar \frac{\partial (\hat{R} Y(t))}{\partial t} = \hat{H} \hat{R} Y(t)$$

Нетрудно получить общие условия, при которых преобразование оставляет инвариантным уравнение эволюции (2.12):

$$\hat{R}(i\hbar \frac{\partial Y(t)}{\partial t}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\hat{R}Y(t)) \quad (2.13)$$

$$\hat{R}\hat{H} = \hat{H}\hat{R} \quad (2.14)$$

Рассмотрим случай, когда \hat{R} содержит операцию обращения во времени $t \rightarrow (-t)$.

Определим операцию обращения во времени с помощью символа - оператора \hat{Q} , который действует, как на обычные функции времени, так и на операторы, зависящие от времени, по правилу

$$\hat{Q}Y(t) = Y(-t)\hat{Q}$$

$$\hat{Q}\hat{x}(t) = \hat{x}(-t)\hat{Q}$$

Из определений (2.15) следует, что двукратное применение операции обращения во времени эквивалентно тождественному преобразованию или иначе

$$\hat{Q}^{-1} = \hat{Q}$$

Если преобразование \hat{R} содержит операцию обращения во времени \hat{Q} , то из условия (2.15) будет следовать, что \hat{R} содержит операцию комплексного сопряжения \hat{K} , определяемую правилом

$$\hat{K}Y = Y^* \hat{K}, \quad \hat{K}x = x^* \hat{K}$$

Таким образом, преобразование \hat{R} мы должны записать в виде

$$\hat{R} = \hat{Q}\hat{K}\hat{O}$$

где оператор \hat{O} определяется из условия (2.14).

В качестве примера рассмотрим систему частиц, описываемую гамильтонианом (в координатном представлении)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \hat{U}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

Тогда из (2.14) следует, что является единичным оператором и в этом случае

$$\hat{R} = \hat{Q}\hat{K}. \quad (2.18)$$

Рассмотрим теперь преобразование операторов при обращении времени. Для операторов координаты и импульсов получим

$$\hat{R} \hat{\mathbf{r}}_i \hat{R}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}_i,$$

$$\hat{R} \hat{\mathbf{p}}_i \hat{R}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}_i.$$

Очевидно, что полученные свойства преобразования не зависят от выбранного нами представления. Тем самым показано, что все физические величины делятся на два класса: одни величины, такие как координаты частиц, кинетическая энергия, не меняют знака при обращении времени; величины другого класса, например, импульсы частиц, меняют знак при обращении времени.

Свойства симметрии операторов физических величин относительно обращения времени можно записать единым образом

$$\hat{R} \hat{x}_i \hat{R}^{-1} = e^i \hat{x}_i,$$

где символ e^i в зависимости от того, меняет или не меняет знак величина \hat{x}_i относительно обращения времени.

Остановимся теперь на следствиях из обратимости во времени для функций корреляции интересующих нас величин.

Рассмотрим сначала первую функцию корреляции. Угловые скобки в (2.10) означают усреднение по ансамблю Гиббса, т.е.

$$M_{ij}(t_0, t_1) = Sp \hat{\mathbf{r}} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1), \quad (2.19)$$

где $\hat{\mathbf{r}} = e^{-b(\hat{H}-\hat{F})}$ - есть матрица плотности канонического ансамбля Гиббса.

Для простоты будем считать, что гамильтониан имеет вид (2.17). Прежде всего, заметим, что распределение Гиббса $\hat{\mathbf{r}}$ и оператор эволюции во времени $\exp\{-\frac{i}{\hbar} H_0 t\}$ инвариантны относительно операции обращения времени (2.18), где можно записать

$$\hat{R} \hat{\mathbf{r}} \hat{R}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}$$

$$\hat{R} \hat{x}_i(t) \hat{R}^{-1} = e^i \hat{x}_i(t). \quad (2.20)$$

Последнее соотношение означает, что преобразование симметрии операторов инвариантно относительно выбора представления. Применим преобразование \hat{R} к левой и правой части (2.19)

$$\hat{R} M_{ij}(t_0, t_1) \hat{R}^{-1} = \hat{R} Sp \hat{\mathbf{r}} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1) \hat{R}^{-1}. \quad (2.21)$$

В левой части (2.21) стоит некоторая, вообще говоря, комплексная функция, зависящая от моментов времени t_0 и t_1 . Поэтому операция обращения времени в левой части (2.21) будет сводиться к комплексному сопряжению и смене знаков времени на противоположные т.е.

$$\hat{R} M_{ij}(t_0, t_1) \hat{R}^{-1} = M_{ij}^*(-t_0, -t_1). \quad (2.22)$$

Чтобы произвести преобразование правой части (2.19), можно ввести оператор \hat{R} под знак Sp , а затем воспользоваться свойствами (2.20), т.е.

$$\hat{R} Sp \hat{r} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1) \hat{R}^{-1} = e^i e^j Sp \hat{r} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1). \quad (2.23)$$

Сравнивая преобразования левой и правой частей (2.22) и (2.23) получим

$$M_{ij}^*(-t_0, -t_1) = e^i e^j M_{ij}(t) \quad (2.24)$$

Применение подобного преобразования к симметричной функции корреляции (в силу ее действительности) дает

$$M_{ij}(-t) = e^i e^j M_{ij}(t)$$

или

$$M_{ij}(t) = e^i e^j M_{ji}(t). \quad (2.25)$$

При записи последнего соотношения мы воспользовались очевидным свойством симметрии

$$M_{ij}(t_0, t_1) = M_{ij}(t_1, t_0) = M_{ij}(t_0, -t_1) = M_{ji}(t_1, -t_0).$$

Соотношение симметрии (2.25) носит название соотношения взаимности флуктуаций (впервые рассмотрено Онсагером). Чтобы пояснить физический смысл соотношений (2.24), запишем их для функции корреляции величин $\hat{A}(t)$ и $\hat{B}(t+t)$, которые будем считать классическими и не меняющими знака при обращении времени. Тогда соотношение взаимности

$$\langle \hat{A}(t) \hat{B}(t+t) \rangle = \langle \hat{B}(t) \hat{A}(t+t) \rangle$$

означает, что значение величины \hat{A} в момент времени t влияет на вероятность значений \hat{B} в момент $t+t$ точно так же, как \hat{B} в момент времени t влияет на вероятность значений \hat{A} в момент времени $t+t$.

Для спектральной функции корреляции из соотношения (2.25) получаем

$$S_{ij}(w) = e^i e^j S_{ji}(w). \quad (2.26)$$

Применяя преобразование обращения времени к корреляции высших порядков (2.11) получим соотношения, аналогичные (2.24)

$$\begin{aligned} M_{ijk}^*(-t_0, -t_1, -t_2) &= e^i e^j e^k M_{ijk}(t_0, t_1, t_2), \\ M_{ijkl}^*(-t_0, -t_1, -t_2, -t_3) &= e^i e^j e^k e^l M_{ijkl}(t_0, t_1, t_2, t_3). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Наиболее простой вид эти соотношения имеют в спектральной форме записи, к которой легко перейти, применяя к (2.24) и (2.27) преобразование Фурье:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \rangle^* &= e^i e^j \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \rangle, \\ \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \hat{x}_k(w_2) \rangle^* &= e^i e^j e^k \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \hat{x}_k(w_2) \rangle, \\ \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \hat{x}_k(w_2) \hat{x}_l(w_3) \rangle^* &= e^i e^j e^k e^l \langle \hat{x}_i \hat{x}_j(w_1) \hat{x}_k(w_2) \hat{x}_l(w_3) \rangle. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Таким образом, в зависимости от того, как ведут себя физические величины относительно обращения времени, их спектральные функции корреляции, либо чисто действительные, либо чисто мнимые.

Наряду с соотношением взаимности для флуктуаций (2.28) и (2.26) будут следовать известные соотношения взаимности Онсагера для кинетических коэффициентов, на которых мы остановимся в разделе 4.

Свойства (2.28) для корреляций высших порядков будут играть важную роль при выводе флуктуационно-диссипационных соотношений симметрии в нелинейных системах.

В заключение сделаем одно уточнение. При выводе этих соотношений мы неявно предполагали, что система не обладает магнитной структурой и не находится во внешнем магнитном поле. Не составляет, однако, особого труда получить подобные соотношения и в общем случае наличия магнитных полей и магнитной структуры системы.

Например, при наличии однородного магнитного поля имеем следующие свойства для спектральных функций корреляции

$$\begin{aligned} M_{ij}^*(w_1, \mathbf{H}) &= e^i e^j M_{ij}(w_1, -\mathbf{H}), \\ M_{ijk}^*(w_1, w_2, \mathbf{H}) &= e^i e^j e^k M_{ijk}(w_1, w_2, -\mathbf{H}), \end{aligned}$$

и т.д.

Отметим также, что в дальнейшем будут рассмотрены свойства временной обратимости системы при наличии внешних, зависящих от времени сил.

§ 2.6. Распределение Гиббса. Физические следствия для флуктуаций

До сих пор мы не использовали специфические свойства состояния термодинамического равновесия (за исключением свойства стационарности системы в равновесии). Свойства распределения Гиббса

$$\hat{\mathbf{r}} = e^{-b(\hat{F} - \hat{H}_0)}, \quad (2.29)$$

описывающего состояние термодинамического равновесия, таковы, что позволяют получить общие соотношения для функций корреляции независимо от конкретной структуры данной системы.

В состоянии термодинамического равновесия функции корреляции определяются как средние от произведения гейзенберговских операторов ($\mathbf{h} = I$)

$$\hat{x}_i(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{x}_i e^{-i\hat{H}_0 t}$$

по распределению Гиббса (2.29)

Легко видеть, что между оператором эволюции системы во времени

$$\hat{S}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t} \quad (2.30)$$

и матрицей плотности распределения Гиббса имеется формальное сходство. Действительно, при «мнимом моменте времени» оператор эволюции (2.30) и оператор (2.29) совпадают

$$\hat{S}(-ib) = e^{-b\hat{H}_0}$$

Мы воспользуемся этим формальным сходством для вывода соотношений для функций корреляции

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1) \rangle &= Sp. \hat{\mathbf{r}} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1), \\ \langle \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1) \hat{x}_k(t_2) \rangle &= Sp. \hat{\mathbf{r}} \hat{x}_i(t_0) \hat{x}_j(t_1) \hat{x}_k(t_2). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Любая из функций (2.31) может быть записана в виде

$$\langle \hat{x}_i(t_0) \hat{C} \rangle = Sp. \hat{\mathbf{r}} \hat{x}_i(t_0) \hat{C}, \quad (2.32)$$

где для краткости через \hat{C} мы обозначили произведение всех остальных гейзенберговских операторов.

Перепишем вначале функцию корреляции (2.32) в виде

$$Sp \hat{r} \hat{x}_i(t_0) \hat{r}^{-1} \hat{r} \hat{C} = Sp \hat{r} \hat{x}_i(t_0) \hat{C}. \quad (2.33)$$

Формальным образом определим гейзенберговский оператор при комплексном значении времени

$$\hat{r} \hat{x}_i(t_0) \hat{r}^{-1} = e^{i\hat{H}_0(t_0+ib)} \hat{x}_i e^{-i\hat{H}_0(t_0+ib)}. \quad (2.34)$$

Тогда, используя инвариантность относительно циклической перестановки операторов, из (2.33) получим

$$\langle \hat{x}_i(t_0) \hat{C} \rangle = \langle \hat{C} \hat{x}_i(t_0 + ib) \rangle. \quad (2.35)$$

Полученное соотношение показывает, что возможно аналитическое продолжение функции корреляции $\langle \hat{C} \hat{x}_i(t_0) \rangle$ на область мнимых значений времени в интервале

$$0 \leq Im t_0 \leq b.$$

Смысл полученных соотношений (2.35) состоит в том, что они связывают в состоянии термодинамического равновесия функции корреляции, получающиеся циклической перестановкой операторов.

Последнее утверждение станет наиболее понятным, если в (2.35) перейти к спектральным функциям.

Преобразование Фурье для операторов (2.5), (2.6) мы можем распространить на область комплексных значений времени

$$\hat{x}_i(t_0 + ib) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{2\pi} e^{iw_0(t_0+ib)} \hat{x}_i(w_0), \quad (2.36)$$

$$\hat{x}_i(w_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_0 e^{-iw_0(t_0+ib)} \hat{x}_i(t_0 + ib). \quad (2.37)$$

Эти соотношения нужно понимать в том же смысле, что и преобразования (2.5) и (2.6) в реальном времени, а именно как операторную запись для матричных элементов. Применяя к (2.35) преобразования Фурье (2.36), (2.37), получим

$$\langle \hat{x}_i(t_0) \hat{C} \rangle = \langle \hat{C} \hat{x}_i(w_0) \rangle e^{-bw_0}. \quad (2.38)$$

Иногда более удобно представить соотношение (2.38) в ином виде, как соотношение между средними значениями от коммутатора операторов \hat{C} и $\hat{x}_i(w_0)$:

$$\langle [\hat{C}, \hat{x}_i(t_0)]_+ \rangle = cth \langle [\hat{C}, \hat{x}_i(w_0)]_- \rangle. \quad (2.39)$$

Таким образом, число независимых функций корреляции в состоянии термодинамического равновесия существенно сокращается. Например, из шести функций корреляции третьего порядка независимыми оказываются лишь две из них.

ГЛАВА 3. ДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ

Общая задача кинетики или теории переноса состоит в изучении физических процессов, протекающих в неравновесных системах, точнее говоря, изменений во времени средних значений физических величин при воздействии на систему каких-либо внешних возмущений. Рассмотренные в предыдущей главе вопросы теории флуктуаций имеют непосредственное отношение не только к свойствам равновесных состояний, но также представляют существенный интерес для теории переноса. Это связано с тем, что в целом ряде задач кинетики параметры, характеризующие неравновесные процессы, (кинетические коэффициенты, обобщенные восприимчивости), будут определяться свойствами той же системы в состоянии термодинамического равновесия. Это особенно ясно проявляется в тех случаях, когда отклонение от равновесия системы или какой-то ее (макроскопической) части не велико.

В данном разделе мы получим строгие выражения, как для линейных, так и для нелинейных восприимчивостей и рассмотрим их свойства.

Точные выражения для обобщенных восприимчивостей мы используем далее в главе 4 при выводе флуктуационно-диссипационных соотношений симметрии.

§ 3.1. Поведение системы при наличии произвольного возмущения. \mathbf{S} – матрица

Предварительно рассмотрим задачу об эволюции системы при наличии произвольного, зависящего от времени возмущения (см. например [10]). При этом будем интересоваться точным решением, не прибегая к каким-либо приближениям. Полученное общее (формальное) решение существенно облегчит в дальнейшем нахождение и не конкретных интересующих нас приближений.

Для простоты предположим, что состояние системы описывается волновой функцией. Тогда изменение состояния с течением времени будет определяться уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (3.1)$$

где гамильтониан системы \hat{H} состоит из суммы гамильтониана \hat{H}_0 невозмущенной системы и оператора возмущения $\hat{V}(t)$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

В частном случае, когда переменное во времени возмущение равно нулю, решение уравнения имеет вид

$$\Psi(t) = e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \Psi(0), \quad (3.2)$$

где \hat{H}_0 предполагается независимым от времени.

Приведем способ нахождения решения, который легко обобщить на случай переменного во времени возмущения. Для этого запишем уравнение Шредингера в интегральной форме

$$\Psi(t) = \Psi(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_0 \Psi(t'). \quad (3.3)$$

Решение уравнения (3.3) будем искать в виде ряда по \hat{H}_0 :

$$\Psi(t) = \Psi^{(0)}(t) + \Psi^{(1)}(t) + \dots \quad (3.4)$$

Подставляя разложение (3.4) в уравнение (3.3) и приравнивая члены одного порядка по H_0 , получим

$$\Psi^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{H}_0 \Psi^{(n-1)}(t'). \quad (3.5)$$

В нулевом приближении состояние в момент времени будет совпадать с состоянием в начальный момент времени:

$$\Psi^{(0)}(t) = \Psi(0). \quad (3.6)$$

Подставляя в правую часть (3.5) нулевое приближение (3.6) найдем первое приближение

$$\Psi^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t \Psi(0).$$

Методом последовательных итераций получим

$$\Psi^{(n)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right)^n \Psi(0).$$

Точное решение представляется в виде ряда

$$\Psi^{(n)}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t\right)^n \Psi(0).$$

и совпадает с (3.2)

Перейдем теперь к случаю, когда возмущение $\hat{V}(t) \neq 0$. Естественно искать решение уравнения (3.1) в виде

$$\Psi(t) = e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}} \Psi^{B3}(t).$$

Тогда для $\Psi^{B3}(t)$ получим уравнение

$$\frac{\partial \Psi^{B3}(t)}{\partial t} = \hat{V}^{B3}(t) \Psi^{B3}(t), \quad (3.7)$$

где

$$\hat{V}^{B3}(t) = e^{\frac{-iH_0t}{\hbar}} \hat{V}(t) e^{\frac{iH_0t}{\hbar}}.$$

Итак, мы переходим от $\hat{V}(t)$ к новому представлению взаимодействия $\hat{V}^{B3}(t)$. Запишем интегральную форму уравнения (3.7)

$$\Psi^{B3}(t) = \Psi^{B3}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}^{B3}(t') \Psi^{B3}(t'),$$

$$(\Psi^{B3}(0) = \Psi(0)). \quad (3.8)$$

Существенное отличие уравнения (3.8) от рассмотренного выше (3.3) состоит в том, что операторы $\hat{V}^{B3}(t')$ оказываются зависящими от времени, причем операторы $\hat{V}^{B3}(t')$ и $\hat{V}^{B3}(t'')$, взятые в различные моменты времени, не коммутируют друг с другом. Будем решать уравнение (3.8) методом последовательных приближений и, чтобы понять структуру получаемых в этом случае членов по возмущению $\hat{V}^{B3}(t')$, запишем их до второго порядка включительно. В нулевом порядке

$$\Psi^{(1)B3}(0) = \Psi(0),$$

в первом и втором порядках:

$$\Psi^{(1)B3}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{V}^{B3}(t_1) \Psi(0),$$

$$\Psi^{(2)B3}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2) \Psi(0). \quad (3.9)$$

Характерная особенность членов ряда (3.9) в том, что операторы в более ранние моменты времени стоят справа от операторов в более поздние моменты времени. Это обстоятельство позволяет нам записать решение уравнения (3.8) в компактной форме. Перепишем сначала член второго порядка в (3.9) в симметричном виде по переменным интегрирования t_1 и t_2 .

$$\Psi^{(2)B3}(t) = \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^2 \left\{ \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2) + \int_0^t dt_2 \int_0^{t_1} dt_1 \hat{V}^{B3}(t_2) \hat{V}^{B3}(t_1) \right\} \Psi(0).$$

Далее, используя определение единичных функций Хевисайда, распространим пределы интегрирования до момента t по каждой переменной интегрирования t_1 и t_2 .

$$\Psi^{(2)B3}(t) = \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 [\hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2) h(t_1 - t_2) + \hat{V}^{B3}(t_2) \hat{V}^{B3}(t_1) h(t_2 - t_1)] \Psi(0).$$

Еще раз отметим, что в членах ряда возмущений операторы $\hat{V}^{B3}(t)$ должны быть упорядоченными во времени. Физически такое упорядочение во времени обусловлено принципом причинности. Обозначим операцию такого упорядочения во времени символом \hat{T} , который действует по правилу

$$\hat{T}[\hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2)] = \hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2) h(t_1 - t_2) + \hat{V}^{B3}(t_2) \hat{V}^{B3}(t_1) h(t_2 - t_1),$$

$$\hat{T}[\hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2)] \equiv \begin{cases} \hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2), t_1 > t_2; \\ \hat{V}^{B3}(t_2) \hat{V}^{B3}(t_1), t_1 < t_2. \end{cases}$$

Тогда член $\Psi^{(2)B3}(t)$ второго порядка принимает вид

$$\Psi^{(2)B3}(t) = \frac{1}{2!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{T}[\hat{V}^{B3}(t_1) \hat{V}^{B3}(t_2)] \Psi(0).$$

Точно также в любом порядке по возмущению мы получаем упорядоченное произведение операторов:

$$\Psi^{(n)B3}(t) = \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_n} dt_n \hat{T}[\hat{V}^{B3}(t_1) \dots \hat{V}^{B3}(t_n)] \Psi(0).$$

Полное решение будет иметь вид суммы слагаемых всех порядков по возмущению \hat{V} :

$$\Psi^{B3}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_n} dt_n \hat{T}[\hat{V}^{B3}(t_1) \dots \hat{V}^{B3}(t_n)] \Psi(0).$$

Теперь воспользуемся очевидным свойством символа упорядочения во времени \hat{T} , вынося его за знак суммы

$$\Psi^{B3}(t) = \hat{T} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\mathbf{h}}\right)^n \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_n} dt_n [\hat{V}^{B3}(t_1) \dots \hat{V}^{B3}(t_n)] \right\} \Psi(0). \quad (3.10)$$

Так как символ \hat{T} , примененный к каждому из слагаемых, располагает их в нужном порядке, то под знаком упорядочения во времени мы можем располагать оператор как

угодно, иначе говоря, можно забыть на время, что мы имеем дело с не коммутирующими операторами. Тогда бесконечную сумму в фигурных скобках (3.10) можно записать в виде

$$e^{\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} \hat{V}^{B3}(t_1) dt_1}$$

и представить решение (3.10) в очень компактной форме

$$\Psi^{B3}(t) = \hat{S}(t, 0) \Psi(0),$$

где оператор

$$\hat{S}(t, 0) = \hat{T} e^{\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} \hat{V}^{B3}(t_1) dt_1} \quad (3.11)$$

носит название \hat{S} -матрицы. Соотношение (3.11) нужно понимать так, что сначала экспонента разлагается в ряд, а затем к каждому из слагаемых применяется оператор упорядочения во времени.

Таким образом, эволюция состояния (в представлении взаимодействия), обусловленная возмущением $\hat{V}(t)$, определяется \hat{S} -матрицей (3.11). Это означает, что если известно состояние в начальный момент времени $t = 0$ то, чтобы получить состояние в последующий момент времени $t > 0$, необходимо подействовать оператором (3.11) на $\Psi(0)$. Здесь мы для простоты выбрали начальный момент времени $t_0 = 0$. Отодвигая начальный момент $t_0 \rightarrow -\infty$ аналогично имеем

$$\Psi^{B3}(t) = \hat{S}(t, -\infty) \Psi(-\infty),$$

где

$$\hat{S}(t, -\infty) = \hat{T} e^{\int_{-\infty}^t \frac{i}{\hbar} \hat{V}^{B3}(t_1) dt_1} \quad (3.12)$$

Напомним, что в представлении взаимодействия операторы изменяются с течением времени также, как гейзенберговские операторы в отсутствие возмущения $\hat{V}(t)$:

$$\hat{x}(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{x}(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \quad (3.13)$$

С помощью унитарного преобразования мы можем перейти к гейзенберговскому представлению, в котором вся эволюция во времени перенесена на операторы.

Для вычисления средних значений физических величин несущественно, каким представлением пользоваться. Однако при исследовании временных характеристик

флуктуаций удобно перенести всю эволюцию во времени на операторы, т.е. перейти к гейзенберговскому представлению:

$$\Psi^{\Gamma}(t) = \hat{S}^{-1}(t) \Psi^{B3}(t) = \Psi(-\infty).$$

Соответственно операторы должны преобразовываться по закону

$$\hat{x}^{\Gamma}(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{x}(t) \hat{S}(t). \quad (3.14)$$

Итак, мы нашли такое описание эволюции системы при наличии произвольного возмущения, когда изменение

$$\hat{x}(t) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} \hat{x}(t) e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}$$

по-прежнему определяется невозмущенным гамильтонианом системы. \hat{S} – матрица $\hat{S}(t)$ (3.12) определяет эволюцию во времени, обусловленную переменным возмущением.

Выражение (3.14) является точным. В нем содержится информация о «динамическом» поведении системы с течением времени. Очевидно также, что выражение для гейзенберговских операторов не зависит от того, описывается ли начальное состояние волновой функцией или матрицей плотности.

Наконец, отметим некоторые свойства \hat{S} – матрицы, которые мы используем в дальнейшем. Поскольку \hat{S} – матрица определяет эволюцию состояния с течением времени, то \hat{S} – матрица унитарна

$$\hat{S}^{-1}(t) = \hat{S}^{\dagger}(t),$$

и при $t > t_1$ удовлетворяет соотношению

$$\hat{S}(t, t_1) \hat{S}(t_1, -\infty) = \hat{S}(t, -\infty). \quad (3.15)$$

Последнее соотношение имеет простой физический смысл. Чтобы получить состояние в момент времени

$$\Psi^{B3}(t) = \hat{S}(t) \Psi^{B3}(-\infty). \quad (3.16)$$

можно записать сначала состояние в более ранний момент времени $t < t_1$

$$\Psi^{B3}(t_1) = \hat{S}(t_1) \Psi^{B3}(-\infty),$$

а затем, подействовать на него матрицей $\hat{S}(t, t_1)$, перевести в состояние (3.16)

$$\hat{S}(t, t_1) \hat{S}(t_1) \Psi^{B3}(-\infty) = \hat{S}(t, -\infty) \Psi^{B3}(-\infty),$$

откуда в силу произвольности начального состояния имеем (3.15).

В частности, из (3.15) имеем

$$\begin{aligned}\hat{S}(t, t_1) &= \hat{S}(t) \hat{S}^{-1}(t_1), t > t_1, \\ \hat{S}^{-1}(t) &= \hat{S}^{-1}(-\infty) \hat{S}(\infty, t).\end{aligned}\quad (3.17)$$

§ 3.2. Линейные и нелинейные временные характеристики сред для динамических возмущений

Используем общие формулы § 3.1. для исследования явлений, которые возникают при наложении внешних сил (полей). Для простоты будем интересоваться сначала изменением во времени какой-то одной физической величины x . Затем дадим обобщение на произвольный случай многих, как дискретных, так и полевых переменных.

Пусть физическая величина x , характеризующая данную систему, такова, что воздействие внешней силы $f(t)$ может быть описано добавочным членом в гамильтониан системы

$$\hat{V}(t) = -\hat{x} f(t),$$

где \hat{x} есть оператор данной физической величины x . Полный гамильтониан системы окажется равным

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Поскольку мы рассматриваем устойчивые макроскопические системы, то в отсутствие каких-либо возмущений до «включения» сил система будет находиться в состоянии равновесия при некоторой температуре T . Состояние термодинамического равновесия описывается (глава 2) распределением Гиббса \mathbf{r} – матрицы плотности

$$\mathbf{r}_0 = e^{-\frac{\hat{H}_0 - \hat{F}}{T}},$$

где \hat{F} – есть свободная энергия.

Внешняя сила $f(t)$ может быть включена в любой заданный момент времени. для определенности будем считать, что момент включения силы $t \rightarrow -\infty$. Тогда изменение силы во времени может быть произвольным за счет условия $f(-\infty) = 0$ или $\lim_{t \rightarrow -\infty} f(t) = 0$.

В частном случае отсутствие внешней силы оператор интересующей нас физической величины x в момент времени t есть

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{x}(t) e^{-i\hat{H}_0 t}, (\mathbf{h} = 1),$$

(гейзенберговское представление).

Среднее значение физической величины x в момент времени t определяется

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = Sp \exp\left(\frac{\hat{F} - \hat{H}_0}{T}\right) \exp\left(\frac{i \hat{H}_0 t}{\mathbf{h}}\right) \hat{x}(t) \exp\left(\frac{-i \hat{H}_0 t}{\mathbf{h}}\right) = Sp r_0 \hat{x}$$

и не зависит от времени. Мы можем выбрать оператор \hat{x} таким образом, чтобы это среднее было равно нулю.

В присутствии внешней силы $f(t)$ оператор величины x в момент времени t согласно (3.14) будет равен

$$\hat{x}^{\Gamma}(t) = \hat{S}^{-1}(t) \hat{x}(t) \hat{S}(t),$$

где

$$\hat{S}(t) = T \exp\left\{\frac{i}{\mathbf{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' x(t') h(t-t')\right\}. \quad (3.19)$$

Мы записали \hat{S} - матрицу (3.19) в несколько отличной от (3.12) форме, введя единичную функцию Хевисайда и тем самым формально продолжив область интегрирования по времени до $+\infty$.

Поскольку эволюция во времени случайной величины известна (оператора величины) и задано начальное статистическое распределение системы, то мы можем определить все статистические характеристики случайной величины x , точно также, как и в случае термодинамического равновесия. Отличие в данном случае состоит в том, что среднее значение величины x отлично от нуля и не зависит от изменения внешней силы $f(t)$. Для описания многих физических явлений, возникающих при наложении внешних сил, достаточно знания среднего значения физической величины.

Для нахождения среднего значения величины x при действии силы $f(t)$ проведем усреднение по распределению Гиббса

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = Sp r_0 \hat{x}^{\Gamma}(t). \quad (3.20)$$

Здесь мы не делали каких-либо приближений, поэтому (3.20) есть точное выражение.

Обратимся к случаю очень малой силы $f(t)$ такой, что среднее значение (3.20) можно считать линейной функцией от $f(t)$. Тогда разлагая \hat{S} - матрицу по $f(t)$:

$$\hat{S}(t) = 1 + \frac{i}{\mathbf{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' x(t') f(t') h(t-t'),$$

$$\hat{S}^{-1}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' x(t') f(t') h(t-t') = \hat{S}^{+}(t),$$

и оставляя в (3.20) члены до первого порядка по $f(t)$, получим

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' j(t, t_1) f(t_1), \quad (3.21)$$

где

$$j(t, t_1) = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_{-} \rangle h(t-t_1) \quad (3.22)$$

носит название линейной функции реакции или функции отклика.

Подчеркнем еще раз, что операторы $\hat{x}(t)$, $\hat{x}(t_1)$: определяются согласно (3.13) невозмущенным гамильтонианом \hat{H}_0 .

Рассмотрим общие свойства и физический смысл реакции. Легко видеть, что функция $j(t, t_1)$ характеризует отклик системы на силу, существенно отличную от нуля в очень короткий промежуток времени (по сравнению с характерным временем установления в системе), так что можно записать силу как

$$f(t') = f_0 \delta(t_1 - t').$$

Тогда среднее значение x согласно (3.21) окажется равным

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = j(t, t_1) f_0.$$

Формула (3.22) дает точное выражение для линейной функции реакции через определенные комбинации временных корреляций второго порядка в состоянии термодинамического равновесия. Таким образом, явления переноса, возникающие при наложении слабой внешней силы, будут определяться статистическими свойствами системы в состоянии термодинамического равновесия. В этом смысле задача теории явлений переноса аналогична традиционной задаче статистической механики – нахождения термодинамических свойств системы. Существенное отличие функции реакции, однако, состоит в том, что она зависит от временной эволюции случайных величин, а не только от статистических свойств в данный момент времени. Точные формулы (3.22) были установлены в работах Кирквуда, Грина, Кубо, Мори.

Определение функции реакции (3.22), несколько отличное от традиционного, позволяет автоматически учесть принцип причинности. Принцип причинности требует, чтобы значение величины x в момент времени t определялось лишь значением силы в предыдущие моменты времени $t > t_1$. В определении (3.22) это учтено тем, что $j(t, t_1)$

обращается в нуль, если $t < t_1$. Остановимся на принципе причинности более детально. Воспользуемся простыми, полезными свойствами функции Хейвисайда. Из определения единичной функции следует, что

$$\begin{aligned} h(t)h(t) &= h(t), \\ h(t)h(-t) &= 0, \\ h(t) + h(-t) &= 1. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Наряду с этим часто используется функция

$$Sgn(t) = h(t) - h(-t),$$

которая удовлетворяет соотношению

$$Sgn(t)Sgn(t) = 1.$$

Используя полученные свойства (3.23) и определение (3.22) запишем условие причинности в виде

$$j(t, t_1) = j(t, t_1)h(t - t_1),$$

или в эквивалентной форме

$$j(t, t_1) = j(t, t_1)Sgn(t - t_1). \quad (3.24)$$

Отметим также простые, почти очевидные свойства функции реакции. Так как внешняя сила и среднее значение (эрмитовского оператора) действительны, то и функция реакции действительна

$$j^*(t, t_1) = j(t, t_1).$$

В силу однородности во времени невозмущенной системы функция реакции будет зависеть лишь от разности моментов времени

$$j(t, t_1) \equiv j(t - t_1) = \frac{i}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}, \hat{x}(t_1 - t)]_- \rangle h(t - t_1),$$

где \hat{x} - шредингеровский оператор.

Используя свойство (3.23) единичных функций Хевисайда, покажем, что линейные функции реакции определяют корреляционные функции $\langle [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_- \rangle$:

$$j(t, t_1) = \frac{i}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}(t_1), \hat{x}(t)]_- \rangle h(t_1 - t). \quad (3.25)$$

Используя (3.23) и свойство коммутатора $[\hat{A}\hat{B}]_- = -[\hat{B}\hat{A}]_-$ из (3.24), (3.25) получим

$$\langle [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_- \rangle = \frac{\mathbf{h}}{i} [j(t, t_1) - j(t_1, t)]. \quad (3.26)$$

Сформулируем принцип причинности в несколько иной форме. Для этого заметим, что наряду с (3.26) имеет место

$$\mathbf{j}(t, t_1) + \mathbf{j}(t_1, t) = \frac{I}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_- \rangle h(t - t_1). \quad (3.27)$$

Сравнивая (3.26) и (3.27), получим

$$\mathbf{j}(t, t_1) + \mathbf{j}(t_1, t) = [\mathbf{j}(t, t_1) - \mathbf{j}(t_1, t)] \text{Sgn}(t - t_1). \quad (3.28)$$

Основное выражение для функции реакции (3.24) является строгим в том смысле, что оно справедливо для произвольных физических систем и не опирается на какое-либо приближенное, модельное описание физических систем. С другой стороны, описание явлений переноса функций реакции (3.24) является приближенным, так как внешняя сила $f(t)$ предполагалась достаточно малой, и лишь в частном случае линейных моделей систем описание явлений переноса с помощью функции реакции является точным для произвольной величины внешней силы.

Реальные физические системы в действительности являются нелинейными. Это означает, что с увеличением воздействия $f(t)$ все большую роль будут играть нелинейные члены в разложении среднего значения величины x по $f(t)$. Иначе говоря, все большую роль будут играть нелинейные явления переноса. В общем случае среднее значение физической величины x при наличии возмущения (3.20) является функционалом от внешней силы $f(t)$, который удобно записать в виде разложения по степеням внешней силы

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathbf{j}(t, t_1) f(t_1) + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \mathbf{j}(t, t_1, t_2) f(t_1) f(t_2) + \dots, \quad (3.29)$$

где функции $\mathbf{j}(t, t_1, t_2), \dots$, также как и линейная функция реакции $\mathbf{j}(t, t_1)$ определяются свойствами системы в состоянии термодинамического равновесия (3.1). Функции $\mathbf{j}(t, t_1, t_2)$, $\mathbf{j}(t, t_1, t_2, t_3)$ назовем соответственно квадратичной и кубичной нелинейными функциями реакции.

Разложение (3.29) имеет практический смысл, если для описания явлений переноса можно ограничиться конечным числом членов разложения в (3.29). Это имеет место в случае достаточно малой нелинейности, когда действующая сила не столь велика, чтобы «включить в игру» последующие члены разложения по силе.

Конечное число членов в разложении (3.29) по внешней силе может быть обусловлено также выбором конкретной модели физической системы, и в рамках этой модели описание остается по-прежнему строгим.

В ряде задач, однако, необходимо учитывать все члены возмущений по внешней силе $f(t)$. В этом случае важной характеристикой явлений переноса является так называемая дифференциальная функция реакции, которая характеризует изменение среднего значения величины x при достаточно малом изменении внешней силы.

Дадим определение дифференциальной функции реакции. Пусть $\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle$ есть среднее значение величины x при заданной внешней силе $f(t)$ и пусть сила получила малое приращение:

$$f'(t) = f(t) + df(t). \quad (3.30)$$

Соответственно, среднее значение получит приращение

$$d \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle' - \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt j^{\Gamma}(t, t_1) df(t_1),$$

где $\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle'$ есть среднее значение при действии силы (3.30), а

$$j^{\Gamma}(t, t_1) = \frac{d \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle}{df(t_1)}. \quad (3.31)$$

есть дифференциальная функция реакции.

Функциональная производная в (3.31) может приниматься как обобщенная частная производная. Чтобы провести такую аналогию функциональной производной с частной достаточно формально перейти от интегрирования по t_1 , к суммированию по дискретным значениям времени t_1

$$d \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle \rightarrow \Delta \langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \sum_i j^{\Gamma}(t, t_i) df(t_i), \quad (3.32)$$

Поскольку вся зависимость от силы $f(t)$ содержится в \hat{S} - матрице (3.19), то для нахождения дифференциальной функции реакции достаточно вычислить производную от

\hat{S} - матрицы $\frac{d \hat{S}(t)}{df(t_1)}$, воспользовавшись тем фактом, что дифференцирование можно

ввести под знак упорядочения во времени T . Под знаком дифференцируем операторы $\hat{x}(t)$ так, как классические величины.

Из оператора (3.19) имеем

$$\begin{aligned} \frac{d \hat{S}(t)}{d f(t_1)} &= \frac{i}{\mathbf{h}} T \left\{ \hat{x}(t_1) \exp \left[\frac{i}{\mathbf{h}} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{x}(t') f(t') \right] \right\} \mathbf{h}(t-t') = \\ &= \frac{i}{\mathbf{h}} \hat{S}(t, t_1) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1) \hat{S}(t_1) \mathbf{h}(t-t_1) = \frac{i}{\mathbf{h}} \hat{S}(t) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1) \mathbf{h}(t-t'). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Здесь мы воспользовались свойствами \hat{S} – матрицы (3.17) и определением (3.14) оператора. Вычислять производную от обратной \hat{S} –матрицы нет необходимости в силу условия унитарности.

Применяя к (3.33) операцию сопряжения, получим

$$\frac{d \hat{S}^{-1}(t)}{d f(t_1)} = -\frac{i}{\mathbf{h}} \hat{x}^{\wedge^r}(t_1) \hat{S}^{-1}(t) \mathbf{h}(t-t_1). \quad (3.34)$$

Используя формулы (3.33), (3.34) при вычислении производной от гейзенберговского оператора (3.19), имеем

$$\frac{d \hat{x}^{\wedge^r}(t)}{d f(t_1)} = \frac{i}{\mathbf{h}} [\hat{x}^{\wedge^r}(t) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1)]_- \mathbf{h}(t-t_1).$$

Таким образом, дифференциальная функция реакции (3.31) оказывается равной

$$\mathbf{j}^r(t, t_1) = \frac{i}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}^{\wedge^r}(t) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1)]_- \rangle \mathbf{h}(t-t_1). \quad (3.35)$$

Полезно сравнить дифференциальную функцию реакции (3.35) с линейной функцией реакции. Легко видеть, что (3.35) получается из линейной функции реакции (3.22), если заменить операторы $\hat{x}(t)$, $\hat{x}(t_1)$ гейзенберговскими операторами $\hat{x}^{\wedge^r}(t)$, $\hat{x}^{\wedge^r}(t_1)$. Поэтому некоторые свойства, которые получены для линейной функции реакции, могут быть сразу же перенесены на дифференциальную функцию реакции.

Функция реакции (3.35) удовлетворяет принципу причинности

$$\mathbf{j}^r(t, t_1) \text{Sgn}(t-t_1) = \mathbf{j}^r(t, t_1). \quad (3.36)$$

При выводе формул (3.26)-(3.28) мы не пользовались специфическими свойствами операторов $\hat{x}(t)$, $\hat{x}(t_1)$, поэтому с таким же успехом можно записать аналогичные формулы для дифференциальной функции реакции

$$\begin{aligned} \langle [\hat{x}^{\wedge^r}(t) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1)]_- \rangle &= \frac{\mathbf{h}}{i} [\mathbf{j}^r(t, t_1) - \mathbf{j}^r(t_1, t)], \\ \mathbf{j}^r(t, t_1) + \mathbf{j}^r(t_1, t) &= \frac{i}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}^{\wedge^r}(t) \hat{x}^{\wedge^r}(t_1)]_- \rangle \text{Sgn}(t-t_1). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Последнее соотношение есть иная формулировка принципа причинности. Отмечая некоторые общие свойства для линейной и дифференциальной функций реакции, следует помнить, что дифференциальная функция реакции является функционалом от внешней силы $f(t)$. Вследствие этого дифференциальная функция реакции не удовлетворяет условию стационарности, если сила $f(t)$ меняется с течением времени.

Дифференциальная функция реакции содержит полную информацию об изменении среднего значения (3.20). В частности, дифференциальная функция реакции определяет как линейную, так и нелинейную функции реакции, входящие в разложение (3.29). Действительно, из определения (3.30) следует

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(t, t_1) &= \left. \frac{d \langle \hat{x}^r(t) \rangle}{df(t_1)} \right|_{f=0} ; \\ \mathbf{j}(t, t_1, t_2) &= \left. \frac{1}{2!} \frac{d^2 \langle \hat{x}^r(t) \rangle}{df(t_1) df(t_2)} \right|_{f=0} ; \\ \mathbf{j}(t, t_1, \dots, t_n) &= \left. \frac{1}{n!} \frac{d^n \langle \hat{x}^r(t) \rangle}{df(t_1) \dots df(t_n)} \right|_{f=0} . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Если воспользоваться определением функция (3.31), соотношения (3.38) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(t, t_1) &= \mathbf{j}^r(t, t_1) \Big|_{f=0}, \\ \mathbf{j}(t, t_1, t_2) &= \mathbf{j}^r(t, t_1, t_2) \Big|_{f=0}. \end{aligned}$$

Воспользуемся последними формулами, чтобы найти явное выражение для нелинейных функций реакции. Например, для квадратичной функции реакции из (3.35), (3.36) получаем

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{j}}(t, t_1, t_2) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right)^2 \left\{ \left\langle \left[\hat{x}(t), \hat{x}(t_2) \right]_-, \hat{x}(t_1) \right\rangle_- \mathbf{h}(t-t_1) \mathbf{h}(t-t_2) + \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \left[\hat{x}(t), [\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)]_- \right]_- \right\rangle_- \mathbf{h}(t-t_1) \mathbf{h}(t_1-t_2) \right\}. \end{aligned}$$

В силу определения (3.29) квадратичная функция реакции обладает симметрией

$$\bar{\mathbf{j}}(t, t_1, t_2) = \bar{\mathbf{j}}(t, t_2, t_1).$$

Чтобы привести (3.39) к симметричной форме, воспользуемся тождеством Якоби

$$\left[\hat{x}(t), [\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2)]_- \right]_- + \left[\hat{x}(t_1), [\hat{x}(t_2), \hat{x}(t)]_- \right]_- + \left[\hat{x}(t_2), [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_- \right]_- \equiv 0$$

и свойством единичных функций Хевисайда

$$\mathbf{h}(t-t_1)\mathbf{h}(t-t_2) = \mathbf{h}(t-t_1)\mathbf{h}(t_1-t_2) + \mathbf{h}(t-t_2)\mathbf{h}(t_2-t_1).$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \bar{j}(t, t_1, t_2) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right)^2 \left\{ \left\langle \left[[\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_-, \hat{x}(t_2) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_1)\mathbf{h}(t_1-t_2) + \right. \\ &\quad \left. + \left\langle \left[[\hat{x}(t), \hat{x}(t_2)]_-, \hat{x}(t_1) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_2)\mathbf{h}(t_2-t_1) \right\} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right)^2 \hat{P}_{12} \left\langle \left[[\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_-, \hat{x}(t_2) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_1)\mathbf{h}(t_1-t_2), \end{aligned}$$

где \hat{P}_{12} – есть оператор суммы перестановок индексов 1,2.

Аналогичную структуру имеют нелинейные функции реакции произвольного порядка

$$\begin{aligned} \bar{j}(t, t_1, \dots, t_n) &= \\ &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right)^n \hat{P}_{12\dots n} \left\langle \left[[\dots [\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_-, \dots \hat{x}(t_{n-1})]_-, \hat{x}(t_n) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_1) \cdot \mathbf{h}(t_{n-1}-t_n). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Полученные точные выражения для функций реакции (3.22), (3.41) позволяют записать среднее значение в виде разложения (3.29).

Легко, однако, заметить, что при выводе мы никоим образом не использовали усреднение по начальному состоянию. Поэтому с таким же успехом может быть записан

гейзенберговский оператор $\hat{x}^F(t)$ в произвольный момент времени при наличии внешнего возмущения (3.18)

$$\hat{x}^F(t) = \hat{x}(t) + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \bar{j}(t, t_1) f(t_1) + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \bar{j}(t, t_1, t_2) f(t_1) f(t_2) + \dots, \quad (3.42)$$

где $\hat{x}(t)$ есть невозмущенный оператор;

$$\begin{aligned} \bar{j}(t, t_1) &= \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right) \left\langle \left[\hat{x}(t), \hat{x}(t_1) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_1), \\ \bar{j}(t, t_1, t_2) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\mathbf{h}} \right)^2 \hat{P}_{12} \left\langle \left[[\hat{x}(t), \hat{x}(t_1)]_-, \hat{x}(t_2) \right]_- \right\rangle \mathbf{h}(t-t_1)\mathbf{h}(t_1-t_2). \end{aligned} \quad (3.43)$$

есть флуктуирующие отклики.

При усреднении (3.42) по начальному состоянию естественно приходим к разложению (3.29).

Остановимся кратко на общих свойствах нелинейных функций реакции. Для определенности будем иметь в виду квадратичную функцию реакции. Нелинейные функции реакции определяются временными корреляционными функциями (3.30) в состоянии термодинамического равновесия. Например, квадратичные функции реакции определяются трехвременными функциями корреляции.

В силу стационарности системы во времени в состоянии термодинамического равновесия нелинейные функции реакции зависят от разности моментов времени

$$\bar{j}(t, t_1, t_2) \equiv \bar{j}(t - t_1, t - t_2) = \bar{j}(t_1, t_2).$$

Нелинейные функции реакции действительны (\hat{x} -эрмитовский оператор)

$$\bar{j}(t, t_1, t_2) = \bar{j}^*(t, t_1, t_2).$$

И удовлетворяют принципу причинности

$$\begin{aligned} \bar{j}(t, t_1, t_2) \text{Sgn}(t - t_1) &= \bar{j}(t, t_1, t_2), \\ \bar{j}(t, t_1, t_2) \text{Sgn}(t - t_2) &= \bar{j}(t, t_1, t_2). \end{aligned} \quad (3.44)$$

§ 3.3 Обобщенные восприимчивости и их свойства

В § 3.2 мы получили строгие выражения для функций реакции через корреляционные функции, относящиеся к невозмущенной системе при произвольной зависимости внешних сил от времени.

При наличии постоянных сил, «включаемых» в момент времени $t = -\infty$, достаточно медленно (адиабатически), система может оказаться в некотором новом состоянии термодинамического равновесия. Очевидно, это возможно в том случае, если при действии силы не происходит диссипации энергии в систему, как, например, при воздействии постоянных магнитных и электрических полей на диэлектрик. Если же при действии постоянной силы происходит диссипация энергии, то состояние не будет описываться, вообще говоря, распределением Гиббса. Часто в таких ситуациях в системе возникает потоковая неустойчивость. Далее будут приведены примеры расчетов флуктуаций, как в первом, так и во втором случаях.

Очень важным видом возмущения являются периодические возмущения, когда внешняя сила меняется по гармоническому закону.

$$f(w) = f(w) \exp(-iwt) + f(-w) \exp(iwt)$$

или

$$f(w) = \sum_i f(w_i) \exp(-iwt_i). \quad (3.45)$$

Рассмотрим отклик системы на периодическое возмущение. Будем считать сначала силу достаточно слабой, так что можно ограничиться лишь линейным членом.

Записывая

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt j(t, t_1) f(t_1),$$

и представляя внешнюю силу в виде суммы гармоник (3.45), получим

$$\langle \hat{x}^{\Gamma}(t) \rangle = \sum_i c(w_i) f(w_i) \exp(-i w_i t)$$

Величина

$$c(w_i) = \int_{-\infty}^{\infty} dt j(t) \exp(i w_i t), \quad (3.46)$$

определяющая отклик системы на гармоническое возмущение, носит название обобщенной восприимчивости.

Найдем явное выражение для обобщенной восприимчивости. Для этого подставим в (3.45) выражение (3.22) для функции реакции и воспользуемся преобразованием Фурье для операторов x

$$c(w) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int \frac{dw'}{2\pi} \frac{i}{\mathbf{h}} \langle [\hat{x}, \hat{x}(w')]_{-} \rangle h(t). \quad (3.47)$$

Преобразование Фурье единичной функции $h(t)$ есть обобщенная функция (интегральный оператор)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i(w - w')t) h(t) = \frac{i}{w - w' + ie} = i \left[\frac{P}{w - w'} - ipd(w - w') \right], \quad (3.48)$$

где P означает интеграл в смысле главного значения. Подставляя интегральное представление (3.48) в (3.47) окончательно получим

$$c(w) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw'}{2\pi} \frac{\langle [\hat{x}, \hat{x}(w')]_{-} \rangle}{w - w' + ie}, \quad (3.49)$$

Из найденного строгого выражения (3.49) для обобщенной восприимчивости оказывается возможным получить некоторые весьма общие соотношения.

Прежде всего, заметим, что $c(w)$ является, вообще говоря, комплексной функцией переменной

$$c(w) = c'(w) + i c''(w),$$

причем действительная часть является четной, а мнимая – нечетной функцией частоты.

$$c'(w) = c'(-w); \quad c''(w) = -c''(-w)$$

Последние свойства следуют из действительности функции реакции и определения (3.46).

Из полученного спектрального представления (3.49) для восприимчивости следует, что функция $c(w)$, определенная на действительной оси w , может быть аналитически продолжена в верхнюю полуплоскость w . Это связано с тем, что имеется лишь полюс в нижней полуплоскости (в силу положительности $e, e > 0$). Используя аналитичность $c(w)$ в верхней полуплоскости комплексной переменной w , нетрудно получить дисперсионные соотношения (ДС) Крамерса-Кронига (см., например, [1]). Возможность аналитического продолжения в верхнюю полуплоскость комплексного переменного физически обусловлена принципом причинности. Чтобы непосредственно показать явную связь ДС с принципом причинности, получим их другим путем, используя математическую формулировку принципа причинности.

Подставляя в (3.46) интегральное представление

$$Sgn(t) = \frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\Omega} \exp(-i\Omega t),$$

и применяя к левой и правой частям преобразование Фурье, получим

$$c(w) = \frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw'}{w-w'} c'(w'). \quad (3.50)$$

Полученное соотношение можно записать как

$$c''(w) = \frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw'}{w-w'} c'(w'), \quad (3.51)$$

$$c'(w) = -\frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw'}{w-w'} c''(w'). \quad (3.52)$$

Интегральные соотношения (3.51), (3.52) между действительной и мнимой частями восприимчивости носят название соотношений Крамерса-Кронига для дисперсионных соотношений.

Приведенный вывод показывает, что ДС (3.51), (3.52) есть следствия принципа причинности. Единственное предположение, которое мы сделали при выводе, состоит в том, что существует свертка от произведения $j(t)$ и $Sgn(t)$. Из теории обобщенных функций следует, что свертка существует, если

$$\lim_{t \rightarrow \infty} j(t) = 0.$$

Если предел $\lim_{t \rightarrow \infty} j(t) = j^* \neq 0$, то не составляет особого труда обобщить ДС (3.50) на этот случай. ДС имеют простой физический смысл. Легко показать, что мнимая часть восприимчивости определяет усредненную по периоду колебаний поглощаемую в единицу времени энергию в системе. В тоже время действительная часть восприимчивости характеризует добавочный вклад в энергию, связанный с внешней силой или, так называемую, дисперсию. ДС (3.50) показывают, что дисперсия и поглощение взаимно однозначно определяют друг друга. Это есть свойство физических систем, обусловленное принципом причинности.

Линейное соотношение между средним значением и внешней силой имеет место в случае, если внешняя сила достаточно мала или же сама система линейна. Мы рассмотрим случай, когда внешняя сила не является малой и необходимо учитывать нелинейные члены в разложении среднего значения.

Представляя внешнюю силу $f(t)$ в разложении (3.42) в виде суммы гармоник, получим

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^\Gamma(t) \rangle = & \sum_i c(w_i) f(w_i) \exp(-i w_i t) + \\ & + \sum_i \sum_k c(w_i, w_k) f(w_i, w_k) \exp(-i(w_i + w_k)t) + \\ & + \sum_i \sum_k \sum_l c(w_i, w_k, w_l) f(w_i, w_k, w_l) \exp(-i(w_i + w_k + w_l)t) + \dots \end{aligned} \quad (3.53)$$

Первое слагаемое в (3.53), линейное по силе, уже рассмотрено нами. Второе и последующие слагаемые в разложении (3.53) будут определять нелинейные эффекты. Коэффициенты в нелинейных членах разложения по гармоникам есть нелинейные восприимчивости, которые связаны преобразованиями Фурье с нелинейными функциями реакции

$$c(w_1, w_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \exp(iw_1 t_1 + iw_2 t_2) j(t_1, t_2), \quad (3.54)$$

где $t_1 = t - t_1$, $t_2 = t - t_2$.

Знание обобщенных восприимчивостей позволяет найти значения средних физических величин, возникающих в системе при наложении внешних гармонических полей. Например, при наложении электрического поля на нелинейную среду $e(w)$ линейная восприимчивость $c(w)$ определит поляризацию на частоте $w: P(w)$. Знание квадратичных нелинейностей $c(w, w)$ и $c(w, -w)$ позволит определить нелинейную поляризацию на удвоенной частоте

$$P^{NL}(2w) = c(w, w)e(w)e^*(w)$$

и постоянную составляющую нелинейной поляризации

$$P^{NL}(0) = c(w, -w)e(w)e^*(w)$$

Здесь для простоты мы опустим у полей и восприимчивостей индексы, указывающие поляризацию.

Для того чтобы найти спектральное представление для нелинейных восприимчивостей, необходимо повторить все те же шаги, что и при записи линейной восприимчивости. Используя преобразование Фурье для операторов и интегральное представление единичных функций (3.48) в нелинейной функции реакции (3.40) для «квадратичных восприимчивостей» (3.54), получим

$$c(w_1, w_2) = \frac{1}{2!} \left(\frac{-i}{\mathbf{h}} \right)^2 P_{12} \int \frac{dw_1'}{2p} \int \frac{dw_2'}{2p} \frac{\langle [[\hat{x}, \hat{x}(w_1')]]_-, \hat{x}(w_2')]_- \rangle}{(w_2 - w_2' + ie)(w_1 + w_2 - w_1' - w_2' + ie)}. \quad (3.55)$$

Квадратичная восприимчивость (3.55) есть комплексная функция двух независимых переменных w_1 и w_2 .

Рассмотрим $c(w_1, w_2)$ как функцию комплексной переменной w_1 . Из спектрального представления (3.55) следует, что нет полюсов в верхней полуплоскости комплексной переменной w_1 . Соответственно квадратичная восприимчивость по w_1 будет удовлетворять дисперсионным соотношениям

$$c(w_1, w_2) = \frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_1'}{w_1 - w_1'} c(w_1', w_2). \quad (3.56)$$

Аналогично ДС можно записать, выделяя переменную w_2

$$c(w_1, w_2) = \frac{i}{p} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_2'}{w_2 - w_2'} c(w_1, w_2').$$

И, наконец, записывая ДС по обеим переменным w_1 и w_2 , будем иметь

$$c(w_1, w_2) = -\frac{1}{p^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_1'}{w_1 - w_1'} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw_2'}{w_2 - w_2'} c(w_1', w_2'). \quad (3.57)$$

Двухкратные ДС (3.58) показывают, что наряду с соотношениями (3.56) между действительной и мнимой частями восприимчивости имеются интегральные соотношения для каждой из указанных характеристик в отдельности. Подчеркнем опять-таки, что физически ДС (3.56), (3.57) обусловлены принципом причинности и непосредственно могут быть получены преобразованием Фурье из условий причинности (3.44). Вопрос о физической интерпретации ДС для нелинейных восприимчивостей в целом является, конечно, более сложным и здесь обсуждаться не будет.

Обобщенные восприимчивости являются очень важными характеристиками системы. Они играют определяющую роль, как в кинетике, так и в теории флуктуаций.

До сих пор мы рассматривали для простоты случай одной физической величины. Рассмотрим теперь набор величин $x_{ai} (i = 0, 1, 2 \dots n)$, характеризующих нашу систему, для каждой из которых существует сопряженная сила f_{ai} , так что действие сил $f_{ai} (i = 0, 1, 2 \dots n)$ можно описать добавочным членом в гамильтониан системы

$$V = - \sum_{i=0}^n x_{ai} f_{ai}(t). \quad (3.58)$$

Здесь индексы a_i могут принимать не только дискретный, но и непрерывный ряд значений. Для полевых величин возмущение (3.58) будет иметь вид ($a \rightarrow r, \mathbf{a}$)

$$V = - \sum_a \int d\mathbf{r} x_a(\mathbf{r}) f_a(\mathbf{r}, t)$$

Если внешние силы представить в виде суммы гармоник, то

$$\begin{aligned} \langle x_{a_0}(t) \rangle = & c_{a_0 a_1}(w_1) f_{a_0}(w_1) \exp(-i w_1 t) + \\ & + c_{a_0 a_1 a_2}(w_1, w_2) f_{a_1}(w_1) f_{a_2}(w_2) \exp(-i(w_1 + w_2)t) + \dots \end{aligned} \quad (3.59)$$

Чтобы получить обобщенные восприимчивости, определяемые разложением (3.59), необходимо всюду в полученных выше формулах для восприимчивостей произвести замену

$$c(w_i) \rightarrow c_{ai}(w_i), \quad c(w_1 w_2) \rightarrow c_{a_0 a_1 a_2}(w_1 w_2)$$

и т.д.

§ 3.4 Методы расчета кинетических коэффициентов (коэффициентов переноса)

Для восприимчивостей (или функций реакции), которые определяют процессы переноса или релаксацию системы к положению равновесия, мы имеем теперь некоторые строгие соотношения.

Точное вычисление кинетических коэффициентов для реальных физических систем, как правило, не представляется возможным. Это связано с тем, что обычно мы имеем дело со сложными макроскопическими системами. Чтобы существенно продвинуться в расчетах, целесообразно применить приближенные методы, которые используют какие-либо малые параметры данной задачи. Несколько иной путь состоит в том, чтобы заменить реальную физическую систему более простой моделью, отражающей наиболее существенные черты реальной системы.

Предварительно остановимся на характеристике хорошо известных методов расчета обобщенных восприимчивостей: методе кинетических уравнений (в классической и квантовой областях) и методе функций Грина.

В настоящее время существуют разнообразные методы исследования явлений переноса и процессов релаксации. Наиболее простым и распространенным методом расчета является метод кинетических уравнений (как в классической, так и в квантовой областях). Классическое кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения имеет вид

$$\frac{dW(r, p, t)}{dt} = \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial r} \mathbf{r} + \frac{\partial W}{\partial p} \mathbf{p} = -\left(\frac{dW}{dt}\right)_{CT}. \quad (3.60)$$

Левая часть уравнения (3.60) представляет собой полную производную от одночастичной функции распределения, Если частицы движутся без столкновений (без взаимодействия), то полная производная будет равна нулю. Наличие столкновения приводит к процессам релаксации, которые описываются членом $-\left(\frac{dW}{dt}\right)_{CT}$, в общем случае, являющимся сложным функционалом от функции распределения. Это так называемый интеграл столкновений. В простейшем случае интеграл столкновений имеет вид

$$-\left(\frac{dW}{dt}\right)_{CT} = -\frac{W - W_0}{\tau},$$

где W_0 – есть равновесная функций распределения, τ - характерное время релаксации.

Квантовые кинетические уравнения записываются соответственно для квантовой функции распределения или матрицы плотности

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_0, \hat{r}] = -\left(\frac{d\hat{r}}{dt}\right)_{CT}.$$

Здесь член в правой части уравнения описывает релаксацию квантовой системы за счет взаимодействия с «термостатом» и эквивалентен интегралу столкновений в классическом уравнении (3.60).

Отметим некоторые особенности метода кинетических уравнений.

а) Следует иметь в виду, что записанные уравнения приближенны. В ряде задач условия их применимости может не выполняться.

б) Метод кинетических уравнений позволяет рассчитывать лишь одновременные средние значения физических величин. Поэтому метод не годится для изучения временных корреляционных функций.

в) Хотя методы решения самих кинетических уравнений могут быть достаточно простыми, корректные расчеты времен релаксации, которые неявно входят в кинетическое уравнение, могут представлять достаточно сложную задачу

Другой достаточно распространенный в настоящее время метод расчета как кинетических коэффициентов, так и термодинамических свойств систем основан на уравнениях для функций Грина. При этом вместо запаздывающих функций Грина (функций релаксации) используются так называемые причинные функции Грина.

$$G_{ij}(t, t_1) = \frac{i}{\hbar} \langle T[\hat{x}_i(t) \hat{x}_j(t_1)]_- \rangle. \quad (3.61)$$

где T – есть символ упорядочения во времени.

Для функций Грина (3.61) записывают уравнение эволюции таким образом, чтобы автоматически учитывались граничные условия. Уравнения для функций Грина, представляют собой в общем случае бесконечную систему зацепляющихся уравнений. Поэтому их решают какими-либо приближенными методами. В ряде интересных задач появляется необходимость выйти за рамки методов возмущений, и для выяснения наиболее существенных черт необходимо суммировать бесконечный ряд членов по возмущению. Для наглядного представления членов ряда теории возмущений и их графического суммирования используют диаграммную технику, введенную Р.Фейнманом в квантовой теории поля.

Если в задаче не удастся выделить наиболее существенной бесконечной последовательности ряда возмущений, т.е. оказываются важными все члены ряда, то метод диаграммной техники в таком случае не годится.

ГЛАВА 4. ВЫВОД СТОХАСТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ОТКРЫТОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ. ПРОСТЫЕ МОДЕЛИ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ.

В данном разделе рассматриваются последовательный вывод стохастических уравнений для динамической подсистемы, взаимодействие с некоторой макроскопической системой, условно называемой термостатом. Для термостата характерно наличие существенно большего числа степеней свободы в сравнении с малым числом степеней свободы динамической подсистемы. Единственное физическое предположение, которое будет использовано в дальнейшем, состоит в учете малости изменения состояния термостата (в силу его макроскопичности) при взаимодействии с динамической подсистемой. В то же время влияние термостата на динамическую систему не предполагается малым.

Полученные уравнения обобщают известные стохастические уравнения Ланжевена и содержат явные выражения флуктуационных источников, зависящих от состояния исследуемой системы. Тем самым в данном разделе решается задача синтеза стохастических моделей систем, допускающих «сокращенное» (упрощенное) термодинамическое описание.

§ 4.1. Осциллятор, взаимодействующий с термостатом

Наша задача будет заключаться в том, чтобы на достаточно простом физическом примере развить такой метод, который подчеркивает единство процессов релаксации (и эволюции средних значений) и флуктуаций физических величин и позволяет одновременно рассмотреть наиболее существенные вопросы кинетики и флуктуаций. Естественно для этой цели выбрать уже рассмотренную в Главе 1 (при феноменологическом подходе) модель осциллятора, взаимодействующего с некоторой макроскопической системой (термостатом). Эта важнейшая физическая модель, описывающая колебания атомов в молекулах, твердых телах, моды электромагнитного поля в резонаторе, электрические и механические колебания различных макросистем. Запишем гамильтониан исследуемого осциллятора в виде

$$\hat{H} = \frac{p_x^2}{2} + \frac{w_0^2 x^2}{2} - xf(t).$$

Здесь мы полагаем, что масса системы равна единице (соответствующим выбором канонических переменных всегда можно это сделать), $f(t)$ - внешняя заданная сила.

Предположим также, что осциллятор взаимодействует с некоторой макроскопической системой, гамильтониан которой $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{w_0^2 x^2}{2}$, так что гамильтониан всей совокупности

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2} + \frac{w_0^2 x^2}{2} - x f(t) - I x Q + \hat{F}. \quad (4.1)$$

Член $\hat{V} = -I x Q$ описывает взаимодействие между осциллятором и макросистемой, I - есть константа взаимодействия; Q - переменная термостата. Влияние макроскопической системы на осциллятор нельзя считать малым, т.к. это взаимодействие приводит к существенным физическим эффектам, таким, как затухание колебаний, смещение собственной частоты осциллятора и т.п. В этом случае обычный метод возмущений по $\hat{V} = -I x Q$ применить нельзя.

Возникает вопрос, как вычислить силу «трения». При взаимодействии термостата на осциллятор существует и обратное влияние осциллятора на термостат. В силу макроскопичности термостата, его состояние при этом должно мало меняться. Поэтому влияние осциллятора, (который может находиться в произвольном состоянии), термостат мы можем учесть уже по теории возмущений.

С этой целью рассмотрим поведение термостата под действием произвольного воздействия осциллятора:

$$\hat{V} = -I x Q,$$

где $x(t)$ - произвольная случайная функция времени. Для простоты и физической ясности мы решаем простую классическую задачу.

Ограничиваясь первым порядком теории возмущений для переменной термостата $Q(t)$, в силу принципа соответствия из

$$x^f(t) = x(t) + \int dt_1 j(t, t_1) f(t_1) + \int dt_1 \int dt_2 j(t, t_1, t_2) f(t_1) f(t_2) + \dots$$

получим

$$Q^f = Q(t) + I \int dt_1 j^Q(t, t_1) x(t_1). \quad (4.2)$$

Здесь $Q(t)$ – определяется невозмущенным поведением термостата; а

$$j^Q(t, t_1) = -\{Q(t), Q(t_1)\} h(t - t_1)$$

есть случайная функция отклика.

Вернемся вновь к осциллятору и запишем уравнения движения для координаты осциллятора. Из канонических уравнений движения имеем

$$\ddot{x}^{\Gamma} + w_0^2 x^{\Gamma} = f(t) + I Q^{\Gamma}(t). \quad (4.3)$$

Данное уравнение является строгим, поскольку $Q^{\Gamma}(t)$ - точный гейзенберговский оператор.

Если для $Q^{\Gamma}(t)$ также попытаться написать уравнения, то в целом мы не получим замкнутой системы уравнений.

Перейдем от точного уравнения (4.3) к приближенному, заменив $Q^{\Gamma}(t)$ приближенным выражением (4.2) и положим

$$\ddot{x}^{\Gamma} + w_0^2 x^{\Gamma} = f(t) + I Q^{\Gamma}(t) + I^2 \int dt j^{\varrho}(t, t_1) x(t_1). \quad (4.4)$$

По поводу полученного уравнения следует сделать ряд замечаний:

Воздействие на осциллятор не предполагалось малым;

Стохастическое уравнение (4.4) в классической области есть уравнение для случайной реализации движения осциллятора, где $Q, j^{\varrho}(t, t_1)$ случайные функции определяются невозмущенным поведением в термостате.

В принятом приближении уравнение (4.4) позволяет вычислить все статистические характеристики переменной осциллятора. Статистические свойства переменных термостата $Q, j^{\varrho}(t, t_1)$ считаются известными.

После сделанных замечаний перейдем, прежде всего, к исследованию структуры уравнений (4.4) и выяснению физического смысла его отдельных членов.

Прежде всего, выясним, к каким эффектам приводит наличие невозмущенной переменной $Q(t)$. Если оставить лишь член нулевого порядка (по V), то уравнение примет вид

$$\ddot{x} + w_0^2 x = f(t) + I Q(t). \quad (4.5)$$

До сих пор мы не конкретизировали состояние макроскопической системы. Оно могло быть произвольным. Сейчас же рассмотрим случай, когда макроскопическая система находится в состоянии термодинамического равновесия.

Если уравнение (4.5) усреднить по состоянию термостата, то, учитывая что $\langle Q(t) \rangle_0 = 0$, получим уравнение

$$\langle \ddot{x}(t) \rangle + w_0^2 \langle x \rangle = f(t).$$

Таким образом, пренебрежение изменением состояния термостата привело к отсутствию релаксации осциллятора.

Рассмотрим влияние члена $I^2 \int dt j^{\varrho}(t, t_1) x(t_1)$, учитывающего изменение термостата. Прежде всего, заметим, что среднее значение флуктуирующего отклика $j^{\varrho}(t, t_1)$ отличие от нуля. Поэтому удобно ввести новую переменную со средним значением, равным нулю

$$\tilde{j}^{\varrho}(t, t_1) = j^{\varrho}(t, t_1) - \bar{j}^{\varrho}(t, t_1).$$

Здесь мы рассмотрим случай, когда флуктуации малы в сравнении с средним значением \bar{j}^{ϱ} :

$$\tilde{j}^{\varrho}(t, t_1) \equiv j^{\varrho}(t - t_1).$$

Пренебрегая в (4.4) флуктуациями отклика, получим

$$\ddot{x} + w_0^2 x - I^2 \int dt j^{\varrho}(t - t_1) x(t_1) = f(t) + I Q(t). \quad (4.6)$$

Стохастическое уравнение для осциллятора в таком виде при ряде дополнительных предположений было получено Сеницким непосредственно из гейзенберговских уравнений движения.

После преобразования Фурье уравнение (4.6) будет иметь вид

$$\left[w_0^2 - w^2 - c_{\varrho}(w) \right] x(w) = f(w) + I Q(w), \quad (4.7)$$

где $c_{\varrho}(w) = I^2 \int dt e^{iwt} j^{\varrho}(t) = c_{\varrho}'(w) + i c_{\varrho}''(w)$ - есть восприимчивость, характеризующая отклик макроскопической системы на монохроматическое возмущение.

Действительная часть восприимчивости $c_{\varrho}'(w)$ определит сдвиг частоты осциллятора, а мнимая часть $i c_{\varrho}''(w)$ будет характеризовать потери в осцилляторе. Отметим, что коэффициент затухания зависит от частоты. Задавшись определенной моделью термостата, мы сможем найти явное выражение для $c_{\varrho}(w)$.

Усреднив (4.7), получим уравнение для среднего значения

$$\left[w_0^2 - w^2 - c_{\varrho}(w) \right] \langle x(w) \rangle = f(w). \quad (4.8)$$

Из уравнения (4.8) найдем

$$\langle x(w) \rangle = c(w) f(w)$$

где $c(w) = \frac{1}{[w_0^2 - w^2 - c'_Q(w)]}$ есть обобщенная восприимчивость, действительная и мнимая части которой равны соответственно

$$c'(w) = \frac{w_0^2 - w^2 - c'_Q(w)}{[(w_0^2 - w^2 - c'_Q(w))^2 + (c''_Q(w))^2]};$$

$$c''(w) = \frac{c''_Q(w)}{[(w_0^2 - w^2 - c'_Q(w))^2 + (c''_Q(w))^2]}.$$

В частном случае, когда внешняя сила равна нулю, уравнение (4.7) описывает флуктуации в состоянии термодинамического равновесия. Причем, спектральная плотность флуктуаций оказывается равной

$$S(w) = \langle \dot{x} \dot{x}(w) \rangle = \frac{\langle \dot{Q} \dot{Q}(w) \rangle}{[(w_0^2 - w^2 - c'_Q(w))^2 + (c''_Q(w))^2]}. \quad (4.9)$$

Легко видеть, что полученные уравнения (4.7) конкретизируют соответствующие уравнения первой главы, полученные на основе простых физических соображений.

В частном случае уравнение (4.7) переходит в более простое уравнение с силой трения, не зависящей от частоты

$$\ddot{x} + w_0^2 x + g \dot{x} = f(t) + I Q(t)$$

или в спектральной форме

$$[w_0^2 - w^2 - iwg] x(w) = f(t) + I Q(t).$$

Рассмотренный выше метод может быть применен к весьма разнообразным задачам флуктуационной кинетике нелинейных систем. В отличие от традиционных методов кинетических уравнений или функций Грина данный метод позволяет, во-первых, менее формально конструировать приближения, и во-вторых, единым образом рассчитать как средние значения физических величин в явлениях переноса, так и их флуктуационные характеристики. Подчеркнем, что метод применим как к линейным, так и к нелинейным системам. При этом нелинейность может быть обусловлена не только нелинейностью динамической системы, но и свойствами самого термостата. Тем самым данный метод позволяет синтезировать адекватную выбранному приближению статистическую модель системы.

§ 4.2. Нелинейное стохастическое уравнение для открытой динамической системы

Основной задачей общей теории флуктуаций является получение адекватных реальных ситуаций флуктуационных уравнений систем с произвольной нелинейной структурой.

Одному из возможных выводов уравнения Ланжевена и его обсуждению посвящен предыдущий параграф. Преимущество предложенного в параграфе 4.1. вывода (в отличие от известных работ) состоит в том, что он с необходимостью приводит к появлению флуктуаций параметров, имеющих место в реальных системах, а также свойствах термостата. В настоящем параграфе будет продемонстрирован универсальный подход к получению нелинейных стохастических уравнений, учитывающих нелинейные свойства термостата и флуктуаций параметров.

Также как и в 4.1., мы разделяем рассматриваемую систему на две подсистемы – так называемую динамическую и взаимодействующую с ней макроскопическую систему (называемую нами термостатом). Для динамической подсистемы существенно, что она обладает малым числом степеней свободы в сравнении с макроскопически большим числом степеней термостата.

Этот прием разделения системы на «малую» и «большую» части (или выделение наиболее существенных переменных) имеет глубокие статистические основания. Поясним такое разделение на ряде физических примеров:

1. Электрон в кристаллическом поле решетки.

Взаимодействие электрона в поле проводимости с фононами (колебаниями решетки) приводит, например, к диссипации импульса и энергии электрона проводимости, изменению закона дисперсии электрона, флуктуации плотности тока и т.д. В данном примере электрон можно рассматривать как «динамическую» подсистему, а взаимодействующую с ним систему фононов как термостат.

2. Электромагнитное поле в нелинейной среде.

Если длина волны поля много больше межатомного расстояния, то длинноволновое поле можно рассматривать как «динамическую» подсистему. Соответственно, роль термостата будет играть среда (атомы, молекулы совместно с коротковолновым полем).

3. Примесный атом, взаимодействующий с полем излучения или колебаниями решетки.

Здесь примесный атом будет «динамической» подсистемой, а поле излучения (или фононы) – термостатом.

Прием разделения рассматриваемой системы на две подсистемы позволяет, прежде всего, рассматривать сильно неравновесные состояния. Мы выделяем часть системы, которая находится в неравновесном состоянии (примесные атомы, длинноволновое поле и

т.д.), и остальную ее макроскопическую, которая находится в состоянии, близком к равновесию.

Приведенные физические примеры позволяют (см. также 4.1.), сделать основное физическое предположение: считать что термостат (в силу его макроскопичности) мало изменяется при взаимодействии с динамической подсистемой. Вместе с тем влияние макроскопической системы на динамическую не является малым и существенным образом определяет диссипационные и флуктуационные процессы в динамической системе. Мы покажем, как, используя только этот факт, получить относительно простые уравнения для флуктуирующих величин динамической подсистемы.

Для физической ясности ограничимся более простым классическим рассмотрением.

В силу основного физического предположения мы должны учесть малость изменения переменных термостата за счет взаимодействия с динамической подсистемой.

Рассмотрим поведение термостата под действие произвольного возмущения

$$V = -I Qx(t), \quad (4.10)$$

обусловленного воздействием динамической подсистемы на термостат. Здесь $x(t)$ есть произвольная случайная функция времени.

Мы можем представить переменную термостата $Q^r(t)$ в виде бесконечного ряда по константе I :

$$Q^r(t) = Q(t) + I \int_{-\infty}^{\infty} dt j^Q(t, t_1) x(t_1) + I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 j^Q(t, t_1, t_2) x(t_1) x(t_2) + \dots \quad (4.11)$$

Здесь:

$$j^Q(t, t_1) = -\{Q(t), Q(t_1)\} h(t - t_1);$$

$$j^Q(t, t_1, t_2) = \frac{P_{12}^Q}{2!} \{Q(t), Q(t_1), Q(t_2)\} h(t - t_1) h(t_1 - t_2); \quad (4.12)$$

$$j^Q(t, t_1, t_2, t_3) = \frac{(-1)^3 P_{123}^Q}{3!} \{Q(t), Q(t_1), Q(t_2), Q(t_3)\} h(t - t_1) h(t_1 - t_2) h(t_2 - t_3)$$

есть случайные функции отклика, которые получаются из полученных ранее квантовых выражений заменой квантовых скобок Пуассона классическими. Переменные $Q(t)$ определяются невозмущенным поведением термостата.

Обратимся теперь к поведению динамической подсистемы. Уравнения движения для переменных динамической подсистемы имеют вид

$$\dot{x}_i(t) = \left\{ x_i^r, \hat{H}_0 \right\} - \left\{ x_i^r, x^r \right\} (I Q^r(t) + f(t)), \quad (4.13)$$

где x_i ($i = 1, 2, \dots$) - полный набор величин, определяющих состояние динамической подсистемы. Закрытые уравнения для переменных динамической подсистемы будут найдены после того, как мы используем основное физическое предположение и поставим в (4.13) приближенное выражение для $Q^G(t)$, ограничившись несколькими первыми членами разложения (4.11)

$$\begin{aligned} \dot{x}_i(t) &= \left\{ x_i^G, \hat{H}_0 \right\} - \left\{ x_i^G, x^G \right\} (I Q^G(t) + f(t)) = \\ &= \left\{ x(t), x_i(t) \right\} \left[I \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 j^Q(t, t_1) x(t_1) + I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 j^Q(t, t_1, t_2) x(t_1) x(t_2) + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

В частности для гармонического осциллятора уравнения (4.14) имеют вид

$$\begin{aligned} \ddot{x} + w_0^2 x + g \dot{x} &= f(t) + I Q(t) + I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 j^Q(t, t_1) x(t_1) + \\ &+ I^3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 j^Q(t, t_1, t_2) x(t_1) x(t_2) + \dots \end{aligned} \quad (4.15)$$

Индекс « G » у переменных x опущен.

Полученное уравнение (4.15) является нелинейным стохастическим уравнением со случайными параметрами. Решение этого уравнения в принципе позволяет найти все статистические характеристики случайно процесса $x(t)$ по заданным характеристикам термостата.

Таким образом, с помощью уравнения (4.15) можно единым образом описывать флуктуационные и релаксационные процессы в динамической подсистеме.

Обсудим приближения, при помощи которых можно из (4.15) получить закрытые уравнения для $\langle x(t) \rangle$. Этих приближений – два.

1. Если ввести характерное время t флуктуаций переменной термостата и характерное время изменения динамической переменной, обусловленное воздействием термостата T , то должно выполняться неравенство

$$t \ll T \quad (4.16)$$

Это приближение применяется при выводе различных кинетических уравнений.

2. Флуктуации $x(t)$ малы по сравнению с его средним

$$\sqrt{\langle |x(t) - \langle x(t) \rangle|^2 \rangle} \ll |\langle x(t) \rangle|. \quad (4.17)$$

Проведем в этом случае усреднение (4.15). Благодаря первому приближению мы можем усреднить динамические термостатные переменные независимо, а условие (4.17) дает возможность написать

$$\langle x(t_1)x(t_2) \rangle_0 = \langle x(t_1) \rangle \langle x(t_2) \rangle.$$

Таким образом, из (4.15) мы получаем замкнутое уравнение для $\langle x(t) \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \dot{x}(t) \rangle + w_0^2 \langle x(t) \rangle - I^2 \int dt_1 \bar{j}^{-\varrho}(t, t_1) \langle x(t_1) \rangle - \\ I^3 \int dt_1 \int dt_2 \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2) \langle x(t_1) \rangle \langle x(t_2) \rangle - \\ I^4 \int dt_1 \int dt_2 \int dt_3 \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2, t_3) \langle x(t_1) \rangle \langle x(t_2) \rangle \langle x(t_3) \rangle = f(t) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Более общее предположение, которое не требует малости характерных времен флуктуации переменных термостата, связано с малостью флуктуаций отклика относительно их средних. Например, малость флуктуации имеет место в случае слабой негауссовости переменной термостата $Q(t)$.

Представим функции отклика:

$$\begin{aligned} j^{\varrho}(t, t_1) = \bar{j}^{-\varrho}(t, t_1) + \tilde{j}^{\varrho}(t, t_1), \\ j^{\varrho}(t; t_1, t_2) = \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2) + \tilde{j}^{\varrho}(t; t_1, t_2), \end{aligned} \quad (4.19)$$

где средние значения $\bar{j}^{-\varrho}(t, t_1), \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2)$ равны нулю.

Ввиду малости флуктуаций функций отклика можно заменить в (4.15) их средними значениями. Пусть воздействующая на осциллятор классическая сила $f(t)$ такова, что флуктуации

$$\tilde{x}(t) = x(t) - \langle x(t) \rangle$$

относительно средних значений будут малы по сравнению со средним. В этом случае при усреднении (4.15) получим уравнение для средних.

Аналогично, удерживая в (4.15) члены первого порядка по флуктуациям \tilde{x} и $\tilde{j}^{-\varrho}$ получим стохастическое уравнение для флуктуаций \tilde{x} , которое запишем в виде

$$\begin{aligned} \int dt_1 D^{-1}(t, t_1) \tilde{x}(t_1) = Q(t) + \int dt_1 \tilde{j}^{-\varrho}(t, t_1) \langle x(t_1) \rangle + \\ + \int dt_1 \int dt_2 \tilde{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2) \langle x(t_1) \rangle \langle x(t_2) \rangle + \dots = R(t), \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} D^{-1}(t, t_1) = \left(\frac{d^2}{dt^2} + w_0^2 \right) \mathbf{d}(t - t_1) - \bar{j}^{-\varrho}(t, t_1) - 2 \int dt_2 \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2) \langle x(t_2) \rangle \\ - 3 \int dt_2 \int dt_3 \bar{j}^{-\varrho}(t; t_1, t_2, t_3) \langle x(t_2) \rangle \langle x(t_3) \rangle, \end{aligned} \quad (4.21)$$

где определяется из уравнения (4.18) для средних.

Левая часть уравнения (4.20) определяет динамику $\tilde{x}(t)$, выражение в правой части представляет собой флуктуационную силу со средним значением, равным нулю.

Таким образом, в приближении малых флуктуаций в стохастическом уравнении возможно разделение на динамическую часть и флуктуационную силу.

§4.3. Гауссова модель термостата. Броуновское движение двухуровневой системы

Покажем, что флуктуации функций отклика, а также наличие нелинейных членов в разложении (4.11) обусловлены негауссовостью переменной термостата $Q(t)$. С этой целью, прежде всего, выясним, как будут выглядеть стохастические уравнения в случае гауссовых флуктуаций $Q(t)$. Решение стохастического уравнения (4.15) является некоторым функционалом переменной $Q(t)$ и случайных функций отклика $j^o(t, t_1), j^o(t; t_1, t_2), \dots$, который можно записать в виде функционального ряда по этим переменным.

Теперь воспользуемся теоремой, согласно которой любое среднее от гауссовых величин или операторов $Q(t)$ типа $\langle Q(t)Q(t_1)Q(t_2)\dots \rangle$ разбивается на сумму всевозможных произведений $\langle Q(t_1) \rangle, \langle Q(t_2) \rangle, \dots$ средних, причем, в случае операторов порядок следования операторов в средних сохраняется. Легко увидеть, что, если усреднить коммутатор $[Q(t), Q(t_1)]$, помноженный на другие $Q(t_2)Q(t_3)\dots$, то выполняется соотношение

$$\langle [Q(t), Q(t_1)] Q(t_2)Q(t_3)\dots \rangle = \langle [Q(t), Q(t_1)] \rangle \langle Q(t_2)Q(t_3)\dots \rangle. \quad (4.22)$$

Например, если мы будем спаривать и в левой части (4.22), то в результате получим C – число, коммутатор которого с $Q(t)$ равен нулю. Отсюда ясно, что коммутатор в левой части (4.22) следует заменить его средним. При этом существенно, что замена коммутаторов $[Q(t), Q(t_1)]$ их средними значениями в нелинейных функциях реакции, представляющих собой многократные коммутаторы приводит к их исчезновению. В силу принципа соответствия коммутаторы $[Q(t), Q(t_1)]$, помноженные на $(i\hbar)^{-1}$, в классическом пределе переходят в классические скобки Пуассона, и мы получаем классический аналог формулы (4.22).

$$\langle \{Q(t), Q(t_1)\} Q(t_2)Q(t_3)\dots \rangle = \langle \{Q(t), Q(t_1)\} \rangle \langle Q(t_2)Q(t_3)\dots \rangle \quad (4.23)$$

Следовательно, скобки Пуассона можно заменить их средним значением в функционале, представляющем собой решение уравнения (4.15), а, значит, и в исходном уравнении (4.15).

В результате получаем стохастическое уравнение для осциллятора для случая гауссовых флуктуаций $Q(t)$:

$$\dot{x}(t) + w_0^2 x(t) + I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \langle \{Q(t), Q(t_1)\} \rangle h(t-t_1) x(t_1) = I Q(t) + f(t), \quad (4.24)$$

в котором отсутствуют нелинейные члены, а также флуктуации функций отклика. Существенно еще раз отметить, что уравнение (4.24) для гауссовой модели переменной термостата $Q(t)$ является точным. Это утверждение оказывается справедливым и в квантовой области.

В качестве другого примера рассмотрим взаимодействие двухуровневой системы с термостатом. Запишем гамильтониан H_0 для двухуровневой системы в виде

$$H_0 = \Delta a^+ a, \quad (4.25)$$

где $aa^+ + a^+a = 1$, $a^2 = a^{+2} = 0$; $x = a^+ + a$ есть дипольный момент двухуровневой системы; $n = aa^+ - a^+a$ - оператор разности населенности верхнего и нижнего уровней.

Полный гамильтониан всей системы запишется в виде

$$H = H_0 + F - I Q x - f(t) x. \quad (4.26)$$

Отсюда получаем уравнение движения для операторов x и n двухуровневой системы

$$\dot{x}(t) + \Delta^2 x(t) = -2I \Delta n(t) Q^r(t); \quad (4.27)$$

$$\Delta \dot{x}(t) = 2I \dot{x}(t) Q^r(t). \quad (4.28)$$

Следует отметить, что невозмущенные операторы $Q(t)$ не коммутируют с операторами $n(t)$ и $x(t)$ динамической подсистемы. Поэтому при получении стохастических уравнений правые части (4.27), (4.28) следует предварительно симметризовать.

Рассмотрим случай гауссовых флуктуаций переменной термостата $Q(t)$, т.е.

$$Q^r(t) = Q(t) + I \int dt_1 j^o(t, t_1) x(t_1), \quad (4.29)$$

$$j^o(t, t_1) = \langle i [Q(t), Q(t_1)] \rangle h(t-t_1). \quad (4.30)$$

Таким образом, подставляя (4.29) в уравнение (4.27), (4.28) получим точные стохастические уравнения для двухуровневой системы

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) + \Delta^2 x(t) = & -2I \Delta \frac{1}{2} [n(t), Q(t)]_+ - 2n(t) \Delta f(t) - \\ & - 2I^2 \Delta \int dt_1 j^o(t, t_1) \frac{1}{2} [n(t), x(t_1)]_+, \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\Delta \dot{x}(t) = I [x(t), Q(t)]_+ + 2x(t) f(t) + 2I^2 \int dt_1 j^o(t, t_1) \frac{1}{2} [x(t), x(t_1)]_+. \quad (4.32)$$

Особенность полученных уравнений (4.31), (4.32) наряду с их нелинейностью состоит в наличии параметрических членов $[n(t), Q(t)]_+, [\&t), Q(t)]_+$. Поэтому при вычислении средних значений x , n и их функций корреляций следует определить средние значения вида $\langle [Q(t), B]_+ \rangle$, где B – произвольный оператор динамической подсистемы.

Для простоты будем считать далее $Q(t)$ – классической переменной.

Для гауссовой переменной $Q(t)$ имеет место формула Фуруцу-Новикова:

$$\langle Q(t)B \rangle = \int dt_1 \langle Q(t)Q(t_1) \rangle \left\langle \frac{dB}{dQ(t_1)} \right\rangle. \quad (4.33)$$

Теперь заметим, что $f(t)$, $IQ(t)$ входят в уравнение (4.26) аддитивно. Поэтому можно записать:

$$\left\langle \frac{dB}{dQ(t_1)} \right\rangle = I \left\langle \frac{dB}{df(t_1)} \right\rangle. \quad (4.34)$$

В результате чего получим

$$\langle Q(t)B \rangle = I \int dt_1 \langle Q(t)Q(t_1) \rangle \left\langle \frac{dB}{df(t_1)} \right\rangle. \quad (4.35)$$

Усредняя уравнения (4.31) и (4.32) по начальному состоянию термостата и используя формулу (4.35), получим

$$\begin{aligned} \langle \&t) \rangle + \Delta^2 \langle x(t) \rangle + 2I^2 \Delta \int dt_1 M^o(t, t_1) \left\langle \frac{dn(t)}{df(t_1)} \right\rangle = -2 \Delta \langle n(t) \rangle f(t) - \\ - 2I^2 \int dt_1 j^o(t, t_1) \left\langle \frac{1}{2} [n(t), x(t_1)]_+ \right\rangle; \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} \Delta \langle \&t) \rangle = 2 \langle \&t) \rangle f(t) + 2I^2 \int dt_1 M^o(t, t_1) \left\langle \frac{d\&t)}{df(t_1)} \right\rangle + \\ + 2I^2 \int dt_1 j^o(t, t_1) \left\langle \frac{1}{2} [\&t), x(t_1)]_+ \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.37)$$

где

$$\begin{aligned} M^o(t, t_1) = \langle Q(t), Q(t_1) \rangle, \\ \left\langle \frac{dn(t)}{df(t_1)} \right\rangle = \langle i [n(t), x(t_1)]_- \rangle h(t - t_1). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Аналогичным образом, после умножения правых и левых частей уравнений (4.31), (4.32) на $x(t_2)$, $n(t_2)$ и т.д. и усреднения по начальному состоянию термостата получаются уравнения для функций корреляций.

Таким образом, поведение двухуровневой системы исчерпывающим образом определяется функцией корреляции (4.38) и откликом $j^o(t, t_1)$. Наличие функциональных производных в уравнениях обусловлено временной дисперсией случайного процесса $Q(t)$.

Перейдем теперь к исследованию случая, когда из общих уравнений (4.36), (4.37) могут быть получены замкнутые уравнения для средних $\langle x(t) \rangle, \langle n(t) \rangle$. Пусть $Q(t)$ есть d – коррелированный классический случайный процесс, т.е.

$$M^o(t, t_1) = sd(t - t_1). \quad (4.39)$$

Будем считать также, что начальное состояние термостата есть состояние термодинамического равновесия при температуре T . Тогда, используя явное выражение для функции отклика j^o , а также формулы

$$\langle [C, x_i(w_0)]_+ \rangle = \text{cth} \left(\frac{bw_0}{2} \langle [C, x_i(w_0)]_- \rangle \right)$$

в предельном классическом случае получим

$$j^o(t - t_1) = \frac{s}{2T} d'(t - t_1) = \frac{1}{2T} \frac{d}{dt} M^o(t - t_1) \quad (4.40)$$

Полученная формула (4.40) представляет собой частный случай общей флуктуационно-диссипационной теоремы.

Подставляя выражение (4.39) и (4.40) в общие уравнения (4.36) и (4.37) и, используя формулы

$$\Delta i[n(t), x(t)]_- = 2\mathfrak{K}(t); [n(t), \mathfrak{K}(t)]_+ \equiv 0; i[\mathfrak{K}(t), \mathfrak{K}(t)]_- = -2\Delta n(t); \mathfrak{K}'(t) = \Delta^2, \quad (4.40')$$

получим замкнутые уравнения для средних

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \Delta^2 + g \frac{d}{dt} \right) \langle x(t) \rangle = -2\Delta \langle n(t) \rangle + f(t), \quad (4.41)$$

$$\langle \mathfrak{K}(t) \rangle = -g \left(\langle n(t) \rangle - n^0 \right) + \frac{2}{\Delta} \langle \mathfrak{K}(t) \rangle + f(t), \quad (4.42)$$

где $g = 2I^2s$ есть константа затухания; $n^0 = -\frac{\Delta}{2T}$ – термодинамическая равновесная разность населенностей верхнего и нижнего уровней.

В этом же приближении стохастические уравнения (4.31), (4.32) могут быть приведены к очень простому виду. Из физических соображений их следует записать по форме, близкой к уравнениям для средних (4.41), (4.42).

Используя (4.40') перепишем уравнения (4.31), (4.32) в виде

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \Delta^2 + g \frac{d}{dt} \right) x(t) + 2\Delta n(t) f(t) = x_x(t), \quad (4.43)$$

$$\frac{d}{dt} n(t) + g(n(t) - n_0) - \frac{2}{\Delta} \mathfrak{K}(t) f(t) = x_n(t), \quad (4.44)$$

где

$$\begin{aligned} x_x(t) &= -2I\Delta n(t)Q(t) + g\mathfrak{K}(t), \\ x_n(t) &= \frac{2I}{\Delta} \mathfrak{K}(t)Q(t) + gn(t), \end{aligned} \quad (4.45)$$

есть флуктуационные источники со средними значениями равными нулю $\langle x_x(t) \rangle = \langle x_n(t) \rangle \equiv 0$.

Для вычисления функции корреляции x и n достаточно знать функции корреляции для флуктуационных источников x_x, x_n .

Вычислим, например, выражение для функции корреляции

$$M^{x_x x_x} = \langle x_x(t) x_x(t_1) \rangle.$$

Используя формулы (4.33), (4.35) для функции корреляции флуктуационных источников, получим

$$\langle x_x(t) x_x(t_1) \rangle = (2I\Delta)^2 \langle Q(t) Q(t_1) \rangle = 2I\Delta s d(t - t_1). \quad (4.46)$$

Наряду с основной формулой (4.35) при выводе (4.46) использовалось свойство

$$\left\langle \frac{dn(t)}{df(t_1)} \frac{dn(t_1)}{df(t)} \right\rangle = 0,$$

которое является следствием принципа причинности.

Аналогично (4.44) получаем также

$$\langle x_n(t) x_n(t_1) \rangle = (2I)^2 s d(t - t_1), \quad (4.47)$$

$$\langle x_x(t) x_n(t_1) \rangle = 0. \quad (4.48)$$

Таким образом, для d – коррелированного процесса $Q(t)$ общие стохастические уравнения приводятся к простому физически прозрачному виду. Левая часть уравнений (4.43), (4.44) описывает динамику флуктуаций, которая совпадает с динамикой средних величин. Правые части уравнений (4.43), (4.44) представляют собой коррелированные источники, определяемые (4.46)-(4.48).

§ 4.4. Феноменологическая теория флуктуаций и флуктуационно-диссипационная теорема (ФДТ)

Теория флуктуаций может быть разделена на микроскопическую и макроскопическую (феноменологическую) теории. Совершенно ясна условность такого деления. В 4.1-4.3 мы рассмотрели один из общих методов получения стохастических уравнений, который сочетает обе теории. Конечным результатом любого статистического расчета является вычисление различных статистических характеристик интересующих нас величин: средних значений, корреляций и спектров первого и высших порядков, вероятностных распределений.

В настоящее время актуальную роль играет макроскопическая теория флуктуаций. Преимущество такой теории (так же как и термодинамики) в ее универсальности. Она применима к макроскопическим системам различной физической природы.

Остановимся на выводе флуктуационно-диссипационных соотношений (ФДС), составляющих основу феноменологической теории. ФДС отражают факт глубокой связи между необратимыми процессами и флуктуациями в одной и той же системе. На эту связь обратили внимание в своих пионерских работах по броуновскому движению частиц Эйнштейн, Ланжевен, Смолуховский. Дальнейшее развитие теории в этом направлении было обусловлено прогрессом в радиофизике. Увеличение чувствительности приемных устройств позволило непосредственно измерять флуктуации электрических величин. В то же время собственные флуктуации в усилителях обуславливали их предельную чувствительность.

В 1927 году Найквист вывел формулу, которая определила спектральную плотность случайной ЭДС, связанной с некоторым двухполюсником через величину активного сопротивления двухполюсника $R(\omega)$ и его температуру T :

$$(e^2)_\omega = 2TR(\omega). \quad (4.49)$$

В 1952 Каллену, Грину, Вельтону удалось доказать, что подобные соотношения существуют для величин произвольной физической природы, и установить универсальную так называемую флуктуационную-диссипационную теорему (ФДТ), обобщающую формулу Найквиста.

В результате феноменологическая теория флуктуаций, рассматривающая корреляции второго порядка в термодинамически равновесных системах, получила строгую статистическую основу.

Кратко остановимся сначала ФДТ Каллена-Велтона и соотношения взаимности Онсагера.

Пусть имеется произвольная замкнутая макроскопическая система или какая-то макроскопическая часть, слабо взаимодействующая с остальной, большей частью системы (термостатом). В соответствии с основными принципами статистической физики при отсутствии каких-либо внешних воздействий система будет находиться в состоянии термодинамического равновесия при некоторой температуре T , которое описывается распределение Гиббса

$$r = \exp\left(\frac{F - H_0}{T}\right), \quad (4.50)$$

где H_0 - гамильтониан системы; F - свободная энергия.

Эволюция во времени физической величины x , характеризующей данную систему, будет происходить согласно уравнениям движения (классической или квантовой теории). Мы используем гейзенберговское представление, в котором вся эволюция во времени содержится в операторах физических величин, а состояние не зависит от времени и определяется распределение Гиббса (4.50).

В гейзенберговском представлении оператор физической величины x в заданный момент времени t есть

$$x(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) x \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right). \quad (4.51)$$

Здесь x - шредингеровский оператор. Среднее значение оператора $x(t)$ по распределению Гиббса не будет зависеть от времени

$$\langle x(t) \rangle = Sp x(t) r_0 = Sp x r_0 = \langle x \rangle,$$

и может быть положено в дальнейшем равным нулю ($\langle x \rangle = 0$).

Среднее значение квадрата величины $x(t)$, определяющее отклонение (флуктуации) величины x относительно среднего значения

$$\langle x^2 \rangle = Sp x^2(t) r_0 = \langle x^2 \rangle$$

также не зависит от времени.

«Динамические свойства» системы в состоянии термодинамического равновесия, отражающие эволюцию во времени корреляционных функций. Корреляция во времени величин $x_a(t)$ и $x_b(t)$, взятых в различные моменты времени t и t_1 , определяются средним значением от симметризованного произведения операторов $x_a(t)$ и $x_b(t)$

$$M_{[ab]}(t-t_1) = \langle \frac{1}{2} [x_a(t)x_b(t_1)]_+ \rangle = \langle \frac{1}{2} [x_a x_b(t_1-t)]_+ \rangle, \quad (4.52)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по распределению Гиббса (4.50).

Соответственно, спектральная плотность флуктуаций, равная образу Фурье функции корреляции (4.52), есть

$$S_{[ab]}(\omega) = \langle \frac{1}{2} [x_a, x_b(\omega)]_+ \rangle, \quad (4.53)$$

Физический смысл и способы измерения временных и спектральных характеристик флуктуаций (4.52), (4.53) уже обсуждались.

Рассмотрим теперь взаимодействие данной системы с некоторой внешней системой, изменением состояния которой можно пренебречь. В этом случае имеем заданное внешнее воздействие, которое описывается добавочным членом в гамильтониане системы.

$$V(t) = -x_a f_a^{cm}(t), \quad (4.54)$$

где $f_a^{cm}(t)$ – заданные внешние силы, определяемые внешней системой. Ограничиваясь случаем малых внешних возмущений и считая, что в начальный момент времени $t = -\infty$ до включения возмущения (4.54) система находилась в состоянии термодинамического равновесия, для средних значений величин $x_a^r(t)$ имеем

$$\langle x_a^r(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \bar{J}_{a,b}(t, t_1) f_b^{cm}(t_1), \quad (4.55)$$

где

$$\bar{J}_{a,b}(t, t_1) = \langle \frac{i}{\hbar} [x_a(t), x_b(t_1)]_- \rangle \hbar \delta(t - t_1), \quad (4.56)$$

есть так называемый линейный отклик или линейная функция реакции.

Соответственно, линейный отклик системы на гармонические силы

$$f_b^{cm}(t) = f_b^{cm}(\omega) \exp(-i\omega t) + \text{к.с.}, \quad (4.57)$$

есть

$$\langle x_a^r(t) \rangle = c_{a,b}(\omega) f_b^{cm}(\omega) \exp(-i\omega t) + \text{к.с.} \quad (4.58)$$

Здесь линейные восприимчивости $c_{a,b}(\omega)$ связаны преобразованием Фурье с функциями реакции (4.56)

$$c_{a,b}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \bar{J}_{a,b}(t) \exp(i\omega t). \quad (4.59)$$

Физический смысл и свойства линейных функций реакции и восприимчивостей уже обсуждались. В настоящем разделе мы используем явные выражения для функций (4.56), (4.59) при доказательстве фундаментальной флуктуационно-диссипационной теоремы.

§ 4.5. Линейные флуктуационно-диссипационные соотношения (теорема Найквиста-Каллена-Велтона)

Как уже отмечалось, ФДС связывает различные статистические характеристики в одной и той же макроскопической системе. В частности, ФДТ Найквиста-Каллена-Велтона устанавливает взаимно однозначное соответствие между термодинамически равновесными флуктуациями физических величин, определяемыми парной функцией корреляции (4.52) или соответствующей ей спектральной плотностью флуктуаций (4.53) и линейными откликами той же системы на внешнее заданное воздействие (4.56).

При доказательстве теоремы исходим из явных выражений для парной функции корреляции (4.52) и линейного отклика (4.56)

$$M_{[ab]}(t-t_1) = \langle \frac{1}{2}[x_a(t)x_b(t_1)]_+ \rangle,$$

$$\bar{J}_{a,b}(t,t_1) = \langle \frac{i}{\hbar}[x_a(t), x_b(t_1)]_- \rangle h(t-t_1).$$

Здесь скобки $\langle \dots \rangle$ означают усреднение по распределению Гиббса (4.50); эволюция во времени операторов $x_a(t)$ и $x_b(t_1)$ определяется согласно (4.51) невозмущенным гамильтонианом системы H_0 .

Существенно отметить, что в силу принципа причинности линейный отклик (4.56) определен лишь в области $t > t_1$. Принцип причинности, как мы увидим ниже, играет существенную роль при доказательстве флуктуационно-диссипационных соотношений. В данном случае из откликов $\bar{J}_{a,b}(t,t_1)$ и $\bar{J}_{b,a}(t_1,t)$ легко образовывать величину, определенную во всей области изменений моментов времени t и t_1 . Из определения (4.56) находим среднее значение скобки Пуассона

$$\langle \frac{i}{\hbar}[x_a(t), x_b(t_1)]_- \rangle = \bar{J}_{a,b}(t,t_1) - \bar{J}_{b,a}(t_1,t) \quad (4.60)$$

Вследствие особого вида распределения Гиббса (4.50), его формальной аналогии с оператором эволюции системы $\exp(\frac{i}{\hbar}H_0t)$ следует соотношение между функцией корреляции (4.52) и средним значением скобки Пуассона (4.60). В спектральной форме это соотношение устанавливает взаимно однозначную связь между средними значениями коммутатора и антикоммутатора операторов x_a и $x_b(w)$:

$$\langle \frac{1}{2}[x_a, x_b(w)]_+ \rangle = \frac{1}{2} \langle [x_a, x_b(w)]_- \rangle \text{cth}(\frac{\hbar w}{2}). \quad (4.61)$$

Теперь, замечая, что из (4.60) и (4.59) следует

$$\langle \frac{i}{\mathbf{h}} [x_a, x_b(\omega)] \rangle = c_{a,b}(\omega) - c_{b,a}^*(\omega), \quad (4.62)$$

и вследствие фундаментального соотношения (4.61) находим, что

$$S_{[ab]}(\omega) = \frac{\mathbf{h}}{2i} (c_{a,b}(\omega) - c_{b,a}^*(\omega)) \operatorname{cth}\left(\frac{b\omega}{2}\right), \quad (4.63)$$

где $b = \mathbf{h}T^{-1}$, постоянная Больцмана $\kappa=1$, спектральная плотность термодинамически равновесных флуктуаций определяется линейными восприимчивостями той же самой системы.

Формула (4.63), составляющая содержание ФДТ, в ясной и достаточно строгой форме была установлена Калленом, Грином, Велтоном. Из приведенного выше вывода следует, что ФДТ одновременно является следствием динамики и специфика распределения Гиббса.

Важно отметить также, что строгое доказательство ФДТ проведено для совокупности физических величин x_a , для которых можно указать сопряженные им внешние силы $f_a^{cm}(t)$, воздействие которых определяется возмущением (4.54) (динамические возмущения).

Используя спектральное представление линейной восприимчивости, из (4.61) нетрудно установить и обратную теорему, определяющую линейные восприимчивости через спектральную плотность термодинамически равновесных флуктуаций

$$c_{a,b}(\omega) = -\frac{1}{\mathbf{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2p} \frac{2S_{ab}(\omega') \operatorname{th}\left(\frac{b\omega'}{2}\right)}{\omega - \omega' + i\epsilon}. \quad (4.64)$$

Обратная теорема (4.64), определяющая линейные восприимчивости через спектральную плотность термодинамически равновесных флуктуаций, доказывалась Мори, Кирквудом, Кубо.

Особенно простой вид формула (4.63) принимает для одной величины x . В этом случае спектральная плотность флуктуаций определяется мнимой частью восприимчивости $c(\omega)$

$$S(\omega) \equiv (x^2)_\omega = \mathbf{h}c''(\omega) \operatorname{cth}\left(\frac{b\omega}{2}\right). \quad (4.65)$$

Как известно, мнимая часть восприимчивости определяет диссипацию энергии при воздействии периодической внешней силы

$$f^{cm}(t) = f_w^{cm} \exp(-i\omega t) + \text{к.с.}$$

По определению диссипации энергии есть усредненная по периоду внешней силы средняя скорость изменения энергии

$$Q = \overline{\frac{dH}{dt}} = - \overline{x^{\Gamma}(e) \dot{f}^m(t)} = \omega c''(\omega) |f_{\omega}^{cm}|^2. \quad (4.66)$$

Таким образом, ФДТ в виде (4.65) показывает, что флуктуации и диссипативные процессы, возникающие в той же системе при внешнем возмущении имеют одни и те же физические причины. Дальнейшие упрощения формулы (4.65) можно получить в предельных случаях низких и высоких температур. В предельном квантовом случае $\hbar\omega \gg T$ флуктуации величины x имеют чисто квантовый характер

$$(x^2)_{\omega} = \hbar c''(\omega) \text{Sgn}(\omega), \quad (4.67)$$

и исчезают при формальном стремлении постоянной Планка к нулю ($\hbar \rightarrow 0$).

В классическом случае при температурах $T \gg \hbar\omega$ имеем $\text{cth}(\frac{\hbar\omega}{2T}) \approx \frac{2T}{\hbar\omega}$ и формула (4.65) принимает вид

$$(x^2)_{\omega} = \frac{2T}{\omega} c''(\omega). \quad (4.68)$$

где в соответствии с классической природой флуктуаций постоянная Планка выпадает.

§ 4.6. Микроскопическая обратимость во времени и соотношения взаимности Онсагера для линейных восприимчивостей

С каждым преобразованием симметрии уравнений движения физической системы связан свой определенный закон сохранения. Так, однородность и изотропность пространственно-временной структуры замкнутой системы приводит к законам сохранения энергии, импульса и момента импульса. Преобразования такого типа представляют собой пример непрерывных преобразований симметрии. Наряду с непрерывными существуют дискретные преобразования симметрии, примером которых могут служить симметрия относительно перестановок одинаковых частиц в квантовой механике, инверсия координат, обращение во времени и т.п. Были рассмотрены следствия из симметрии уравнений движения относительно обращения во времени для временных функций корреляции. Используя полученные в свойства, легко вывести соотношения взаимности Онсагера для линейных функций реакции и обобщенных восприимчивостей.

При доказательстве соотношений взаимности исходим из явного выражения для линейной функции реакции (4.56) и свойства для функций корреляции, вытекающих из обратимости микроскопических уравнений относительно инверсий времени.

Все физические величины делятся на два класса: одни величины, такие как координаты частиц, кинетическая энергия, не меняют знака при обращении времени; величины другого класса, например, импульс частиц, плотность тока, меняют знак при обращении времени.

Если через R обозначить оператор преобразования симметрии, включающий обращение времени, то свойства симметрии операторов физических величин относительно обращения времени можно записать единым обрезаем

$$Rx_aR^{-1} = e^a x_a,$$

где символ e^a есть +1 или -1 в зависимости от того, сохраняет или меняет знак величина относительно обращения времени.

Из свойства

$$\langle x_a(t) x_b(t_1) \rangle = e^a e^b \langle x_b(-t_1) x_a(-t) \rangle,$$

для скобки Пуассона операторов $x_a(t)$ и $x_b(t_1)$ следует:

$$\left\langle \frac{i}{\hbar} [x_a(t), x_b(t_1)]_- \right\rangle = e^a e^b \left\langle \frac{i}{\hbar} [x_b(-t_1), x_a(-t)]_- \right\rangle. \quad (4.69)$$

В состоянии термодинамического равновесия функции корреляции зависят лишь от разности моментов времени. Вследствие этого (4.69) может быть переписано в виде

$$\left\langle \frac{i}{\hbar} [x_a, x_b(t_1 - t)]_- \right\rangle = e^a e^b \left\langle \frac{i}{\hbar} [x_b, x_a(t_1 - t)]_- \right\rangle. \quad (4.70)$$

Подстановка (4.70) в выражение для линейной функции реакции (4.56) приводит к соотношениям взаимности

$$\bar{J}_{a,b}(t-t_1) = e^a e^b \bar{J}_{b,a}(t-t_1). \quad (4.71)$$

Преобразование Фурье (4.71) приводит к соотношениям взаимности Онсагера для линейных восприимчивостей

$$c_{a,b}(w) = e^a e^b c_{b,a}(w). \quad (4.72)$$

Соотношения взаимности Онсагера (4.72) играют фундаментальную роль в линейной термодинамике необратимых процессов. Физическая значимость соотношений взаимности в том, что они сокращают число независимых величин и связывают между собой различные физические эффекты. С этой точки зрения наибольший интерес представляют случаи, когда величины x_a и x_b имеют разную физическую природу.

При учете соотношений взаимности Онсагера (4.72) ФДТ (4.63) может быть переписана в виде

$$S_{ab}^{\square}(w) = \frac{\mathbf{h}}{2i} (c_{a,b}(w) - e^a e^b c_{a,b}^*(w)) \operatorname{cth} \left(\frac{bw}{2} \right). \quad (4.73)$$

В частности, если обе величины x_a , x_b имеют одинаковую четность относительно обращения времени, то (4.73) принимает вид

$$S_{ab}^{\square}(w) = \mathbf{h} c_{a,b}^{\prime\prime}(w) \operatorname{cth} \left(\frac{bw}{2} \right),$$

и спектральная плотность флуктуаций оказывается чисто действительной.

Таким образом, соотношения взаимности Онсагера приводят к более простой связи между спектральной плотностью флуктуаций $S_{ab}^{\square}(w)$ и линейной восприимчивостью $c_{a,b}(w)$. Существенно отметить, что при доказательстве ФДТ (4.63) микроскопическая обратимость во времени не использовалась.

В заключение этого параграфа заметим, что соотношения взаимности Онсагера в виде (4.72) справедливы в том случае, если система не обладает магнитной структурой и не находится во внешнем магнитном поле. Не составляет особого труда получить аналог соотношений взаимности (4.72) при наличии внешнего магнитного поля. Пусть на систему наложено однородное постоянное во времени магнитное поле \dot{H} , энергия взаимодействия с которым

$$V = -\dot{M}\dot{H}.$$

Как известно, оператор магнитного момента \dot{M} меняет знак при обращении времени. Вследствие этого инвариантность гамильтониана системы относительно обращения времени нарушается, и соотношения взаимности (4.72) для восприимчивости $c_{a,b}(w; \dot{H})$ не имеют места. Легко, однако, заметить, что если одновременно с обращением времени изменить направление магнитного поля на противоположное, то полный гамильтониан системы не изменится. В этом случае оператор преобразования симметрии уравнений движения, включающий обращение времени

$$R = \Theta \cdot KI_{\dot{H}}. \quad (4.74)$$

Здесь Θ и K есть операторы обращения времени и комплексного сопряжения; $I_{\dot{H}}$ - оператор инверсии магнитного поля. Симметрия уравнений движения относительно преобразования (4.74) приводит к обобщенным соотношениям взаимности для линейных восприимчивостей

$$c_{a,b}(w; \dot{H}) = e^a e^b c_{b,a}(w; -\dot{H}). \quad (4.75)$$

§ 4.7. Простые применения ФДТ

Физическая значимость ФДТ в первую очередь вытекает из ее чрезвычайной общности, применимости к величинам различной физической природы. Вследствие этого ФДТ имеет большое число разнообразных применений. Здесь мы рассмотрим простые примеры, которые дадут также более глубокое понимание теоремы. Остановимся для определенности на флуктуациях электрических величин в электрических цепях и проводящих средах. Для практического использования ФДТ необходимо знать либо возмущение (4.54), возникающее под действием сторонних сил $f_a^{cm}(t)$, либо диссипацию энергии, вызываемую внешним возмущением. Если в конкретной задаче известна диссипация энергии, то в ФДТ (4.63) удобно перейти от обобщенных восприимчивостей к адмитансам, которые непосредственно связаны с диссипацией энергии в системе.

При наличии возмущения

$$V(t) = -x_a f_a^{cm}(t),$$

скорость изменения средней энергии есть

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V}{\partial t} \right\rangle = -\langle x_a^r(t) \rangle f_a^{cm}(t) = \langle x_a^r(t) \rangle y_a^{cm}(t). \quad (4.76)$$

Если вместо внешней силы $f_a^{cm}(t)$ будем задавать скорость изменения этой силы $y_a^{cm}(t)$, то адмитансы $Y_{a,b}(w)$ определяются разложением

$$\langle x_a(t) \rangle = Y_{a,b}(w_i) y_a^{cm}(w_i) \exp(-iw_i t). \quad (4.77)$$

Если учесть, что

$$y_b^{cm}(w_i) = iw_i f_b^{cm}(w_i) \quad (4.78)$$

и сравнить (4.77) с определением восприимчивостей (4.58), то получим

$$iwY_{a,b}(w) = c_{a,b}(w). \quad (4.79)$$

Средняя диссипация энергии Q (в единицу времени) получается усреднением (4.76) по периоду внешнего возмущения

$$Q = [Y_{a,b}(w) + Y_{b,a}^*(w)] \cdot |y_a^{cm*}(w) y_b^{cm}(w)| \quad (4.80)$$

(здесь y_a^{cm} и y_b^{cm} имеют одинаковые фазы).

Соответственно, подставляя (4.79) в (4.63), получим следующую формулировку ФДТ

$$S_{ab}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right) [Y_{a,b}(\omega) + Y_{b,a}^*(\omega)]. \quad (4.81)$$

Еще более простой вид формула (4.81) имеет в предельном классическом случае. При $\hbar\omega \ll T$ из (4.81) имеем

$$S_{ab}(\omega) = T \left[Y_{a,b}(\omega) + Y_{b,a}^*(\omega) \right]. \quad (4.82)$$

Таким образом, спектральная плотность равновесных флуктуаций непосредственно связана с величиной, определяющей диссипацию энергии (4.80) при воздействии на систему заданных потоков сил y_a^{cm} и y_b^{cm} .

Рассмотрим, например, флуктуации плотности тока в некоторой проводящей среде при заданной температуре T . Для этого заметим, что диссипация энергии при заданном электрическом поле есть

$$Q = \int d^3r \langle j_a(\mathbf{r}, t) \rangle e_a(\mathbf{r}, t).$$

Соответственно, роль обобщенных адмитансов в данном случае будут играть компоненты тензора проводимости $s_{a,b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega)$, определяемые следующим образом

$$\langle j_a(\mathbf{r}, t) \rangle = \int d^3r_1 s_{a,b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega) e_b(\mathbf{r}_1, \omega) \exp(-i\omega t). \quad (4.83)$$

Тогда согласно ФДТ в форме (4.81) для спектра флуктуаций плотности тока получим

$$\left\langle \frac{1}{2} [j_a(\mathbf{r}), j_b(\mathbf{r}_1, \omega)]_+ \right\rangle = \hbar \omega \text{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right) s'_{a,b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega). \quad (4.84)$$

Таким образом, вычисляя из микротемпературы или определяя экспериментально тензор электропроводимости $s_{a,b}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \omega)$, мы одновременно знаем спектр флуктуаций плотности тока в той же среде в состоянии термодинамического равновесия.

§ 4.8. ФДТ и простые статистические модели физических систем

С точки зрения строгой микроскопической теории могут быть вычислены любые статистические характеристики макроскопической системы. Это, однако, связано с большими вычислительными трудностями. Но даже если строгий расчет возможен, значение ФДТ состоит в уменьшении числа независимых величин, которые должны быть вычислены в теории. Покажем, каким образом применение ФДТ приводит к упрощению расчетов флуктуаций для статистических моделей. Остановимся сначала на модели осциллятора, взаимодействующего с гауссовым термостатом. Мы получили уравнение для оператора осциллятора

$$[\omega_0^2 - \omega^2 - c_Q(\omega)] \cdot x(\omega) = Q(\omega) \quad (4.85)$$

и для среднего значения координаты осциллятора при наличии внешней силы

$$[\omega_0^2 - \omega^2 - c_Q(\omega)] \langle x(\omega) \rangle = f^{cm}(\omega), \quad (4.86)$$

где $Q(\omega)$ - спектр флуктуационной силы, действующей со стороны термостата;

$$c_Q(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left\langle \frac{1}{\hbar} [Q(\omega'), Q]_- \right\rangle \frac{1}{\omega - \omega' + i\epsilon} \quad (4.87)$$

имеет смысл восприимчивости термостата при заданном воздействии на него со стороны осциллятора ($V(t) = -Q\langle x(t) \rangle$). Мнимая часть $c_Q''(\omega)$ определяет потери в осцилляторе, а действительная часть $c_Q'(\omega)$ - смещение частоты осциллятора. Если осциллятор находится в равновесии с термостатом, то для спектра равновесных флуктуации координаты из (4.85) получим

$$\left\langle \frac{1}{2} [x, x(\omega)]_+ \right\rangle = \frac{\left\langle \frac{1}{2} [Q, Q(\omega)]_+ \right\rangle}{(\omega_0^2 - \omega^2 - c_Q'(\omega))^2 + (c_Q''(\omega))^2}. \quad (4.88)$$

Задавшись определенной моделью термостата, мы можем вычислить $c_Q(\omega)$ и спектр флуктуаций $Q(t)$. В качестве термостата мы можем рассмотреть, например, определенное тепловое поле излучения (фотоны) и т.д. Однако на определенном этапе рассмотрения мы можем избежать анализа термостата, используя то, что термостат находится в состоянии термодинамического равновесия, и для него применима ФДТ. Согласно ФДТ (4.65) для спектра флуктуаций Q имеем

$$\left\langle \frac{1}{2} [Q, Q(\omega)]_+ \right\rangle = \hbar c_Q''(\omega) \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right). \quad (4.89)$$

Подставляя (4.89) в (4.88), находим

$$\left\langle \frac{1}{2} [x, x(\omega)]_+ \right\rangle = \frac{\hbar c_Q''(\omega) \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right)}{(\omega_0^2 - \omega^2 - c_Q'(\omega))^2 + (c_Q''(\omega))^2}. \quad (4.90)$$

Таким образом, спектр флуктуаций координаты осциллятора определяется лишь восприимчивостью (4.87).

Рассмотренный пример ясно показывает, что источник флуктуаций и причина затухания колебаний в осцилляторе, определяемые $c_Q''(\omega)$ имеют одну и ту же физическую природу.

Теперь покажем, что для флуктуаций координаты мы получим тот же самый результат, используя непосредственно ФДТ (5.16). Обобщенная восприимчивость, определяемая

$$\langle x(\mathbf{w}) \rangle = c(\mathbf{w}) f^{cm}(\mathbf{w}),$$

согласно уравнению (5.37), равна

$$c(\mathbf{w}) = \frac{1}{w_0^2 - w^2 - c_Q(\mathbf{w})}. \quad (4.91)$$

Подставляя в

$$\left\langle \frac{1}{2} [x, x(\mathbf{w})]_+ \right\rangle = \mathbf{h} c''(\mathbf{w}) \operatorname{cth} \left(\frac{b\mathbf{w}}{2} \right)$$

мнимую часть восприимчивости (4.87), приходим к формуле

$$\left\langle \frac{1}{2} [x, x(\mathbf{w})]_+ \right\rangle = \frac{\mathbf{h} c_Q''(\mathbf{w}) \operatorname{cth} \left(\frac{b\mathbf{w}}{2} \right)}{(w_0^2 - w^2 - c_Q'(\mathbf{w}))^2 + (c_Q''(\mathbf{w}))^2},$$

в точности совпадающей с расчетом спектра флуктуаций (4.90) непосредственно из стохастического уравнения (4.85).

Этот фундаментальный факт означает, что из ФДТ для невозмущенных переменных термостата следует ФДТ для переменных динамической системы, взаимодействующей с термостатом. При этом температура всей системы совпадает с начальной температурой термостата до включения взаимодействия с динамической системой. В данном случае ФДТ служит также хорошим методом проверки правильности построенной статистической модели.

В качестве другого примера рассмотрим двухуровневую систему, взаимодействующую с гауссовым термостатом. В этом случае имеем стохастические уравнения для операторов дипольного момента x и разности населенностей n :

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) + \square^2 x(t) = & -2I \frac{1}{2} [n(t), Q(t)]_+ - 2 f^{cm}(t) n(t) - \\ & - 2I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt j^Q(t, t_1) \frac{1}{2} [n(t), x(t_1)]_+; \end{aligned} \quad (4.92)$$

$$\dot{n}(t) = I [x(t), Q(t)]_+ + 2x(t) f^{cm}(t) + 2I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt j^Q(t, t_1) \frac{1}{2} [x(t), x(t_1)]_+.$$

Здесь $Q(t)$ - невозмущенная переменная термостата; \square - разность энергий между двумя уровнями ($\mathbf{h}=1$); I - константа взаимодействия двухуровневой системы с термостатом;

$$j^Q(t, t_1) = \left\langle i [Q(t), Q(t_1)]_- \right\rangle h(t-t_1) -$$

отклик термостата на заданную внешнюю силу.

Особенность уравнений (4.92) наряду с их нелинейностью состоит в наличии параметрических членов $[n(t), Q(t)]_+$, $[\mathfrak{K}(t), Q(t)]_+$, средние значения которых равны

$$\left\langle \frac{1}{2} [n(t), Q(t)]_+ \right\rangle = I \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \left\langle \frac{dn(t)}{df^{cm}(t_1)} \right\rangle; \quad (4.93)$$

$$\left\langle \frac{1}{2} [\mathfrak{K}(t), Q(t)]_+ \right\rangle = I \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \left\langle \frac{d\mathfrak{K}(t)}{df^{cm}(t_1)} \right\rangle.$$

$$M^Q(t, t_1) = \left\langle \frac{1}{2} [Q(t), Q(t_1)]_+ \right\rangle. \quad (4.94)$$

Используя формулы (4.93), стохастические уравнения (4.92) перепишем в виде

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}(t) + \square^2 x(t) + 2I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \frac{dn(t)}{df^{cm}(t_1)} + \\ + 2I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 j^Q(t, t_1) \frac{1}{2} [n(t), x(t_1)]_+ = -2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 f^{cm}(t_1) n(t) + x_x(t); \end{aligned} \quad (4.95)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}(t) = \frac{2I^2}{\square} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \frac{d\mathfrak{K}(t)}{df^{cm}(t_1)} + \frac{2I^2}{\square} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 j^Q(t, t_1) \frac{1}{2} [x(t), x(t_1)]_+ + \\ + \frac{2}{\square} f^{cm}(t) \mathfrak{K}(t) + x_n(t), \end{aligned} \quad (4.96)$$

где

$$\begin{aligned} x_x(t) = -I \square [Q(t), n(t)]_+ + 2I^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \frac{d\mathfrak{K}(t)}{df^{cm}(t_1)}; \\ x_n(t) = \frac{I}{\square} [Q(t), \mathfrak{K}(t_1)]_+ - \frac{2I^2}{\square} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 M^Q(t, t_1) \frac{d\mathfrak{K}(t)}{df^{cm}(t_1)} \end{aligned} \quad (4.97)$$

есть флуктуационные источники с равными нулю средними значениями по начальному состоянию термостата.

В силу гауссовости невозмущенных переменных термостата $Q(t)$ могут быть вычислены корреляционные функции флуктуационных источников $x_x(t)$ и $x_n(t)$ любого порядка.

Для определенности рассмотрим наиболее важный механизм релаксации и флуктуационных процессов атомов, обусловленный их взаимодействием с квантованным электромагнитным полем (фотонным термостатом). Выбирая кулоновскую калибровку для векторного потенциала ($\text{div} \mathbf{A} = 0$), запишем энергию взаимодействия электрона с полем в виде

$$V(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + eA_0(\mathbf{r}, t). \quad (4.98)$$

Если начальное состояние термостата (до включения взаимодействия) есть состояние термодинамического равновесия при температуре T , то все статистические свойства атома будут определяться запаздывающими функциями Грина для потенциалов поля ($\hbar = 1$)

$$D_{j,k}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_1, t_1) = \langle i [A_j(\mathbf{r}, t), A_k(\mathbf{r}_1, t_1)]_- \rangle \hbar(t - t_1), \quad (4.99)$$

$$k, j = 0, 1, 2, 3.$$

В выбранной калибровке ($\text{div} \mathbf{A} = 0$) фурье-образы функций Грина для изотропной среды имеют вид

$$D_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{w}) = d_{i,j} \frac{e^{-cr}}{r} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_i} \left(\frac{e^{-cr} - 1}{r} \right), \quad (4.100)$$

$$D_{i,0} = 0,$$

$$D_{0,0} = \frac{1}{e(\mathbf{w})} \frac{1}{r},$$

где $i, j = 0, 1, 2, 3$, $c^2 = \frac{w^2}{e(\mathbf{w})}$, $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

Отметим, что взаимодействие электронов со скалярной частью потенциала поля ответственно за кулоновское взаимодействие между электронами и в то же время приводит (в силу особенности функции Грина $D_{0,0}(r, w)$ в точке $r = 0$) к бесконечному постоянному сдвигу каждого из уровней (инфракрасная расходимость). Поэтому в дальнейшем взаимодействие со скалярным потенциалом будет опущено. Особенность векторной части функции Грина (4.100) на нулевой частоте в точке $r = 0$ также приводит к инфракрасной расходимости. Однако вопрос об инфракрасной расходимости выходит за рамки двухуровневого приближения, которое мы здесь рассматриваем.

Перейдем к приближению двухуровневого атома. Для определенности будем считать, что волновые функции верхнего и нижнего уровней $j_2(r)$ и $j_1(r)$ действительны. Учитывая переходы, обусловленные недиагональным матричным элементом от оператора взаимодействия (4.98), придем к гамильтониану с константой взаимодействия $I = \frac{e}{mc}$ и переменной термостата

$$Q(t) = -i \int d^3 \mathbf{r} j_2(\mathbf{r}) A_j(\mathbf{r}, t) \nabla_j j_1(\mathbf{r}). \quad (4.101)$$

Соответственно, функция реакции $j^\varrho(t-t_1)$ в уравнениях (4.95), (4.96) для двухуровневой системы будет определяться фотонной запаздывающей функцией Грина (4.100), а выражение для восприимчивости принимает вид

$$c^\varrho(\omega) = \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 j_2(\mathbf{r}_1)(\nabla_j j_1(\mathbf{r}_1)) j_2(\mathbf{r}_2)(\nabla_k j_1(\mathbf{r}_2)) \times \\ \times D_{j,k}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \omega) = \int dt e^{i\omega t} j^\varrho(t). \quad (4.102)$$

Таким образом, все статистические свойства двухуровневого атома (кинетика и флуктуации) для произвольного неравновесного состояния будут определяться восприимчивостью (4.102).

В настоящем разделе не ставится задача полного статистического исследования динамической системы для произвольного закона дисперсии восприимчивости (4.102) и произвольной константы связи.

Остановимся на дипольном приближении или слабой частотной дисперсии для восприимчивости (4.102), полагая при этом $\epsilon(\omega) = 1$. Вследствие условия $\left| \frac{\omega}{c} a \right| \ll 1$ (a - размеры атома) для функции Грина (4.100) в выражении (4.102) можно написать разложение

$$D_{j,k}(r, \omega) \approx \frac{1}{3} \sum_j D_{j,j}(r, \omega) \approx \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} + i \frac{\omega}{c} \right).$$

После чего для восприимчивости (4.102) получим

$$c^\varrho(\omega) = \frac{2a}{3a} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2 + i\omega \frac{3}{2c} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2, \quad (4.103)$$

где d_{12} - матричный элемент дипольного момента атома. Коэффициент a определяется отношением

$$a = \frac{\int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 j_2(\mathbf{r}_1) \nabla_j j_1(\mathbf{r}_1) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} j_2(\mathbf{r}_2) \nabla_k j_1(\mathbf{r}_2)}{\int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 j_2(\mathbf{r}_1) \nabla_j j_1(\mathbf{r}_1) j_2(\mathbf{r}_2) \nabla_k j_1(\mathbf{r}_2)}.$$

Наиболее простой вид уравнения (4.95), (4.96) приобретают в предельном классическом случае.

Предположим, что начальное состояние термостата есть состояние термодинамического равновесия. Тогда согласно ФДТ Каллена-Велтона (4.68) и формуле (4.103), имеем

$$S^{\varrho}(w) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iwt} M^{\varrho}(t) = \frac{2T}{w} c^{\varrho''}(w) = \frac{4T}{3c} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2. \quad (4.104)$$

Применяя к (4.103), (4.104) обратное преобразование Фурье, получим

$$j^{\varrho}(t-t_1) = \frac{2a}{3a} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2 d(t-t_1) + \frac{2}{3c} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2 d'(t-t_1), \quad (4.105)$$

$$M^{\varrho}(t-t_1) = \frac{4T}{3c} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2 d(t-t_1). \quad (4.106)$$

Подставляя полученные выражения для $j^{\varrho}(t-t_1)$ и $M^{\varrho}(t-t_1)$ в уравнения (4.95), (4.96) и используя коммутационные соотношения для операторов $x(t)$, $n(t)$, $\mathfrak{K}(t)$ двухуровневой системы, получим

$$\mathfrak{K}(t) + g \mathfrak{K}(t) + \Delta^2 x(t) + 2\Delta n(t) f^{cm}(t) = x_x(t), \quad (4.107)$$

$$\mathfrak{K}(t) - \frac{2}{\Delta} \mathfrak{K}(t) f^{cm}(t) + g \left(n + \frac{\Delta}{2T} \right) = x_n(t), \quad (4.108)$$

где $g = 4 \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \frac{2T}{3c} \left(\frac{m\Delta d_{12}}{e} \right)^2$ - константа затухания, $-\frac{\Delta}{2T}$ - термодинамически равновесная разность населенностей. Эти уравнения справедливы при любой внешней силе $f^{cm}(t)$ и произвольной константе связи.

Для вычисления функций корреляции x и n достаточно знать корреляторы флуктуационных источников $x_x(t)$ и $x_n(t)$. Из (4.97) в данном приближении следует

$$\begin{aligned} \langle x_x(t) x_x(t_1) \rangle &= 2g\Delta^2 d(t-t_1); \\ \langle x_n(t) x_n(t_1) \rangle &= 2gd(t-t_1); \\ \langle x_x(t) x_n(t_1) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (4.109)$$

Исходя из явного вида флуктуационных источников, можно вычислить корреляторы флуктуационных сил любого порядка. Приведем выражение для коррелятора третьего порядка

$$\langle x_x(t) x_x(t_1) x_x(t_2) \rangle = 2g^2 \Delta^2 \{ \langle \mathfrak{K}(t) \rangle d(t_1-t_2) + \langle \mathfrak{K}(t_1) \rangle d(t-t_2) + \langle \mathfrak{K}(t_2) \rangle d(t-t_1) \}.$$

Таким образом, полученные в классическом случае в "дипольном" приближении стохастические уравнения для двухуровневой системы (4.107), (4.108) имеют простой физически прозрачный вид. Левые части уравнений (4.107), (4.108) описывают «динамику» флуктуаций, совпадающую с динамикой средних величин. Правые части

(4.107), (4.108) содержат флуктуационные источники, функции корреляции которых определяются согласно (4.109).

В данном случае мы имеем пример существенно нелинейной стохастической модели, в которой могут быть вычислены любые статистические характеристики переменных $x(t)$ и $n(t)$ двухуровневой системы.

Существенно отметить, что при выводе уравнений (4.107), (4.108) использовалась ФДТ Каллена-Велтона для невозмущенных переменных термостата.

Естественно ожидать, что переменные динамической системы $x(t)$, $n(t)$ также должны удовлетворять ФДТ Каллена-Велтона. Для того, чтобы убедиться в этом, достаточно вычислить спектральную плотность флуктуаций дипольного момента x непосредственно из стохастических уравнений при $f^{cm}(t) = 0$ и сравнить полученный результат с результатом, следующим из ФДТ Каллена-Велтона для переменной x дипольного момента. Полагая в (4.107) внешнюю силу $f^{cm}(t)$ равной нулю и используя выражение (4.109) для функции корреляции x_x , получим

$$(x^2)_w = \frac{2\Delta^2 g}{(\Delta^2 - w^2)^2 + (gw)^2}. \quad (4.110)$$

С другой стороны из уравнения (4.107) легко определить линейную восприимчивость

$$\langle x(w) \rangle = c(w) f_w^{cm} = \frac{\Delta^2 / T}{(\Delta^2 - w^2)^2 - igw} f^{cm}(w). \quad (4.111)$$

Тогда, используя ФДТ (4.68) для переменной динамической системы x , получим выражение

$$(x^2)_w = \frac{2T}{w} c''(w) = \frac{2\Delta^2 g}{(\Delta^2 - w^2)^2 + (gw)^2},$$

в точности совпадающее с результатом (4.110), полученным непосредственно из стохастического уравнения.

Совпадение расчетов подтверждает правильность исходных предположений построения стохастических моделей. Приведенные здесь примеры непосредственно показывают, что ФДТ одинаково применима как в линейных, так и нелинейных моделях систем. В свое время этот вопрос был предметом оживленных дискуссий.