



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

ТЕРМОДИНАМИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА. ЧАСТЬ 2

САВЧЕНКО
АЛЕКСАНДР МАКСИМОВИЧ

ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА [VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
[VK.COM/TEACHINMSU](https://vk.com/teachinmsu).

Содержание

1 Лекция 1. Теория неравновесных систем. Корреляционные функции и флуктуации плотности	6
1.1 Теория неравновесных систем. Флуктуации	6
1.2 Использование корреляционных функций для расчета флуктуаций . .	7
1.3 Квазитермодинамическая теория флуктуаций. Основные положения . .	11
2 Лекция 2. Квазитермодинамическая теория флуктуаций	12
2.1 Общая формула для вероятности флуктуационного отклонения от равновесного состояния	12
2.2 Зависимость вероятности флуктуационного отклонения от интенсивности малых флуктуаций	13
2.3 Общая формула для малых ТД-флуктуаций в неизолированной системе	14
2.4 Примеры для различных термодинамических систем	16
2.5 Броуновское движение (традиционная задача неравновесной термодинамики)	17
3 Лекция 3. Броуновское движение. Дисперсия импульса в первой грубой шкале времени	19
3.1 Броуновское движение. Уравнение Ланжевена	19
3.2 Свойства случайной силы $F(t)$. Плавная и грубая шкала	20
3.3 Дисперсия импульса в первой грубой шкале времени. Формула Эйнштейна	22
3.4 Вид корреляционной функции. Дельта-функция	23
3.5 Смещение броуновской частицы	24
4 Лекция 4. Смещение броуновской частицы. Вторая грубая шкала времени	25
4.1 Смещение броуновской частицы. Уравнение Ланжевена для координаты	25
4.2 Дисперсия координаты в первой грубой шкале времени. Формула Эйнштейна для смещения частицы	27
4.3 Вторая грубая шкала времени	28
5 Лекция 5. Уравнения Смолуховского и Фоккера-Планка	31
5.1 Моменты высших порядков. Функция распределения для одномерного случая	31
5.2 Уравнение Смолуховского	32

5.3	Уравнение Фоккера-Планка	35
6	Лекция 6. Феноменология уравнения Фоккера-Планка. Введение в теорию случайных процессов	36
6.1	Феноменология уравнения Фоккера-Планка	36
6.2	Броуновское движение. Общие выводы	37
6.3	Некоторые аспекты теории случайных процессов. Основные понятия .	39
7	Лекция 7. Спектральные представления для случайной перемен- ной и корреляционной функции	42
7.1	Стационарный марковский случайный процесс	42
7.2	Спектральные представления для случайной переменной и корреляци- онной функции	43
7.3	Пример. Спектральная плотность гауссовского стационарного марков- ского процесса (теорема Дуба)	44
7.4	Смещение во времени случайной величины. Формула Эйнштейна . . .	45
8	Лекция 8. Применение метода спектральных разложений к бро- уновскому трансляционному движению. Формула Найквиста	47
8.1	Смещение во времени случайной величины. Формула Эйнштейна . . .	47
8.2	Применение метода спектральных разложений к броуновскому транс- ляционному движению	47
8.3	Формула Найквиста	50
8.4	Примеры оценки теплового шума в полосе частот	50
9	Лекция 9. Кинетические уравнения в статистической механике. Уравнение Лиувилля	52
9.1	Классическая система N тел. Уравнение Лиувилля	52
9.2	Альтернативный способ получения уравнения Лиувилля	55
9.3	Общая структура кинетического уравнения для одночастичной функ- ции распределения	56
10	Лекция 10. Цепочка уравнений Боголюбова. Кинетическое урав- нение Власова. Кинетическое уравнение Больцмана	57
10.1	Общая структура кинетического уравнения для одночастичной функ- ции распределения	57
10.2	Кинетическое уравнение с релаксационным членом	58

10.3 Цепочка уравнений Боголюбова для кинетических функций распределения	60
10.4 Кинетическое уравнение Власова	61
10.5 Кинетическое уравнение Больцмана	62
11 Лекция 11. Лемма Больцмана и ее следствия. Линеаризованное уравнение Больцмана	64
11.1 Кинетическое уравнение Больцмана	64
11.2 Лемма Больцмана	66
11.3 H - теорема Больцмана	66
11.4 Линеаризованное уравнение Больцмана	69
11.5 Итоговые выводы. Парадокс Лошмидта	70

Оглавление (продолжение)

Лекция №12. Связь корреляционной функции и уравнения Ван-дер-Ваальса..	72
Свободная энергия газа. Расчёт удельной свободной энергии.....	72
Термическое уравнение состояния. Модельный потенциал.....	73
Поправка для модельного потенциала. Сравнение уравнений и выводы	73
Лекция №13. Система с кулоновским взаимодействием. Дебаевская экранировка	75
.....	75
Условия рассматриваемой системы	75
Экранировка зарядов в равновесной двухкомпонентной классической системе с кулоновским взаимодействием.....	76
Итоги вывода	80
Лекция №14. Теоретические характеристики систем с кулоновским взаимодействием	81
Средняя энергия и гамильтониан электростатического взаимодействия	81
Свободная энергия системы. Уравнения состояния.....	83
Лекция №15. Затухания Ландау	84
Модель "желе". Особенности приближения. Закон дисперсии.....	84
Теорема Сохотского-Племеля для интеграла. Дисперсионное уравнение. Формула Ландау	87

Лекция 1. Теория неравновесных систем. Корреляционные функции и флуктуации плотности

Теория неравновесных систем. Флуктуации

Параметры равновесного термодинамического состояния не фиксированы строго во времени, а флуктуируют около своих средних значений. То есть статическая система, уже достигнув состояния термодинамического равновесия, все равно “шумит” около состояния равновесия. Этот “шум” — не истребим. Этот “шум” можно выключить, только принудительно прекратив тепловое движение молекул.

Определение 1.1. *Флуктуации — это случайные, нерегулярные, самопроизвольные, обязанные микроскопическому движению частиц статистической системы, отклонения значений макроскопических характеристик системы от их средних значений.*

Для характеристики отклонения произвольной величины F от ее среднего значения \bar{F} , необходимо использовать дисперсию:

$$\overline{(\Delta F)^2} = \overline{(F - \bar{F})^2} = \overline{F^2} - (\bar{F})^2$$

Также необходимо использовать относительную флуктуацию:

$$\delta_F = \frac{\sqrt{\overline{(F)^2}}}{\bar{F}}$$

Под средним подразумевается распределение Гиббса:

$$\bar{F} = \sum_n F_n w_n$$

Флуктуации можно вычислять с помощью распределения Гиббса или использовать формулу Эйнштейна.

Замечание 1.1. *Если рассчитывать величины $\overline{(E)^2}$, $\overline{(N)^2}$, пользуясь каноническими распределениями Гиббса, то можно определить малые относительные флуктуации общей величины энергии E в системе или общего числа N в системе.*

$$\delta_E \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$
$$\delta_N \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Но локальные флуктуации E и N могут быть гораздо больше.

Температура в распределении Гиббса не флуктуирует.

Использование корреляционных функций для расчета флуктуаций

Величины аддитивного динамического типа выглядят следующим образом:

$$A(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \sum_{1 \leq i \leq N} A(\vec{r}_i)$$

При усреднении этой величины получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \bar{A} &= \sum_{1 \leq i \leq N} \int A(\vec{r}_i) d\vec{r}_i \int w_N \frac{d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}{d\vec{r}_i} = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{1}{V} \int A(\vec{r}_i) F_1(\vec{r}_i) d\vec{r}_i = \\ &= \frac{N}{V} \int A(\vec{r}) F_1(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{v} \int A(\vec{r}) F_1(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned}$$

$$w_N = \frac{1}{QV^N} e^{-\frac{H_1}{\theta}}$$

Величины бинарного типа выглядят следующим образом:

$$B = \sum_{1 \leq i < j \leq N} B(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$

При усреднении этой величины получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} \bar{B} &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} \int B(\vec{r}_i, \vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j \times \int w_N \frac{d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N}{d\vec{r}_i d\vec{r}_j} = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{V^2} \int B(\vec{r}_i, \vec{r}_j) F_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) d\vec{r}_i d\vec{r}_j = \\ &= \frac{N(N-1)}{2V^2} \int B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) F_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \frac{1}{2v^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) F_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{aligned}$$

Если рассматривать дисперсию величины аддитивного типа, то есть построить:

$$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - (\bar{A})^2$$

Тогда появится следующая конструкция:

$$A^2 = \sum_{ij} A(\vec{r}_i) A(\vec{r}_j) = \sum_{1 \leq i \leq N} A^2(\vec{r}_i) + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} A(\vec{r}_i) A(\vec{r}_j)$$

Усреднив это выражение с использованием полученных выше формул, получится:

$$\overline{A^2} = \frac{1}{v} \int A^2(\vec{r}) F_1(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{v^2} \int \int A(\vec{r}_1) A(\vec{r}_2) F_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Таким образом, для расчета дисперсии величины аддитивного типа необходимо располагать корреляционными функциями F_1 и F_2 .

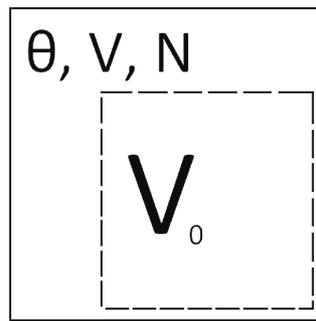


Рис. 1.1. Статистическая система

Пример 1.1. Рассматривается флуктуация числа частиц в пространственно однородной статистической системе.

Необходимо рассчитать дисперсию числа частиц в объеме V_0 с помощью корреляционной функции. Вводится вспомогательная функция:

$$f(\vec{r}_i) = \begin{cases} 1, & \vec{r}_i \in V_0 \\ 0, & \vec{r}_i \notin V_0 \end{cases}$$

Тогда точное число частиц N_0 в объеме V_0 записывается следующим образом:

$$N_0 = \sum_{1 \leq i \leq N} f(\vec{r}_i)$$

Замечание 1.2. Функция $f(\vec{r})$, попадая под знак интеграла по $d\vec{r}$, вырезает под интегралом область V_0 .

$$f^2(\vec{r}) = f(\vec{r})$$

В пространственно однородном случае:

$$F_1(\vec{r}) = 1$$

$$F_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = F_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Тогда, используя формулы для средних величин аддитивного типа, можно получить:

$$\overline{N_0} = \frac{1}{v} \int_V f(\vec{r}) F_1(\vec{r}) d\vec{r} = \frac{1}{v} \int_{V_0} d\vec{r} = \frac{V_0}{v}$$

$$\overline{N_0^2} = \frac{1}{v} \int_{V_0} d\vec{r} + \frac{1}{v^2} \int_{V_0} \int_{V_0} F_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

Следовательно, выражение для дисперсии выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta N_0)^2} &= \overline{N_0^2} - (\overline{N_0})^2 = \frac{V_0}{v} + \frac{1}{v^2} \int \int_{V_0} F_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 - \frac{V_0^2}{v^2} = \\ &= \frac{V_0}{v} + \frac{1}{v^2} \int \int_{V_0} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 [F_2(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) - 1] \end{aligned}$$

Такая дисперсия подчиняется биномиальному закону распределения.

Замечание 1.3. Объем V_0 считается макроскопическим с линейным размером:

$$L_0 \sim \sqrt[3]{V_0}$$

Следовательно:

$$L_0 \gg R_{\text{корр}}$$

$R_{\text{корр}}$ — радиус корреляции. Это условие термодинамичности системы в объеме V_0 .

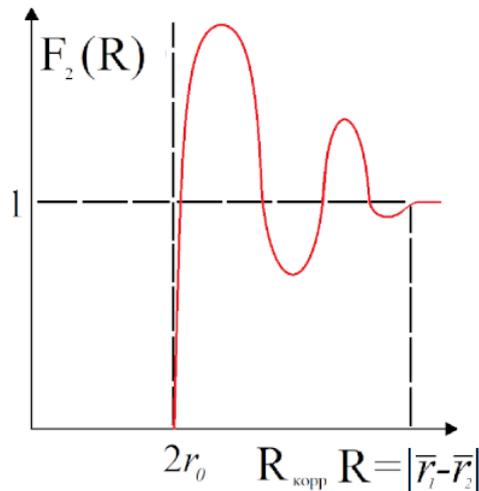


Рис. 1.2. Макроскопический объем V_0

Утверждение 1.1. Полагая V_0 макроскопическим объемом, то есть считая $L_0 \gg R_{\text{корр}}$, можно после соответствующей замен переменных интегрирование распространить на все бесконечное пространство, а не только на объем V_0 .

Замена переменных происходит следующим образом:

$$\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_2$$

$$J = 1$$

J — Якобиан перехода. Получается следующее выражение для дисперсии числа частиц в объеме V_0 :

$$\overline{(\Delta N_0)^2} = \frac{V_0}{v} \left[1 + \frac{1}{v} \int_0^\infty [F_2(R) - 1] 4\pi R^2 dR \right]$$

$$\int_0^\infty (F_2(R) - 1) 4\pi R^2 dR = \frac{4}{3} \pi R_{\text{корр}}^3 \varphi$$

φ — конечная величина не аддитивного типа, зависящая от конкретных свойств системы, например, от законов взаимодействия частиц друг с другом. Тогда окончательно получается:

$$\overline{(\Delta N_0)^2} = \left| \frac{V_0}{v} = \overline{N_0} \right| = \overline{N_0} \left\{ 1 + \frac{4}{3} \pi R_{\text{корр}}^3 \frac{\varphi}{v} \right\} \sim \overline{N_0}$$

Следовательно, относительная флуктуация числа частиц в объеме V_0 записывается следующим образом:

$$\delta_{N_0} = \frac{\sqrt{\overline{(\Delta N_0)^2}}}{\overline{N_0}} \sim \frac{1}{\sqrt{\overline{N_0}}}$$

Таким образом, такая зависимость дисперсии величины аддитивного типа и относительной флуктуации от числа частиц в исследуемой системе является характерной для статистической теории, а именно, дисперсия аддитивной величины также оказывается аддитивной величиной. Описанные выше флуктуации называются термодинамическими.

Утверждение 1.2. *Существует другая возможность.*

$$\overline{F} \sim N$$

$$\overline{(\Delta F)^2} \sim N$$

Отмеченная зависимость появилась, потому что случилось обрезание на радиусе корреляции. Пусть радиус корреляции возрастает до линейного размера системы L_0 или даже больше. Тогда система в объеме V_0 не является термодинамической, так как невозможно пренебречь граничными эффектами по сравнению с объемными. Стенку начинает чувствовать не только приграничные частицы, но и все частицы системы. Тогда не получается делить систему на части, вводить термодинамические аддитивные и не аддитивные величины.

Пусть:

$$M = \max(F_2 - 1)$$

Тогда для дисперсии числа частиц получается следующая оценка:

$$\overline{(\Delta N_0)^2} < \bar{N}_0 \left(1 + \frac{V_0}{v} M \right) \simeq (\bar{N}_0^2) M \sim (\bar{N}_0)^2$$

Получается максимальная степень роста дисперсии:

$$\overline{(\Delta N_0)^2} \sim (\bar{N}_0)^\alpha \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

Флуктуации, соответствующие величине $\alpha > 1$, называются не термодинамическими.

Квазитермодинамическая теория флуктуаций. Основные положения

Флуктуационные отклонения по построению от равновесного состояния — крупномасштабными, а именно такими, что каждый из областей системы, где произошли флуктуации, также можно будет считать термодинамической системой. Это справедливо, когда:

$$\Delta x \gg \lambda$$

Δx — линейный размер системы.

λ — длина свободного пробега.

Флуктуационное отклонение с микроскопической точки зрения считаются медленными, чтобы пользоваться формулами равновесия и термодинамики.

Флуктуации в соседних областях происходят независимо друг от друга.

Лекция 2. Квазитермодинамическая теория флуктуаций

Общая формула для вероятности флуктуационного отклонения от равновесного состояния

Рассматривается изолированная система с фиксированными E, V, a, N .

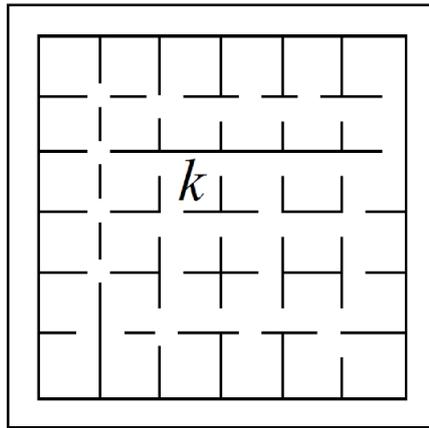


Рис. 2.1. Система в двойных стенках

Система разбивается на подсистемы со своими флуктуационно отклоненными от средних по системе параметрами, т.е. внутри каждой области существует локальное термодинамическое равновесие, однако значения параметров различны и соответствуют флуктуационным отклонениям от равновесных значений в целом.

Как известно, для равновесного состояния в целом изолированной системы:

$$\Gamma = e^S$$

Так как флуктуационные отклонения в каждой из подобластей считаются независимыми, а число микроскопических реализаций образовать данное термодинамическое состояние в k области есть $\Gamma_k = e^{S_k}$, то число способов образовать данное флуктуационное состояние уже для всей системы определится как:

$$\Gamma' = \prod_k \Gamma_k = e^{\sum_k S_k} = e^{S'}$$

S' — энтропия отклоненного от равновесия состояния системы. Необходимо определить по Эйнштейну вероятность такого отклоненного состояния как отношение

статических весов:

$$W_{\Delta} \sim \frac{\Gamma'}{\Gamma} = e^{S' - S} = e^{\Delta S}$$

Таким образом, получается основная формула для всего формализма термодинамических флуктуаций.

Зависимость вероятности флуктуационного отклонения от интенсивности малых флуктуаций

Пусть флуктуационные отклонения системы от равновесного состояния может быть описана всего одним параметром x . Тогда равновесному состоянию соответствует:

$$x = 0$$

В случае равновесия:

$$S = S(0)$$

В отклоненном состоянии происходит разложение S' в ряд Тейлора:

$$S' = S(x) = S(0) + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_{x=0} x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)_{x=0} x^2 + \dots$$

Если выбирать изолированную систему, то так как энтропия стремится к своему максимальному значению, то:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_{x=0} &= 0 \\ \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right)_{x=0} &= -\lambda < 0 \quad \lambda > 0 \end{aligned}$$

$$W_{\Delta}(x) = \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}$$

Таким образом, было получено Гауссово распределение для малых флуктуаций с дисперсией:

$$\overline{(\Delta x)^2} = \frac{1}{\lambda}$$

Замечание 2.1. Если отклонение от равновесия характеризуется набором параметров $x = \{x_k\}$, то:

$$W_{\Delta} = \text{const} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{kl} \lambda_{kl} x_k x_l \right\}$$

Квадратичная форма (в силу устойчивости равновесного состояния) должна быть положительно определенной. Если ее с помощью линейного преобразования

диогонализовать $(\{x_k\} \rightarrow \{\tilde{x}_k\})$, то в новых переменных получится произведение распределений Гаусса:

$$W_{\Delta} = \prod_k \sqrt{\frac{\tilde{\lambda}_k}{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\tilde{\lambda}_k \tilde{x}_k^2} \quad \tilde{\lambda}_k > 0$$

Общая формула для малых ТД-флуктуаций в неизолированной системе

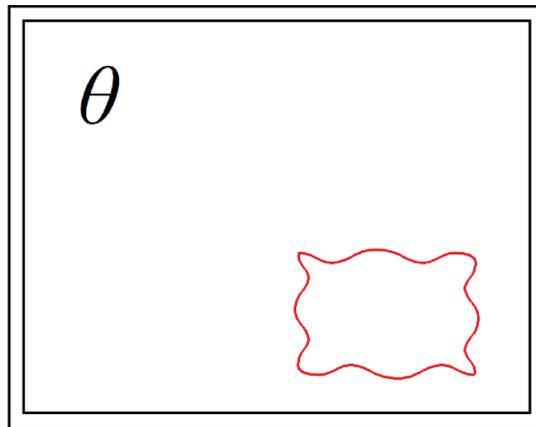


Рис. 2.2. Изолированная система

Общая система по-прежнему остается изолированной, так как для нее получена формула Эйнштейна. Внутри этой системы выделяется некоторая макроскопическая часть и предполагается, что именно там произошла флуктуация. Термостат при этом сохраняет состояние равновесия. Тогда для квазистатически возникшего неравновесного состояния:

$$\Delta S_{\text{общ}} = \Delta S_{\text{T}} + \Delta S_{\text{н.с.}}$$

$$\Delta S_{\text{T}} = \frac{1}{\theta_{\text{T}}} (\Delta E_{\text{T}} + p_{\text{T}} \Delta V_{\text{T}} - \mu_{\text{T}} \Delta N_{\text{T}})$$

Если величины $E_{\text{общ}}, V_{\text{общ}}, N_{\text{общ}}$ зафиксированы, то:

$$\Delta E_{\text{T}} = -\Delta E_{\text{н.с.}}$$

$$\Delta V_{\text{T}} = -\Delta V_{\text{н.с.}}$$

$$\Delta N_{\text{T}} = -\Delta N_{\text{н.с.}}$$

При условии равновесия получаются следующие условия:

$$\theta_T = \theta$$

$$p_T = p$$

$$\mu_T = \mu$$

Тогда, подставляя всю эту информацию в выражение для

$$\Delta S_{\text{общ}}$$

, получается:

$$\Delta S_{\text{общ}} = \Delta S_T + \Delta S = -\frac{1}{\theta} \Delta E - \frac{1}{\theta} p \Delta V + \frac{1}{\theta} \mu \Delta N + \Delta S$$

$$W_{\Delta} \sim e^{-\frac{1}{\theta}(\Delta E + p \Delta V - \mu \Delta N - \theta \Delta S)} \quad (2.1)$$

Рассматриваются частные случаи полученной формулы.

1) Изолированная система:

$$W_{\Delta} \Big|_{E, V, a, N} \sim e^{\Delta S}$$

2) Система в термостате:

$$W_{\Delta} \Big|_{\theta, V, a, N} \sim e^{-\frac{1}{\theta}(\Delta E - \Delta(\theta S))} = e^{-\frac{\Delta F}{\theta}}$$

3) Система с воображаемыми стенками:

$$W_{\Delta} \Big|_{\theta, V, a, \mu} \sim e^{-\frac{\Delta \Omega}{\theta}}$$

4) Система под поршнем:

$$W_{\Delta} \Big|_{\theta, p, a, N} \sim e^{-\frac{\Delta G}{\theta}}$$

Выделяется квадратичная форма в формуле (2.1):

$$E = E(S, V, N)$$

$$(S, V, N) = (x_1, x_2, x_3)$$

$$\Delta E = \sum_i \frac{\partial E}{\partial x_i} \Delta x_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial x_i \partial x_j} \Delta x_i \Delta x_j + \dots =$$

$$\begin{aligned}
 &= \left| \Delta \left(\frac{\partial E}{\partial x_i} \right) = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial E}{\partial x_i} \right) \Delta x_j \right| = \\
 &= \sum_i \frac{\partial E}{\partial x_i} \Delta x_i + \frac{1}{2} \sum_i \Delta \left(\frac{\partial E}{\partial x_i} \right) \Delta x_i + \dots = \\
 &= \left| \frac{\partial E}{\partial x_1} = \frac{\partial E}{\partial S} = \theta, \quad \frac{\partial E}{\partial x_2} = \frac{\partial E}{\partial V} = p, \quad \frac{\partial E}{\partial x_3} = \frac{\partial E}{\partial N} = \mu \right| = \\
 &= \theta \Delta S - p \Delta V + \mu \Delta N + \frac{1}{2} (\Delta \theta \Delta S - \Delta p \Delta V + \Delta \mu \Delta N) = \Delta E
 \end{aligned}$$

Следовательно, окончательная формула для вероятности флуктуаций в не изолированной системе записывается следующим образом:

$$W_{\Delta} \sim \exp \left\{ \frac{\Delta p \Delta V - \Delta \theta \Delta S - \Delta \mu \Delta N}{2\theta} \right\}$$

Примеры для различных термодинамических систем

Пример 2.1. Пусть по каким-либо причинам флуктуациями объема и числа частиц в системе можно пренебречь, т.е. $\Delta V = 0$, $\Delta N = 0$, тогда:

$$(\Delta S)_{VN} = \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{VN} \Delta \theta = \frac{C_{VN}}{\theta} \Delta \theta$$

Подставив это выражение в окончательную формулу для вероятности флуктуаций, получается следующее:

$$W_{\Delta} \sim \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{C_{VN}}{\theta^2} (\Delta \theta)^2 \right\}$$

Из основной формул для W_{Δ} получается Гауссово распределение по оставшейся переменной $\Delta \theta$. Можно получить выражение для дисперсии температуры:

$$\overline{(\Delta \theta)^2} = \frac{\theta^2}{N \times C_v}$$

Пример 2.2. Необходимо получить выражение для W_{Δ} при условии, что $N = const$, а флуктуируют V и Θ .

$$p = p(V, \theta) \quad \Delta p = \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{\theta} \Delta V + \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right)_{V} \Delta \theta$$

$$S = S(V, \theta) \quad \Delta S = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{\theta} \Delta V + \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_{V} \Delta \theta =$$

$$= \left| \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_\theta = \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right)_V ; \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right) = \frac{C_{VN}}{\theta} \right| = \left(\frac{\partial p}{\partial \theta} \right)_V \Delta V + \frac{C_{VN}}{\theta} \Delta \theta$$

$$W_\Delta \sim \exp \left\{ \frac{1}{2\theta} (\Delta p \Delta V - \Delta \theta \Delta S) \right\}$$

$$W_\Delta \sim \exp \left\{ -\frac{1}{2\theta} \frac{1}{N} \left(-\frac{\partial p}{\partial v} \right)_\theta (\Delta V)^2 - \frac{1}{2} \frac{C_{VN}}{\theta^2} (\Delta \theta)^2 \right\}$$

$$\overline{(\Delta \theta)^2} = \frac{\theta^2}{N \times C_v}$$

$$\overline{(\Delta V)^2} = \frac{N\theta}{\left(-\frac{\partial p}{\partial v} \right)_\theta}$$

Замечание 2.2. Требование $\Delta S = S' - S < 0$ для изолированной системы приводит к требованию $\tilde{\lambda}_k > 0$, иначе говоря, к положительности соответствующих дисперсий. Обнаруживается тесная связь теории флуктуации с условиями устойчивости:

$$C_v > 0$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_\theta < 0$$

Замечание 2.3. Необходимо отметить, что квазитермодинамическое рассмотрение флуктуаций существенно основывалось на их малости. При возрастании флуктуации нарушаются очень многие предположения (флуктуации перестают быть независимыми, квазистатическими), и для их описания будут существенны слагаемые порядка больше, чем $\sim x^2$. Такие флуктуации наблюдаются при фазовых переходах в сверхпроводниках.

Замечание 2.4. По отношению к каноническим распределениям, в которых $\theta = \text{const}$ и $\Delta \theta = 0$, результат для дисперсии температуры $\overline{(\Delta \theta)^2}$ является существенно новым, так как получить его в случае распределений Гиббса невозможно.

Броуновское движение (традиционная задача неравновесной термодинамики)

Рассматривается физическое явление, основой эволюционного процесса которого является воздействие на систему случайной силы. Экспериментально открыто Робертом Брауном в 1827 г. Рассматривается движение крупных частиц в однородной среде типа газа и жидкости. Крупные частицы — это частицы, которые макроскопически наблюдаемы в микроскопе. Минимальный размер: ($R \sim 10^{-4}$ см.

Предполагается, что отдельные броуновские частицы друг с другом не взаимодействуют в термостате, состоящем из более мелких частиц. Рассматривается только трансляционное броуновское движение.

Рассматривается пространственно однородная система и одну броуновская частица:

$$U_{\text{внеш}} = 0$$

Так как все направления x, y, z равноправны, рассматривается одномерное движение.

Лекция 3. Броуновское движение. Дисперсия импульса в первой грубой шкале времени

Броуновское движение. Уравнение Ланжевена

Рассматривается пространственно однородная система и одну броуновская частица:

$$U_{\text{внеш}} = 0$$

Так как все направления x, y, z равноправны, рассматривается одномерное движение. Необходимо разделить силу, действующую на броуновскую частицу, на две части:

- 1) Регулярная часть (обычная сила вязкого трения):

$$\dot{p} = -\Gamma p$$

$$\Gamma = \frac{\gamma}{m} = \frac{6\pi R\eta}{m}$$

η — коэффициент вязкости среды; m, R — масса и радиус броуновской частицы.

- 2) Случайная сила $F(t)$:

$$\begin{cases} \dot{p} + \Gamma p = F(t) \\ p(0) = p_0 \end{cases}$$

Таким образом, получается полное уравнение (уравнение Ланжевена или стохастическое дифференциальное уравнение).

Общее решение соответствующего однородного уравнения имеет вид:

$$p = p_0 e^{-\Gamma t}$$

Далее необходимо воспользоваться методом вариации постоянной, то есть:

$$p_0 \rightarrow \tilde{p}(t), \quad p = \tilde{p}(t) e^{-\Gamma t}$$

После подставления в уравнение получается:

$$\tilde{p}' e^{-\Gamma t} - \Gamma \tilde{p} e^{-\Gamma t} + \Gamma \tilde{p} e^{-\Gamma t} = F(t)$$

$$\tilde{p}' = F(t) e^{\Gamma t}$$

Интегрируя в пределах от 0 до t , учитывая, что $\tilde{p}(0) = p_0$, получается:

$$\tilde{p}(t) - p_0 = \int_0^t F(t_1) e^{\Gamma t_1} dt_1$$

Таким образом, получается формальное (математически строгое) решение уравнения Ланжевена:

$$p(t) = p_0 e^{-\Gamma t} + \int_0^t F(t_1) e^{-\Gamma(t-t_1)} e^{\Gamma t_1} dt_1$$

Если рассматривать уравнение Ланжевена как обыкновенное дифференциальное уравнение, то его формальное решение было получено. Невозможно считать силу $F(t)$ заданной функцией времени. В таком виде решение ничего не дает.

Свойства случайной силы $F(t)$. Плавная и грубая шкала

Взаимодействие броуновской частицы со средой характеризуется следующими временными интервалами:

- 1) Время соударения броуновской частицы с частицами среды или время слипания:

$$\tau_{\text{соуд}} = \tau \sim 10^{-12} \text{ с}$$

- 2) Время между взаимодействиями:

$$\tau' \sim 10^{-16} - 10^{-17} \text{ с}$$

- 3) Время исчезновения информации о начальном состоянии броуновской частицы:

$$\tau_M \simeq \frac{1}{\Gamma} \sim 10^{-10} \text{ с}$$

Очевидно, что броуновская частица одновременно взаимодействует с большим числом молекул. Вводится в рассмотрение первая грубая шкала времени, которая сгладит структуру случайной функции $F(t)$ порядка τ' . Усредняются все рассматриваемые величины по интервалу времени $\Delta t \gg \tau$, то есть по построению Δt превышает значение времени, на котором соседние значения случайной силы $F(t)$ могут быть скоррелированы друг с другом, например, через взаимодействие с одной и той же частицей среды. В первой грубой шкале времени:

$$\bar{F}(t) = 0$$

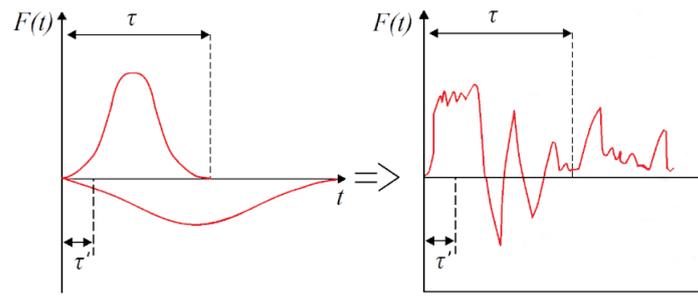


Рис. 3.1. Свойства случайной силы $F(t)$

$$\Delta t \gg \tau \quad \overline{F(t)F(t + \Delta t)} = 0$$

Усредняя формулу по первой грубой шкале времени получается:

$$\bar{p} = p(0)e^{-\Gamma t}$$

Вводится в рассмотрение отклонение величины импульса p от своего среднего \bar{p} по первой грубой шкале времени:

$$\Delta p = p - \bar{p} = \int_0^t e^{-\Gamma(t-t_1)} F(t_1) dt_1$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p - \bar{p})^2} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{-\Gamma(t-t_1)} e^{-\Gamma(t-t_2)} \overline{F(t_1)F(t_2)}$$

$$\overline{F(t_1)F(t_2)} \Big|_{|t_1-t_2|>\tau} = \overline{F(t_1)} \cdot \overline{F(t_2)} = 0$$

Подынтегральная функция отлична от нуля только в узком интервале ширины 2τ , то есть рассматривается однородный во времени или стационарный процесс:

$$\overline{F(t_1)F(t_2)} \Big|_{|t_1-t_2|<\tau} = \varphi(t_1 - t_2)$$

$$\varphi(t') = \begin{cases} \frac{1}{2}\varphi & |t'| \leq \tau; \\ 0 & |t'| > \tau \end{cases}$$

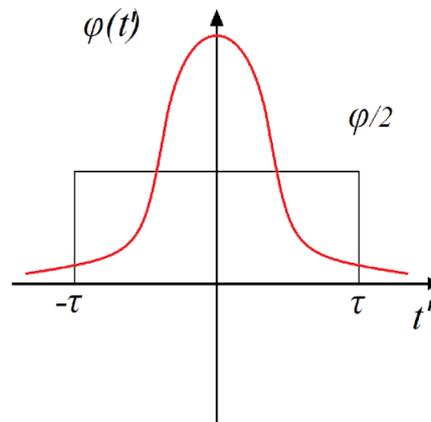


Рис. 3.2. Однородный во времени или стационарный процесс

Дисперсия импульса в первой грубой шкале времени. Формула Эйнштейна

$$t' = t_1 - t_2$$

$$\overline{(p - \bar{p})^2} = \int_0^t e^{-2\Gamma(t-t_2)} dt_2 \int_{-\tau}^{\tau} \varphi(t') e^{\Gamma t'} dt' = \frac{\varphi\tau}{2\Gamma} (1 - e^{-2\Gamma t}) + O(\tau^2)$$

В итоге получается следующее выражение:

$$\overline{(p - \bar{p})^2} = (1 - e^{-2\Gamma t}) \frac{\varphi\tau}{2\Gamma} + O(\tau^2)$$

Если рассматривать случай $t \rightarrow \infty$, то получается:

$$\overline{(\Delta p)^2} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{p}^2 = m\theta$$

$$\overline{(\Delta p)^2} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{\varphi\tau}{2\Gamma} = m\theta$$

$$\varphi\tau = 2\Gamma m\theta = 2\gamma\theta$$

Считая, что при $t \rightarrow \infty$ броуновская частица приходит в состояние термодинамического равновесия со средой и отождествляя \bar{p}^2 с тем, которое вычисляется из распределения Максвелла, получается результат, что:

$$\varphi\tau = 2\Gamma m\Theta = 2\gamma\Theta$$

Таким образом, получается окончательная формула, определяющая эволюцию дисперсии импульса в первой грубой шкале времени:

$$\overline{(\Delta p)^2} = m\Theta(1 - e^{-2\Gamma t}) \quad t \gg \tau$$

$$t \sim \tau_M \sim \frac{1}{2\Gamma}$$

t — это время установления для броуновской частицы Максвелловского распределения по скоростям. Если рассмотреть случай малых времен $t \ll \frac{1}{2\Gamma}$, то получается характерное для броуновского движения поведение дисперсии по времени:

$$\overline{(\Delta p)^2} = |2\Gamma t \ll 1| \simeq m\theta(1 - (1 - 2\Gamma t)) \simeq 2\Gamma m\theta t = 2\gamma\theta t$$

Таким образом, получается формула Эйнштейна для дисперсии импульса на малых временах в первой грубой шкале времени. Уже при выходе на первую грубую шкалу времени ($t \gg \tau$) получается результат, непредсказуемый с точки зрения простых механических соображений.

Замечание 3.1. На больших временах начальное значение импульса p_0 забывается броуновской частицей и уже не влияет на дальнейшую эволюцию броуновской частицы.

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta p)^2} &= \overline{p^2} - (\overline{p})^2 = \overline{p^2} - p_0^2 e^{-2\Gamma t} = m\theta(1 - e^{-2\Gamma t}) \\ \overline{p^2} &= p_0^2 e^{-2\Gamma t} + m\theta(1 - e^{-2\Gamma t}) \end{aligned}$$

Вид корреляционной функции. Дельта-функция

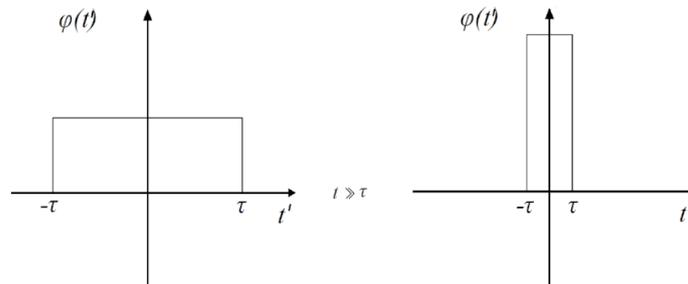


Рис. 3.3. Корреляция φ

Если считать случайную силу δ - коррелированной, то дисперсия импульса в первой грубой шкале времени считается намного проще. Пусть корреляция имеет следующий вид:

$$\overline{F(t_1)F(t_2)} = C\delta(t_1 - t_2)$$

C — интенсивность источника случайной силы.

$$\begin{aligned} \overline{(p - \bar{p})^2} &= \int_0^t \int_0^t e^{-\Gamma(t-t_2)} e^{-\Gamma(t-t_1)} \overline{F(t_1)F(t_2)} dt_1 dt_2 = \\ &= \int_0^t \int_0^t e^{-\Gamma(t-t_2)} e^{-\Gamma(t-t_1)} C \delta(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 = C e^{-2\Gamma t} \int_0^t e^{\Gamma t_2} e^{\Gamma t_2} dt_2 = \frac{C}{2\Gamma} (1 - e^{-2\Gamma t}) \\ \overline{(\Delta p)^2} &\rightarrow \overline{p^2}^M = m\theta \\ \overline{(\Delta p)^2} &\rightarrow \frac{C}{2\Gamma} \end{aligned}$$

Таким образом:

$$C = 2\Gamma m\theta$$

Очевидно, что δ - коррелированность случайной силы ведет к некоторой идее о бесконечной силе, что, естественно, физически ничем не обосновано. Понятно, что δ - коррелированность — это упрощение.

Смещение броуновской частицы

Рассматривается смещение Броуновской частицы:

$$\begin{aligned} u(\bar{r}) &\equiv 0 \\ \frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\ x \Big|_{t=0} &= x(0) = x_0 \end{aligned}$$

Необходимо записать уравнение Ланжевена в терминах смещения:

$$\begin{aligned} \frac{p}{m} &= \frac{p_0}{m} e^{-\Gamma t_2} + \frac{1}{m} \int_0^{t_2} e^{-\Gamma(t_2-t_1)} F(t_1) dt_1 \\ \frac{dx}{dt_2} &= V_0 e^{-\Gamma t_2} + \int_0^{t_2} e^{-\Gamma(t_2-t_1)} \frac{F(t_1)}{m} dt_1 \\ F(x) &= \int_0^x \hat{f}(t) dt \\ \frac{dF(x)}{dx} &= \hat{f}(x) \end{aligned}$$

Лекция 4. Смещение броуновской частицы. Вторая грубая шкала времени

Смещение броуновской частицы. Уравнение Ланжевена для координаты

Рассматривается смещение Броуновской частицы:

$$u(\vec{r}) \equiv 0$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$$

$$x \Big|_{t=0} = x(0) = x_0$$

Необходимо записать уравнение Ланжевена в терминах смещения:

$$\frac{p}{m} = \frac{p_0}{m} e^{-\Gamma t_2} + \frac{1}{m} \int_0^{t_2} e^{-\Gamma(t_2-t_1)} F(t_1) dt_1$$

$$\frac{dx}{dt_2} = V_0 e^{-\Gamma t_2} + \int_0^{t_2} e^{-\Gamma(t_2-t_1)} \frac{F(t_1)}{m} dt_1$$

$$F(x) = \int_0^x \hat{f}(t) dt$$

$$\frac{dF(x)}{dx} = \hat{f}(x)$$

Происходит интегрирование:

$$\int_{x_0}^x dx = V_0 \int_0^t e^{-\Gamma t_2} dt_2 + \int_0^t \tilde{f}(t_2) dt_2$$

$$x(t) = x_0 + V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} + \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} e^{-\Gamma t_2} e^{\Gamma t_1} \frac{F(t_1)}{m} dt_1$$

Последний интеграл рассчитывается отдельно по частям:

$$\int_0^t e^{-\Gamma t_2} dt_2 \int_0^{t_2} e^{\Gamma t_1} \tilde{F}(t_1) dt_1 = \left| \tilde{F}(t_1) = \frac{F(t_1)}{m} \right| = \int_0^t f(t_2) e^{-\Gamma t_2} dt_2 = \left(-\frac{1}{\Gamma} \right) \int_0^t f(t_2) d(e^{-\Gamma t_2}) =$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(-\frac{1}{\Gamma} \right) \left\{ f(t_2)e^{-\Gamma t_2} \Big|_{t_2=0}^{t_2=t} - \int_0^t e^{-\Gamma t_2} df(t_2) \right\} = \\
 &= \left| f(t_2) = \int_0^{t_2} e^{\Gamma t_1} \tilde{F}(t_1) dt_1; f \Big|_{t_2=0} = 0; f \Big|_{t_2=t} = \int_0^t e^{\Gamma t_1} \tilde{F}(t_1) dt_1; df = e^{\Gamma t_2} \tilde{F}(t_2) dt_2 \right| = \\
 &= \left(-\frac{1}{\Gamma} \right) \left\{ e^{-\Gamma t} \tilde{F}(t) dt - \int_0^t e^{-\Gamma t_2} e^{\Gamma t_2} \tilde{F}(t_2) dt_2 \right\} = \\
 &= \left(\frac{1}{\Gamma} \right) \int_0^t \left\{ \frac{F(t_1)}{m} - \frac{F(t_1)}{m} e^{-\Gamma(t-t_1)} \right\} dt_1 = \int_0^t \frac{1 - e^{-\Gamma(t-t_1)}}{\Gamma} \frac{F(t_1)}{m} dt_1
 \end{aligned}$$

Если в конечном интеграле сделать замену переменной $(t - t_1) \rightarrow t'$, то получится:

$$\begin{aligned}
 t_1 = 0 \quad t' &= t \\
 t_1 = t \quad t' &= 0 \\
 x &= x_0 + V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} + \int_0^t \frac{1 - e^{-\Gamma t'}}{\Gamma} \frac{1}{m} F(t - t') dt'
 \end{aligned}$$

Замечание 4.1. Для среднего смещения броуновской частицы в первой грубой шкале времени ($t \gg \tau$):

$$\bar{x} = x_0 + V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} = \begin{cases} x_0 + V_0 t & t \ll \frac{1}{\Gamma}; \\ x_0 + \frac{V_0}{\Gamma} & t \gg \frac{1}{\Gamma}. \end{cases}$$

Необходимо получить выражение для дисперсии смещения:

$$\begin{aligned}
 x - x_0 &= V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} + \int_0^t \frac{1 - e^{-\Gamma t'}}{\Gamma} \frac{1}{m} F(t - t') dt' \\
 \bar{x} - x_0 &= V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} \\
 \Delta x = x - \bar{x} &= \int_0^t \frac{1 - e^{-\Gamma t'}}{\Gamma} \frac{1}{m} F(t - t') dt
 \end{aligned}$$

Дисперсия координаты в первой грубой шкале времени. Формула Эйнштейна для смещения частицы

Для расчета дисперсии координаты записывается следующее выражение:

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \left(\frac{1 - e^{-\Gamma t_1}}{\Gamma} \right) \left(\frac{1 - e^{-\Gamma t_2}}{\Gamma} \right) \frac{1}{m^2} \varphi(t_1 - t_2)$$

Этот интеграл необходимо досчитать с помощью δ функций.

$$\begin{aligned} \overline{(x - \bar{x})^2} &= \int_0^t \int_0^{t_2} \frac{1 - e^{-\Gamma t_1}}{\Gamma} \frac{1 - e^{-\Gamma t_2}}{\Gamma} \frac{\varphi(t_1 - t_2)}{m^2} dt_1 dt_2 = \\ &= \left| \varphi = 2\Gamma m \theta \delta(t_1 - t_2) \right| = \frac{2\Gamma m \theta}{\Gamma^2 m^2} \int_0^t \int_0^{t_2} (1 - e^{-\Gamma t_1})(1 - e^{-\Gamma t_2}) \delta(t_1 - t_2) dt_1 dt_2 = \\ &= \left| \gamma = \Gamma m \right| = \frac{2\theta}{\gamma} \int_0^t (1 - e^{-\Gamma t_2})^2 dt_2 = \left| \begin{cases} \frac{2\theta\gamma}{m^2} \times \frac{t^3}{3} & \Gamma t \ll 1 \\ \frac{2\theta}{\gamma} t & \Gamma t \gg 1 \end{cases} \right| = \\ &= \frac{2\theta}{\gamma} \left[1 - 2 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma t} + \frac{1 - e^{-2\Gamma t}}{2\Gamma t} \right] \end{aligned}$$

Замечание 4.2. С практической точки зрения важно знать дисперсию не:

$$\overline{(x - \bar{x})^2}$$

а дисперсию относительно стартового положения:

$$\overline{(x - x_0)^2}$$

Дальше необходимо пересчитать полученный результат удобной дисперсии:

$$x - x_0 = V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} + \int_0^t \frac{1 - e^{-\Gamma t'}}{\Gamma} \frac{1}{m} F(t - t') dt'$$

$$\overline{(x - x_0)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} + V_0^2 \left(\frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} \right)^2$$

Необходимо собрать полученные результаты:

1) Случай малых времен: $\Gamma t \ll 1$

$$\bar{x} = x_0 + V_0 \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} \simeq x_0 + V_0 t$$

$$\overline{(x - x_0)^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} + V_0^2 \left(\frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma} \right)^2 = \frac{2\Gamma m \theta t^3}{m^2} + V_0^2 t^2 = V_0^2 t^2 \left[1 + \frac{2\theta}{mV_0^2} \frac{\Gamma t}{3} \right] \simeq V_0^2 t^2$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = m\theta(1 - e^{-\Gamma t}) \simeq 2\gamma\theta t$$

2) Случай больших времен: $\Gamma t \gg 1$

$$\bar{x} = x_0 + \frac{V_0}{\Gamma}$$

$$\overline{(x - x_0)^2} = \frac{2\theta}{\gamma} t + \frac{V_0^2}{\Gamma^2} = \frac{2\theta}{\gamma} t \left[1 + \frac{mV_0^2}{2\theta} \frac{1}{\Gamma t} \right] \simeq \frac{2\theta}{\gamma} t$$

$$\overline{p^2} = m\theta$$

Вторая грубая шкала времени

Замечание 4.3. В еще более грубой шкале времени ($t \gg \frac{1}{\Gamma}$), удобно исследовать систему с помощью функции распределения $\rho(t, x)$.

Рассматриваются средние значения более высокого порядка:

$$\overline{(p - \bar{p})^3} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3 e^{-\Gamma(t-t_1)} e^{-\Gamma(t-t_2)} e^{-\Gamma(t-t_3)} \overline{F(t_1)F(t_2)F(t_3)}$$

Подынтегральная функция отлична от нуля, когда все три аргумента (t_1, t_2, t_3) близки друг к другу в масштабах параметра τ . Если любая из t_i выходит за пределы этой области, то получается:

$$\overline{F(t_1)F(t_2)F(t_3)} = \overline{F(t_1)} \cdot \overline{F(t_2)F(t_3)} = 0$$

В полной аналогии с подсчетом дисперсии импульса получается:

$$\overline{(p - \bar{p})^3} = \int_0^t dt_1 e^{-3\Gamma(t-t_1)} C_3 + O(\tau^3) = \frac{1 - e^{-3\Gamma t}}{3\Gamma} \varphi_3 \tau^2 + O(\tau^3)$$

$$C_3 = \varphi_3 \tau^2$$

C_3 — строение.

$$\overline{(p - \bar{p})^3} = \bar{p}^3 - 3\bar{p}^2\bar{p} + 2(\bar{p})^3, \quad \bar{p} = p_0 e^{-\Gamma t}$$

$$\overline{(p - \bar{p})^3} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{p}^3 = 0 \rightarrow C_3 = 0$$

$$\overline{(p - \bar{p})^3} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{\varphi_3 \tau^2}{3\Gamma} \rightarrow C_3 = 0$$

Таким образом, фактор строения обнулится. Рассматривается дисперсия четвертого порядка:

$$\overline{(p - \bar{p})^4} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3 \int_0^t dt_4 \exp \left\{ -\Gamma \sum_{i=1}^4 (t - t_i) \right\} \times \overline{F(t_1)F(t_2)F(t_3)F(t_4)}$$

Подынтегральная функция отлична от нуля, когда четное число временных аргументов разделено временным интервалом $< \tau$.

$$\overline{F(t_1)F(t_2)F(t_3)F(t_4)} = \overline{F(t_1)F(t_2)} \cdot \overline{F(t_3)F(t_4)}$$

$$|t_1 - t_2| < \tau$$

$$|t_3 - t_4| < \tau$$

$$|t_1 - t_3| > \tau$$

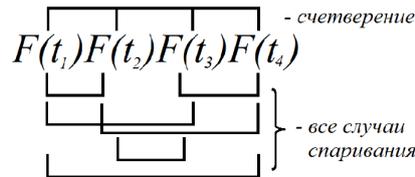


Рис. 4.1. Счетверение

Каждое спаривание дает результат $(\overline{(\Delta p)^2})^2$.

$$\overline{(p - \bar{p})^4} = 3 \left[\overline{(p - \bar{p})^2} \right]^2 + \frac{1 - e^{-4\Gamma\tau}}{4\Gamma} \varphi_4 \tau^3$$

$$C_4 = \varphi_4 \tau^3$$

$$\overline{(p - \bar{p})^4} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{p}^4 = 3(m\theta)^2$$

$$\overline{(p - \bar{p})^4} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow 3 \left[\overline{(\Delta p)^2} \right]^2 + \frac{C_4}{4\Gamma} = 3(m\theta)^2 + \frac{C_4}{4\Gamma}$$

Таким образом, результат счетверения должен быть опущен:

$$C_4 = 0$$

В полной аналогии с исследованием $\overline{(\Delta p)^3}$ и $\overline{(\Delta p)^4}$, помня, что вклады от строения $C_3 = 0$ и счетверения $C_4 = 0$, равны 0, можно получить следующие результаты для координаты ($t \gg \frac{1}{\Gamma}$):

$$\overline{(x - \bar{x})^2} \simeq \frac{2\theta}{\gamma} t \sim t$$

$$\overline{(x - \bar{x})^3} = 0$$

$$\overline{(x - \bar{x})^4} = 3 \left[\overline{(x - \bar{x})^2} \right]^2 \sim t^2$$

Если для полного обобщения ввести в рассмотрение медленно меняющееся внешнее поле $U(\vec{r})$, то для случая $t \gg \frac{1}{\Gamma}$ получится:

$$\bar{x} = x_0 + u_0 t$$

u_0 — скорость установившегося движения, которая определяется вязкостью среды и может быть найдено из очевидного условия:

$$u_0 = \frac{1}{\gamma} F_{\text{внеш}} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x}$$

Лекция 5. Уравнения Смолуховского и Фоккера-Планка

Моменты высших порядков. Функция распределения для одномерного случая

Если для полного обобщения ввести в рассмотрение медленно меняющееся внешнее поле $U(\vec{r})$, то для случая $t \gg \frac{1}{\Gamma}$ получится:

$$\bar{x} = x_0 + u_0 t$$

u_0 — скорость установившегося движения, которая определяется вязкостью среды и может быть найдено из очевидного условия:

$$u_0 = \frac{1}{\gamma} F_{\text{внеш}} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x}$$

Если пересчитать дисперсии относительно среднего положения к дисперсиям относительно стартового положения, получится:

$$\begin{aligned} \overline{(x - \bar{x})^3} = 0 &= \overline{(x - x_0)u_0 t}^3 = \overline{(x - x_0)^3} - 3\overline{(x - x_0)^2}u_0 t + 3\overline{(x - x_0)}(u_0 t)^2 - (u_0 t)^3 \\ \overline{(x - x_0)^4} &= 3\left(\frac{2\theta}{\gamma}\right)t^2 = \overline{(x - x_0)^4} - 4\overline{(x - x_0)^3}(u_0 t) + \\ &+ 6\overline{(x - x_0)^2}(u_0 t)^2 - 4\overline{(x - x_0)}(u_0 t)^3 + (u_0 t)^4 \end{aligned}$$

Для скоростей изменения отклонений $\overline{(x - x_0)^k}$ можно написать следующие выражения:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\overline{x - x_0}}{t} \right|_{t \rightarrow 0} &= u_0 \\ \left. \frac{\overline{(x - x_0)^2}}{t} \right|_{t \rightarrow 0} &= \frac{2\theta}{\gamma} \\ \left. \frac{\overline{(x - x_0)^3}}{t} \right|_{t \rightarrow 0} &\sim t \rightarrow 0 \\ \left. \frac{\overline{(x - x_0)^4}}{t} \right|_{t \rightarrow 0} &\sim t \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Таким образом, если на больших временах перейти к описанию системы с помощью функции распределения $\rho(t, x)$, необходимо потребовать:

- 1) Чтобы $\rho(t, x)$ определяло плотность числа броуновских частиц в окрестности точки x в момент времени t ;

- 2) Чтобы вычисленные уже с ее помощью скорости изменения дисперсий вида $\left. \frac{(x-x_0)^k}{t} \right|_{t \rightarrow 0}$ удовлетворяли выше полученным соотношениям.

Уравнение Смолуховского

Вводится функция распределения $\rho(t_0, x_0 | t, x)$ такая, что $\rho(t_0, x_0 | t, x) dx$ — вероятность обнаружить броуновскую частицу в интервале $(x, x + dx)$ в момент времени t , если она была в точке x_0 в момент времени t_0 .

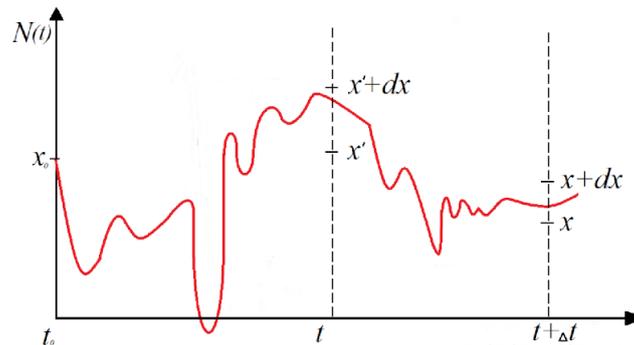


Рис. 5.1. Уравнение Смолуховского

Нормировка записывается следующим образом:

$$\int \rho(t_0, x_0 | t, x) dx = 1 \quad \forall t$$

Начальное условие записывается как:

$$x = x_0 \quad t = t_0$$

$$\rho(t_0, x_0 | t_0, x) = \delta(x - x_0)$$

Свойства рассматриваемых процессов во второй грубой шкале времени ($t \gg \frac{1}{\Gamma}$) следующие:

- 1) В шкале $t \gg \frac{1}{\Gamma}$ такой, что и $dt \gg \frac{1}{\Gamma}$, в любой момент времени распределение по скоростям является максвелловским, а процессы являются безынерционными (то есть можно каждое из промежуточных состояний броуновской частицы взять за начальное, и от этого дальнейшее описание процесса не изменится).
- 2) $\rho(t_0, x_0 | t, x)$ по построению не зависит от событий, которые произошли с броуновской частицей до момента t_0 . То есть все равно, каким способом или путем частица попала в точку x_0 к моменту t_0 .

$\rho(t_0, x_0|t, x)$ также не несет никакой информации о том, каким способом частица за $(t - t_0)$ попала из x_0 в x .

Рассматриваются 2 последовательных интервала времени $(t_0, t$ и $t, t + \Delta t)$ и составляется вероятность обнаружить броуновскую частицу в момент времени $t + \Delta t$ в области $(x, x + dx)$, если в момент времени t_0 она находилась в точке x_0 , а в промежуточный момент времени t — в области $(x', x' + dx')$:

$$[\rho(t_0, x_0|t, x') dx' \rho(t, x'|t + \Delta t, x)] dx$$

Если проинтегрировать по всем промежуточным состояниям x' броуновской частицы в момент времени t , то получится следующая условная вероятность:

$$\rho(t_0, x_0|t + \Delta t, x) = \int \rho(t_0, x_0|t, x') dx' \rho(t, x'|t + \Delta t, x)$$

Таким образом, было получено уравнение Смолуховского.

Замечание 5.1. Если зависимость функции ρ от времени однородна, то есть никакой из моментов времени не выделен, то всегда можно сдвинуть временной аргумент:

$$\rho(t_0, x_0|t, x) = \rho(0, x_0|t - t_0, x) = \rho(x_0|t - t_0, x)$$

Тогда в случае однородной во времени $0 < t < t + \Delta t$ функции ρ можно немного переписать уравнение Смолуховского:

$$\rho(x_0|t + \Delta t, x) = \int \rho(x_0|t, x') \rho(x'|t + \Delta t, x) dx'$$

Уравнение Смолуховского — это нелинейное интегральное уравнение, теорема единственности решения для которого не существует. Более того, оно имеет массу решений не физически осмысленных.

Необходимо показать, что если задать следующие условия:

$$\begin{aligned} \left. \overline{\frac{(x' - x)}{\Delta t}} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} &= \int \frac{x' - x}{\Delta t} \rho(x|x', \Delta t) dx' \Big|_{\Delta t \rightarrow 0} = \left. \frac{M_1}{\Delta t} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} = A(x) = u_0 = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x} \\ \left. \overline{\frac{(x' - x)^2}{2\Delta t}} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} &= \int \frac{(x' - x)^2}{2\Delta t} \rho(x|x', \Delta t) dx' \Big|_{\Delta t \rightarrow 0} = \left. \frac{M_2}{2\Delta t} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} = B(x) = \frac{\theta}{\gamma} \end{aligned}$$

А все скорости изменения моментов более высокого порядка положить равными нулю, то есть:

$$\left. \overline{\frac{(x' - x)^k}{\Delta t}} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} = \int \frac{(x' - x)^k}{\Delta t} \rho(x|x', \Delta t) dx' \Big|_{\Delta t \rightarrow 0} = \left. \frac{M_k}{\Delta t} \right|_{\Delta t \rightarrow 0} = 0 \quad k \geq 3$$

То в уравнении Смолуховского содержится физически осмысленное решение для ρ , относящееся к описанию броуновского движения, которое при заданных граничных условиях и условиях нормировки является единственным.

Пусть $F(x)$ — некоторая произвольная достаточно гладкая функция, для которой существует среднее значение, посчитанное по ρ :

$$\bar{F}(t) = \tilde{f} = \int F(x)\rho(x_0|x,t)dx$$

Необходимо написать по определению производную от \tilde{f} , работая во второй грубой шкале времени, для которой даже интервалы $dt \gg \frac{1}{\Gamma}$:

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} = \int dx' F(x') \frac{\rho(x_0|x',t+\Delta t) - \rho(x_0|x',t)}{\Delta t} \Bigg|_{\Delta t \rightarrow 0}$$

ρ подчиняются уравнению Смолуховского.

$$\rho(x_0|x',t+\Delta t) = \int \rho(x_0|x,t)\rho(x|\Delta t,x')dx$$

Таким образом, получается следующее:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} &= \int \int dx dx' F(x') \rho(x_0|x,t) \frac{\rho(x|\Delta t,x') - \rho(x|0,x')}{\Delta t} \Bigg|_{\Delta t \rightarrow 0} = \\ &= \left| \rho(x|x',\Delta t), \Delta t \rightarrow 0, x' = x, \Delta t = 0 \right| = \\ &= \int dx \rho(x_0|t,x) \\ &= \left\{ \int dx' \left[F(x) + (x' - x)F'(x) + \frac{(x' - x)^2}{2}F''(x) + \dots \right] \times \frac{\rho(x|x',\Delta t) - \rho(x|x',0)}{\Delta t} \Bigg|_{\Delta t \rightarrow 0} \right\} = \\ &= \left| \begin{array}{l} \int \rho(x|x',\Delta t)dx' = \int \rho(x|x',0)dx' = 1 \\ \int (x' - x)^k \rho(x|x',0)dx' = \int (x' - x)^k \delta(x' - x)dx' = 0, \quad k \geq 1 \\ \frac{(x' - x)^k \rho(x|x',\Delta t)}{\Delta t} \quad k = 1, 2 \end{array} \right| = \\ &= \int dx (\rho A F' + \rho B F'') = \left| \rho \Big|_{x=\pm\infty} = 0; \quad \rho \Big|_{x=\pm\infty} = 0; \quad -F \frac{\partial}{\partial x}(\rho A); \quad F \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\rho B) \right| = \\ &= \int F dx \left\{ -\frac{\partial}{\partial x}(\rho A) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\rho B) \right\} \end{aligned}$$

Уравнение Фоккера-Планка

$$\int dx F(x) \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho A) - \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\rho B) \right\} = 0$$

Известно, что:

$$A(x) = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x}$$

$$B(x) = \frac{\theta}{\gamma}$$

Это приводит к уравнению вида:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\theta}{\gamma} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial U}{\partial x} \right)$$

Таким образом, возникло уравнение Фоккера-Планка. Уравнение Фоккера-Планка — это линейное дифференциальное уравнение параболического типа, существование и единственность решения которого обеспечивается при наличии начального условия $\rho(x_0|x, 0) = \delta(x - x_0)$ и соответствующих граничных условий.

Лекция 6. Феноменология уравнения Фоккера-Планка. Введение в теорию случайных процессов

Феноменология уравнения Фоккера-Планка

Работа происходит во второй грубой шкале времени ($t \gg \frac{1}{\Gamma}, dt \gg \frac{1}{\Gamma}$) с функцией ρ . В ней распределение по импульсам в любой момент времени будет являться максвелловским.

$\rho(t, \vec{r})d\vec{r}$ — вероятность обнаружить броуновскую частицу в момент времени t в $(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r})$. Нормировка имеет следующий вид:

$$\int_{(V)} \rho(t, \vec{r})d\vec{r} = 1$$

Броуновские частицы стабильны, то есть они не исчезают и не рождаются вновь (нет их источников). Поэтому $\rho(t, \vec{r})$ удовлетворяют уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\rho \vec{V}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0$$

Пусть поток $\rho \vec{V}$ складывается из двух частей в соответствии с разбиением $\vec{V} = \vec{u}_0 + \vec{u}_{\text{случ}}$.

- 1) За \vec{u}_0 отвечает макроскопическая гидродинамика, описывающая движение тела в вязкой жидкости:

$$F_{\text{внеш}} = \gamma U_0 \quad \gamma = 6\pi R\eta$$

η — коэффициент вязкости.

$$\rho \vec{u}_0 = -\frac{1}{\gamma} \rho \frac{\partial U}{\partial \vec{r}}$$

- 2) $\rho \vec{u}_{\text{случ}}$ отвечает диффузионным процессам:

$$\rho \vec{u}_{\text{случ}} = -D \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}}$$

D — коэффициент диффузии броуновской частицы.

Тогда для потока получится:

$$-\frac{1}{\gamma}\rho \operatorname{grad} U - D \operatorname{grad} \rho = \left| t \rightarrow \infty \right| = 0$$

Случай, когда система достигает своего состояния термодинамического равновесия, которая характеризуется постоянством во времени всех характеристик системы и отсутствием потоков любого типа, то тогда на $t \rightarrow \infty$ поток равен 0. Это приводит к трем уравнениям:

$$\frac{1}{\gamma D} \frac{\partial U}{\partial r^\alpha} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial r^\alpha} = 0$$

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial r^\alpha} = -\frac{\partial}{\partial r^\alpha} \left(\frac{U}{\gamma D} \right), \quad \alpha = x, y, z$$

Решение имеет следующий вид:

$$\rho(\vec{r}) C e^{-\frac{U(r)}{\gamma D}}$$

С другой стороны, идеальный газ броуновских частиц во внешнем поле $U(\vec{r})$ в равновесном случае характеризуется распределением Больцмана:

$$\rho(\vec{r}) = C e^{-\frac{U(r)}{\theta}}$$

Сопоставляя два последних результата:

$$D = \frac{\theta}{\gamma}$$

Возвращаясь к уравнению непрерывности, записывается:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \left(-\frac{1}{\gamma} \rho \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} - D \frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}} \right) = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{1}{\gamma} \operatorname{div}(\rho \vec{\operatorname{grad}} U) - \frac{\theta}{\gamma} \Delta \rho = 0$$

При наличии нормировки начальных и граничных условий полностью определяет решение для ρ . Это решение определяет эволюцию системы на временах $t \gg \frac{1}{\gamma}$.

Броуновское движение. Общие выводы

Эволюцию системы можно представить как последовательность следующих характерных временных этапов:

1)

$$0 < t < \tau$$

τ — время корреляции случайного воздействия $F(t)$. В этой шкале времени (чисто механической) имеется дело с задачей теоретической механики.

2) Первая грубая шкала времени:

$$t \gg \tau$$

Детали воздействия среды на броуновскую частицу уже сглажены, а в качестве динамических переменных уже выступают средние по $\Delta t \gg \tau$, не имеющие прямых аналогов в механике.

$$t \ll \frac{1}{\Gamma} \begin{cases} \overline{(\Delta p)^2} \simeq 2\gamma\theta t \\ \overline{(x-x_0)^2} \simeq V_0^2 t^2 \end{cases}$$

$$t \gg \frac{1}{\Gamma} \begin{cases} \overline{p^2} = m\theta \\ \overline{(x-x_0)^2} \simeq \frac{2\theta}{\gamma} t \end{cases}$$

3) Вторая грубая шкала времени:

$$t \gg \frac{1}{\Gamma}$$

Случайное блуждание броуновской частицы носит характер диффузионного движения. Эволюция описывается функцией ρ , являющейся решением уравнения Фоккера-Планка.

Пример 6.1. Рассматривается свободное одномерное броуновское движение, то есть уравнение Фоккера-Планка в одномерном случае при отсутствии внешнего потенциала. Необходимо убедиться, что схема уравнения Фоккера-Планка с соответствующими дополнительными условиями дает необходимые для $t \gg \frac{1}{\Gamma}$ результаты.

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\theta}{\gamma} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, & \int \rho dx = 1 \\ \rho(0, x) = \delta(x-0), & \rho \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0 \end{cases}$$

Такую схему удобно решать с помощью Фурье-преобразований.

$$\rho(t, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_k(t) e^{ikx} dk$$

$$\begin{cases} \dot{\rho}_k = -\frac{\theta}{\gamma} k^2 \rho_k(t) \\ \rho_k(0) = 1 \end{cases} \rightarrow \rho_k(t) = e^{-\frac{\theta}{\gamma} k^2 t}$$

$$\rho(t, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\theta}{\gamma} k^2 t} e^{ikx} dk$$

Решение записывается следующим образом:

$$\rho(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \left(\frac{\theta}{\gamma}\right) t}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4 \left(\frac{\theta}{\gamma}\right) t}\right\}, \quad \frac{\theta}{\gamma} = D$$

$$\overline{x^2}^{\rho} = 2Dt$$

$$\overline{x^3}^{\rho} = 0$$

$$\overline{x^4}^{\rho} = 12 \left(\frac{\theta}{\gamma}\right)^2 t^2$$

$$\left.\frac{\overline{x^k}}{t}\right|_{t \rightarrow 0} = 0, \quad k \geq 3$$

Таким образом, найденная функция $\rho(t, x)$ действительно принадлежит к требуемому классу функций.

Некоторые аспекты теории случайных процессов. Основные понятия

Пусть величина $x(t)$ характеризует случайный процесс (стохастический процесс), например, отклонение системы от положения равновесия $x = 0$. Случайный процесс — любой протекающий во времени процесс, управляемый вероятностными законами. Случайная функция $x(t)$ — это такая функция, значение которой для любого момента времени — случайная величина, например, движение броуновской частицы.

Предполагается, что случайное отклонение $x(t)$ существует при всех значениях t и условно выглядит так:

Ограничения следующие:

- 1) Не всякому случайному процессу можно поставить в соответствие непрерывную траекторию, но предполагается, что в данном рассмотрении это можно сделать.
- 2)

$$\bar{x} = \text{const} = 0$$

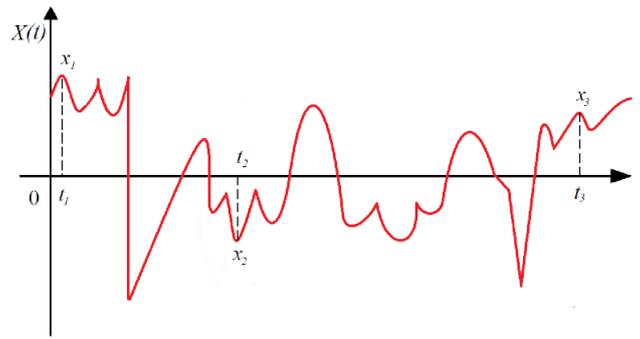


Рис. 6.1. Случайное отклонение

3) Случайный процесс $x(t)$ предполагается финитным.

4) Происходит обозначение:

$$x(t_i) = x_i$$

5) Предполагается, что по отношению к случайному процессу $x(t)$ можно вывести следующие плотности вероятности:

- $W_1(x_1) \equiv W_1(x_1, t_1)$, такую, что $W_1 dx_1$ — вероятность обнаружить величину x в интервале $(x_1, x_1 + dx_1)$ в момент времени $t = t_1$;
- $W_2(x_1, x_2) \equiv W_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$, такую, что $W_2 dx_1 dx_2$ — вероятность обнаружить величину x в интервале $(x_2, x_2 + dx_2)$ в момент времени $t = t_2$;

6) Вводятся условные вероятности: $P_2(x_1|x_2) \equiv P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$, такую, что $P_2 dx_2$ — вероятность обнаружить величину x в интервале $(x_2, x_2 + dx_2)$ в момент времени $t = t_2$, если в момент времени $t = t_1$ случайная величина имела значение x_1 .

7) Из самого смысла введенных величин следует, что они не являются обособленными:

$$\int W_3(x_1, x_2, x_3) dx_2 = W_2(x_1, x_3)$$

$$W_2(x_2, x_3) = W_1(x_2) P_2(x_2|x_3)$$

$$W_3(x_1, x_2, x_3) = W_2(x_1, x_2) P_3(x_1, x_2|x_3)$$

Последние 2 равенства иногда используются как определение условной вероятности.

8) Рассматриваются стационарные случайные процессы, для которых W_n и P_n однородны во времени:

$$W_n(x_1, t_1 + t_0; x_2, t_2 + t_0; \dots; x_n, t_n + t_0) = W_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$$

$$W_1(x|t) = W_1(x, t_1 - t) = W_1(x)$$

$$W_2(x_1, t_1; x_2, t_2) = W_2(x_1, x_2; t_2 - t_1)$$

$$P_2(x_1, t_1 | x_2, t_2) = P_2(x_1, x_2 | t_2 - t_1)$$

Замечание 6.1. Теоретически стационарный случайный процесс реализуется только в равновесных статистических системах.

Стационарный марковский случайный процесс

Если $t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n$, то стационарный случайный процесс называется марковским при условии, что:

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) = P_2(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$$

Лекция 7. Спектральные представления для случайной переменной и корреляционной функции

Стационарный марковский случайный процесс

Если $t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n$, то стационарный случайный процесс называется марковским при условии, что:

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n) = P_2(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$$

Для марковских случайных процессов справедливо:

$$\begin{aligned} W_3(x_1, x_2, x_3) &= W_2(x_1, x_2)P_3(x_1, x_2 | x_3) = W_2(x_1, x_2)P_2(x_2 | x_3) = \\ &= W_1(x_1)P_2(x_1 | x_2)P_2(x_2 | x_3) \end{aligned}$$

$$\int W_3(x_1, x_2, x_3) dx_2 = W_2(x_1, x_3) = W_1(x_1)P_2(x_1 | x_3)$$

После подставления получается:

$$\int W_1(x_1)P_2(x_1 | x_2)P_2(x_2 | x_3) dx_2 = W_1(x_1)P_2(x_1 | x_3)$$

Таким образом, получается следующее уравнение:

$$P_2(x_1 | x_3) = \int P_2(x_1 | x_2)P_2(x_2 | x_3) dx_2$$

Следовательно, получилось уравнение Смолуховского. Это уравнение описывает броуновское движение, когда скорости изменения первого и второго моментов конечны, а скорости изменения всех высших моментов равны 0. В этом случае оно сводится к уравнению Фоккера-Планка.

$$P_2(x_1 | x_3, t_3 - t_1) = \int P_2(x_1 | x_2, t_2 - t_1)P_2(x_2 | x_3, t_3 - t_2) dx_2$$

Вопрос о конкретном виде $W_1(x)$ остается одним из самых важных в теории случайных процессов и, в отличие от статистической механики равновесных систем в данном случае нет какого-либо общего или строго обоснованного вида $W_1(x)$.

Спектральные представления для случайной переменной и корреляционной функции

$$\bar{x}(t) = 0$$

Вводится в рассмотрение спектральное представление $x(t)$:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$
$$x(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{i\omega t - \varepsilon|t|} dt \Bigg|_{\substack{\varepsilon > 0 \\ \varepsilon \rightarrow 0}}$$

Замечание 7.1. ε - процедура обеспечивает математическое существование величины $x(\omega)$, не имеющей убывания на $t \rightarrow \pm\infty$.

Если действительный случайный процесс:

$$x^*(t) = x(t) \Rightarrow x^*(\omega) = x(-\omega)$$

Корреляционная функция стационарного процесса $x(t)$ имеет вид:

$$\overline{x^*(t_0)x(t_0+t)} = F(t_0, t_0+t) = F(t)$$

Корреляционная функция тоже может быть разложена спектрально:

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$
$$F(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) d\omega = \overline{x^2}$$

$J(\omega)$ — спектральная плотность.

$$J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) e^{i\omega t - \varepsilon|t|} dt \Bigg|_{\substack{\varepsilon > 0 \\ \varepsilon \rightarrow 0}}$$

Замечание 7.2. ε - процедура сохранена на тот случай, когда $F(t)$ не имеет быстрого убывания при $t \rightarrow \infty$.

Замечание 7.3. В предложенном варианте спектральных представлений, где:

$$-\infty < \omega < +\infty; -\infty < t < +\infty$$

физические частоты определяются $|\omega|$. В стационарном случае для действительных случайных процессов:

$$F(t) = \overline{x(t_0)x(t_0+t)} = \overline{x(t_0-t)x(t_0)} = F(-t)$$

Условие стационарности, наложенное на корреляционную функцию, называется стационарность в широком смысле:

$$J^*(\omega) = J(-\omega) = J(\omega)$$

Необходимо получить условие стационарности случайного процесса:

$$\begin{aligned} F(t) = \overline{x^*(t_0)x(t+t_0)} &= \left| x^*(t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^*(\omega') e^{i\omega' t_0} d\omega'; x(t+t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(\omega) e^{-i\omega t} e^{-i\omega t_0} d\omega \right| = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{x(\omega)x^*(\omega')} e^{-i(\omega-\omega')t_0} d\omega' \right] e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) e^{-i\omega t} \\ &\quad \overline{x(\omega)x^*(\omega')} = J(\omega)\delta(\omega-\omega') \end{aligned}$$

Таким образом, было получено условие стационарности случайного процесса.

Пример. Спектральная плотность гауссовского стационарного марковского процесса (теорема Дуба)

Необходимо рассчитать спектральную плотность гауссовского стационарного марковского процесса. Чтобы рассчитать спектральную плотность, нужно иметь корреляционную функцию такого процесса. Записывается теорема Дуба:

$$F(t) = F(0)e^{-\Gamma|t|}$$

$$\begin{aligned} J_{\text{Гаусс}}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(0)e^{-\Gamma|t|+i\omega t} dt = \frac{F(0)}{2\pi} \cdot \left[\int_{-\infty}^0 e^{(\Gamma+i\omega)t} dt + \int_0^{+\infty} e^{-(\Gamma-i\omega)t} dt \right] = \\ &= \frac{F(0)\Gamma}{\pi} \cdot \frac{1}{\Gamma^2 + \omega^2} = \left| J(0) = \frac{F(0)}{\pi\Gamma} \right| = J(0) \cdot \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + \omega^2} \end{aligned}$$

Смещение во времени случайной величины. Формула Эйнштейна

Вводится в рассмотрение случайную величину, называемую смещением (или накоплением) $x(t)$:

$$x(t) = \int_0^t x(t') dt'$$

Необходимо рассчитать $\overline{|x|^2}$:

$$\begin{aligned} \overline{x^*(t)x(t)} &= \overline{|x(t)|^2} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \overline{x^*(t_2)x(t_1)} = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 F(t_1 - t_2) = \\ &= \left| F(t_1 - t_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) e^{-\omega(t_1 - t_2)} d\omega \right| = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{\omega(t_1 - t_2)} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \frac{1 - e^{i\omega t}}{-i\omega} \frac{1 - e^{-i\omega t}}{i\omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \frac{2 - (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})}{\omega^2} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) \frac{2(1 - \cos \omega t)}{\omega^2} = \left| J_\Gamma = J(0) \frac{\Gamma^2}{\omega^2 + \Gamma^2}; \hat{x} = \omega t; \alpha = \Gamma t \right| = \\ &= 2J(0)t\pi \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1 - \cos \hat{x}}{\hat{x}^2} \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + \hat{x}^2} d\hat{x} = 2\pi J(0)t \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\hat{x} (1 - \cos \hat{x}) \left(\frac{1}{\hat{x}^2} - \frac{1}{\hat{x}^2 + \alpha^2} \right) = \\ &= 2\pi J(0)t (I_0 - I_\alpha) = \left[I_\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\hat{x} \frac{1 - \cos \hat{x}}{\hat{x}^2 + \alpha^2} \right] = \operatorname{Re} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\hat{x} \frac{1 - e^{i\hat{x}}}{(\hat{x} + i\alpha)(\hat{x} - i\alpha)} = \\ &= \frac{1}{\pi} 2\pi i \frac{1 - e^{-\alpha}}{2i\alpha} = \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha}; \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha} = 1; I_\alpha \Big|_{\alpha \rightarrow 0} \rightarrow I_0 = 1; I_0 = 1; I_\alpha = \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha} \end{aligned}$$

Таким образом, получаются следующие результаты:

$$\overline{|x|^2} = 2\pi J(0)t \left(1 - \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma t} \right)$$

$$F(0) = J(0)\pi\Gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega) d\omega = \overline{\dot{x}^2}$$

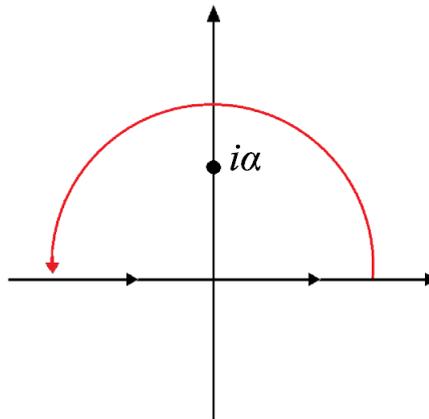


Рис. 7.1. Смещение

Рассматривается случай малых времен: $\Gamma t \ll 1$. Экспонента раскладывается до квадратичных слагаемых:

$$\overline{|x|^2} = \left| \Gamma t \ll 1 \right| \simeq \pi J(0) \Gamma t^2 = \overline{x^2} t^2$$

Получится механический результат.

Лекция 8. Применение метода спектральных разложений к броуновскому трансляционному движению. Формула Найквиста

Смещение во времени случайной величины. Формула Эйнштейна

Были получены следующие результаты:

$$\overline{|x|^2} = 2\pi J(0)t \left(1 - \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma t}\right)$$

$$F(0) = J(0)\pi\Gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} J(\omega)d\omega = \overline{x^2}$$

Рассматривается случай малых времен: $\Gamma t \ll 1$. Экспонента раскладывается до квадратичных слагаемых:

$$\overline{|x|^2} = \left| \Gamma t \ll 1 \right| \simeq \pi J(0)\Gamma t^2 = \overline{x^2} t^2$$

Получится механический результат.

Рассматривается случай больших времен: $\Gamma t \gg 1$.

$$\overline{|x|^2} \approx 2\pi J(0)t \left(1 - \frac{1 - e^{-\Gamma t}}{\Gamma t}\right) \simeq 2\pi J(0)t = \frac{\overline{x^2}}{\Gamma} t$$

Была получена формула Эйнштейна в абстрактных переменных.

Применение метода спектральных разложений к броуновскому трансляционному движению

Применяется метод спектральных разложений к броуновскому движению: τ — время корреляции случайной силы $F(t)$.

$$\tau = \frac{1}{\Gamma'} \ll \tau_M = \frac{1}{\Gamma}$$

τ_M — время установления стационарного случайного процесса для импульса $p(t)$.

Рассматривается временной интервал:

$$\frac{1}{\Gamma'} \ll t \ll \frac{1}{\Gamma}$$

Случайный процесс $F(t)$ на этих временах уже стал стационарным, а случайный процесс $p(t)$ не стал стационарным. Спектральную плотность $F(t)$ необходимо положить в Гауссовской:

$$J_F = J_{\text{Гаусс}} = \frac{F(0)\Gamma'}{\pi(\omega^2 + \Gamma'^2)} = J(0) \frac{\Gamma'^2}{\omega^2 + \Gamma'^2}$$

В данном рассмотрении удобно обозначить:

$$x(t) = F(t)$$

Тогда накоплением является импульс:

$$X(t) = p(t)$$

Происходит обозначение формально:

$$J(0) = \frac{\gamma\theta}{\pi}$$

Тогда абстрактная формула Эйнштейна для больших времен выглядит следующим образом:

$$\overline{p^2(t)} \simeq 2\pi J(0)t = 2\theta\gamma t$$

Замечание 8.1. В данном рассмотрении введенная спектральная плотность J случайного процесса $F(t)$ на этом результате никак не сказывается.

Необходимо выяснить что за γ в формуле $J(0) = \frac{\gamma\theta}{\pi}$ и та же ли это γ , что и в теории броуновского движения. Записывается схема стохастического дифференциального уравнения Ланжевена:

$$\dot{p} + \Gamma p = F(t)$$

Его спектральная форма выглядит следующим образом:

$$-i\omega p(\omega) + \Gamma p(\omega) = F(\omega)$$

$$p(\omega) = \frac{F(\omega)}{\Gamma - i\omega}$$

Рассматривается следующий интервал времени: $t \gg \tau_M = \frac{1}{\Gamma}$

На этом временном интервале случайный процесс $p(t)$ уже стал стационарным. Используется условие стационарности случайного процесса и к p , и к F :

$$\overline{p(\omega)p^*(\omega')} = \frac{1}{\Gamma^2 + \omega^2} \overline{F(\omega)F^*(\omega')} = \frac{J_F(\omega)}{\Gamma^2 + \omega^2} \delta(\omega - \omega') = J_p(\omega) \delta(\omega - \omega')$$

Необходимо подсчитать в этом формализме $\overline{p^2}$:

$$\begin{aligned} \overline{p^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} J_p(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J_F(\omega)}{\Gamma^2 + \omega^2} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{J(0)\Gamma'^2}{\omega^2 + \Gamma'^2} \frac{1}{\Gamma^2 + \omega^2} d\omega = \\ &= \frac{\gamma\theta\Gamma'^2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{(\omega^2 + \Gamma'^2)(\omega^2 + \Gamma^2)} = \frac{\gamma\theta\Gamma'^2}{\pi} 2\pi i \left[\frac{1}{2i\Gamma(\Gamma'^2 - \Gamma^2)} + \frac{1}{2i\Gamma'(\Gamma'^2 - \Gamma^2)} \right] = \\ &= \left| \Gamma' \gg \Gamma \right| \simeq \frac{\gamma\theta\Gamma'^2}{\pi} 2\pi i \frac{1}{2i\Gamma} \cdot \frac{1}{\Gamma'^2} = \frac{\gamma\theta}{\Gamma} = m\Theta \end{aligned}$$

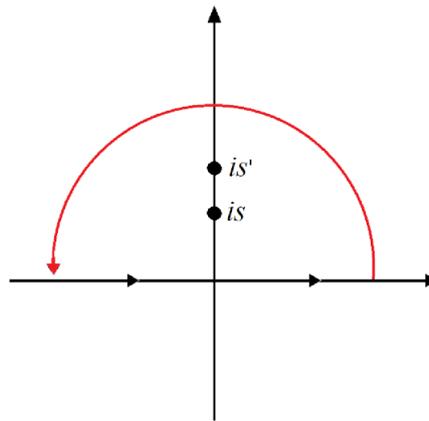


Рис. 8.1. 2 простых полюса

Таким образом:

$$\frac{\gamma\theta}{\Gamma} = m\theta \rightarrow \gamma = m\Gamma = 6\pi R\eta$$

Следовательно, γ — это как раз та самая, что и была в теории броуновского движения, то есть формальное обозначение было правомерным.

Рассматривается следующий временной интервал: $t \gg \frac{1}{\Gamma}$. Для $p(t)$ установился стационарный случайный процесс, соотношение между J известно:

$$\begin{aligned} J_p(\omega) &= \frac{J_F(\omega)}{\Gamma^2 + \omega^2} \\ J_p(0) &= \frac{\gamma\theta}{\pi} \cdot \frac{1}{\Gamma^2} \end{aligned}$$

Тогда если в этом интервале применить формулы, записанные в абстрактных переменных для теории броуновского движения положить $x(t) = p(t)$, то накоплением является:

$$\begin{aligned} X(t) &= mx_{\text{броун}}(t) \\ \overline{x_{\text{броун}}^2} &= \frac{1}{m^2} 2\pi J(0)t = \frac{1}{m^2} 2\pi \frac{\gamma\theta}{\pi} \cdot \frac{1}{\Gamma^2} t = \frac{2\theta}{\gamma} t, \quad t \gg \frac{1}{\Gamma} \end{aligned}$$

Формула Найквиста

Вводится следующее построение:

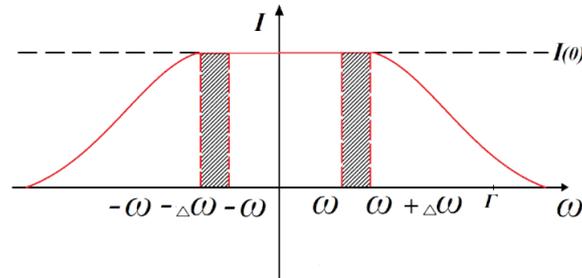


Рис. 8.2. Формула Найквиста

Пусть с помощью некоторого фильтра в спектре $J(\omega)$ сохранена только некоторая полоса частот $(\omega, \omega + \Delta\omega)$ причем в этом диапазоне частот $(\omega_0 \ll \Gamma)J(\omega)$ можно аппроксимировать константой:

$$J(\omega) \approx I(0)$$

$$J_{\Delta\omega}(\omega') = \begin{cases} J(0) & \omega \leq |\omega'| \leq \omega + \Delta\omega \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

Тогда стационарный шум величины x^2 в полосе частот $\Delta\omega$:

$$\begin{aligned} \overline{x^2} \Big|_{\Delta\omega} &= \int_{-\infty}^{+\infty} J_{\Delta\omega}(\omega') d\omega' = 2J(0)\Delta\omega = \\ &= \left| J(0) = \frac{\overline{x^2}}{\pi\Gamma} = \frac{\overline{X^2}}{2\pi t} \right| = \frac{2\overline{x^2}}{\pi\Gamma}\Delta\omega = \frac{\overline{X^2}}{\pi t}\Delta\omega \end{aligned}$$

Таким образом, получается формула Найквиста, записанная в абстрактных переменных

Примеры оценки теплового шума в полосе частот

Пример 8.1. Необходимо оценить тепловой шум случайного воздействия на броуновскую частицу в полосе частот $\Delta\omega$:

$$\begin{aligned} \overline{F(t_1)F(t_2)} &= \varphi(t_1 - t_2), \quad t_1 = t_2 \\ \overline{F^2} &= \left| \overline{F(t_1)F(t_2)} = \varphi(t_1 - t_2) \right| = \varphi(0) = \frac{\varphi}{2} = \left| \frac{\varphi\tau}{2\Gamma} = m\theta \right| = \frac{\gamma\theta}{\tau} \end{aligned}$$

Происходит замена: $\overline{x^2} \rightarrow \overline{F^2}$

$$\overline{F^2} \Big|_{\Delta\omega} = \frac{2}{\pi} \frac{\Delta\omega}{\Gamma'} \overline{F^2} = \frac{2}{\Gamma'} \frac{\Delta\omega}{\pi} \frac{\gamma\theta}{\tau} = 2\gamma\theta \frac{\Delta\omega}{\pi}$$

Пример 8.2. Если теперь применить схему, аналогичную схеме броуновского стохастического движения:

$$\begin{cases} \dot{p} + \Gamma p = F(t), \\ \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\Theta}{2}. \end{cases}$$

К оценке теплового шума ЭДС в цепи, то концептуально получится та же самая задача (того же типа уравнения):

$$\begin{cases} L\dot{i} + Ri = \varepsilon, \\ \frac{L\overline{i^2}}{2} = \frac{\Theta}{2}. \end{cases}$$

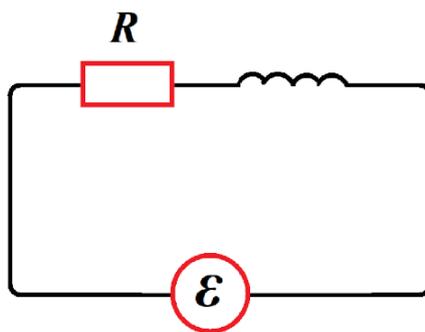


Рис. 8.3. ЭДС в цепи

Если обозначить:

$$p = LI$$

$$m = L$$

$$\Gamma = \frac{R}{L}$$

то одна схема сведется к другой. Таким образом, для шума ЭДС настоящую формулу Найквиста, которую он получил в 1928 г:

$$\overline{\varepsilon^2} \Big|_{\Delta\omega} = 2R\Theta \frac{\Delta\omega}{\pi}$$

Необходимо отметить, что это только один из способов получить привычную формулу Найквиста. Ее можно получить и без формализма спектральных разложений, и без предположения гауссовских случайных процессов.

Лекция 9. Кинетические уравнения в статистической механике. Уравнение Лиувилля

Классическая система N тел. Уравнение Лиувилля

Главный основоположник — Л.Больцман. Чистое механическое состояние системы N частиц представимо в виде точки $x = (q, p)$ в $6N$ -мерном пространстве.

$$x = (q, p) = (\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N; \vec{p}_1 \dots \vec{p}_N)$$

Тогда эволюция системы в $6N$ -мерном пространстве будет отображаться движущейся в фазовом пространстве точкой $x(t)$.

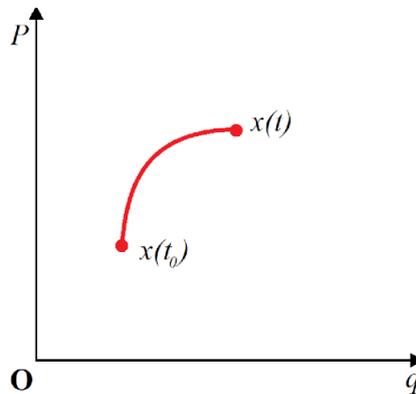


Рис. 9.1. Эволюция системы

Для нахождения этой траектории (каждая точка которой фиксирует q и p) необходимо решить уравнение Гамильтона:

$$\dot{q} = \frac{\partial K}{\partial p}$$
$$\dot{p} = -\frac{\partial K}{\partial q}$$

Важно то, что эта система имеет решение, причем, при заданном $x(t_0) = x_0$, единственное. Это означает, что траектории $x(t, x_0)$, движение точек в фазовом пространстве, соответствующие разным начальным условиям x_0 , не пересекаются ни при каких значениях t .

Ту же систему из N частиц можно описывать смешанными состояниями. В классическом случае системы из N частиц описываются непрерывной функцией $w_N(x, t)$

такой, что $w_N(x, t)dx$ — вероятность обнаружить микроскопическое состояние системы $x = (q, p)$ в $6N$ -мерном бесконечно малом “кубе” $(q, q + dq; p, p + dp)$ в момент времени t . Функция $w_N(q, p, t)$ описывается следующим образом: плотность вероятности w_N для данного момента времени фиксируется в пространстве p, q и плотностью фиктивных точек в этом пространстве (фазовые точки). Фазовые точки описывают набор из одних и тех же систем микроскопически отличных друг от друга, но находящихся в одном и том же макроскопическом состоянии. В таком случае говорят об ансамбле систем, которые тогда получаются представимы в фазовом пространстве. Когда макроскопическая система находится, к примеру, в состоянии термодинамического равновесия, ее макроскопические характеристики остаются во времени постоянными. Но с точки зрения микроскопической ее состояние все время меняется, и не известно в каком именно микроскопическом состоянии система находится в данный момент времени. Таким образом, можно рассмотреть не одну данную конкретную систему, а целый их набор, состоящий из одинаковых копий одной и той же системы, находящихся в одних и тех же макроскопических состояний.

Теорема Лиувилля

Необходимо выяснить к какому уравнению подчиняется $w_N(x, t)$. Если V_0 — объем некоторой фиксированной в момент времени $t_0 = 0$ области G_0 фазового пространства (q, p) , то с течением времени фазовые точки двигаются в соответствии с эволюцией системы так, что объем, занимаемый ими в фазовом пространстве не меняется, то есть:

$$V_0 = \int_{G_0} dx_0 = V = \int_{G_t} dx$$

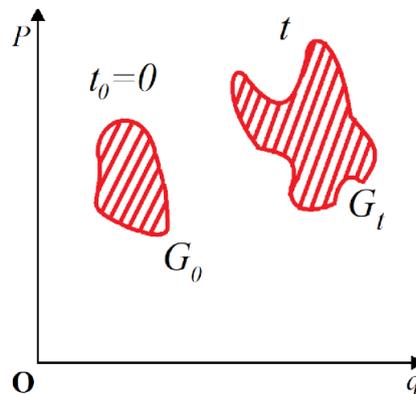


Рис. 9.2. Теорема Лиувилля

Каждая точка $x_0 = (q_0, p_0)$ из области G_0 к моменту времени t переходит в область G_t , причем соответствие $x_0 \rightarrow x(t, x_0)$ однозначно.

В интеграле V можно сделать замену переменных $x \rightarrow x_0$ и тогда нужно найти якобиан перехода:

$$J(t) = \frac{\partial(q, p)}{\partial(q_0, p_0)} = \det \left\| \frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right\|$$

$$J(0) = 1$$

Тогда можно записать интеграл V через исходные переменные:

$$V = \int_{G_0} J(t) dx_0$$

Можно заметить, что достаточно показать, что $J(t) = \text{const}$, причем:

$$J(t) = J(0) = 1$$

Иначе говоря, $\dot{J}(t) = 0$.

Важное свойство якобиана J :

$$\sum_j \frac{\partial J}{\partial \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \cdot \frac{\partial x_k}{\partial x_j^{(0)}} = \delta_{ik} J$$

Если назвать следующую конструкцию $6N$ -мерной дивергенцией скорости \dot{x} :

$$\sum_{i=1}^{6N} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} (\dot{\vec{r}}_i) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} (\dot{\vec{p}}_i) \right) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right) = 0$$

Необходимо посчитать \dot{J} как производную от сложной функции:

$$\dot{J} = \sum_{ij} \frac{\partial J}{\partial \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j^{(0)}} = \sum_{ijk} \frac{\partial J}{\partial \left(\frac{\partial x_i}{\partial x_j^{(0)}} \right)} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x_j^{(0)}} = \sum_{ik} J \delta_{ik} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_k} = J \sum_i \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_i} = 0 = \dot{J}$$

Что и требовалось доказать.

Рассматривается уравнение движения для плотности вероятности w_N . Можно сказать, что в фазовом пространстве живет w_N - жидкость, которая по теореме Лиувилля ведет себя как несжимаемая жидкость. Действительно V совпадает с V_0 исходным, траектории не пересекаются, граничные точки переходят в граничные, внутренние — во внутренние, число точек или количество w_N жидкости в области G_t все время постоянно. $\int_{G_0} w_N(x_0, t_0) dx_0 = \int_{G_t} w_N(x, t) dx = \int_{G_0} w_N(x(t, x_0), t) J dx_0$

Это справедливо для любого t , в том числе и для:

$$t = t_0 + dt$$

$$\int_{G_0} [w_N(x((t, t_0 + dt), x_0), t) - w_N(x_0, t_0)] dx_0 = 0$$

$$\frac{dw_N}{dt} = \frac{dw_N}{dt} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}_i} \dot{\vec{r}}_i + \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_i} \dot{\vec{p}}_i \right) = 0$$

$$\frac{dw_N}{dt} = \frac{dw_N}{dt} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right) = 0$$

$$\frac{dw_N}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}_i} \right) = \{H, w_N\}_{\text{кл}}$$

Таким образом, было получено уравнение Лиувилля.

Альтернативный способ получения уравнения Лиувилля

К уравнению Лиувилля можно придти и из других соображений. Так как фазовые точки не исчезают и не рождаются вновь, то функция w_N в фазовом пространстве должна удовлетворять уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{V}) = 0$$

$$\rho = \rho(x, y, z, t)$$

$$\vec{V} = |v_x; v_y; v_z|$$

Но в $6N$ - мерном пространстве, по аналогии, имеется:

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} + \nabla(w_N \bar{V}) = 0$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_{3N}}, \frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_{3N}} \right)$$

$$\bar{V} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_{3N}; \dot{p}_1, \dots, \dot{p}_{3N})$$

$$-\frac{\partial w_N}{\partial t} = \nabla(\bar{V} w_N) = \sum_{i=3}^{3N} \left[\frac{\partial}{\partial p_i} (\dot{p}_i w_N) + \frac{\partial}{\partial q_i} (\dot{q}_i w_N) \right] = \sum_{i=3}^{3N} \left[\frac{\partial w_N}{\partial p_i} (\dot{p}_i) + \frac{\partial w_N}{\partial q_i} (\dot{q}_i) \right] +$$

$$+ \sum_{i=3}^{3N} w_N \left(\frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} + \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} \right) - \frac{\partial w_N}{\partial t} = \sum_{i=3}^{3N} \left(\frac{\partial w_N}{\partial p_i} (\dot{p}_i) + \frac{\partial w_N}{\partial q_i} (\dot{q}_i) \right)$$

Подставляя в правую часть уравнения Гамильтона, окончательно получается:

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} = \{H; w_N\}_{\text{кл}}$$

Общая структура кинетического уравнения для одночастичной функции распределения

$$H = H_0 + H_1 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

Вводится в рассмотрение одночастичная функция распределения:

$$F(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1) = N \int w_N d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N$$

Условия нормировки выглядят следующим образом:

$$\int F(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{r} d\vec{p} = N$$

$F d\vec{r} d\vec{p}$ — среднее число частиц в фазовом объеме $(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}; \vec{p}, \vec{p} + d\vec{p})$ в момент времени t .

Примеры использования или связь с физическими характеристиками системы:

- $n(t, \vec{r})$ — локальная плотность

$$n(t, \vec{r}) = \int F(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}$$

- $\vec{u}(t, \vec{r})$ — локальная средняя скорость упорядоченного движения частиц.

$$\vec{u}(t, \vec{r}) n(t, \vec{r}) = \int \frac{\vec{p}}{m} F(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}$$

- $\vec{q}(t, \vec{r})$ — локальный поток.

$$\vec{q}(t, \vec{r}) n(t, \vec{r}) = \int \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{p^2}{2m} F(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}$$

Из уравнения Лиувилля можно получить кинетическое уравнение для F без учета какого-либо взаимодействия между частицами вообще.

Лекция 10. Цепочка уравнений Боголюбова. Кинетическое уравнение Власова. Кинетическое уравнение Больцмана

Общая структура кинетического уравнения для одночастичной функции распределения

Из уравнения Лиувилля можно получить кинетическое уравнение для F без учета какого-либо взаимодействия между частицами вообще.

Замечание 10.1. Таким образом, уже одночастичная функция $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ содержит достаточно важную информацию о системе, но не дает способа вычисления внутренней энергии, для которой нужно знать уже двухчастичную функцию:

$$F_2(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2)$$

Можно получить кинетическое уравнение для $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ и выяснить его структуру:

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}} \right) = \{H_0; w_N\} + \{H_1; w_N\}$$

$$H = H_0 + H_1 = \sum_{1 \leq i \leq N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(\vec{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \frac{\partial H_0}{\partial \vec{p}_i} = \frac{\vec{p}_i}{m}; \quad \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{j: i \neq j} \frac{\partial \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)}{\partial \vec{r}_i}$$

При нахождении общей структуры $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ можно опустить слагаемые, связанные с взаимодействием.

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_k} - \frac{\vec{p}_k}{m} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}_k} \right)$$

Дальше необходимо подействовать на каждое слагаемое конструкцией:

$$N \int \dots d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N$$

Тогда получается следующее:

$$N \int \frac{\partial w_N}{\partial t} \dots d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N = \sum_{k=1}^N N \int \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_k} \dots d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N -$$

$$- \sum_{k=1}^N N \int \frac{\partial \vec{p}_k}{m} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_k} \dots d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N$$

Если рассмотреть конструкцию B , то:

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_2^{(x)}}{m} \frac{\partial w_N}{\partial r_2^{(x)}} d\vec{r}_2^{(x)} = - \frac{p_2^{(x)}}{m} w_N \Big|_{r_2^{(x)}=-\infty}^{r_2^{(x)}=+\infty} = 0$$

Если рассмотреть конструкцию A , то:

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial U}{\partial r_2^{(x)}} \frac{\partial w_N}{\partial p_2^{(x)}} d\vec{p}_2^{(x)} = \frac{\partial U}{\partial r_2^{(x)}} w_N \Big|_{p_2^{(x)}=-\infty}^{p_2^{(x)}=+\infty} = 0$$

Тогда получается следующее:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} N \int w_N d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N = \\ & = \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} N \int w_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N - \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} N \int w_N d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N \\ & \frac{\partial F(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = 0 \end{aligned}$$

Таким образом, было получено кинетическое уравнение для $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ без учета взаимодействий. Но идеальных систем в природе не бывает. По общему началу ТД система должна иметь механизм релаксации, чтобы прийти к состоянию ТД равновесия. Поэтому:

$$\frac{\partial F(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{столкн}}$$

Структура интеграла столкновений определяется типом взаимодействия и для разных систем он разный, но необходимо, чтобы интеграл столкновений выражался через F . $\left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)_{\text{столкн}} d\vec{r} d\vec{p}$ — скорость изменения числа частиц в $6N$ - мерном объеме $d\vec{r} d\vec{p}$ за счет взаимодействий частиц. Интеграл столкновений должен иметь структуру, обеспечивающую релаксационную эволюцию системы к состоянию термодинамического равновесия.

Кинетическое уравнение с релаксационным членом

Основные идеи получения:

1) Пусть F_0 равновесная одночастичная функция распределения, то есть:

$$F(t) \Big|_{t \rightarrow \infty} \longrightarrow F_0$$

2) Пусть в конце релаксационного процесса система слабо не равновесна, то есть при $t \gg \tau$:

$$\frac{F(t) - F_0}{F_0} \ll 1$$

Вводится в рассмотрение:

$$F_1(t) \equiv F(t) - F_0$$

3) Остаток релаксационного процесса, не интересуясь тем, как система добралась до этого, характеризуется одним подгоночным параметром — время релаксации τ .

$$F_1(t) \simeq \tilde{F}_1(0) e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Истинные формы эволюции F_1 на самом деле не известны. τ подбирается так, чтобы при $t \ll \tau$ “хвосты” модельной и реальной эволюции максимально совпадали.

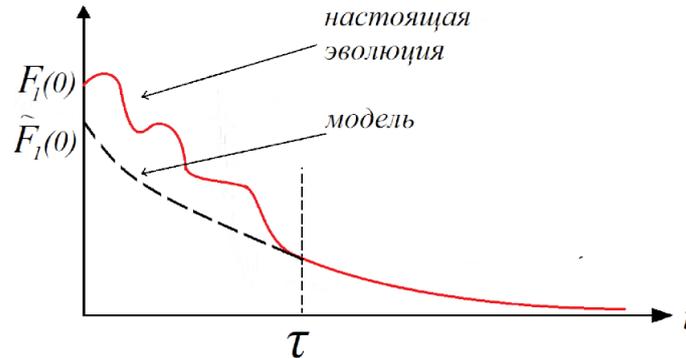


Рис. 10.1. Эволюция F_1

$$\dot{F}_1(t) = -\frac{1}{\tau} F_1(t) = -\frac{F(t) - F_0}{\tau}$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = -\frac{F - F_0}{\tau}$$

Таким образом, получается кинетическое уравнение с релаксационным членом. Экспоненциальный характер эволюции абсолютно модельный (не обоснован). По построению оно описывает состояние, близкое к равновесию. Хотя оно и полу феноменологическое, но зато достаточно простое, и оттого распространенное. Рассматривается случай, когда явная зависимость $F(t)$ пропала: $F \neq F(t)$.

$$0 + \left(\frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F(\vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}} \right) = - \frac{F(\vec{r}, \vec{p}) - F_0}{\tau}$$

Решение кинетического уравнения с релаксационным членом выглядит следующим образом:

$$F(\vec{r}, \vec{p}) = F_0(\vec{r}, \vec{p}) - \tau \left(\frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}}(\vec{r}, \vec{p}) - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}}(\vec{r}, \vec{p}) \right)$$

$$F_0(\vec{r}, \vec{p}) = n(\vec{r}) \left(\frac{1}{2m\theta(\vec{r})} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left\{ - \frac{(\vec{p} - m\vec{u}(\vec{r}))^2}{2m\theta(\vec{r})} \right\}$$

Цепочка уравнений Боголюбова для кинетических функций распределения

Следуя Боголюбову, вводится последовательность функций распределения:

$$F_1(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1) = V \int w_N \frac{d\vec{q}d\vec{p}}{d\vec{r}_1 d\vec{p}_1}$$

$$F_2(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2) = V^2 \int w_N \frac{d\vec{q}d\vec{p}}{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{p}_1, d\vec{p}_2}$$

Оставляются в рассуждениях слагаемые, связанные со взаимодействием:

$$\frac{\partial w_N}{\partial t} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_k} - \frac{\vec{p}_k}{m} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{r}_k} \right) + \sum_{s=1}^N \sum_{j:i \neq j} \frac{\partial \Phi_{sj}}{\partial \vec{r}_s} \frac{\partial w_N}{\partial \vec{p}_s}$$

$$\Phi_{sj} = \Phi(|\vec{r}_s - \vec{r}_j|)$$

Необходимо подействовать на обе части конструкцией:

$$V \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_n$$

$$\frac{\partial F_1(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1)}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}_1} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}_1} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}_1} = \frac{1}{V} \sum_{j \geq 2} \int \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \vec{r}_1} d\vec{r}_j d\vec{p}_j \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} \left(V^2 \left(w_N \frac{d\vec{q}d\vec{p}}{d\vec{r}_1 d\vec{p}_1 d\vec{r}_j d\vec{p}_j} \right) \right)$$

$$\frac{N-1}{V} \rightarrow \frac{N(1 - \frac{1}{N})}{V}$$

Таким образом, получается первое уравнение цепочки Боголюбова:

$$\frac{\partial F_1(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{V} \int \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_2(t, \vec{r}, \vec{r}', \vec{p}, \vec{p}')}{\partial \vec{p}} d\vec{r}' d\vec{p}'$$

Кинетическое уравнение Власова

Рассматривается случай дальнего действия на примере системы с кулоновским потенциалом:

$$\Phi(R) = \pm \frac{e^2}{R}$$

Для данного вида потенциала частица будет взаимодействовать со всеми частицами системы, то есть все время будет находиться в силовом поле большого числа частиц. Радиус взаимодействия: $R_0 = \infty$.

Систему считается электрически нейтральной. Все частицы действуют на некоторую выбранную, создавая в точке ее нахождения некоторое общее поле. При этом вклад в это поле от $(N-2)$ частиц много больше, чем от некоторых двух выделенных. То есть две частицы не “слышат” друг друга никогда:

$$F_2 = F_1 \cdot F_1 + G$$

G — корреляция. Таким образом, концепция главенствующего значения самосогласованного поля означает, что вклады в ТД характеристики такой системы, связанные с учетом индивидуальных корреляций, пренебрежимо малы по сравнению с эффектами, обусловленными главным слагаемым:

$$F_2(t, \vec{r}, \vec{r}', \vec{p}, \vec{p}') = F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) \cdot F_1(t, \vec{r}', \vec{p}')$$

Это выражение подставляется в правую часть уравнения Боголюбова:

$$\Phi_1(F_2) = \frac{1}{v} \int d\vec{r}' d\vec{p}' \cdot \frac{\partial \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|)}{\partial \vec{r}} F_1(t, \vec{r}', \vec{p}') \frac{\partial F_1(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (\tilde{U}(t, \vec{r})) \frac{\partial F_1(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial \vec{p}}$$

$$\tilde{U}(t, \vec{r}) = \frac{1}{v} \int \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) F_1(t, \vec{r}', \vec{p}') d\vec{r}' d\vec{p}'$$

Записывается плотность числа частиц в окрестности точки \vec{r}' :

$$\frac{N}{V} \int F_1(t, \vec{r}', \vec{p}') d\vec{p}' = n(t, \vec{r}')$$

Тогда:

$$\tilde{U}(t, \vec{r}) = \int n(t, \vec{r}') \Phi(|\vec{r} - \vec{r}'|) d\vec{r}'$$

Таким образом, $\tilde{U}(t, \vec{r})$ — потенциал того самосогласованного поля, которое создается всеми частицами, распределенными в пространстве с плотностью $n(t, \vec{r}')$ в точке \vec{r}' в момент времени t . Таким образом уравнение Власова записывается следующим образом:

$$\frac{\partial F_1(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} [U + \tilde{U}(t, \vec{r})] \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}} = 0$$

Замечание 10.2. Уравнение условно, так как всегда существует два сорта зарядов, а тогда имеется дело с системой уравнений Власова.

Замечание 10.3. В уравнении не учитываются столкновения, то есть рассматривается как бы “бестолкновительная” плазма в смысле ее разреженности.

Кинетическое уравнение Больцмана

Рассматривается случай короткодействия.

- 1) Система состоит из одинаковых нейтральных частиц;
- 2) Главный механизм, который будет учитываться при эволюции системы — соударение частиц друг с другом.

Цель — замкнуть уравнения Боголюбова на F_1 справа.

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}} = \Phi(\vec{r}, \vec{p} | F_2)$$

Допущения:

- 1) Учитываются только парные столкновения. Пренебрежение тройными столкновениями означает, что рассматриваются в этом смысле разреженные газы.
- 2) В такой системе:

$$R_0 \ll a = \sqrt[3]{\frac{V}{n}}$$

R_0 — радиус взаимодействия. a — среднее расстояние между частицами.

- 3) Таким образом, имеется дело с системой с короткодействием, то есть частицы двигаются как свободные, и эволюция системы на языке эволюции F_1 будет определяться парными столкновениями.

Если оценить число парных соударений в 1см^3 за 1 с при нормальных условиях, то их будет $\sim 10^{29}$. В молекулярных масштабах за $\tau_{\text{св.пр.}} \sim 10^{-10}$ с в объеме с $\lambda \sim \lambda_{\text{св.пр.}}$ таких столкновений будет $\sim 1^4$. Следовательно, процесс парных соударений — массовый.

На интервалах $\Delta\tau \sim \tau_{\text{столкн.}}$ имеется дело с механической задачей о столкновениях. Но на этих временных масштабах характеристики сталкивающихся частиц, живущие в F_2 меняются сильно, а на F_1 это влияние уже не сильно сказывается. Оно

осуществляется через F_2 и потенциал взаимодействия Φ , поэтому резкое изменение F_2 из-за столкновения частиц друг с другом на F_1 распределяется сглаженно и $F - 1$ меняется мало.

На этом основании Боголюбов выдвинул предположение: $t \sim \tau_{\text{столкн.}}$. При переходе от механики к кинетическому этапу эволюции, на котором F_1 управляет эволюцией системы, все $F_3(t, x_1, \dots, x_3) (x := (\vec{r}_i, \vec{p}_i), s \geq 2)$ начинают зависеть от времени через зависимость от F_1 , то есть:

$$F_2 = F_2(x_1, x_2 | F_1)$$
$$\Phi(x | F_2) = \Phi(x | F_2(x, x' | F_1)) = \check{\Phi}(x | F_1)$$

Таким образом, на кинетической стадии эволюции учет парных столкновений, происходящих постоянно и в массивном количестве, можно производить на уровне стационарного явления, в котором $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ имеет смысл плотности числа частиц в пространстве (\vec{r}, \vec{p}) .

Лекция 11. Лемма Больцмана и ее следствия.

Линеаризованное уравнение Больцмана

Кинетическое уравнение Больцмана

Необходимо получить конкретный вид интеграла столкновений Больцмана. Импульсы до столкновения: \vec{p}, \vec{p}_1 . Импульс после столкновения: \vec{p}', \vec{p}'_1 . При переходе от переменных $(\vec{p}', \vec{p}'_1) \rightarrow (\vec{p}, \vec{p}_1)$, которые связаны друг с другом решением задачи двух тел, можно показать, что:

$$d\vec{p}' d\vec{p}'_1 = d\vec{p} d\vec{p}_1$$

До столкновения:

$$F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = f$$

$$F_1(t, \vec{r}, \vec{p}_1) = f_1$$

После столкновения:

$$F_1(t, \vec{r}, \vec{p}') = f'$$

$$F_1(t, \vec{r}, \vec{p}'_1) = f'_1$$

Рассматривается малая область шестимерного пространства:

$$dx(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r}; \vec{p}, \vec{p} + d\vec{p})$$

В этом объеме dx в момент времени t находится $nf d\vec{r} d\vec{p}$. Выбирается одна из этих частиц и происходит переход в систему отчета, двигающаяся со скоростью $\frac{\vec{p}}{m}$, рисуется сфера с радиусом $2r_0$ и выбирается ось z вдоль вектора:

$$\frac{\vec{p}_1 - p}{m} = \vec{u} = (0, 0, u)$$

Вводится также в рассмотрение угол рассеяния ψ . Тогда среднее число частиц с импульсами от $(\vec{p}_1, \vec{p}_1 + d\vec{p}_1)$, падающих за единицу времени на $d\omega$:

$$d\omega n f_1 d\vec{p}_1$$

Среднее число столкновений всех частиц из элемента dx с налетающими частицами, у которых импульс от $(\vec{p}_1, \vec{p}_1 + d\vec{p}_1)$:

$$(d\omega n f_1 d\vec{p}_1)(n f d\vec{r} d\vec{p})$$

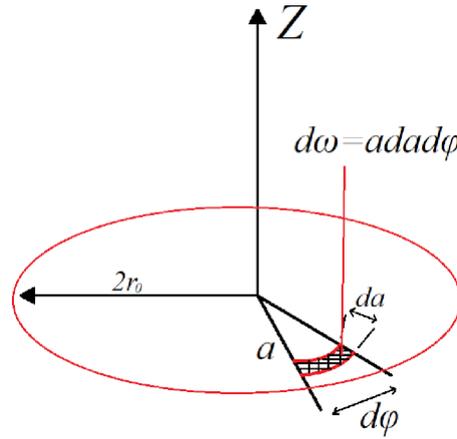


Рис. 11.1. Вспомогательное построение

Так как в результате каждого такого столкновения из элемента dx частица выбивается, то здесь, по сути, записана скорость выбивания числа частиц из dx , происходящего за счет столкновения.

Обратный процесс:

$$(d\omega n f'_1 d\vec{p}'_1)(n f' d\vec{p}' d\vec{r})$$

Обратный процесс является скоростью увеличения числа частиц. Подводя баланс входящих и выходящих частиц за единицу времени и интегрируя по всем значениям импульса \vec{p}_1 и параметром рассеяния, получится:

$$\frac{\partial(nf)}{\partial t} d\vec{p} d\vec{r} = \left[\int n^2 (f' f'_1 - f f_1) u d\omega d\vec{p}_1 \right] d\vec{p} d\vec{r}$$

Следовательно, в пространственно однородном случае получается формула для интеграла столкновений Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{столкн.}} = \frac{1}{v} \int (f' f'_1 - f f_1) u d\omega d\vec{p}_1$$

Замечание 11.1. Если система пространственно неоднородна, то такое же выражение написать невозможно, однако интерес представляет один важный частный случай, когда это выражение применить можно — случай пространственной неоднородности крупного масштаба с точки зрения молекулярных масштабов, то есть когда все величины в уравнении — плавные функции \vec{r} в масштабе $\lambda_{\text{св.нр.}}$. Тогда область $\sim \lambda_{\text{св.нр.}}^3$, в которой происходит столкновение двух частиц, будет представлять собой пространственно однородную систему. И в этом случае интеграл столкновений сохраняет свою форму, а значит можно записать:

$$\frac{\partial f(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{1}{v} \int (f' f'_1 - f f_1) u d\omega d\vec{p}_1$$

Лемма Больцмана

Рассматривается интеграл, являющийся сверткой некоторой функции $\Phi(\vec{p})$ с интегралом столкновений Больцмана:

$$I = \int \Phi(\vec{p}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} d\vec{p} = \int \Phi(\vec{p}) \left[f(\vec{p}'_1) f(\vec{p}') - f(\vec{p}_1) f(\vec{p}) \right] u d\omega d\vec{p} d\vec{p}_1$$

Этот же интеграл записывается еще в четырех видах:

- 1) Частицы меняются местами: $\vec{p} \rightarrow \vec{p}_1$:

$$I = \int \Phi(\vec{p}_1) \left[f(\vec{p}'_1) f(\vec{p}') - f(\vec{p}_1) f(\vec{p}) \right] u d\omega d\vec{p} d\vec{p}_1$$

- 2) Происходит интегрирование по штрихованной переменной в исходном интеграле:

$$I = \int \Phi(\vec{p}) \left[f(\vec{p}'_1) f(\vec{p}') - f(\vec{p}_1) f(\vec{p}) \right] u d\omega d\vec{p}' d\vec{p}_1$$

- 3) Во втором пункте происходит перестановка штрихованных переменных с нештрихованными:

$$I = - \int \Phi(\vec{p}') \left[f(\vec{p}'_1) f(\vec{p}') - f(\vec{p}_1) f(\vec{p}) \right] u d\omega d\vec{p} d\vec{p}_1$$

- 4) Меняя последний раз местами $\vec{p} \rightarrow \vec{p}_1$:

$$I = \int \Phi(\vec{p}) \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{ст}} d\vec{p} = \frac{1}{4}$$

Если сложить исходный интеграл, первый, третий и четвертый, то получится следующее:

$$I = \frac{1}{4} \int (\Phi + \Phi_1 - \Phi' - \Phi'_1) \cdot (f' f'_1 - f f_1) u d\omega d\vec{p} d\vec{p}_1$$

H - теорема Больцмана

Вводится безразмерная функция распределения:

$$\tilde{f} = (2\pi\hbar)^3 \cdot \frac{1}{v} f$$

Уравнение Больцмана для такой \tilde{f} :

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vec{p}} = \int (\tilde{f}' \tilde{f}'_1 - \tilde{f}_1 \tilde{f}) \cdot \frac{u d\omega d\vec{p}_1}{(2\pi\hbar)^3}$$

Определяется безразмерная H функцию Больцмана, зависящую только от времени:

$$H(t) = \int \tilde{f}(t, \vec{r}, \vec{p}) \ln \tilde{f}(t, \vec{r}, \vec{p}) \cdot \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3}$$

Исследуемый знак производной по времени H - функции Больцмана:

$$\dot{H} = \int \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \ln \tilde{f} \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3} + \int \frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\dot{H} = \int \ln \tilde{f} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right) \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\frac{dH}{dt} = \int \left[\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{\text{ст}} + \left(\frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vec{p}} - \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vec{r}} \right) \right] \ln \tilde{f} \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\int \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \ln \tilde{f} dx = \int \frac{\partial}{\partial x} (\tilde{f} \ln \tilde{f}) dx - \int \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} dx = [\tilde{f} \ln \tilde{f} - \tilde{f}] \Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} = 0$$

x — любая из компонент \vec{p} или \vec{r} . Тогда можно определить лемму Больцмана:

$$\dot{H} = \int \ln \tilde{f} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial t} \right)_{\text{ст. Больцмана}} \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^3} = \left| \ln \tilde{f} + \ln \tilde{f}_1 - \ln \tilde{f}' - \ln \tilde{f}'_1 = -\ln \left[\frac{\tilde{f}' \tilde{f}'_1}{\tilde{f} \tilde{f}_1} \right] + \text{Лемма} \right| =$$

$$-\frac{1}{4} \int \ln \frac{F' F'_1}{F F_1} (F' F'_1 - F F_1) \frac{ud\omega d\vec{p}_1 d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^6}$$

Вспоминая, что $(a - b) \ln \frac{a}{b} \geq 0$, получается фундаментальное утверждение H - теоремы Больцмана:

$$\frac{dK}{dt} \leq 0$$

Таким образом, уравнение Больцмана описывает необратимую во времени эволюцию системы.

Необходимо определить, какая \tilde{f} соответствует значению $H(\infty) = H_0$, то есть когда $\dot{H} = 0$:

$$\ln \frac{F' F'_1}{F F_1} (F' F'_1) = 0$$

Необходимо заметить что H , удовлетворяющая этому уравнению обращает в 0 интеграл столкновений Больцмана.

$$\ln F(\vec{r}, \vec{p}) + \ln F(\vec{r}, \vec{p}_1) = \ln F(\vec{r}, \vec{p}') + \ln F(\vec{r}, \vec{p}'_1)$$

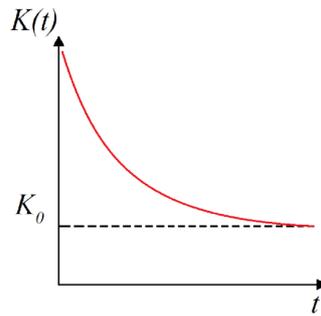


Рис. 11.2. Уравнение Больцмана

При упругих столкновениях сохраняется величина, не зависящая от импульса, сам импульс (ЗСИ) и квадрат импульса (ЗСЭ). Поэтому решение можно искать в виде:

$$\ln F = \alpha + \vec{\beta} \vec{p} + \gamma p^2$$

$$F(\vec{r}, \vec{p}) = e^{\alpha + \vec{\beta} \vec{p} + \gamma p^2} = n(\vec{r}) \frac{(2\pi\hbar)^3}{2\pi m \theta(\vec{r})^{\frac{3}{2}}} \exp \left\{ -\frac{(\vec{p} - \vec{p}_0(\vec{r}))^2}{2m\theta(\vec{r})} \right\}$$

α, β и γ находились из условий:

$$n(\vec{r}) = \int F(\vec{r}, \vec{p}) \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3}$$

$$\frac{\vec{p}_0(\vec{r})}{m} = \overline{\left(\frac{\vec{p}}{m}\right)} = \vec{u}$$

$$\frac{3}{2}\theta(\vec{r}) = \frac{\overline{(\vec{p} - \vec{p}_0(\vec{r}))^2}}{2m}$$

Локальные распределения Максвелла обращает в нуль интеграл столкновений Больцмана и определяет предельное значение H_0 .

Замечание 11.2. Если рассматривать пространственно однородную систему, то есть:

$$U(\vec{r}) = 0$$

$$\theta(\vec{r}) = \theta$$

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{v}$$

$$\vec{p}_0 = 0$$

то $-H_0 \simeq S_0$, где S_0 — энтропия идеального классического газа. Так получилось потому, что ранее везде предполагалось, что $F_2 = F_1 \cdot F_1$, то есть не учитывались корреляции.

Линеаризованное уравнение Больцмана

Рассматривается пространственно однородный случай, для которого интеграл Больцмана был записан, введя для рассмотрения одночастичную функцию нормированную на число частиц:

$$F(t, \vec{r}, \vec{p}) = nf(t, \vec{r}, \vec{p})$$

Получается следующее:

$$\frac{dF}{dt} = \int (F'F'_1 - FF_1) u d\omega d\vec{p}_1$$

Если считать, что F близка к локальному равновесию, то есть:

$$F(t, \vec{r}, \vec{p}) = \tilde{F}(\vec{r}, \vec{p})(1 + \chi(t, \vec{r}, \vec{p}))$$

Подставляя такой вид $F(t, \vec{r}, \vec{p})$ в уравнение Больцмана и выбрасывая квадратичные по χ слагаемые, а также используя соотношение $\tilde{F}\tilde{F}_1 = \tilde{F}'\tilde{F}'_1$, получается линеаризованное уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \int \tilde{F}_1 [\chi'_1 + \chi' - \chi_1 - \chi] u d\omega d\vec{p}$$

Если убрать зависимость времени:

$$\chi(t, \vec{r}, \vec{p}) = e^{-vt} h(\vec{r}, \vec{p})$$

То получится безвременное линейное интегральное уравнение:

$$-vh = \int \tilde{F}_1 (h'_1 + h' - h_1 - h) u d\omega d\vec{p}_1$$

$-v$ может быть протрактовано как собственное значение интегрального оператора, стоящего справа. Необходимо показать, что все $v \geq 0$, а это будет означать, что $\chi(t, \vec{r}, \vec{p})$ релаксирует к нулю. Ввиду сходимости интегралов по \vec{p} и \vec{p}_1 , которая обеспечивается максвелловскими распределениями, живущими в \tilde{F} , $v < v_{max}$:

$$\chi_v(t, \vec{p}) = e^{-vt} h(\vec{p}), \quad v \geq 0$$

v образует ограниченный спектр обратных времен релаксаций:

Дискретность этого спектра не доказана, поэтому это мечта. Общее решение для $\chi(t, \vec{p})$ имеет вид:

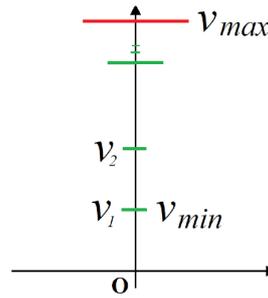


Рис. 11.3. Спектр обратных времен релаксаций

$$\chi(t, \vec{p}) = \sum_n C_n e^{-v_n t} h_n(\vec{p})$$

Если в этой сумме сохранить только одно, самое долгоживущее слагаемое, то получится уравнение с релаксационным членом:

$$\frac{\partial F}{\partial t} \simeq \frac{\partial}{\partial t} [\tilde{F}(1 + \chi)] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\tilde{F} \left(1 + h e^{-\frac{t}{\tau'}} \right) \right] = \tilde{F} h \left(-\frac{1}{\tau'} \right) e^{-\frac{t}{\tau'}} = -\frac{F - \tilde{F}}{\tau'}$$

Время релаксации τ' к локальному распределению Максвелла оказывается $\tau' \sim \tau_{\text{св.пр.}}$.

Итоговые выводы. Парадокс Лошмидта

Было получено $-H_0 \simeq S_0$, так как было принято $F_2 = F_1 \cdot F_1$. Привязка предельной функции H_0 к ТД энтропии системы обычно служит основанием для объявления всей функции $H(t)$ минус - энтропией неравновесной системы. Но такое обобщение вообще не имеет смысла и строго нигде не доказано. Отсутствие парных корреляций ($F_2 = F_1 \cdot F_1$) называется гипотезой молекулярного хаоса. По мере приближения неравновесной функции F_1 к локальному максвелловскому распределению роль интеграла Столкновений ослабевает, и образование $F_{\text{лок}}$ знаменует тот этап эволюции системы, когда успели сформироваться ТД параметры.

Парадокс Лошмидта

Если в момент t_0 поменять все скорости частиц:

$$\vec{v}_i t_0 - \vec{v}_i$$

То есть $\dot{H} \leq 0$ не является фундаментальным результатом.

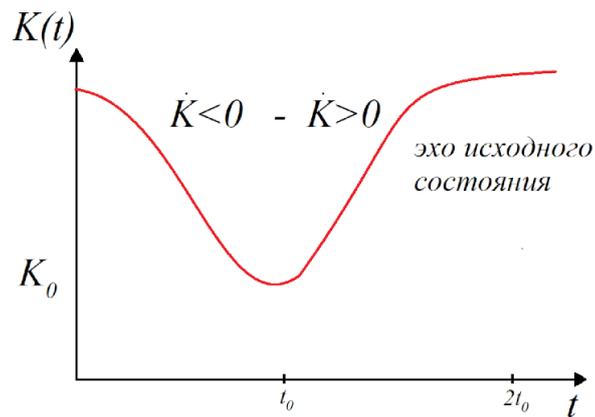


Рис. 11.4. Парадокс Лошмидта

После того, как Больцман не нашелся, что ответить господину Лошмидту, у него начала развиваться фобия чтения собственных лекций из-за неуверенности в корректности своих открытий. На этой почве, спустя некоторое время, Людвиг Больцман скончался.

Лекция №12. Связь корреляционной функции и уравнения Ван-дер-Ваальса

Свободная энергия газа. Расчёт удельной свободной энергии

Выведем связь корреляционной функции и уравнения Ван-дер-Ваальса. Имеем для свободной энергии

$$F(\theta, V, N) - F_0(\theta, V, N) = \Delta F(\theta, V, N)$$

здесь $F_0(\theta, V, N)$ – свободная энергия идеального газа, $F(\theta, V, N)$ – интересующая нас свободная энергия газа. Величина $\Delta F(\theta, V, N)$ ранее была получена и имеет вид

$$\Delta F(\theta, V, N) = \frac{N}{2v} \int d\vec{R} \Phi(R) \int_0^1 dg F_2^{(g)}(R), \quad F_2^{(0)}(R) = e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}}$$

здесь $F_2^{(g)}(R)$ – корреляционная функция, построенная на основе гамильтониана с параметром взаимодействия, $F_2^{(0)}(R)$ – парная корреляционная функция в первом приближении.

Для расчёта величины $\Delta f(\theta, v) = f(\theta, v) - f_0(\theta, v)$ (здесь f – удельная свободная энергия) необходимо произвести дополнительные интегрирования по параметру включения взаимодействия g

$$\Delta f(\theta, v) = \frac{\Delta F}{N} = \frac{1}{2v} \int_0^\infty \Phi(R) \int_0^1 e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} dg 4\pi R^2 dR + \frac{1}{v^2}$$

Рассмотрим выделенный интеграл обособленно

$$\int_0^1 e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} dg = -\frac{\theta}{\Phi} \left(e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} \Big|_0^1 \right) = -\frac{\theta}{\Phi} \left[e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right],$$

тогда с учётом данного результата, а также вида функции Майера $\tilde{f}(R)$, получаем для $\Delta f(\theta, v)$

$$\begin{aligned} \Delta f(\theta, v) &= -\frac{\theta}{2v} \int_0^\infty \left[e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right] 4\pi R^2 dR + \frac{1}{v^2} \dots = \left| \tilde{f}(R) = e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right| \\ &= -\frac{\theta}{2v} \int_0^\infty \tilde{f}(R) 4\pi R^2 dR + \frac{1}{v^2} \dots \end{aligned}$$

Термическое уравнение состояния. Модельный потенциал

Чтобы добраться до уравнения термического состояния, вспомним формулу из термодинамических потенциалов:

$$p(\theta, v) = -\frac{\partial f(\theta, v)}{\partial v}, \quad f(\theta, v) = f_0(\theta, v) + \Delta f(\theta, v)$$

Домножим обе части уравнения на $\frac{v}{\theta}$ и подставим $f(\theta, v)$ с учётом результата для удельной свободной энергии идеального газа $f_0(\theta, v)$ из предыдущих лекций:

$$\frac{pv}{\theta} = -\frac{v}{\theta} \frac{\partial}{\partial v} (f_0(\theta, v) + \Delta f(\theta, v))$$

$$\frac{pv}{\theta} = -\frac{v}{\theta} \frac{\partial}{\partial v} \left[-\theta \ln \left(\frac{(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} ve \right) - \frac{\theta}{2v} \int_0^\infty \tilde{f}(R) 4\pi R^2 dR \right]$$

$$\frac{pv}{\theta} = 1 - \frac{1}{2v} \int_0^\infty \tilde{f}(R) 4\pi R^2 dR + \dots = 1 - \frac{1}{2v} \beta_1 + \dots, \quad \beta_1 = \int_0^\infty \tilde{f}(R) 4\pi R^2 dR$$

здесь величина β_1 определяет первую вириальную поправку к уравнению состояния идеального газа и называется *первым неприводимым интегралом Майера*.

Рассмотрим упрощенную модель потенциал, построим его в следующем виде:

$$\Phi(R) = \begin{cases} +\infty, & 0 < R < d_0 \\ -U(R) < 0, & d_0 < R < +\infty \end{cases}$$

здесь d_0 – диаметр частицы.

Поправка для модельного потенциала. Сравнение уравнений и выводы

Выполним расчёт значения поправки β_1 для введенного потенциала, зная, что функция Майера $\tilde{f}(R) = e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} - 1$.

$$\beta_1 = \int_0^{d_0} e^{-\frac{\Phi(\vec{R})}{\theta}} - 1 \Big|_{\Phi(R)=+\infty} 4\pi R^2 dR + \int_{d_0}^\infty e^{-\frac{-U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \Big|_{\Phi(R)=+\infty} 4\pi R^2 dR$$

$$\beta_1 = -4\pi \frac{R^3}{3} \Big|_0^{d_0} + 4\pi \int_{d_0}^\infty \left(e^{\frac{U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right) R^2 dR$$

$$\beta_1 = -4\pi \frac{d_0^3}{3} + 4\pi \int_{d_0}^{\infty} \left(e^{\frac{U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right) R^2 dR$$

Подставляя данный результат в уравнение состояния с точностью до первой вириальной поправки, получим

$$\frac{pv}{\theta} = 1 + \frac{1}{v} \frac{2\pi d_0^3}{3} - \frac{2\pi}{v} \int_{d_0}^{\infty} \left(e^{\frac{U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right) R^2 dR$$

Полученный результат необходимо сравнить с уравнением Ван-дер-Ваальса, имеющего следующий вид в вириальном разложении с точностью до членов порядка $\frac{1}{v^2}$

$$p = \frac{\theta}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad \Big| \times \frac{v}{\theta}$$

$$\left(\frac{pv}{\theta} \right)_{\text{В.д.В}} = \frac{v}{v-b} - \frac{a}{\theta v} = \frac{1}{1 - \frac{b}{v}} - \frac{a}{\theta v}$$

Упрощаем, зная, что $(1 \pm x)^{-1} = 1 \mp x + x^2 \mp x^3 + \dots$

$$\left(\frac{pv}{\theta} \right)_{\text{В.д.В}} = 1 + \frac{b}{v} - \frac{a}{\theta v} + \frac{1}{v^2} + \dots$$

Сравним два выражения для $\frac{pv}{\theta}$

$$1 + \frac{1}{v} \frac{2\pi d_0^3}{3} - \frac{2\pi}{v} \int_{d_0}^{\infty} \left(e^{\frac{U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right) R^2 dR = 1 + \frac{b}{v} - \frac{a}{\theta v}$$

здесь в левой части выражение, полученное из формализма гравитационных функций, в правой – запись уравнения Ван-дер-Ваальса. Сравнение включает допущение:

$$\frac{U(R)}{\theta} \ll 1, \quad \text{откуда} \quad \left(e^{\frac{U(\vec{R})}{\theta}} - 1 \right) \approx \frac{U(R)}{\theta}$$

Тогда получаем

$$b = \frac{2\pi d_0^3}{3}, \quad a = 2\pi \int_{d_0}^{\infty} U(R) R^2 dR$$

где b – поправка на собственный объем молекулы, a – энергия притяжения молекул, усредненная по объему.

Лекция №13. Система с кулоновским взаимодействием. Дебаевская экранировка

Условия рассматриваемой системы

1. Система с дальним действием: выполняется условие

$$\frac{R_0^3}{v} \gg 1,$$

то есть каждая частица взаимодействует не поочередно с другими частицами за счет столкновений, а сразу с большим числом частиц.

2. Взаимодействие между частицами конечно, имеет конечный радиус эффективного взаимодействия \tilde{R}_0
3. Система нейтральна, состоит из сбалансированного числа положительно и отрицательно заряженных частиц
4. Система состоит из частиц двух сортов, а именно ионов противоположных знаков

$$\frac{N}{2}, q_+ = e, \quad \frac{N}{2}, q_- = -e, \quad n_0 = \frac{N/2}{V} \frac{1}{2v}, \quad v = \frac{V}{N}$$

здесь n_0 — равновесная плотность частиц

5. Взаимодействие ионов аппроксимируется простой моделью, учитывающей кулоновское взаимодействие и размер ионов (r_0 — радиус частицы)

$$\Phi_{ab}(R) = \begin{cases} +\infty, & R < 2r_0 \\ \frac{q_a q_b}{R} = \pm \frac{e^2}{R}, & R > 2r_0 \end{cases}$$

6. Радиус взаимодействия потенциала есть бесконечность, поэтому каждая частица взаимодействует со всеми остальными частицами системы и наоборот, все частицы системы действуют на данную частицу, создавая в области нахождения иона общее поле, индивидуальные вклады в которое от частиц 1 и 2 пренебрежимо малы по сравнению с вкладом от остальных частиц (эффект *самосогласованного поля*)

$$U_{12} \ll U_{N-2}, \quad |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = R, \quad |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| > \tilde{R}_0$$

Для парной корреляционной функции происходит распад выражения на произведение одночастичных корреляционных функций (события независимы), в этом случае можем записать

$$F_{ab}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) |_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg \tilde{R}_0} = F_a(\vec{r}_1) F_b(\vec{r}_2) = 1$$

7. На расстояниях порядка $2r_0$ взаимодействие частиц происходит по аналогии сталкивающихся шаров, т.е. предельно короткодействующее. Чтобы самосогласованное поле не разрушалось сильными индивидуальными корреляциями, возникающими на расстояниях порядка линейных размеров ионов, требуется наряду с условием дальнего действия $\tilde{R}_0 \gg a = \sqrt[3]{v}$ (где a - расстояние между частицами) выполнение условия *разреженности плазмы*

$$a \gg 2r_0$$

Экранировка зарядов в равновесной двухкомпонентной классической системе с кулоновским взаимодействием

Рассмотрим изменение кулоновского поля некоторого электрического заряда q в окружении полностью ионизованного нерелятивистского газа в равновесии. Пусть потенциал поля, действующего на заряд $\pm e$ со стороны заряда q есть $U_{\pm}(R)$

$$U_{\pm}(R) = \pm e \tilde{\varphi}(R),$$

здесь $\tilde{\varphi}(R)$ – искаженный потенциал, вид которого нас интересует. Вспомним *условие равновесия газа во внешнем магнитном поле* из термодинамики

$$\mu(\vec{r}) + U(\vec{r}) = \text{множитель Лагранжа} = \text{const},$$

тогда *условие равновесия каждой из компонент газа в сферическом внешнем поле $U_{\pm}(R)$:*

$$\frac{1}{\theta} \mu_{\pm}(R) \pm \frac{1}{\theta} e \tilde{\varphi}(R) = \text{const}$$

Химический потенциал заряженных частиц $\mu_{\pm}(R)$ неизвестен, чтобы его найти, нужна формула химического потенциала идеального бoльцмановского газа. В нулевом приближении без квантовых поправок термодинамическое число частиц N равно

$$N = \sum_p n_p = \sum_p \left\{ e^{\frac{\mu - E_p}{\theta}} \pm \left(\begin{array}{l} \text{квант. поправки} \\ \text{на классичность} \end{array} \right) \right\} = \exp\left\{\frac{\mu}{\theta}\right\} \sum_p e^{-\frac{E_p}{\theta}}$$

Для простоты скажем, что имеем дело с бесструктурными частицами: $\gamma = 1$.

Найдем сумму

$$\sum_p e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-\frac{p^2}{2m\theta}} d\vec{p} = \frac{V(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3};$$

Получаем в нулевом приближении без квантовых поправок термодинамическое число частиц и выражаем $\frac{\mu_{\pm}}{\theta}$

$$N = \exp\left\{\frac{\mu}{\theta}\right\} \frac{V(2\pi m\theta)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \exp\left\{\frac{\mu}{\theta}\right\} = \frac{N}{V} \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}}$$

$$\frac{\mu_{\pm}}{\theta} = \ln \left[\frac{N_{\pm}}{V} \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}} \right]$$

$$\frac{\mu_{\pm}}{\theta} = \ln \frac{n_{\pm}(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}}, \quad n_{\pm} = \frac{N_{\pm}}{V}$$

здесь n_{\pm} – плотность числа положительных/отрицательных ионов. Условие равновесия каждой из компонент газа в сферическом внешнем поле при устремлении $R \rightarrow \infty$ (исчезновение внешнего поля) имеет вид

$$\frac{1}{\theta} \mu_{\pm}(R) \pm \frac{1}{\theta} e\tilde{\varphi}(R) = const = \frac{1}{\theta} \mu_{\pm}|_{R \rightarrow \infty} = \frac{1}{\theta} \mu_0(\theta, v)$$

здесь $\mu_0(\theta, v)$ – химический потенциал положительных/отрицательных ионов в случае пространственно-однородного скомпенсированного по плотности их электрических зарядов состояния.

$$R \rightarrow \infty, \quad n_{\pm}(R) \rightarrow n_0 = \frac{1}{2v}$$

Имеем дело со следующим выражением

$$\ln \frac{n_{\pm}(R)(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}} \pm \frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta} = \ln \frac{n_{\pm}(R)(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}} \Big|_{R \rightarrow \infty};$$

$$\ln n_{\pm}(R) + \ln \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}} \pm \frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta} - \ln \frac{(2\pi\hbar)^3}{(2\pi m\theta)^{3/2}} - \ln \frac{1}{2v} = 0$$

$$\ln[2vn_{\pm}(R)] \pm \frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta} = 0$$

Получили, что концентрация выражается как

$$n_{\pm}(R) = \begin{cases} \frac{1}{2v} \exp\left\{\mp \frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right\}, & R > 2r_0 \\ 0, & R < 2r_0 \end{cases}$$

Сферическая симметричность важна в данной задаче. Ищем вид потенциала, построим потенциал $\tilde{\varphi}(R)$ в области кулоновского взаимодействия, т.е.

$$R > 2r_0 = d \quad (0 < R < 2r_0, \quad \tilde{\varphi}(R) = +\infty)$$

Построим уравнение Пуассона, поместив изучаемый заряд q в начало координат:

$$\Delta\tilde{\varphi}(R) = -4\pi\rho_e(R) = -4\pi q\delta(\vec{R}) - 4\pi e(n_+(R) - n_-(R)),$$

куда подставим полученные $n_{\pm}(R)$.

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\varphi}(R) &= -4\pi q\delta(\vec{R}) - 4\pi e\left(\frac{1}{2v}\exp\left\{-\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right\} - \frac{1}{2v}\exp\left\{\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right\}\right) = \left|\operatorname{sh} \alpha = \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{2}\right| \\ &= -4\pi q\delta(\vec{R}) + 4\pi e\left(\frac{1}{2v}e^{\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}} - \frac{1}{2v}e^{-\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}}\right) = -4\pi q\delta(\vec{R}) + 4\pi \frac{e}{v} \operatorname{sh}\left(\frac{e\tilde{\varphi}}{\theta}\right) \end{aligned}$$

В итоге получаем нелинейное уравнение, не доступное для аналитического решения

$$\Delta\tilde{\varphi}(R) - 4\pi \frac{e}{v} \operatorname{sh}\left(\frac{e\tilde{\varphi}}{\theta}\right) = -4\pi q\delta(\vec{R}), \quad R > 2r_0$$

Рассмотрим частный случай, когда во всей интересующей области потенциальная энергия $U_{\pm}(R) = \pm e\tilde{\varphi}(R)$ значительно меньше средней кинетической энергии ионов $\frac{3}{2}\theta$, т.е. $\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta} \ll 1$. Вспомним разложение гиперболического синуса в ряд

$$\operatorname{sh} x = x + \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 + \dots, \quad \operatorname{sh} x \cong x, \quad \operatorname{sh} \frac{e\tilde{\varphi}}{\theta} \cong \frac{e\tilde{\varphi}}{\theta}$$

Уравнение преобразуется в следующий вид

$$\Delta\tilde{\varphi}(R) - 4\pi \frac{e}{v} \frac{e\tilde{\varphi}}{\theta} = -4\pi q\delta(\vec{R}), \quad \frac{4\pi e^2}{v\theta} = \kappa^2$$

$$\Delta\tilde{\varphi} - \kappa^2\tilde{\varphi} = -4\pi q\delta(\vec{R})$$

Перейдем к Фурье-представлению, запишем Фурье-представление для искаженного потенциала $\tilde{\varphi}(R)$ и дельта-функции $\delta(\vec{R})$

$$\tilde{\varphi}(R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \Phi_k e^{i\vec{k}\vec{R}} d\vec{k}, \quad \delta(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int 1 \cdot e^{i\vec{k}\vec{R}} d\vec{k}$$

$$-k^2 \Phi_k - \kappa^2 \Phi_k = -4\pi q, \quad \Phi_k = \frac{4\pi q}{(k^2 + \kappa^2)}$$

Возвращаемся к координатному представлению, переходя к сферическим координатам

$$\tilde{\varphi}(R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi q}{(k^2 + \kappa^2)} e^{i\vec{k}\vec{R}} d\vec{k} = |\text{сф. коорд.}|$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \frac{4\pi q}{k^2 + \kappa^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi e^{ikR \cos \tilde{\theta}} \sin \tilde{\theta} d\tilde{\theta}$$

Отдельно посчитаем выделенный интеграл:

$$2\pi \int_0^\pi e^{ikR \cos \tilde{\theta}} \sin \tilde{\theta} d\tilde{\theta} = |x = \cos \tilde{\theta}| = 2\pi \int_{-1}^1 e^{ikRx} dx = 2\pi \frac{2}{2ikR} [e^{ikR} - e^{-ikR}]$$

$$= \left| \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \right| = 2\pi \frac{2}{kR} \left[\frac{e^{ikR} - e^{-ikR}}{2i} \right] = \frac{4\pi}{kR} \sin kR$$

Получаем для искаженного потенциала

$$\tilde{\varphi}(R) = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty k^2 dk \frac{4\pi q}{k^2 + \kappa^2} \frac{4\pi}{kR} \sin kR = \frac{q}{R} \text{Im} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{ikR} k dk}{(k + i\kappa)(k - i\kappa)}$$

Удобно использовать *лемму Жордана*, считаем вычет в точке $k = i\kappa$

$$I = \frac{1}{\pi} 2\pi i \frac{e^{-iR(i\kappa)}}{2i\kappa} = ie^{-i\kappa R}$$

Искаженный кулоновский потенциал $\tilde{\varphi}(R)$ для рассматриваемой модели

$$\tilde{\varphi}(R) = \frac{q}{R} e^{-\frac{R}{r_D}}, \quad r_D = \frac{1}{\kappa} = \sqrt{\frac{v\theta}{4\pi e^2}}$$

здесь r_D – Дебаевский радиус.

Итоги вывода

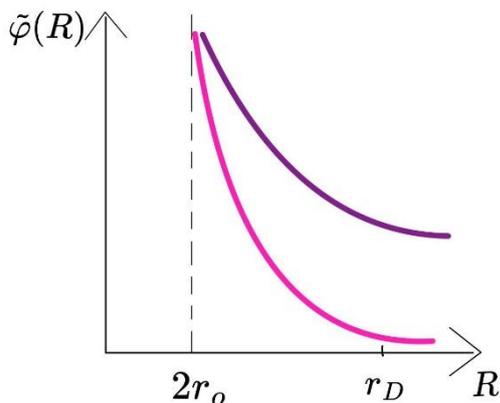


Рисунок 13.1 Зависимость искаженного кулоновского потенциала $\tilde{\varphi}(R)$, - розовая линия, кулоновский потенциал - фиолетовая линия.

1. При $R > r_D$ имеем дело с экспоненциальной экранировкой поля.
2. Так как в качестве заряда q может фигурировать какой-либо из ионов самой системы, то эффективное поле в такой системе имеет конечный радиус действия. Хаотически движущиеся вокруг выбранного заряда q другие ионы (из-за экранировки поля) сводят поле к почти нулевому.

Лекция №14. Теоретические характеристики систем с кулоновским взаимодействием

Средняя энергия и гамильтониан электростатического взаимодействия

Определим среднюю энергию электростатического взаимодействия, например, положительного заряда $q = (+e)$ со всей окружающей его средой, используя известные формулы электростатики. Так как дифференциально малый объем системы $d\vec{R}$ расположенный на расстоянии R от положительного заряда несет заряд

$$(e)(n_+(R) - n_-(R))d\vec{R},$$

то средняя энергия кулоновского взаимодействия \bar{U}_+ имеет вид

$$\bar{U}_+ = \int \frac{ee(n_+(R) - n_-(R))d\vec{R}}{R}$$

Точно такая же энергия будет характерна и для отрицательного заряда $e \leftrightarrow (-e)$ в силу симметрии системы по отношению к знаку заряда. Умножение на общее число частиц N приведет к возможности учёта каждого взаимодействия частиц между собой дважды $1 \leftrightarrow 2, 2 \leftrightarrow 1$, поэтому вводится множитель $\frac{N}{2}$. Средняя энергия взаимодействия есть гамильтониан

$$\bar{H}_1 = \frac{N}{2} \int \frac{e^2(n_+(R) - n_-(R))}{R} d\vec{R}$$

Из прошлой лекции знаем, что

$$n_+(R) - n_-(R) = \frac{1}{2v} \exp\left\{-\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right\} - \frac{1}{2v} \exp\left\{\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right\}$$

С учётом $\left|\text{sh } \alpha = \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{2}\right|$, получим

$$n_+(R) - n_-(R) = -\frac{1}{v} \text{sh}\left(\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right)$$

Используем разложение гиперболического синуса

$$\text{sh } x = x + \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 + \dots \cong x$$

Получаем

$$\bar{H}_1 = \frac{N}{2} \int \frac{e^2}{R} \left(-\frac{1}{v}\right) \text{sh} \left(\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right) d\vec{R} = -\frac{N}{2} \int_{2r_0}^{\infty} 4\pi R^2 dR \frac{e^2}{R} \frac{1}{v} \text{sh} \left(\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right)$$

Чтобы воспользоваться явным видом искаженного потенциала $\tilde{\varphi}(R)$, нужно учесть

$$\frac{U(R)}{\theta} \ll 1, \quad 2r_0 < R < \infty$$

тогда

$$\bar{H}_1 = -\frac{N}{2} \int_{2r_0}^{\infty} 4\pi R^2 dR \frac{e^2}{R} \frac{1}{v} \text{sh} \left(\frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\theta}\right) = -\frac{N}{2} \int_{2r_0}^{\infty} 4\pi R^2 dR \frac{e^2}{R} \frac{1}{v} \frac{e}{R} e^{-\kappa R}$$

Сократим константы и переменные в выражении, вынесем неинтегрируемые величины в скобки и проинтегрируем с подстановкой пределов

$$\bar{H}_1 = \int_{2r_0}^{\infty} \left(-N \frac{2\pi e^2}{v} \frac{e^2}{\theta}\right) e^{-\kappa R} dR = \left(-N \frac{2\pi e^2}{v} \frac{e^2}{\theta}\right) \left(-\frac{1}{\kappa}\right) (e^{-\kappa R} |_{2r_0}^{\infty})$$

$$\bar{H}_1 = N \frac{2\pi e^4}{v\theta} \frac{1}{\kappa} (e^{-\kappa\infty} - e^{-\kappa 2r_0}) = -N \frac{2\pi e^4}{v\theta} \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa 2r_0}$$

В силу экспериментальных данных экспоненту можно разложить в ряд и в приближении взять только единицу, не удерживая даже линейную поправку (рассмотреть самостоятельно).

$$\bar{H}_1 \cong -N \frac{2\pi e^4}{v\theta} \frac{1}{\kappa} \cdot 1 = -N \frac{2\pi e^4}{v\theta} \sqrt{\frac{v\theta}{4\pi e^2}} = -N \sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3$$

Замечание: для исходного гамильтониана (g – параметр включения взаимодействия)

$$H_1 = \sum \Phi_{ab} \sim e^2 \rightarrow g e^2 \sim g$$

Для среднего значения гамильтониана

$$\bar{H}_1 \sim e^3 \rightarrow g^{3/2} e^3 \sim g^{3/2}$$

Свободная энергия системы. Уравнения состояния

Рассчитаем свободную энергию системы с учетом масштабирования, обсужденного в замечании

$$\Delta F = \int_0^1 \frac{dg}{g} \overline{(gH_1)^g} \cong |e \rightarrow \sqrt{g}e| \cong -N \int_0^1 \frac{1}{g} \left(\sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3 g^{3/2} \right) dg = -N \sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3 \int_0^1 g^{1/2} dg$$

Считаем определенный интеграл

$$\Delta F = -N \sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3 \frac{2}{3} \left(g^{3/2} \Big|_0^1 \right) = -N \sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3 \frac{2}{3}$$

Для удельной свободной энергии получим

$$f(\theta, v) \cong f_0(\theta, v) - \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\pi}{v\theta}} e^3$$

Термическое и калорическое уравнения состояния из термодинамических потенциалов

$$\begin{cases} p(\theta, v) = -\frac{\partial f(\theta, v)}{\partial v} \cong \frac{\theta}{v} - \frac{e^3}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta}} \frac{1}{v^{3/2}} \\ c_{V,N}(\theta, v) = -\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\varepsilon_0(\theta) + \frac{1}{N} \bar{H}_1 \right) \cong \frac{3}{2} + \frac{e^3}{2\theta} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} \end{cases}$$

Итог

$$\begin{cases} p(\theta, v) \cong \frac{\theta}{v} - \frac{e^3}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\theta}} \frac{1}{v^{3/2}} \\ c_{V,N}(\theta, v) \cong \frac{3}{2} + \frac{e^3}{2\theta} \sqrt{\frac{\pi}{\theta v}} \end{cases}$$

Лекция №15. Затухания Ландау

Модель "желе". Особенности приближения. Закон дисперсии

Основные идеи, заложенные в фундамент вывода, включают в себя следующие утверждения:

1. Чтобы сохранить однокомпонентную структуру уравнения Власова, удобно рассмотреть *модель «желе»* - положительные ионы считаем неподвижными и равномерно размазанными в пространстве. На фоне положительного заряда движутся легкие электроны, газ которых считаем невырожденным.
2. Одночастичную функцию электронного газа $F_1(t, \vec{r}, \vec{p})$ представляем в виде

$$F_1(t, \vec{r}, \vec{p}) = F_0(\vec{r}, \vec{p}) + f(t, \vec{r}, \vec{p})$$

где $F_0(\vec{r}, \vec{p})$ – равновесная функция распределения, представляющая собой *распределение Максвелла* по \vec{p} и *однородное распределение* по \vec{r} , $f(t, \vec{r}, \vec{p})$ – малая добавка.

3. Рассмотрим связь F_1 с локальной плотностью. Плотность положительного заряда фона имеет вид

$$\rho^+ = en \int F_0(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}$$

где e – заряд электрона, n – концентрация электронов

4. Положительный заряд фона создает в точке \vec{r} *поле* $U(\vec{r})$

$$U(\vec{r}) = n \int \frac{(-e^2)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} F_0(\vec{r}', \vec{p}') d\vec{p}' d\vec{r}'$$

Самосогласованный потенциал $\tilde{U}(t, \vec{r})$, создаваемый в точке \vec{r} другими электронами имеет вид

$$\tilde{U}(t, \vec{r}) = n \int \frac{(e^2)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} F_1(t, \vec{r}', \vec{p}') d\vec{p}' d\vec{r}'$$

5. Построим напряженность действующего на электрон $q_{эл} = -e$ поля $\vec{E}(t, \vec{r})$

$$-\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(U + \tilde{U}) = (-e)\vec{E}(t, \vec{r}) = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(n \int \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \underbrace{(F_1(t, \vec{r}', \vec{p}') - F_0(\vec{r}', \vec{p}'))}_{f(t, \vec{r}', \vec{p}')} d\vec{p}' d\vec{r}' \right)$$

Вспомним, что $\operatorname{div} \operatorname{grad} = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} = \Delta$, а также уравнение Пуассона для единичного точечного заряда:

$$\frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Сократив на заряд электрона обе части уравнения, содержащего напряженность поля, а также применяя операцию дивергенции, получим

$$\operatorname{div} \vec{E} = -4\pi ne \int f(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}$$

Будем считать, что наша система для $\forall t$ и $\forall \vec{r}$ подчиняется неравенству

$$\frac{f(t, \vec{r}, \vec{p})}{F_0(\vec{r}, \vec{p})} \ll 1$$

Вспомним, что E и f – величины одного порядка малости, а также по построению и в силу однородности распределения имеем

$$-\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(U + \tilde{U}) = -e\vec{E}, \quad \frac{\partial F_0}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial F_0}{\partial \vec{r}} = 0$$

Тогда, подставляя в уравнение Власова F_0 и учитывая равенство нулю производных по времени t и координатам \vec{r} и тот факт, что E и f – величины одного порядка малости, получим систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{\partial f(t, \vec{r}, \vec{v})}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}} = 0 \\ \operatorname{div} \vec{E} = -4\pi ne \int f(t, \vec{r}, \vec{v}) d\vec{v} \end{cases}$$

здесь F_0 имеет Максвелловское распределение

$$\begin{cases} F_0 = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{3/2} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2\theta}\right\} \\ \frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}} = -\frac{m}{\theta} \vec{v} F_0 \end{cases}$$

На данный момент имеем:

- Приближение опускает парные корреляции (бесстолкновительное приближение)
- Слабо неравновесный случай: добавка $f \ll F_0$
- Электростатика + нерелятивистское приближение

Необходимы механизмы релаксации: включим в систему интеграл столкновений $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}}$ с релаксационным членом с последующей процедурой его исключения:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{ст}} = -\varepsilon(F_1 - F_0) = -\varepsilon f \Big|_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \varepsilon > \theta}}$$

Получаем следующее уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{e\vec{E}}{m} \frac{\partial F_0}{\partial \vec{v}} = -\varepsilon f \Big|_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \varepsilon > \theta}}$$

Будем искать решение в виде волны продольного типа, распространяющейся вдоль оси ОХ, тогда:

$$\begin{cases} f(t, \vec{r}, \vec{v}) = f_{k\omega}(\vec{v}) e^{-i\omega t + ikx} \\ E_x(t, \vec{r}) = E_{k\omega} e^{-i\omega t + ikx}, \quad E_y = E_z = 0 \end{cases}$$

Подставляем в таком виде поле $E_x(t, \vec{r})$ и $f(t, \vec{r}, \vec{v})$ в систему уравнений:

$$\begin{cases} -i\omega f_{k\omega} + iv_x k f_{k\omega} - \frac{e}{m} \frac{\partial F_0}{\partial v_x} E_{k\omega} = -\varepsilon f_{k\omega} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} \\ ikE_{k\omega} = -4\pi en \int f_{k\omega}(\vec{v}) d\vec{v} \end{cases}$$

Выражая $f_{k\omega}$, получим

$$f_{k\omega} = i \frac{\frac{e}{m} \frac{\partial F_0}{\partial v_x}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} E_{k\omega}$$

Подставим во второе соотношение в фигурной скобке системы

$$ikE_{k\omega} = -4\pi ei \frac{en}{m} E_{k\omega} \int \frac{\frac{\partial F_0}{\partial v_x}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} d\vec{v}$$

Нас интересует нетривиальное решение, когда $E_{k\omega} \neq 0$. Сократим получившееся уравнение на $ikE_{k\omega}$, получим **дисперсионное уравнение** для собственной частоты $\omega = \omega(k)$. Учитывая, что $F_0 = w(v_x)w(v_y)w(v_z)$, а также выражения для $\frac{\partial F_0}{\partial v_x}$ и $w(v_x)$

$$w(v_x) = \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2\theta}\right\}, \quad \frac{\partial F_0}{\partial v_x} = -\frac{m}{\theta} v_x F_0$$

получим

$$\int \frac{\frac{\partial F_0}{\partial v_x} d\vec{v}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} = \left(-\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} dv_x$$

Возвращаясь к уравнению, имеем

$$1 = -\frac{4\pi e}{k} \left(\frac{en}{m}\right) \left(-\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} dv_x$$

Выделим **частоту Ленгмюра** (*I. Langmuir, L. Ponks, 1929 г.*) как

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$$

Физический смысл частоты Ленгмюра есть частота электронных колебаний, возникающих при смещении электронов в некоторой области плазмы. Закон дисперсии в данном случае таков, что частота колебаний не зависит от волнового вектора. Колебания не распространяются, поэтому неоднородность плазмы «вибрирует», оставаясь на месте. Выполнив замену, получим

$$1 - \frac{\omega_0^2}{k} \left(\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\omega + i\varepsilon - v_x k} dv_x = 0$$

Теорема Сохотского-Племеля для интеграла. Дисперсионное уравнение. Формула Ландау

Подробнее рассмотрим интеграл, входящий в уравнение, для этого вспомним теорему Сохотского-Племеля, которая поможет выполнить вычисления

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) dx}{x - i\varepsilon} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0} = \int \frac{f(x) dx}{x} + i\pi f(0)$$

Обозначим интеграл как A :

$$A = \left(-\frac{1}{k}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\left(v_x - \frac{\omega}{k}\right) + i\frac{\varepsilon}{k}} dv_x$$

Выполним замену $x = v_x - \frac{\omega}{k}$

$$A = \left(-\frac{1}{k}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\left(v_x - \frac{\omega}{k}\right)} dv_x - i\pi \frac{\omega}{k^2} e^{-\frac{m\omega^2}{2\theta k^2}}$$

Подставим полученный результат в уравнение

$$1 - \frac{\omega}{k^2} \left(\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} A = 0$$

$$1 - \underbrace{\frac{\omega}{k^2} \left(\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x}{\left(\omega - v_x k\right)} e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}} dv_x}_{J(k,\omega)} + i \underbrace{\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_0^2 \omega m^{3/2}}{k^3 \theta^{3/2}} e^{-\frac{m\omega^2}{2\theta k^2}}}_{I(k,\omega)} = 0$$

Дисперсионное уравнение имеет вид

$$1 - J(k, \omega) + iI(k, \omega) = 0$$

где

$$J(k, \omega) = \frac{\omega^2}{k} \left(\frac{m}{\theta}\right) \left(\frac{m}{2\pi\theta}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v_x e^{-\frac{mv_x^2}{2\theta}}}{\omega - v_x k} dv_x$$

$$I(k, \omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_0^2 \omega m^{3/2}}{k^3 \theta^{3/2}} \exp\left\{-\frac{m\omega^2}{2\theta k^2}\right\}$$

Интеграл в $J(k, \omega)$ нельзя взять, поэтому ограничиваемся случаем малых k , то есть длинных волн. Подынтегральная дробь имеет вид

$$\frac{v_x}{\omega - v_x k} = \frac{v_x}{\omega} \frac{1}{1 - \frac{v_x}{\omega} k}$$

$$\frac{1}{1-x} = \frac{1-x+x}{1-x} = \left[1 + x \frac{1}{1-x}\right] = 1 + x \frac{1}{1-x} = 1 + x \left[1 + x \frac{1}{1-x}\right]$$

Выше получили рекурсивную формулу, и с учётом замены $x = \frac{v_x}{\omega} k$ получим для выражения $\frac{v_x}{\omega - v_x k}$ следующий результат

$$\frac{v_x}{\omega} \frac{1}{1 - \frac{v_x}{\omega} k} = \frac{v_x}{\omega} + \frac{v_x^2}{\omega^2} k + \frac{v_x^3}{\omega^3} k^2 + \frac{v_x^4}{\omega^4} k^3 + \frac{v_x^5}{\omega^5} k^4 + \frac{v_x^6}{\omega^6} k^5 + \frac{1}{1 - \frac{v_x}{\omega} k}$$

Учтём, что средние для компоненты скорости в разных степенях:

$$\overline{v_x} = \overline{v_x^3} = \overline{v_x^5} = 0, \quad \overline{v_x^2} = \frac{\theta}{m}, \quad \overline{v_x^4} = 3(\overline{v_x^2})^2 = 3 \frac{\theta^2}{m^2}$$

Тогда *дисперсионное уравнение* имеет вид

$$1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2} \left[1 + \frac{3\theta}{m\omega^2} k^2 + \frac{m}{\theta\omega^4} k^4 \left(\frac{v_x^6}{1 - \left(\frac{k}{m}\right) v_x} \right) \right] + iI(k, \omega) = 0$$

Работаем в длинноволновом приближении, то есть $k^2 \ll \frac{m\omega^2}{\theta}$, тогда в квадратных скобках можно сохранить только первые два слагаемых, опустив поправки порядка k^4 и выше, уравнение станет приближенным. Уравнение трансцендентно относительно $\omega(k)$. В силу того, что $I(k, \omega) \neq 0$, уравнение не имеет действительных решений. Пусть

$$\omega = \Omega - i\gamma, \quad \frac{\gamma}{\Omega} \ll 1$$

т.е. реализуется затухающих колебаний. Считаем $I(k, \Omega - i\gamma) \cong I(k, \Omega)$. Тогда

$$\frac{1}{\omega^2} = \frac{1}{(\Omega - i\gamma)^2} \cong \frac{1}{\Omega^2} + i \frac{1}{\Omega^2} 2 \frac{\gamma}{\omega}$$

Сохраним только главные члены в действительной и мнимой частях дисперсионного уравнения:

$$1 - \frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \left[1 + \frac{3\theta}{m\omega^2} k^2 + \dots \right] - i \frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \frac{2\gamma}{\omega} (1 + \dots) + iI(k, \omega) + \dots = 0$$

А) Пусть мнимая часть есть ноль. В нулевом приближении частота собственных колебаний совпадает с ленгмюровской частотой, к которой с ростом волнового числа добавляется слабый квадратичный член

$$\Omega^2 = \omega_0^2 \left(1 + \frac{3\theta}{m\omega^2} k^2 + \dots \right), \quad \Omega|_{k=0} = \omega_0$$

$$\Omega \cong \omega_0 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{\theta}{m \omega_0^2} k^2 + \dots \right)^{0,5}$$

Б) Пусть действительная часть есть ноль

$$\Omega \cong \omega_0$$

$$-\frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \frac{2\gamma}{\Omega} = -I(k, \omega)$$

$$\gamma \cong \frac{\omega_0}{2} I(k, \omega_0) \cong \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_0^4 m^{3/2}}{k^3 \theta^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{m\omega_0^2}{2\theta k^2} \right\}$$

Введем замену

$$\frac{m\omega_0^2}{\theta} = \frac{m}{\theta} \frac{4\pi e^2 n}{m} = \frac{4\pi e^2 n}{\theta} = \frac{1}{r_D^2} = \kappa^2$$

где r_D – радиус Дебая.

Получим *формулу Ландау* (1946 г.) для затухания плазменных колебаний

$$\gamma = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\omega_0 \kappa^3}{k^3} \exp \left\{ -\frac{\kappa^2}{2k^2} \right\}$$



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА

teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ