Июль 2015 г. **Том 185, № 7**

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Почему природе нужен 1/f-шум

Ю.Е. Кузовлев

Низкочастотный 1/f-шум, который встречается на всех уровнях организации природы, стал актуальным фактором нанотехнологий, однако, по сути, он до сих пор не понят его исследователями. Отмечается, что причина этого может лежать в некритическом приложении к физическим случайным явлениям таких понятий теории вероятностей, как "независимость". Показано, что в статистической механике никакая среда не способна придать блуждающей в ней частице определённые значения коэффициента диффузии и подвижности, тем самым производя фликкерные флуктуации этих величин. В данном примере реализуется универсальный источник 1/f-шумов в многочастичных системах: зависимость временно́го хода частных процессов релаксации и переноса от деталей начального микросостояния системы в целом.

Ключевые слова: 1/f-шум, молекулярное случайное блуждание, броуновское движение, статистическая механика процессов переноса, динамические основания кинетики, детерминированный хаос в многочастичных системах

PACS numbers: 05.20.Jj, 05.40.Fb DOI: 10.3367/UFNr.0185.201507d.0773

Содержание

Ю.Е. Кузовлев. Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины,
ул. Р. Люксембург 72, 83114 Донецк, Украина
E-mail: yuk-137@yandex.ru

Статья поступила 22 января 2015 г., после доработки 24 апреля 2015 г.

1. Введение

1.1. Корень вопроса и популярная гипотеза

Уже в течение многих лет вопрос 1/f-шума (фликкерного шума, от англ. flicker — мерцание, дрожание) набирает актуальность, расширяясь и углубляясь вместе с физическим экспериментом и новыми технологиями и касаясь чуть ли ни всего на свете, от космических явлений до молекулярной биологии и наноэлектроники. Однако обзоров вопроса, пропорциональных его объёму и значению, нет — по всей видимости, потому, что исследователи не находят достаточно воодушевляющих идей. Правда, одно подходящее предложение, о котором далее пойдёт речь, было сделано ещё в [1–4], но оно не получило отклика. Между тем ныне мы видим отчёты о всё более изобретательных и утончённых измерениях 1/f-шума, например, в плёнках металлов и сплавов [5] или атомных слоях графена [6], но по-прежнему не дающие однозначных указаний на его происхождение. Как отмечено в [6], "1/f-шум, несмотря на его исследование в течение почти целого века, остаётся противоречивым явлением, и продолжаются многочисленные дебаты относительно его природы и механизмов" [1].

Добавим, что "дебаты", по опыту автора настоящих заметок, нередко принимают весьма тоталитарные формы. Может быть, отчасти поэтому, с точки зрения автора, ситуация в общем почти не отличается от той, которая была обрисована в [1], а несколько позднее — в [7]. Её хочется сравнить с положением, сложившимся в астрономии 300 с лишним лет назад перед выходом в свет знаменитых *Начал* И. Ньютона [8]. Мы позволяем

[1] "...Despite almost a century of research, 1/f noise remains a controversial phenomenon and numerous debates continue about its origin and mechanisms".

себе такое сравнение не ради красного словца, а потому, что намерены продемонстрировать в данных заметках, что именно в ньютоновских законах механики может крыться разгадка 1/f-шума. Вернее, 1/f-шум является непременным свойством систем большого числа частиц, движущихся и взаимодействующих по этим законам (в их классической или квантовой формулировке, включая также поля). Для того чтобы увидеть это, надо только последовать совету Ньютона не строить излишних гипотез ("Hypotheses non fingo" [8]).

Какие же гипотезы выдвигаются физиками относительно 1/f-шума? Разберём это на примере токового шума в электрическом проводнике, находящемся под заданной разностью потенциалов. Присутствие 1/f-шума означает, что ток не имеет определённого значения, в том смысле, что его усреднение (сглаживание) по времени даёт непредсказуемый — меняющийся от опыта к опыту — результат с разбросом, практически не убывающим, а иногда и возрастающим при увеличении длительности усреднения (потому что соответствующее сужение полосы частот шума, вносящих вклад в разброс, почти или с избытком компенсируется возрастанием спектральной плотности мощности шума внутри этой полосы).

Задаваясь вопросом о причине такого феномена, обычно первым делом предполагают, что она заключается в неких специфических флуктуационных процессах, влияющих на ток, например, через количество носителей заряда или их подвижность, а специфика этих процессов состоит в очень большом разнообразии их масштабов времени (времён памяти, релаксации, корреляции или т.п.) [5, 6, 9]. Это и есть главная гипотеза.

1.2. Идея ответа и план действий

На самом деле в указанной в разделе 1.1 гипотезе нет нужды, потому что законы механики и так не требуют определённости тока, а значит, и особых причин для его неопределённости. Действительно, каков бы ни был конкретный механизм проводимости, если он безразличен к количеству заряда, ранее пропущенного проводником из одной части внешней цепи в другую, и тем самым — к прошлой величине сглаженного по времени тока, то этот механизм и далее будет безразличен к ним и в целом не сможет обусловить определённость тока. Таким образом, он служит механизмом 1/f-шума. Указанное безразличие поощряется самими условиями эксперимента, согласно которым флуктуации тока (сглаженного) не встречают обратной реакции внешней цепи, пассивно проглатывающей их.

В этом рассуждении нет никаких коллекций больших характерных времён, есть только одно, на практике обычно малое, время, по истечении которого теряется память механизма проводимости. Если это время, например, меньше нескольких часов, то перенос носителей заряда, с их столкновениями, рассеяниями, отражениями и прочим, сейчас, т.е. на текущем отрезке времени, протекает безразлично к тому, сколько заряда было пропущено вчера, даже если экспериментальная установка не выключалась на ночь. Соответственно, на частотах, меньших 1 сут$^{-1}$, можно обнаружить 1/f-шум.

Аналогично, если некто, имея безграничные возможности доходов и расходов, не ведёт их учёт, то он и сам не может знать, какими окажутся его траты в среднем по времени, и следует ожидать, что они распределятся по времени подобно 1/f-шуму.

Возвращаясь к проводнику, заметим, что если замкнуть его накоротко, то токовый 1/f-шум исчезает вместе с направленным током, но продолжаются беспорядочные перемещения заряда в противоположных направлениях, причём опять же безразлично к их прошлому количеству, т.е. и к их средней по времени интенсивности. Последняя поэтому не направлена к определённому значению, что выражается в 1/f-флуктуациях интенсивности (спектральной плотности мощности) термодинамически равновесного белого (теплового) токового шума. Они связаны с 1/f-шумом в неравновесном проводнике с током посредством "обобщённых флуктуационно-диссипационных соотношений" [1, 2, 10–12].

Если же измерить равновесный тепловой шум разности потенциалов между берегами разомкнутого проводника, например электрического контакта, то и тогда можно обнаружить 1/f-флуктуации интенсивности. Они свидетельствуют о том, что сумма чисел (отнесённая к единице времени) случайных переходов носителей заряда с одного берега на другой и обратно не отслеживается и не регулируется системой, в отличие от разности чисел переходов туда и обратно [10]. При этом характерная постоянная времени системы (эквивалентной *RC*-цепи) служит верхним масштабом времени для флуктуаций разности и нижним — для флуктуаций суммы (верхнего у них нет, так как они не изменяют макросостояния системы).

Сказанное легко распространяется при непринципиальной замене терминов и частных смыслов на другие виды 1/f-шума в природе. Ряд различных примеров приведён в [1, 2, 4, 10, 11, 13–15]. Нашу демонстрацию в разделах 2 и 3 мы проведём в терминах равновесного "молекулярного броуновского движения" [3, 7, 10, 12, 16–23].

Максимально простыми средствами мы покажем, что предположение об определённости темпа, или коэффициента, диффузии броуновской частицы несовместимо с точными уравнениями статистической механики, т.е. с механической динамической подоплёкой броуновского движения. Механика, таким образом, неизбежно порождает 1/f-шум, или фликкерные флуктуации, коэффициента диффузии и подвижности частицы. Затем мы обсудим их количественные характеристики, а в разделе 4 представим их объяснение на языке теории детерминированного хаоса в многочастичных системах.

2. Феноменология броуновского движения

2.1. Постановка задачи

Представим себе малую, "броуновскую", частицу в трёхмерной статистически однородной, изотропной и термодинамически равновесной среде. Очень мелкие пылинки или частицы цветочной пыльцы, движение которых в жидкости впервые изучалось через микроскоп [24, 25] в XIX в., а в начале следующего века — теоретически в [26–28], нам подходят. Но лучше мы будем подразумевать какую-нибудь "наночастицу" или даже просто отдельный атом или молекулу в жидкости или газе [29]. В принципе можно иметь в виду даже свободный носитель заряда или точечный дефект в твёрдом теле, но мы ограничимся объектом, вполне свойственным классическому варианту механики.

Обозначим через $\mathbf{R}(t)$ и $\mathbf{V}(t) = \mathrm{d}\mathbf{R}(t)/\mathrm{d}t$ векторы координат и скорости центра масс нашей броуновской частицы (БЧ) в данный момент времени, а через $\mathbf{R}$ и $\mathbf{V}$ — их возможные значения. Будем считать, что в начальный момент $t = 0$ БЧ находилась в известном нам месте пространства — в каком именно, не важно ввиду однородности среды и термодинамической эквивалентности любых положений БЧ. Поэтому для удобства будем считать, что при $t = 0$ БЧ находится в начале координат: $\mathbf{R}(0) = 0$. Тогда далее её текущая позиция $\mathbf{R}(t)$ будет совпадать с вектором перемещения, или пути, БЧ за всё время её наблюдения.

Спросим себя, как выглядит "закон диффузии" БЧ, т.е. каково вероятностное распределение её пути. Плотность этого распределения $W(t, \mathbf{R})$ можно представить следующим выражением:

$$W(t, \mathbf{R}) = \big\langle \delta\big(\mathbf{R} - \mathbf{R}(t)\big) \big\rangle \,, \tag{1}$$

в котором фигурирует дираковская дельта-функция, $\mathbf{R}(t)$ понимается как результат предыдущего взаимодействия БЧ со средой, а угловые скобки обозначают усреднение по равновесному (гиббсовскому [30]) статистическому ансамблю начальных состояний среды и начальных значений скорости БЧ. Несомненно, график (рельеф) $W(t, \mathbf{R})$ в зависимости от $\mathbf{R}$ имеет вид расползающегося со временем "колокола". Нас интересует, какие формы колокол может принимать в действительности.

2.2. Условное усреднение и уравнение непрерывности

Фактически (1) — это тождество, но его дифференцирование по времени немедленно даст нам пищу для размышлений. Имеем

$$\frac{\partial W(t, \mathbf{R})}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \big\langle \mathbf{V}(t)\, \delta\big(\mathbf{R} - \mathbf{R}(t)\big) \big\rangle \,.$$

Привлекая математический аппарат теории вероятностей [31], это равенство можно представить в виде

$$\frac{\partial W(t, \mathbf{R})}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\, \overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R})\, W(t, \mathbf{R}) \,, \tag{2}$$

где $\overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R}) = \langle \mathbf{V}(t) \rangle_{\mathbf{R}}$ — условное среднее значение текущей скорости БЧ, при условии, что известно (измерено) её текущее положение, $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}$, и тем самым задан её предшествующий путь. Вообще операция условного усреднения $\langle \ldots \rangle_{\mathbf{R}}$ определяется формулой

$$\langle \ldots \rangle_{\mathbf{R}} \equiv \frac{\big\langle \ldots \delta\big(\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}\big) \big\rangle}{\big\langle \delta\big(\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}\big) \big\rangle} \,.$$

Очевидно, что (2) представляет собой "уравнение непрерывности" для плотности вероятности $W(t, \mathbf{R})$ и "поле скорости потока вероятности" $\overline{V}(t, \mathbf{R})$ несёт ценную информацию о решениях этого уравнения. Обсудим поэтому сначала, как может быть устроена вектор-функция $\overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R})$.

2.3. Условная средняя скорость броуновской частицы

Будем полагать, что продолжительность наблюдения t велика по сравнению с временем τ релаксации (флуктуаций) скорости БЧ.

Привлечём сначала следующие эвристические соображения. С одной стороны, по условию $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}$ среднее значение скорости БЧ в прошлом, за время наблюдения, составило $\mathbf{R}/t$. С другой стороны, так как БЧ совершает беспорядочное блуждание и $t \gg \tau$, условие $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}$ почти ничего не говорит о будущей скорости БЧ, поэтому её среднее значениие за равный последующий промежуток времени можно считать равным нулю. Поскольку искомое среднее $\overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R})$ относится к настоящему моменту времени, находящемуся посредине "между прошлым и будущим", можно полагать, что оно даётся полусуммой указанных величин:

$$\overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R}) = \frac{\mathbf{R}}{2t} \,. \tag{3}$$

Подтвердим этот вывод формально более строго, исходя из основного отличительного статистического свойства броуновского движения [27]:

$$\big\langle \mathbf{R}^2(t) \big\rangle = \int \mathbf{R}^2\, W(t, \mathbf{R})\, \mathrm{d}\mathbf{R} = 6Dt \tag{4}$$

при $t \gg \tau$, т.е. средний квадрат перемещения БЧ возрастает прямо пропорционально времени наблюдения.

Для подтверждения сделанного выше вывода достаточно увидеть, что вследствие уравнения непрерывности

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \mathbf{R}^2 W\, \mathrm{d}R = 2 \int \mathbf{R}\overline{\mathbf{V}} W\, \mathrm{d}R \,,$$

а это требование естественным образом (с учётом параллельности $\overline{\mathbf{V}} \parallel \mathbf{R}$) выполняется одновременно с (4), если справедливо равенство (3).

Попутно заметим, что коэффициент диффузии БЧ D и время корреляции τ всегда можно связать соотношением

$$D = V_0^2\, \tau \equiv \frac{T}{M}\, \tau \,,$$

где T — температура среды, M — масса БЧ, $V_0 = \sqrt{T/M}$ — её характерная тепловая скорость.

2.4. Общий вид вероятностного закона диффузии и неопределённость коэффициента диффузии

Подставляя функцию (3) в (2), приходим к уравнению

$$2t\, \frac{\partial W}{\partial t} = -3W - \mathbf{R}\, \nabla W \,, \tag{5}$$

ясно указывающему на масштабно-инвариантный характер его решений. Интересующие нас изотропные (сферически-симметричные) решения имеют вид

$$W(t, \mathbf{R}) = (2Dt)^{-3/2}\, \Psi\left(\frac{\mathbf{R}^2}{2Dt}\right) \tag{6}$$

с некоторой безразмерной функцией $\Psi(z)$ безразмерного аргумента $z = \mathbf{R}^2/(2Dt)$. У нас она, представляя собой плотность вероятности, во всяком случае должна быть неотрицательной и удовлетворяющей условию нормировки $\int W \mathrm{d}\mathbf{R} = 1$ в совокупности с равенством (4), что заведомо можно соблюсти. При этом (6) есть наиболее общий закон случайного блуждания *диффузионного* типа, когда типичные перемещения БЧ пропорциональны квадратному корню из времени наблюдения: $\mathbf{R}^2(t) \propto t$.

В частности, беря $\Psi(z) = (2\pi)^{-3/2} \exp(-z/2)$, получаем известный гауссов закон диффузии:

$$W = W_D(t, \mathbf{R}) \equiv (4\pi Dt)^{-3/2} \exp\left(-\frac{\mathbf{R}^2}{4Dt}\right) . \tag{7}$$

Соответствующее блуждание привлекательно тем, что на достаточно грубой по сравнению с τ шкале времени его последовательные приращения статистически независимы. Благодаря этому его единственный параметр — коэффициент диффузии D — может быть однозначно определён из наблюдения за любой его частной реализацией с помощью достаточно долгого усреднения по времени.

Но такие же наблюдения за негауссовым блужданием, отвечающим какому-либо из распределений общего вида (6), будут давать каждый раз различные значения коэффициента диффузии [1–4, 7, 10]. Действительно, их совпадение, т.е. стремление всех результатов усреднения по времени к одной и той же величине, было бы невозможно без статистической независимости приращений (по крайней мере, взаимоудалённых во времени), а последняя в свою очередь означала бы, согласно соответствующей предельной теореме теории вероятностей ("закону больших чисел"), что при $t \gg \tau$ распределение пути стремится к гауссову (нормальному) [32].

Это делается очевидным, если представить распределения (6) в виде линейных комбинаций гауссовых "колоколов":

$$W(t, \mathbf{R}) = \int_0^\infty W_\Delta(t, \mathbf{R})\, U\!\left(\frac{\Delta}{D}, \xi\right) \frac{\mathrm{d}\Delta}{D}\,.$$

Такого рода разложения естественным образом возникают в микроскопической теории [12, 16–18]. Соответственно, вместо $\Psi(z)$ в (6) можно подставить

$$\Psi(z, \xi) = \int_0^\infty \frac{\exp\left(-z/2\zeta\right)}{(2\pi\zeta)^{3/2}}\, U(\zeta, \xi)\, \mathrm{d}\zeta\,. \tag{8}$$

Функция $U(\zeta, \xi)$ здесь имеет смысл плотности вероятностного распределения $\zeta = \Delta/D$ — случайного коэффициента диффузии Δ, отнесённого к среднему коэффициенту диффузии D. Последний формально вводится равенством (4), а практически его можно попытаться найти усреднением по множеству экспериментов или одинаковых броуновских частиц.

Дополнительный аргумент ξ в данном разложении, если взять, например, $\xi \equiv \tau/t$ и условиться, что $\Psi(z, 0) = \Psi(z)$, позволяет учесть нарушение идеальной масштабной инвариантности случайного блуждания при $\xi \neq 0$ — в первую очередь далеко на "хвостах" закона диффузии, где $\mathbf{R}^2 \gtrsim V_0^2 t^2$, т.е. $z \gtrsim 1/\xi$. Здесь темп диффузии достигает темпа свободного полёта со значениями $\Delta \sim V_0^2 t = D/\xi$.

Конечно, коррекция хвостов закона диффузии может сильно повлиять на его высшие статистические моменты и кумулянты, даже если $\xi \ll 1$. Однако в главном вид колокола $W(t, \mathbf{R})$ при этом почти не меняется. Соответствующее изменение функции $\overline{\mathbf{V}}(t, \mathbf{R})$, требуемое уравнением (2) и условием (4), мало́ в меру малости ξ, так что выражение (3) остаётся справедливым.

Заметим, что сама возможность нарушения масштабной инвариантности закона диффузии автоматически предполагает его негауссовость, поскольку в гауссовой статистике нарушения просто нет (иначе оно вошло бы в противоречие с условием (4)). Уже этот факт свидетельствует о том, что гауссов закон не совсем адекватен реальности, как бы прочно он ни ассоциировался в сознании учёных с диффузией физических частиц. В то же время ни общие соображения, приводящие к (3) и (5), ни само уравнение (5) никоим образом не навязывают специальный гауссов выбор. Поэтому стоит обсудить другие возможности и поискать критерии выбора между ними в статистической механике.

3. Микроскопический подход

3.1. Уравнение Ньютона и уравнение Лиувилля

Перейдём от кинематики броуновского движения к его динамике и непосредственно рассмотрим взаимодействие БЧ со средой, пользуясь методами статистической механики. С этой целью возьмём для нашей системы обычный простой гамильтониан:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \Phi(\mathbf{R}, \Gamma) + H_{\mathrm{th}}(\Gamma)\,, \tag{9}$$

где $\mathbf{P} = M\mathbf{V}$ — импульс БЧ, Γ — совокупность переменных (канонических) среды, $\Phi(\mathbf{R}, \Gamma)$ — энергия её взаимодействия с БЧ, $H_{\mathrm{th}}(\Gamma)$ — собственная энергия среды (или, можно сказать, "термостата"). Если БЧ имеет внутренние степени свободы, то соответствующие переменные мы включим в состав Γ, формально отнеся их к среде.

Обозначим через $\mathcal{D} = \mathcal{D}(t, \mathbf{R}, \mathbf{P}, \Gamma)$ полную функцию (плотности) вероятностного распределения состояний системы. Её эволюция описывается формально точно уравнением Лиувилля [30, 33]. Выпишем его часть, непосредственно относящуюся к БЧ:

$$\frac{\partial \mathcal{D}}{\partial t} = -\mathbf{V}\,\nabla \mathcal{D} - \mathbf{F}(\mathbf{R}, \Gamma)\,\nabla_{\mathbf{P}} \mathcal{D} + \ldots \tag{10}$$

Здесь $\mathbf{F}(\mathbf{R}, \Gamma) = -\nabla \Phi(\mathbf{R}, \Gamma)$ — сила, действующая на БЧ со стороны среды, а многоточие заменяет слагаемые с производными по Γ.

Для распределения перемещения (координаты) БЧ,

$$W(t, \mathbf{R}) = \iint \mathcal{D}(t, \mathbf{R}, \mathbf{P}, \Gamma)\, \mathrm{d}\Gamma\, \mathrm{d}\mathbf{P}\,,$$

из уравнения (10) после его интегрирования по Γ и $\mathbf{P}$ вытекает, разумеется, уравнение непрерывности (2). Умножив (10) на V и проинтегрировав по тем же переменным, получим дополнительное уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\, \overline{\mathbf{V}} W = -\boldsymbol{\nabla}\, \overline{\mathbf{V} \circ \mathbf{V}}\, W + M^{-1}\, \overline{\mathbf{F}} W\,. \tag{11}$$

Здесь и далее символ $\circ$ обозначает тензорное произведение векторов, а черта сверху, как и ранее, — условные средние значения при заданной величине $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}$, а именно в первом слагаемом правой части

$$\overline{\mathbf{V} \circ \mathbf{V}}(t, \mathbf{R}) = \big\langle \mathbf{V}(t) \circ \mathbf{V}(t) \big\rangle_{\mathbf{R}} = \frac{\iint \mathbf{V} \circ \mathbf{V}\, \mathcal{D}\, \mathrm{d}\Gamma\, \mathrm{d}\mathbf{P}}{W}\,,$$

а во втором слагаемом

$$\overline{\mathbf{F}}(t, \mathbf{R}) = \big\langle \mathbf{F}\big(\mathbf{R}(t), \Gamma(t)\big) \big\rangle_{\mathbf{R}} = \frac{\iint F(\mathbf{R}, \Gamma)\, \mathcal{D}\, \mathrm{d}\Gamma\, \mathrm{d}\mathbf{P}}{W}\,.$$

Уравнение (11) описывает обмен импульсом между БЧ и средой и, по сути, как легко проверить, представляет собой просто уравнение Ньютона $M\,\mathrm{d}\mathbf{V}/\,\mathrm{d}t = \mathbf{F}$, выраженное в терминах условного усреднения:

$$\left\langle M\,\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}(t)}{\mathrm{d}t} - \mathbf{F}\big(\mathbf{R}(t), \Gamma(t)\big)\right\rangle_{\mathbf{R}} = 0\,.$$

Мы получим из него соотношение между функциями $\overline{\mathbf{F}}(t,\mathbf{R})$ и $W(t,\mathbf{R})$, способное послужить для отбора допустимых законов диффузии без дальнейшего углубления в уравнение Лиувилля.

3.2. Уравнение трения броуновской частицы

Заменяя в (11) производную $\partial W/\partial t$ правой частью (2), после несложных преобразований придём к эквивалентному точному уравнению:

$$\frac{\mathrm{d}\overline{\mathbf{V}}}{\mathrm{d}t} + \frac{\boldsymbol{\nabla}\,\overline{\overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}}}\,W}{W} = \frac{\overline{\mathbf{F}}}{M} \tag{12}$$

с "материальной производной" средней скорости БЧ,

$$\frac{\mathrm{d}\overline{\mathbf{V}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\overline{\mathbf{V}}}{\partial t} + (\overline{\mathbf{V}}\,\boldsymbol{\nabla})\,\overline{\mathbf{V}}\,,$$

и двойной чертой сверху, помечающей тензор (матрицу) квадратичных условных кумулянтов скорости (кумулянтов второго порядка):

$$\overline{\overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}}} \equiv \overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}} - \overline{\mathbf{V}}\circ\overline{\mathbf{V}}\,.$$

Обсудим сначала этот последний объект.

Поскольку мы рассматриваем термодинамически равновесное броуновское движение, можно утверждать, что матрица условных кумулянтов $\overline{\overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}}}(t,\mathbf{R})$ при $t \gg \tau$ совпадает с матрицей безусловных равновесных квадратичных моментов скорости, $\langle\mathbf{V}(t)\circ\mathbf{V}(t)\rangle$, т.е. сводится к независящему от $\mathbf{R}$ числу $V_0^2 = T/M$. Действительно, если $t \gg \tau$, то при любом условии $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}$ БЧ фиксируется в точке $\mathbf{R}$ после множества случайных шагов и циклов обмена импульсом и энергией со средой в рамках детального баланса между ними. Поэтому величина (дисперсия) соответствующего теплового разброса скорости БЧ никак не затрагивается данным условием (иначе тепловая кинетическая энергия БЧ, в среднем равная $M\overline{\overline{\mathbf{V}\,\mathbf{V}}}/2$, зависела бы от того, где БЧ наблюдается).

Сказанное подтверждается прямым вычислением матрицы $\overline{\overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}}}(t,\mathbf{R})$ для гауссова случайного блуждания, подчинённого распределению (7), что даёт

$$\overline{\overline{\mathbf{V}\circ\mathbf{V}}}(t,\mathbf{R}) = V_0^2\left(1-\frac{\xi}{2}\right) \to V_0^2 \tag{13}$$

при $\xi \equiv \tau/t \to 0$. Это справедливо и для негауссова блуждания, отвечающего (6) и (8), поскольку различие между ним и гауссовым начинается с кумулянтов высшего порядка.

Далее, сравним между собой первое и второе слагаемые в левой части (12). Для первого слагаемого, подставляя в него выражение (3), имеем

$$\frac{\mathrm{d}\overline{\mathbf{V}}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathbf{R}}{4t^2} = -\frac{\xi}{2}\,\frac{T}{M}\,\frac{\mathbf{R}}{2Dt}\,.$$

Для второго подстановка в него (13) и (6) даёт

$$\left(1-\frac{\xi}{2}\right)\frac{T}{M}\,\frac{2\,\mathrm{d}\ln\Psi(z,\xi)}{\mathrm{d}z}\,\frac{\mathbf{R}}{2Dt} \sim -\frac{T}{M}\,\frac{\mathbf{R}}{2Dt}\,,$$

где, как и ранее, $z = \mathbf{R}^2/(2Dt)$. Здесь выражение в правой части отвечает гауссову закону диффузии, для которого $\mathrm{d}\ln\Psi/\mathrm{d}z = -1/2$, но по порядку величины оно верно и в общем случае, по крайней мере при $z \ll 1/\xi$. Оно показывает, что первое слагаемое, будучи примерно в $2t/\tau$ раз меньше второго, пренебрежимо мало́ в пределе $\xi \to 0$.

Таким образом, рассмотрение достаточно длительных интервалов времени приводит нас от (12) к укороченному соотношению

$$-\left[\frac{T}{D}\left(-\frac{2\,\mathrm{d}\ln\Psi(z,\xi)}{\mathrm{d}z}\right)\right]\frac{\mathbf{R}}{2t} = \overline{\mathbf{F}}\,, \tag{14}$$

напоминающему уравнение вязкого трения с $\mathbf{R}/(2t) = \overline{\mathbf{V}}$ в роли скорости движущегося сквозь вязкую жидкость тела, а в роли коэффициента трения выступает содержимое квадратных скобок.

Ещё одно упрощение можно получить, пренебрегая в рассматриваемом пределе нарушением масштабной инвариантности и трактуя $\Psi(z,\xi)$ как функцию одного аргумента, $\Psi(z)$. В разделах 3.3–3.5 мы сначала так и поступим.

Но прежде рассмотрим исчезающее первое слагаемое в (12). Выражая его вклад в среднюю силу как

$$M\,\frac{\mathrm{d}\overline{\mathbf{V}}}{\mathrm{d}t} = -\nabla\,\frac{M\overline{\mathbf{V}}^2}{2}\,,$$

можно сказать, что это сила реакции среды на добавку $M\overline{\mathbf{V}}^2/2$ к энергии БЧ и системы в целом, вносимую самим измерением пути БЧ, поэтому данная сила не зависит от формы закона диффузии, т.е. и от конкретных особенностей среды. Здесь очевидна аналогия с возмущающим действием измерений в квантовой механике.

Напротив, остающаяся в пределе большого времени часть силы, (14), зависит исключительно от формы вероятностного распределения равновесного броуновского перемещения ("закона диффузии"). Следовательно, она характеризует собственное — невозмущённое наблюдениями — взаимодействие БЧ со средой, в том числе уровни сил и энергий взаимодействия, необходимые для реализации того или иного конкретного закона диффузии. Обсудим с этой точки зрения в первую очередь гауссов закон (7) и убедимся в его нереалистичности.

3.3. Статистический парадокс броуновского движения

Для гауссова закона содержимое круглых скобок в "уравнении трения" (14) сводится к единице, и уравнение становится линейным,

$$\overline{\mathbf{F}} \Rightarrow -\frac{T}{D}\,\frac{\mathbf{R}}{2t} = -\frac{\mathbf{R}}{|\mathbf{R}|}\,\sqrt{z}\,\frac{T}{\sqrt{2Dt}}\,, \tag{15}$$

причём "коэффициент трения" при $\mathbf{R}/(2t) = \overline{\mathbf{V}}$ связан с коэффициентом диффузии соотношением, подобным соотношению Эйнштейна [27, 29]. Такое сходство, однако, является не достоинством, а недостатком равенства (15).

Дело состоит в следующем. Трение в истинном соотношении Эйнштейна представляет собой силу сопротивления среды направленному движению частицы. При перемещении последней на расстояние $\mathbf{R}$ эта сила совершает работу

$$\sim |\mathbf{R}\,\overline{\mathbf{F}}| \sim \frac{T}{D}\,\frac{\mathbf{R}}{t}\,\mathbf{R} \sim zT\,,$$

производя тепло (напомним, что $z = \mathbf{R}^2/(2Dt)$). Данная величина, как и сама сила, в принципе может быть сколь угодно велика при соответствующем исходном запасе кинетической энергии частицы.

Это ясно. Но странно, что равенство (15) предлагает нам такие же характерные величины силы и работы, тоже неограниченные. Такая картина категорически противоречит здравому смыслу.

Ведь у нас, повторимся, фигурирующая в (15) сила представляет собой реакцию среды на перемещение частицы, совершённое по беспорядочной траектории теплового движения, когда исходный запас энергии заведомо всего лишь $\sim T$. При этом среда, препятствуя свободному полёту БЧ по инерции, не чинит препятствий её неограниченному удалению от начала пути. Напротив, оно происходит именно "по воле" среды, за счёт её собственных равновесных флуктуаций.

Поэтому в действительности, вопреки (15), средняя сила (14) как функция пройденного пути $\mathbf{R}$ не может принимать произвольно больших значений, а является ограниченной по абсолютной величине. Этого требует фактически присущая броуновскому движению трансляционная инвариантность, т.е. безразличие системы к безвозвратным уходам БЧ куда угодно. Более того, резонно ожидать, что возвращающая сила исчезает при больших $|\mathbf{R}|$.

Приходится заключить, таким образом, что гауссов закон неадекватен физической природе реального броуновского движения.

Неизбежность этого вывода очевидна, если обратить внимание на то, что равенство (15), будь оно верно, утверждало бы, что среда тянет БЧ к началу её пути с силой, пропорциональной удалению от него, $\overline{\mathbf{F}} \propto -\mathbf{R}$, т.е. как идеальная пружина с потенциальной энергией $zT/2 \propto \mathbf{R}^2$. С физической точки зрения это выглядит абсурдным, поскольку любые далёкие уходы разрешены БЧ именно потому, что не изменяют термодинамического состояния системы.

Наш вывод может показаться парадоксальным, потому что гауссов закон диффузии, который многократно выходил из-под пера теоретиков в различных физических контекстах, занимает центральное место в идеальном мире математической физики. Но парадокс разрешается просто: гауссова статистика всегда появлялась как следствие явного или неявного построения гипотез (либо введения постулатов) о "независимостях" случайных событий или величин. Мы же обошлись без таких гипотез и тем самым показали ошибочность их применения к броуновскому движению.

Ранее мы тоже не связывали себя этими гипотезами и приходили к тому же парадоксальному выводу в рамках как феноменологического статистического анализа процессов диффузии и переноса [1–4, 10], так и анализа на основе полной иерархии уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) [7, 10, 16, 18, 19, 23] или точных "обобщённых флуктуационно-диссипационных соотношений" (ФДС) и "динамических вириальных соотношений" [12, 17, 18, 22], а также другими методами [10, 11, 15], в том числе для квантовых систем [13, 15, 21].

В разделе 4 мы ещё коснёмся "парадокса независимости", но прежде ниже рассмотрим пример физически корректной альтернативы гауссова закона.

3.4. Термодинамика броуновского движения и статистика больших уклонений

Из выражения в левой части (14) понятно, что ограниченность силы $\overline{\mathbf{F}}$ в общем влечёт за собой соотношение

$$\left|\overline{\mathbf{F}}(t, \mathbf{R})\right| \leqslant \overline{F}_{\max}(t) \sim \frac{T}{\sqrt{2Dt}}\,, \tag{16}$$

правую часть которого легко угадать исходя из соображений размерности. Разумеется, символ $\sim$ здесь прячет безразмерный коэффициент, отражающий особенности системы, т.е. детали устройства функции $-\ln \Psi(z)$. Сравнение (16) с (15) показывает, что при $z \gtrsim 1$, в области "хвостов" закона диффузии, гауссов закон требует завысить реальную силу по меньшей мере в $\sim \sqrt{z}$ раз, тем самым совершенно неправильно описывая (очень сильно занижая) вероятности больших перемещений БЧ с $z \gg 1$.

На самом деле, согласно (16), функция $-\ln \Psi(z)$ не может возрастать быстрее, чем $\propto \sqrt{z}$, т.е. $-\ln \Psi(z)/\sqrt{z} < \infty$, так что убывание $W(t, \mathbf{R})$ при больших $|\mathbf{R}| \to \infty$ всегда субэкспоненциальное (во всяком случае, не более быстрое, чем простое экспоненциальное, не говоря уже о "гауссиане").

Отличие "гауссова идеала" от действительности усугубляется, если ограничена не только сама сила, но и величина сопряжённой с ней характерной энергии (работы):

$$A(z) \equiv \frac{|\mathbf{R}||\overline{\mathbf{F}}|}{2} \leqslant A_{\max} = A(\infty) \sim T \tag{17}$$

(с учётом прежнего замечания относительно $\sim$). Этого естественно ожидать, имея в виду, что в результате любого блуждания (любого пути $\mathbf{R}$) среда отбирает у БЧ не больше энергии, чем та была способна получить от среды ранее.

Ограниченность $A(z)$ влечёт за собой ограниченность силы и, кроме того, означает, что с возрастанием $|\mathbf{R}|$ сила, пройдя через максимум, затем убывает до нуля приблизительно как $|\overline{\mathbf{F}}| \approx 2A_{\max}/|\mathbf{R}| \propto T/|\mathbf{R}|$. Эта асимптотика опять-таки подсказывается размерностями величин, предоставляемых нами статистической термодинамике.

В результате, согласно равенству (14), хвосты закона диффузии и вероятности больших уклонений ($z \gg 1$) от типичного поведения ($z \sim 1$) спадают в зависимости от $|\mathbf{R}|$ ещё медленнее, а именно не просто субэкспоненциально, как в общем диктует неравенство (16), а степенны́м образом:

$$\Psi(z) \propto z^{-A_{\max}/T}\,, \qquad z \to \infty\,.$$

Это можно увидеть, если скалярно умножить (14) на $\mathbf{R}$, решить получившееся дифференциальное уравнение, что даёт

$$\Psi(z) = \Psi(0) \exp\left(-\int_0^z \frac{A(z)}{Tz}\,\mathrm{d}z\right),$$

и применить неравенство (17).

Подчеркнём, впрочем, что ограниченность силы, (16), тоже логически влечёт за собой её исчезновение на бесконечности (за исключением особого случая, в котором

$F_{\max}(t) = |\mathbf{F}(t, \infty)|$), так что "пружина" среды всегда сопротивляется только малым "растяжениям", а при больших теряет упругость.

Подходящим примером закона диффузии, удовлетворяющего (17), т.е. обладающего степенны́м хвостом, может служить

$$\Psi(z) = \frac{(3/2+\eta)!}{(2\pi\eta)^{3/2}\eta!}\left(1+\frac{z}{2\eta}\right)^{-5/2-\eta} \tag{18}$$

со свободным параметром $\eta > 0$ (факториал $x!$ — это стандартный "синоним" гамма-функции $\Gamma(x+1)$). При этом очевидно, что $A_{\max} = (5/2+\eta)\,T$. Условие $\eta > 0$ продиктовано конечностью среднего коэффициента диффузии в (4).

Такого рода распределение, с $\eta = 1$, впервые было получено в [16] при рассмотрении броуновского движения ("самодиффузии" [7]) пробного, или меченого, атома газа. Аналогичный (18) результат был найден для молекулярного броуновского движения в жидкости [17, 18]. Правда, в строгом смысле это лишь приближение формально более точных, но и более громоздких выражений, учитывающих, в частности, нарушение масштабной инвариантности.

Формула (18) оказалась также разумным приближением для БЧ, масса M которой отличается от массы m атомов среды (газа). При этом различные математические подходы [19, 22, 23] к уравнениям ББГКИ приводят к одинаковой оценке зависимости параметра η от отношения масс: $\eta = M/m$.

Таким образом, исследование полного (бесконечномерного) уравнения Лиувилля качественно подтверждает выводы нашего полуэвристического анализа начальных членов этого уравнения.

Можно и ещё понизить формальную строгость и попробовать "на пальцах" истолковать математические указания статистической механики на связи между статистикой броуновского движения и его микроскопическим механизмом. Так, обозначая через Π давление среды (газа), отождествим $A_{\max} = A(\infty)$ с величиной $3T/2+\Pi\Omega$, где Ω — объём газа, вытесняемый далеко убежавшей БЧ, а $\Pi\Omega$ — работа вытеснения. По сути, Ω представляет нехватку столкновений БЧ с атомами газа, способствующую нетипично большому уходу БЧ. При этом, поскольку центр масс системы сохраняет своё положение, эффективное уменьшение массы газа вблизи БЧ, $m\Omega n$, где n — средняя плотность числа атомов газа, как раз компенсирует местный избыток массы, $M+m$, отвечающий текущему столкновению БЧ – атом. Отсюда имеем $\Omega = (M/m+1)/n$ и, принимая $\Pi/n = T$ для неплотного газа, $A_{\max} = (5/2+M/m)\,T$.

Подобные рассуждения, конечно, сами по себе ненадёжны, но за ними стоят точные результаты о парных и многочастичных неравновесных статистических корреляциях [12, 17, 18, 22], в частности теорема, утверждающая, что пространственное короткодействие одновременной парной корреляции БЧ – атом (ограниченность "объёма корреляции" Ω) влечёт за собой дальнодействие ("долгоживучесть") разновременны́х корреляций в движении БЧ и тем самым несправедливость гауссова закона диффузии (и наоборот, выполнение последнего требует нелокальности корреляций БЧ – газ в пространстве) [17, 18].

3.5. Неопределённость и фликкерные флуктуации темпа диффузии

Разлагая негауссов закон диффузии (18) по гауссовым в соответствии с (8), для распределения случайной величины $\zeta = \varDelta/D$ получим

$$U(\zeta, 0) = \frac{1}{\eta!\,\zeta}\left(\frac{\eta}{\zeta}\right)^{\eta+1}\exp\left(-\frac{\eta}{\zeta}\right). \tag{19}$$

Согласно ФДС [1, 4, 12] это распределение передаётся подвижности БЧ (по крайней мере, "низкополевой"), и поэтому оно может наблюдаться по измерениям разброса "времени пролёта" (дрейфа) броуновских частиц под действием внешней силы (например, инжектированных электронов или дырок в полупроводниках) [20].

Эффекты негауссовости наблюдались и непосредственно в равновесии — в измерениях "четверных кумулянтов" (неприводимых корреляций четвёртого порядка) флуктуационных токов или напряжений [1]. При этом изучались низкочастотные, на частотах $f \sim 1/t$, флуктуации спектральной мощности теплового электрического шума, т.е., по существу, неопределённость и флуктуации темпа переноса заряда и темпов (коэффициентов) диффузии его носителей.

В нашем примере (18), (19), считая $\eta > 1$, несложно получить

$$\frac{\langle(\mathbf{R}^2)^2\rangle}{\langle\mathbf{R}^2\rangle^2} - 3 = 3\left(\frac{\langle\varDelta^2\rangle}{\langle\varDelta\rangle^2} - 1\right) = \frac{3}{\eta-1}$$

с $\langle\varDelta\rangle = D$ и $\langle\mathbf{R}^2\rangle = 6Dt$. Эта формула показывает не только степень неопределённости темпа диффузии, но и недостатки приближения чистой масштабной инвариантности: расходимость дисперсии флуктуаций темпа при $\eta \leqslant 1$ и её полную независимость от длительности наблюдения. Последнее означает, что флуктуации темпа диффузии подобны квазистатическим со спектром (спектральной плотностью мощности) $S_D(f) \propto D^2\,\delta(f)$, сосредоточенным на нулевой частоте. Это обычный результат первого (хотя и нетривиального) приближения к 1/f-шуму в микроскопической теории [13 – 15].

Разумеется, в более детальном приближении за рамками идеальной масштабной инвариантности [16, 19] хвосты закона диффузии обрезаются по крайней мере при $\mathbf{R}^2 \gtrsim V_0^2 t^2$ ($\varDelta \gtrsim D/\xi \sim V_0^2 t$ в (8)), так что как дисперсия $\varDelta$, так и все высшие статистические моменты $\mathbf{R}$ и $\varDelta$ являются заведомо конечными и вряд ли превышают величины, отвечающие свободному полёту БЧ,

$$\langle(\mathbf{R}^2)^k\rangle \lesssim (2k+1)!!\,(V_0^2 t^2)^k\,, \qquad \langle\varDelta^k\rangle \lesssim (2k+1)!!\left(\frac{V_0^2 t}{2}\right)^k.$$

Вместе с тем дельта-функция $\delta(f)$ некоторым образом "размазывается" с сохранением особенности в нуле и размерности, принимая вид зависимости $\sim 1/f$, где $\sim$ заменяет ту или иную функцию от $\ln(\tau f)$.

Первая из этих коррекций может быть легко описана заменой $U(\zeta, 0)$, определяемого, например, (19), приближённым выражением $U(\zeta, \xi) \approx U(\zeta, 0)\,\Xi(\zeta\xi)$, где $\Xi(0) = 1$ и $\Xi(\cdot)$ достаточно быстро стремится к нулю на бесконечности. Тогда взамен (18) получаем

$$\Psi(z, \xi) \approx \Psi(z)\,\Theta(z\xi)\,,$$

где масштабно-инвариантный сомножитель $\Psi(z)$ даётся исходным выражением, например (18), и аналогично $\Theta(0) = 1$, а $\Theta(\cdot)$ быстро убывает на бесконечности, обеспечивая обрезание длинного хвоста $\Psi(z)$. В результате квадратичный кумулянт Δ оказывается конечным даже при $\eta \leqslant 1$. Кроме того, он приобретает зависимость от времени наблюдения, так что четвёртый кумулянт перемещения БЧ возрастает со временем как $t^{3-\eta}$, если $\eta < 1$, и как $t^2 \ln(t/\tau)$ при $\eta = 1$. Соответственно, квазистатический спектр, который $\propto \delta(f)$, заменяется фликкерным спектром,

$$S_D(f) \sim \frac{D^2}{\pi f} \left(\frac{1}{\tau f}\right)^{1-\eta}, \tag{20}$$

при $\tau f \ll 1$, в частности 1/f-спектром, при $\eta = 1$.

Но при $\eta > 1$ данная коррекция недостаточна для полного "размазывания" частотной дельта-функции — это говорит о том, что нарушение масштабной инвариантности имеет тут более сложный или иной характер. Представление о том, как ещё, например, это нарушение может выглядеть, мы получим, если рассмотрим [1–4, 10, 34] закон диффузии, обладающий свойствами безграничной делимости и устойчивости в смысле теории вероятностей [32], но только асимптотически, в пределе $\xi = \tau/t \to 0$, поскольку никакой реальный процесс переноса физически нельзя раздробить на бесконечно малые независимые части. Соответствующее ядро разложения (8) упрощённо описывается формулой

$$U(\zeta, \xi) \approx \frac{\alpha(\xi) \exp_+\left[-(\zeta - \zeta_0(\xi))/c\right]}{\left[\zeta - \zeta_0(\xi) + \alpha(\xi)\right]^2}, \tag{21}$$

в которой

$$\alpha(\xi) = \frac{1}{\ln(1/\xi)} = \frac{1}{\ln(t/\tau)},$$

$$\exp_+(x) = \begin{cases} \exp(x), & x > 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

функция $\zeta_0(\xi)$ определяется условием (4), т.е. $\int \zeta\, U(\zeta, \xi)\, \mathrm{d}\zeta = 1$, $c = r_0^2/D\tau_0$, где r_0 и τ_0 — минимальные масштабы, пространственный и временной соответственно, на которых "безграничная делимость" случайного блуждания ещё остаётся физически осмысленной (в (21) для простоты предполагается, что константа c не слишком мала, $c \gg \alpha(\xi)$). Как отсюда видно, при $\xi \to 0$ выражение (21) сводится к $U(\zeta, 0) = \delta(\zeta - 1)$. Таким образом, масштабно-инвариантная "затравка" такого закона диффузии — гауссова, что позволяет назвать его квазигауссовым [10]. В [34] такой закон рассмотрен в подробностях вместе с обобщениями и сравнениями с экспериментальными данными [20].

Для хвостов квазигауссова закона при $z \gg 1$ из (8) и (21) находим

$$\frac{\Psi(z, \xi)}{\Psi(0, \xi)} \sim \alpha(\xi)\, \frac{2c\sqrt{\pi}}{z^{3/2}} \exp\left(-\sqrt{\frac{2z}{c}}\right),$$

т.е. хвосты подчиняются требованию ограниченности (16), хотя и лежат на границе множества дозволенных неравенством (16) законов диффузии. А для вытекающего из (21) спектра фликкерных флуктуаций темпа диффузии (или вообще процесса переноса) получаем

$$S_D(f) \approx \frac{D^2 c}{f} \left(\ln \frac{1}{\tau f}\right)^{\gamma}, \tag{22}$$

где $\gamma = -2$.

Спектр (22) отражает различие между наиболее вероятным и средним (по ансамблю) значениями темпа переноса — $\zeta_0(\xi)$ и 1 в (21) в относительных единицах, — причём убывающее со временем наблюдения, пусть и логарифмически медленно: $1 - \zeta_0(\xi) \approx \alpha(\xi) \ln(c/\alpha(\xi))$. Распределение (19) по форме подобно (21) (более или менее крутая "стенка" слева и относительно пологий склон справа), но у (19) аналогичное различие фиксировано. Появление у него зависимости от времени может быть ещё одним, параллельным, сценарием размытия спектра $\propto \delta(f)$ в улучшенном аналитическом приближении к точному решению уравнений ББГКИ. С нашей точки зрения, это актуальная задача статистической механики.

Впрочем, и в имеющихся приближениях микроскопическая теория способна дать реалистичную количественную оценку амплитуды 1/f-шума. Полученные в [7] и в [16, 20] в разных приближениях оценки ((22) с $\gamma = 1$ и (20) с $\eta = 1$ или (22) с $\gamma = 0$ соответственно), хотя и разнятся на фактор $\ln[1/(\tau f)]$, обе вполне согласуются с экспериментальными данными о жидкостях и газах [1, 20] с учётом разброса последних. С другой стороны, схема квазигауссова случайного блуждания хорошо предсказывает или объясняет уровень электрического 1/f-шума в разнообразных системах [1–3, 10, 20]. Поскольку речь при этом идёт о переносе заряда, а не массы (ввиду малости последней у обычных носителей заряда), а взаимодействие блуждающих зарядов со средой — дальнодействующее, неудивительно, что статистика их переноса негауссова существенно по-иному, чем в случае молекулярного броуновского движения. Исследовать её отношение к квантовому многочастичному уравнению Лиувилля или эквивалентной "квантовой иерархии ББГКИ", например, для стандартных электрон-фононных гамильтонианов, тоже представляется актуальной задачей.

На современном этапе развития статистической механики важно констатировать, что при непредвзятом обращении с ней с необходимостью обнаруживаются фликкерные флуктуации темпов процессов переноса, даже темпа блуждания частицы в идеальном газе [17, 18, 22, 23], и, более того, даже в формальном пределе Больцмана–Грэда (исчезающе малого газового параметра) [35].

Данный факт прекрасно высвечивает несостоятельность попыток свести 1/f-шум и выражающие его долгоживущие статистические зависимости и корреляции к некоторым очень большим временам памяти или релаксации, а значит, и несостоятельность мнения, подпитывающего такие попытки, будто всякая статистическая корреляция случайных явлений выдаёт какие-то буквальные или хотя бы опосредованные физические связи между ними.

В разделе 4 мы с помощью одной лишь элементарной логики покажем, что на самом деле в системе многих частиц именно физическая несвязанность их столкновений ведёт к неопределённости и 1/f-шуму частости столкновений и темпа блуждания каждой из них. Тем самым мы с новых позиций подтвердим как общую логику введения, так и проведённый в разделах 2, 3 элементарный математический анализ молекулярного случайного блуждания.

4. Мифы и реалии молекулярных случайных блужданий

4.1. Гауссов вероятностный закон и два смысла независимости случайных явлений

Прежде всего напомним, почему гауссов закон появлялся и появляется в разных теоретических моделях. Одна из причин состоит в том, что гауссов закон естественно вытекает из предположения о статистической независимости перемещений БЧ (приращений случайного блуждания) за различные интервалы времени. Однако главная причина заключается в том, что физики привыкли отождествлять статистическую независимость случайных событий в смысле теории вероятностей с их независимостью в житейском смысле невлияния друг на друга.

Оба эти обстоятельства имеют более чем 300-летнюю историю. История гауссова закона началась со знаменитого "закона больших чисел" Я. Бернулли [36], исследовавшего статистику последовательностей наблюдений за превратностями жизни или, например, бросаниями игральной кости в предположении, что непредсказуемые результаты последовательных "случайных испытаний" взаимно независимы, точнее независимы их вероятности, т.е. совместная вероятность нескольких случайных событий распадается на произведение их индивидуальных вероятностей (факторизуется).

Точно так же вводится статистическая независимость и в современной теории вероятностей [31]. Но в теории вероятностей она — формальная математическая дефиниция, поэтому, как предостерегал А. Колмогоров [31], выводить это свойство вероятностей из независимости физических явлений как таковых допустимо лишь в качестве гипотезы, подлежащей проверке в экспериментах.

Другими словами, никакие свидетельства независимости случайных физических событий при каждой конкретной их реализации (в смысле, например, отсутствия причинно-следственных связей между ними) сами по себе не дают оснований утверждать статистическую независимость этих событий во множестве (статистическом ансамбле) реализаций.

Логически обращая этот тезис, получаем, что если статистические эксперименты обнаруживают статистическую зависимость в ансамбле случайных событий, то это ещё не означает, что за ней стоит реальное взаимодействие между ними. Именно так обстоит дело при встрече с 1/f-шумом.

Таким образом, отождествление двух смыслов "независимости" есть не что иное, как проявление заблуждения, к сожалению, традиционно определяющего отношения физиков со случайностью, несмотря даже на его обстоятельное разоблачение — в контексте фундаментальной статистической механики, — сделанное Н. Крыловым ещё более 60 лет назад [37].

4.2. Столкновения, хаос и шум в системе твёрдых шаров

Математикам Н. Крылов известен как один из основателей современной теории динамического хаоса. Согласно этой теории [38, 39], например, движение $N \geqslant 3$ упругих шаров в ящике или дисков на торе, происходящее по детерминированным законам механики, неотличимо от случайного процесса [39, 40]. Для нас здесь важно, что статистические характеристики этого процесса существенно зависят от соотношения между временем наблюдения за ним и количеством участвующих в нём шаров.

Точнее, рассмотрим роль параметра $t/\tau N$, где τ — среднее время между столкновениями данного шара с прочими и время релаксации его скорости вследствие этих столкновений [16, 18]. При

$$\frac{t}{\tau} \gg N$$

очевидно, что количество $\propto t/\tau$ чисел, описывающих траекторию любого из шаров, много больше количества $\propto N$ чисел, задающих начальное состояние всей системы, так что каждая частная траектория содержит одну и ту же исчерпывающую информацию о системе. Более того, эта информация содержится уже в любой малой части траектории каждого шара с длительностью $\sim N\tau \ll t$.

Благодаря этому обстоятельству флуктуации количества столкновений данного шара от одного подынтервала времени длительностью $\sim N\tau$ к следующему ведут себя как статистически независимые случайные величины, или как белый шум (что и понятно: присутствие в них закономерности или корреляции показало бы ещё не реализованную специфику начального состояния системы, а это противоречило бы условию $t \gg N\tau$). Соответственно, усреднённая по всему времени наблюдения "частость" (термин [37]) столкновений шара почти неслучайна, т.е. одна и та же для всех шаров и всех начальных условий (при фиксированной полной энергии системы, разумеется), а статистика флуктуаций числа столкновений (данного шара) на интервалах $t \gg N\tau$ подчиняется закону больших чисел, т.е. асимптотически является гауссовой.

4.3. Парадокс независимости

Такое представление хаоса столкновений — как обычного шума — весьма привлекательно для физиков. Но не забудем, что для построения такой картины понадобилось условие $t/\tau \gg N$, устанавливающее жёсткую (детерминированную) нелокальную во времени и пространстве (неисчезающую при $t/\tau \to \infty$ и охватывающую все шары) физическую (причинно-следственную) взаимозависимость между столкновениями. Именно благодаря ей, как это ни парадоксально, обеспечивается статистическая независимость отдалённых во времени или пространстве событий (столкновений).

Как видно, поддержание идеального беспорядка, с которым обычно ассоциируют статистическую независимость, требует неусыпного подспудного контроля за ним и в этом смысле — глобального порядка.

Тут невольно вспоминается Дронт из *Алисы в стране чудес* Л. Кэррола, расставлявший других персонажей "строго как попало" или "строго в беспорядке" (хотя эти забавно парадоксальные слова принадлежат скорее переводчику Б. Заходеру, чем самому автору). Напрашивается также сравнение с загадочной "квантовой нелокальностью" и "запутанными квантовыми состояниями".

4.4. Неопределённость и 1/f-шум частости столкновений и темпа диффузии

Однако в реальном мире непросто так строго отмерить временной беспорядок случайных событий, чтобы осуществился закон больших чисел. Непросто по той простой причине, что для реальных многочастичных систем характерно обратное соотношение между практической (достигаемой в эксперименте) длительностью наблюдения и количеством частиц в системе:

$$\frac{t}{\tau} \ll N\,.$$

Поэтому любимая в математической физике апелляция к произвольно большим временам усреднения не имеет под собой оснований [40].

Последнее неравенство выполняется даже для весьма малых объёмов жидкости или газа [18], изолированных от остального мира. А с учётом невозможности полной изоляции выполняется почти всегда, так как к N тогда надо добавить число атомов (и вообще степеней свободы) необъятного внешнего окружения системы. Тем более под это неравенство подпадают объекты гиббсовской статистической механики, в которой число частиц N неограниченно. Именно к ней относится критический анализ Крылова [37].

Теперь количество $\propto t/\tau$ чисел, достаточных для описания наблюдённой траектории той или иной частицы (шара), всё время мало́ по сравнению с количеством $\propto N$ независимых причин (параметров начального состояния системы), влияющих на устройство этой траектории.

Но усреднение по относительно малому числу следствий большого числа причин не может дать определённый результат, поскольку он остаётся зависящим от множества неизвестных свободных параметров и не представляет все возможные варианты течения событий, тем более в каком-то определённом их соотношении. Поэтому усреднение по времени, доступному для наблюдения за жизнью частицы, в каждом опыте (на разных частях или реализациях фазовой траектории системы) неизбежно будет давать непредсказуемое новое значение частости её столкновений и тем более новое распределение (гистограмму) столкновений (или более сложных событий) по их внутренним характеристикам. Иначе говоря, экспериментатор встретит $1/f$-шум (см. введение).

Отсюда следует, что вместо измышления гипотез о частостях или "вероятностях" и "независимостях" событий, составляющих случайные блуждания, лучше всё-таки, подражая Ньютону [8], предаться исследованию уравнений статистической механики.

4.5. Игра в независимости и проблемы статистической механики

К исследованию уравнений статистической механики вместо выдвижения гипотез призывал и Н. Крылов, разъясняя ошибочность распространённого мнения, "*будто вероятностный закон существует независимо от теоретической схемы и полного опыта*" и «*будто явления,* "*очевидно независимые*", *должны иметь независимые законы вероятностного распределения*» [37].

Под полным опытом здесь подразумевается конкретная реализация фазовой траектории системы, взятая как единое целое — как образ конкретного эксперимента — без искусственного дробления времени наблюдения на "независимые" интервалы (таким образом, в разделах 2 и 3 мы рассматривали именно полный опыт). Поскольку при $N \gg t/\tau$ сглаженная по времени частость данного сорта явлений (столкновений данной частицы с прочими) изменяется от опыта к опыту, мы не можем ввести для них по отдельности определённую априорную "вероятность". Это означает, что все они оказываются статистически зависимыми друг от друга, так как, фигурально выражаясь, все они одинаково ответственны за результирующую, каждый раз новую, частость их появления (апостериорную вероятность). При этом физически они независимы, поскольку при $N \gg t/\tau$ обусловлены взаимодействием с разными группами из полного числа N частиц. Соответственно, рушится бернуллиевский закон больших чисел, основанный на постулате о статистических независимостях.

Здесь мы ясно видим другую сторону "парадокса независимости": истинный, полноценный, хаос влечёт за собой бесконечно протяжённые во времени статистические зависимости и корреляции.

Понятно, почему молекулярное броуновское движение, сопряжённое с таким полноценным хаосом, не желает укладываться в прокрустово ложе гауссовой статистики и тем более больцмановской кинетики.

5. Заключение

К сожалению, отмеченные выше популярные легкомысленные представления о зависимостях и вероятностях случайных явлений "*настолько привычны, что даже человек, согласившийся с нашей аргументацией, часто снова невольно к ним возвращается, как только он сталкивается с новым вопросом. Причина стойкости этих представлений в том, что они основаны на нашем интуитивном знании статистических законов, и потому они были бы допустимыми и целесообразными, если бы речь шла об изучении явлений конкретной действительности. Однако такие представления оказываются совершенно неудовлетворительными в качестве исходного пункта для обоснования самих вероятностных законов, когда речь идёт о связи статистических законов и принципов микромеханики*" [37].

К счастью, сегодня у нас есть понимание ошибочности подмены микромеханики умозрительными вероятностными конструкциями, какими бы красивыми и правдоподобными они ни казались. Уже есть, как мы тоже отметили выше, и некоторый практический опыт последовательного изучения уравнений статистической механики в задачах о процессах переноса. Он ясно показывает, что механика систем очень большого числа взаимодействующих частиц, или степеней свободы, никоим образом не предписывает взаимодействиям определённости темпов смены микросостояний системы (вероятностей переходов), даже когда молекулярный хаос принимает вид макроскопического порядка.

Дело в том, что реализация всякого "элементарного" акта взаимодействий есть продукт полного (начального) микросостояния системы, поэтому количество причин видимой случайности всегда намного больше количества её проявлений, подвергаемых усреднению по фактически достижимым временам эксперимента. Как следствие, всякий конкретный эксперимент предоставляет исследователю свою уникальную коллекцию частостей ("вероятностей") случайных событий, составляющих наблюдаемый процесс. Это и есть $1/f$-шум.

Таким образом, удивляться $1/f$-шуму имеется не больше оснований, чем удивляться шуму вообще. Он нужен природе как отражение в каждом частном "необратимом" процессе всего неисчерпаемого ресурса её случайности, а в целом — неповторимости наблюдающейся реализации Вселенной во всех масштабах её времени. Чисто стохастический мир, без $1/f$-шума, в котором всё легко усредняется, был бы скучен (и даже, пожалуй, подавлял бы свободу воли [41]).

К сожалению, как мы могли убедиться выше, 1/f-шум имеет "плохую" статистику, совершенно чуждую закону больших чисел, подобную той, которая иногда заставляет её наблюдателей (см., например, [42]) подозревать в ней неведомые "космофизические факторы". Это обстоятельство радикально усложняет задачи теории.

К счастью, хотя влияние космоса безусловно никогда не исключается, достаточный для появления 1/f-шума источник случайности скрывает в себе, как отмечено выше, уже такая простейшая система, как молекулярная броуновская частица во взаимодействии с идеальным газом. И вообще, как мы продемонстрировали, такой источник содержит любая среда, допускающая броуновское движение. Так что имеются шансы на удачу в построении и сравнении с экспериментальными результатами теории 1/f-шума (и сопровождающих его аномалий статистики), опирающейся на вполне обычные гамильтонианы.

Надеемся, что данные заметки побудят кого-либо из заинтересованных читателей к работе в этой интригующей области статистической физики.

Список литературы

1. Бочков Г Н, Кузовлев Ю Е *УФН* **141** 151 (1983); Bochkov G N, Kuzovlev Yu E *Sov. Phys. Usp.* **26** 829 (1983)
2. Кузовлев Ю Е, Бочков Г Н "О природе и статистических характеристиках 1/f-шума", Препринт № 157 (Горький: НИРФИ, 1982); Kuzovlev Yu E, Bochkov G N, arXiv:1211.4167
3. Кузовлев Ю Е, Бочков Г Н *Изв. вузов. Радиофизика* **26** 310 (1983); Kuzovlev Yu E, Bochkov G N *Radiophys. Quantum Electron.* **26** 228 (1983)
4. Бочков Г Н, Кузовлев Ю Е *Изв. вузов. Радиофизика* **27** 1151 (1984); Bochkov G N, Kuzovlev Yu E *Radiophys. Quantum Electron.* **27** 811 (1984)
5. Жигальский Г П *УФН* **173** 465 (2003); Zhigal'skii G P *Phys. Usp.* **46** 449 (2003)
6. Balandin A A *Nature Nanotechnol.* **8** 549 (2013); arXiv:1307.4797
7. Кузовлев Ю Е *ЖЭТФ* **94** (12) 140 (1988); Kuzovlev Yu E *Sov. Phys. JETP* **67** 2469 (1988)
8. Newton I *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* (Londini: Jussu Societatis Regiae, 1684); *The Principia*: *Mathematical Principles of Natural Philosophy* (Berkeley, Calif.: Univ. of California Press, 1999); Ньютон И *Математические начала натуральной философии* (Пер. с лат. А Н Крылова) (М.: Наука, 1989)
9. Weissman M B *Rev. Mod. Phys.* **60** 537 (1988)
10. Kuzovlev Yu E, cond-mat/9903350
11. Кузовлев Ю Е *ЖЭТФ* **111** 2086 (1997); Kuzovlev Yu E *JETP* **84** 1138 (1997)
12. Бочков Г Н, Кузовлев Ю Е *УФН* **183** 617 (2013); Bochkov G N, Kuzovlev Yu E *Phys. Usp.* **56** 590 (2013)
13. Кузовлев Ю Е, Медведев Ю В, Гришин А М *Письма в ЖЭТФ* **72** 832 (2000); Kuzovlev Yu E, Medvedev Yu V, Grishin A M *JETP Lett.* **72** 574 (2000)
14. Кузовлев Ю Е, Медведев Ю В, Гришин А М *ФТТ* **44** 811 (2002); Kuzovlev Yu E, Medvedev Yu V, Grishin A M *Phys. Solid State* **44** 843 (2002)
15. Kuzovlev Yu E, arXiv:1302.0373
16. Kuzovlev Yu E, cond-mat/0609515
17. Kuzovlev Yu E, arXiv:0802.0288; arXiv:0803.0301
18. Кузовлев Ю Е *ТМФ* **160** 517 (2009); Kuzovlev Yu E *Theor. Math. Phys.* **160** 1301 (2009)
19. Kuzovlev Yu E, arXiv:1007.1992
20. Kuzovlev Yu E, arXiv:1008.4376
21. Kuzovlev Yu E, arXiv:1207.0058
22. Kuzovlev Yu E, arXiv:1209.5425
23. Kuzovlev Yu E, arXiv:1311.3152
24. Brown R *Edinburgh New Phil. J.* **5** 358 (1828)
25. Brongniart A *Ann. Sci. Naturelles* **12** 41 (1827)
26. Einstein A *Ann. Physik* **17** 549 (1905); Эйнштейн А *Собрание научных трудов* Т. 3 (М.: Наука, 1966) с. 108
27. Einstein A *Ann. Physik* **19** 289 (1906); Эйнштейн А *Собрание научных трудов* Т. 3 (М.: Наука, 1966) с. 75
28. Einstein A *Ann. Physik* **19** 371 (1906); Эйнштейн А *Собрание научных трудов* Т. 3 (М.: Наука, 1966) с. 118
29. Лифшиц Е М, Питаевский Л П *Физическая кинетика* (М.: Наука, 1979); Lifshitz E M, Pitaevskii L P *Physical Kinetics* (Oxford: Pergamon Press, 1981)
30. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Физматлит, 2004)); Landau L D, Lifshitz E M *Statistical Physics* Vol. 1 (Oxford: Pergamon Press, 1980)
31. Колмогоров А Н *Основные понятия теории вероятностей* (М.: Наука, 1974); Kolmogorov A N *Foundations of the Theory of Probability* (New York: Chelsea, 1956)
32. Feller W *An Introduction to Probability Theory and Its Applications* (New York: Wiley, 1968); Феллер В *Введение в теорию вероятностей и ее приложения* Т. 2 (М.: Мир, 1984)
33. Арнольд В И *Математические методы классической механики* (М.: Наука, 1989); Arnold V I *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (New York: Springer, 1997)
34. Бочков Г Н, Кузовлев Ю Е "К теории 1/f-шума", Препринт № 195 (Горький: НИРФИ, 1985)
35. Kuzovlev Yu E, arXiv:1411.3261
36. Bernoulli J *Ars Conjectandi* (Basel: Thurneysen Brothers, 1713); Бернулли Я *О законе больших чисел* (М.: Наука, 1986)
37. Крылов Н С *Работы по обоснованию статистической физики* (М.–Л.: Изд-во АН СССР, 1950); Krylov N S *Works on the Foundations of Statistical Physics* (Princeton, N.J.: Princeton Univ. Press, 1979)
38. Лоскутов А Ю *УФН* **180** 1305 (2010); Loskutov A *Phys. Usp.* **53** 1257 (2010); Лоскутов А Ю *УФН* **177** 989 (2007); Loskutov A Yu *Phys. Usp.* **50** 939 (2007)
39. Гальперин Г А, Земляков А Н *Математические бильярды* (М.: Наука, 1990); Chernov N, Galperin G, Zemlyakov A *The Mathematics of Billiards* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003)
40. Arnold V I, Avez A *Problèmes Ergodiques de la Mécanique Classique* (Paris: Gauthier-Villars, 1967); *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (New York: Benjamin, 1968); Арнольд В И, Авец А *Эргодические проблемы классической механики* (Ижевск: РХД, 1999)
41. Стругацкий А, Стругацкий Б *За миллиард лет до конца света* (М.: Сталкер, 2005); Strugatsky A, Strugatsky B *Definitely Maybe*: *a Manuscript Discovered under Strange Circumstances* (Brooklyn: Melville House Publ., 2014)
42. Шноль С Э и др. *УФН* **168** 1129 (1998); Shnoll S E et al. *Phys. Usp.* **41** 1025 (1998)

Why nature needs 1/f-noise

Yu.E. Kuzovlev
Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering, National Academy of Sciences of Ukraine,
ul. R. Luxemburg 72, 83114 Donetsk, Ukraine. E-mail: yuk-137@yandex.ru

While ubiquitous at all levels of nature's organization, including objects of today's nanotechnology, the low-frequency 1/f-noise is not yet understood. A possible reason is the uncritical application of probability theory concepts, primarily that of independence, to physical random phenomena. It is shown that in the framework of statistical mechanics no medium can impart a certain definite diffusivity and mobility to a particle that performs a random walk through it, which gives rise to flicker fluctuations in these properties. This example realizes a 1/f-noise source universal for many-particle systems, namely, the dependence of time behavior of any particular relaxation or transport process on the details of initial microstate of the system as a whole.

Keywords: 1/f-noise, molecular random walks, Brownian motion, statistical mechanics of transport processes, dynamical foundations of kinetics, deterministic chaos in many-particle systems

PACS numbers: 05.20.Jj, 05.40.Fb
Bibliography — 42 references
Uspekhi Fizicheskikh Nauk **185** (7) 773–783 (2015)

DOI: 10.3367/UFNr.0185.201507d.0773
Received 22 January 2015, revised 24 April 2015
Physics – Uspekhi **58** (7) (2015)