Письма в ЖЭТФ, том 36, вып. 2, стр. 35 – 38 20 июля 1982 г.

МЕРА НЕПОЛНОТЫ СТАТИСТИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ И НЕОБРАТИМОСТЬ. ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННЫЕ СООТНОШЕНИЯ (ФДС) ДЛЯ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Ю.Л.Климонтович

Введено понятие меры неполноты статистического описания при необратимых процессах. На уровне матрицы плотности макроскопической системы сформулировано обобщенное ФДС, справедливое и для неравновесных процессов. На его основе получено ФДС для газа и предложена флуктуационная формулировка интеграла столкновений Больцмана.

Рассматриваем макроскопическую систему из N частиц с функцией Гамильтона H_0. $X(t)$ – совокупность всех координат и импульсов частиц, а $\mathcal{X}$ – точка в $6N$-мерном фазовом пространстве. Вводим две функции распределения в фазовом пространстве: микроскопическую $f_N^M(\mathcal{X},t) = \delta(\mathcal{X} - X(t))$, зависящую не только от $\mathcal{X}$, но и от $X(t)$; усредненную по ансамблю $f_N(\mathcal{X}, t) = \langle f_N^M(\mathcal{X}, t)\rangle$. Определяем одновременной коррелятор флуктуаций $\delta f_N = f_N^M - f_N$

$$\langle \delta f_N(\mathcal{X}, t)\delta f_N(\mathcal{X}', t)\rangle = \delta(\mathcal{X} - \mathcal{X}')f_N(\mathcal{X}, t) - f_N(\mathcal{X}, t) f_N(\mathcal{X}', t). \qquad (1)$$

При полном механическом описании, когда $f_N = f_N^M$, он равен нулю, а при неполном – служит мерой неполноты статистического описания.

В квантовой теории рассматриваем две соответствующие матрицы плотности: $f_{nm}^M = \Psi_n^+ \Psi_m$ для чистого ансамбля (n – набор квантовых чисел частиц системы); $f_{nm} = \langle f_{nm}^M\rangle$ для смешанного ансамбля. За меру неполноты статистического описания принимаем одновременной коррелятор флуктуаций $\delta f_{nm} = f_{nm}^M - f_{nm}$, соответствующий (1)

$$\langle \delta f_{nm}(t)\, \delta f_{n_1 m_1}(t)\rangle = \delta_{nm_1} f_{n_1 m} - f_{nm} f_{n_1 m_1}. \qquad (2)$$

Определяемые с помощью (2) корреляторы коммутирующих операторов для чистого ансамбля равны нулю. Используем соответствующее уравнение для двухвременного коррелятора

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \Delta + i\omega_{nm}\right) \langle \delta f_{nm} \delta f^*_{n_1 m_1} \rangle_{t,\,t'} = 0, \quad t > t'. \tag{3}$$

При неполном описании (смешанный ансамбль) оно имеет при начальном ($t = t'$) условии (2) отличное от нуля решение. С его помощью находим выражение для спектральной плотности. При условии $f_{nm} = \delta_{nm} f_n$

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \pi\delta(\omega - \omega_{nm})\delta_{nn_1}\delta_{mm_1}(f_m + f_n). \tag{4}$$

Его можно переписать в виде ФДС

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \hbar \operatorname{Im} A_{nmn_1 m_1}(\omega) \frac{f_m + f_n}{f_m - f_n}. \tag{5}$$

Здесь введена соответствующая восприимчивость

$$A_{nmn_1 m_1}(\omega) = -\frac{1}{\hbar}\delta_{nn_1}\delta_{mm_1} \frac{f_m - f_n}{\omega + i\Delta - \omega_{nm}}. \tag{6}$$

Если f_n – каноническое распределение Гиббса, то из (5) следует наиболее общее ФДС для флуктуаций многочастичной матрицы плотности равновесного состояния макроскопической системы

$$(\delta f_{nm} \delta f_{n_1 m_1})_\omega = \hbar \operatorname{Im} A_{nmn_1 m_1}(\omega) \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}. \tag{7}$$

С его помощью можно найти как известную формулу Каллена – Вельтона (§ 124 в [1]), так и новые ФДС, например, для больцмановского газа.

Существенно, что в форме (5) ФДС можно использовать и для неравновесных состояний с матрицей плотности $f_{nm}(t) = \delta_{nm} f_n(t)$. Функция f_n удовлетворяет при этом кинетическому уравнению для многочастичной функции распределения $f_n(t)$. Это уравнение описывает релаксацию к каноническому распределению Гиббса. Кинетическое уравнение для многочастичной функции распределения впервые было введено Леонтовичем [2]. Для больцмановского газа уравнение Леонтовича описывает релаксацию к многомерному распределению Максвелла. В работе [3] получено уравнение, описывающее релаксацию к распределению Гиббса за счет флуктуационного электромагнитного взаимодействия.

Из формул (5), (6) следует ФДС для больцмановского газа

$$(\delta f_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'} \delta f_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'})_\omega = \hbar \operatorname{Im} A_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'}(\omega) \frac{f_1(\mathbf{p}_1') + f_1(\mathbf{p}_1)}{f_1(\mathbf{p}_1') - f_1(\mathbf{p}_1)}, \tag{8}$$

$$A_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'}(\omega) = -\frac{1}{N} \frac{f_1(\mathbf{p}_1') - f_1(\mathbf{p}_1)}{\hbar(\omega + i\Delta) - (E_{\mathbf{p}_1} - E_{\mathbf{p}_1'})}, \quad E_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^2/2m. \tag{9}$$

Функция распределения $f_1(\mathbf{p}_1, t)$ удовлетворяет уравнению Больцмана. При подстановке в (8), (9) распределения Максвелла приходим в ФДС для равновесного газа.

При использовании ФДС (5), (8) для неравновесных состояний величина Δ, определяющая „ширины" функций $\delta(\omega - \omega_{nm})$, $\delta(\omega - (E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{p}_1'})/\hbar)$, удовлетворяет условию "бесстолкновительного приближения" $\Delta\tau_{\text{рел}} \gg 1$, в котором $\tau_{\text{рел}}$ – соответствующее время релаксации к равновесию.

Основываясь на ФДС (8), (9), можно ввести флуктуационное представление для интеграла столкновений Больцмана

$$I(\mathbf{p}_1, t) = \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \int d\omega\, d\mathbf{k}\, d\mathbf{p}_1'\, \delta(\hbar\mathbf{k} - (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'))\delta(\hbar\omega - (E_{\mathbf{p}_1} - E_{\mathbf{p}_1'})).$$

$$[(\delta U \delta U)_{\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1'} (f_1(\mathbf{p}_1') - f_1(\mathbf{p}_1)) - \hbar \operatorname{Im} D(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1')(f_1(\mathbf{p}_1') + f_1(\mathbf{p}_1))] \quad (10)$$

Сюда входит выражение для спектральной плотности флуктуаций потенциала, отвечающего задаче рассеяния

$$\delta U_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1'}(\omega) = N \int T(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2') \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2') \delta f_{\mathbf{p}_2' \mathbf{p}_2}(\omega) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_2' . \quad (11)$$

Формулы для спектральной плотности флуктуаций δU и мнимой части соответствующей восприимчивости $\operatorname{Im} D(\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1')$ следуют из (8), (11). Эти функции зависят не только от ω и $\mathbf{k} = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1')/\hbar$, но и от $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1'$. Последняя зависимость исчезает лишь в приближении теории возмущений, когда T-матрица связана с компонентой Фурье потенциала взаимодействия равенством

$$T(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2') = \frac{1}{V} \nu\left(\frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'|}{\hbar}\right) \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2'). \quad (12)$$

Используя флуктуационное представление интеграла столкновений Больцмана, можно найти выражение для интеграла столкновений, в котором одновременно учитываются сильные парные столкновения на малых расстояниях и слабые, но коллективные взаимодействия на больших расстояниях. Для этого определяем соответствующую „диэлектрическую проницаемость" ,

$$\epsilon(\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1') = 1 + \frac{N}{V} \int \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_2' ,$$

$$\frac{|T(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1' \mathbf{p}_2')|^2}{\nu\left(\frac{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_1'|}{\hbar}\right)} \frac{\delta(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1' - \mathbf{p}_2')(f(\mathbf{p}_2') - f(\mathbf{p}_2))}{\hbar(\omega + i\Delta) - (E_{\mathbf{p}_2'} - E_{\mathbf{p}_2})} . \quad (13)$$

Учет „поляризации" в интеграле столкновений Больцмана (при использовании обычного представления) проводится путем введения в подынтегральное выражение симметризованного поляризационного фактора .

$$\frac{1}{2}[|\epsilon(\omega, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_1')|^{-2} + |\epsilon(\omega, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_2')|^{-2}] . \quad (14)$$

Полученное таким путем обобщенное выражение для интеграла столкновений объединяет приближение Больцмана с поляризационным приближением, которое для кулоновской системы отвечает интегралу столкновений Балеску – Ленарда [4, 5]. Из ряда вариантов решения этой проблемы (§ 46 в [4], § 56 в [5]) предлагаемый здесь является внутренне наиболее согласованным. Эта согласованность необходима, в частности, при учете в кинетических уравнениях эффектов неидеальности [5].

Одновременной учет сильных и слабых, но коллективных взаимодействий необходим во многих случаях: в кинетической теории уширения спектральных линий, в кинетической теории частично ионизованной плазмы и т. д. [6, 3]

Введенная выше мера неполноты статистического описания важна не только в статистической теории многих частиц, но и в задачах квантовой механики, например, в теории квантовых переходов.

Пользуюсь случаем, чтобы поблагодарить Л.М.Горбунова за внимание и интерес к настоящей работе.

Литература

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1976.
2. *Леонтович М.А.* ЖЭТФ, 1935, 5, 211.
3. *Климонтович Ю.Л.* ЖЭТФ, 1978, 75, 361; Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980.
4. *Лифщиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979.
5. *Климонтович Ю.Л.* Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. М.:, 1975.
6. *Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.

Московский государственный университет
им. М.Л.Ломоносова

Поступила в редакцию
1 июня 1982 г.