

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

536.75:530.145

**ПРИМЕР ОПИСАНИЯ ДИССИПАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ
НА ОСНОВЕ ОБРАТИМЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
И НЕКОТОРЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ
ОТНОСИТЕЛЬНО ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННОЙ ТЕОРЕМЫ**

В. И. Татарский

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	273
1. Решение задачи о движении системы взаимодействующих осцилляторов	275
2. Усредненное движение макроскопического осциллятора и его сопоставление с феноменологическим описанием, основанным на законе Ома	279
3. Равновесные флуктуации. Обсуждение флуктуационно-диссипационной теоремы и формулы Найквиста	289
4. Квантовая флуктуационно-диссипационная теорема и формула Найквиста	296
Основные выводы	305
Список литературы	307

ВВЕДЕНИЕ

В противоположность замкнутым системам, описываемым при помощи гамильтонова формализма, незамкнутые диссипативные системы описываются при помощи тех или иных феноменологических уравнений. Если описание проводится на макроскопическом уровне, то таким уравнением может быть, например, уравнение движения, в которое введена сила трения. Примером феноменологических уравнений, описывающих систему на микроскопическом уровне, могут служить кинетические уравнения. При этом если гамильтоново описание исходит из «первых принципов» физики, то использование феноменологических уравнений всегда связано с дополнительными предположениями, справедливость которых ограничена *). Так, некоторые теоремы, справедливые для гамильтоновых систем, нарушаются (например, фазовый объем, связанный с теми степенями свободы, в которые вводится диссипация, уже не сохраняется). Диссипативные параметры, такие, как сила трения, электрическое сопротивление, эффективная частота соударений и т. п., при этом вводятся в уравнения как параметры, описывающие взаимодействие рассматриваемой системы с термостатом и с другими системами. Принципиальные трудности возникают при совместном анализе диссипативных и квантовых явлений, поскольку последовательное квантовое рассмотрение возможно лишь для гамильтоновых систем.

*) Впрочем, в недавно вышедшей книге Пригожина¹ высказывается прямо противоположная точка зрения о том, что в основу физики должны быть положены уравнения, явно учитывающие принципиальную необратимость процессов. Необходимость столь кардинального изменения фундаментальных принципов физики представляется сомнительной.

Между тем, хотя бы в принципе, возможно совместное описание рассматриваемой системы и всех взаимодействующих с ней систем (включая термостат) в рамках единого гамильтонова формализма. При таком описании все диссипативные параметры должны «автоматически» возникать в процессе решения задачи и, естественно, должны выражаться через параметры полного гамильтониана. Такая возможность обычно упоминается во вводных параграфах любого курса статистической физики, но лишь как потенциально возможная, но реально не осуществимая ввиду непреодолимых технических трудностей.

Данная методическая статья посвящена анализу простейшей, но не тривиальной задачи, в которой такой подход может быть реализован. Мы рассматриваем поведение макроскопического осциллятора, взаимодействующего с термостатом, который тоже состоит из осцилляторов, взаимодействующих как между собой, так и с выделенным осциллятором.

Поскольку задача о системе связанных осцилляторов решается *точно* как в классическом, так и в квантовом случаях, на этом примере можно проследить переход от чисто динамического описания на основе обратимых уравнений к статистическому описанию. При этом естественным образом возникает описание и усредненного движения осциллятора, и его флуктуации. Рассматриваемая система совершает периодическое (или почти-периодическое) движение и имеет время T_0 точного (или приближенного) возврата к начальному состоянию (длительность цикла Пуанкаре). Коэффициенты квадратичной формы потенциальной энергии можно подобрать так, что на начальном («диссипативном») этапе эволюции системы (при $t \ll T_0/2$) происходит затухание колебаний макроскопического осциллятора, которое при приближении t к T_0 сменяется их ростом. Закон затухания усредненного движения полностью определяется спектром нормальных колебаний всей системы и не зависит от закона распределения вероятностей координат и скоростей осцилляторов термостата. Параметры, играющие на начальном этапе эволюции роль «диссипативных», выражаются через величины, входящие в *полный* гамильтониан.

Рассмотренная модель помогает прояснить смысл флуктуационно-диссипационной теоремы Каллена — Вельтона (ФДТ). Последняя доказывается для *гамильтоновой* системы, не содержащей диссипации, и связывает корреляционную функцию флуктуации с функцией Грина этой гамильтоновой системы. Однако фактически ФДТ применяется к *негамильтоновым* системам, описываемым феноменологическими (микроскопическими или макроскопическими) уравнениями, явно содержащими диссипативные параметры. Это может быть оправдано тем, что упомянутые феноменологические уравнения, описывающие диссипативные процессы, действительно способны хорошо описывать поведение системы, но лишь на *первоначальном* этапе ее эволюции, **при $t \ll T_0/2$** . Эти уравнения становятся заведомо непригодными при $t \sim T_0$. К счастью, в подавляющем большинстве задач физики T_0 настолько велико, что нас просто не интересуют времена, сравнимые с этим временем, и феноменологическое описание, использующее диссипативные уравнения, практически оказывается весьма точным. Однако если мы пытаемся понять, как в ФДТ появляются диссипативные характеристики, несмотря на то, что эта теорема является следствием чисто гамильтоновского описания, то следует иметь в виду сказанное выше.

В рамках рассматриваемой частной задачи можно вывести и формулу Найквиста, соответствующую электрическому колебательному контуру с постоянным сопротивлением. Она может быть получена, если сделать соответствующее предположение о спектре нормальных колебаний рассматриваемой системы осцилляторов.

Наконец, в рамках рассматриваемой модели можно естественным путем вывести из обратимых уравнений квантовой механики квантовую формулу Найквиста.

Отметим, что задача об осцилляторе, взаимодействующем с термостатом, также состоящем из осцилляторов, имеет характерную особенность, связанную с неэргодичностью этой системы. Действительно, представив рассматриваемую колебательную систему в виде совокупности независимых нормальных колебаний, мы видим, что в отдельности сохраняется энергия каждого из них. Поэтому в процессе эволюции система никогда не попадает в те области фазового пространства, которые несовместимы с начальным распределением полной энергии по модам. По существу, та же трудность хорошо известна и в теории равновесного теплового излучения, где ее обходят путем включения в систему пренебрежимо малого тела, обеспечивающего обмен энергией между различными модами. В настоящей работе будет использован прием, заключающийся в том, что на этапе формирования начальных условий, соответствующих распределению Гиббса, т. е. при $t < 0$, мы рассматриваем более сложную систему с дополнительными взаимодействиями, обеспечивающими возможность обмена энергией между модами. Такая «расширенная» система может в принципе обеспечивать установление распределения Гиббса за счет реализации в ней режима «динамического хаоса»². Однако после фиксации начальных условий (при $t = 0$) эти дополнительные взаимодействия выключаются и рассматриваемая система становится чисто колебательной и линейной.

Вторая особенность, связанная с неэргодичностью, заключается в необходимости использовать не статистическое, а временное усреднение, которое является более естественным при нашем чисто динамическом подходе. **Временное** усреднение соответствует и процедуре измерения средних значений в эксперименте. Существенно, что при повторных измерениях нет необходимости, как это будет показано далее, снова формировать начальные условия, соответствующие распределению Гиббса — все повторные временные усреднения для нестационарных процессов можно производить на единственной рассматриваемой динамической траектории в фазовом пространстве.

С несколько иных позиций термостат, состоящий из осцилляторов, рассматривался на микроскопическом уровне во многих работах. Так, при анализе туннелирования из метастабильного состояния учет диссипативных эффектов оказывается весьма существенным. Поскольку это — сугубо квантовое явление, то его последовательное рассмотрение должно базироваться на гамильтоновом формализме, и здесь термостат из осцилляторов оказывается весьма удобной моделью (см. обзор³ и цитированную в нем литературу). Осциллятор, взаимодействующий с термостатом, также состоящим из осцилляторов, рассматривался в работах^{4,5}. Более подробно на этих работах мы остановимся несколько позже.

1. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ДВИЖЕНИИ СИСТЕМЫ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Итак, рассмотрим систему из n взаимодействующих осцилляторов, координаты которых $q_1, \dots, q_n$, массы $m_1, \dots, m_n$; в случае электрических колебаний q_i — заряды конденсаторов, а массы m_i заменяются на индуктивности L_i . Функция Лагранжа системы имеет вид *)

$$L = K - U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \kappa_{ij} q_i q_j. \quad (1.1)$$

Квадратичная форма потенциальной энергии U положительно определенная, что соответствует устойчивому положению равновесия в точке $q_i = \dots$

*) При нумерации формул разделу соответствует цифра после точки.

$\dots = q_n = 0$. Квадратичную форму кинетической энергии K мы сразу же приняли диагональной, что не ограничивает общности результатов *).

Перейдем к нормальным координатам. Как известно (см., например, ⁶), преобразованием вида

$$q_i = m_i^{-1/2} \sum_{v=1}^n S_{iv} x_v, \quad (2.1)$$

где S_{iv} — вещественная ортогональная матрица, можно привести лагранжиан (1.1) к диагональному виду. Ортогональность S_{iv} означает, что

$$\sum_{i=1}^n S_{iv} S_{i\mu} = \delta_{v\mu}, \quad (3a.1)$$

$$\sum_{v=1}^n S_{iv} S_{jv} = \delta_{ij}. \quad (3b.1)$$

Квадратичная форма кинетической энергии при любом выборе S_{iv} в силу (3a.1) остается диагональной и принимает вид

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i, v, \mu} S_{iv} S_{i\mu} \dot{x}_v \dot{x}_\mu = \frac{1}{2} \sum_{v=1}^n \dot{x}_v^2. \quad (4.1)$$

Квадратичная форма потенциальной энергии диагонализуется, если в качестве S_{iv} выбрать матрицу, удовлетворяющую одному из эквивалентных условий **)

$$\sum_{i, j=1}^n \frac{\kappa_{ij}}{(m_i m_j)^{1/2}} S_{iv} S_{j\mu} = \lambda_v \delta_{v\mu}, \quad (5a.1)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{\kappa_{il}}{(m_i m_l)^{1/2}} S_{iv} = \lambda_v S_{lv}, \quad (5b.1)$$

$$\kappa_{jl} = (m_j m_l)^{1/2} \sum_{v=1}^n \lambda_v S_{jv} S_{lv} \quad (5b.1)$$

Легко проверить, что эти равенства эквивалентны в силу условий ортогональности (3.1). Из (5b.1) видно, что для нахождения S_{iv} достаточно найти собственные векторы и собственные значения матрицы $g_{il} = \kappa_{il}/(m_i m_l)^{1/2}$, т. е. найти все нетривиальные решения задачи

$$\sum_{i=1}^n g_{il} \Phi_i = \lambda \Phi_l.$$

Если занумеровать различные решения этой задачи индексом v , то видно, что после соответствующей нормировки решений $\Phi_i^{(v)}$ (и, возможно, их ортогонализации при наличии вырождения) можно положить $S_{iv} = \Phi_i^{(v)}$. Формула (5b.1) дает каноническое разложение матрицы g_{il} по ее собственным

*) В общем случае (неортогональные криволинейные координаты или наличие коэффициентов взаимной индукции) квадратичная форма K может и не быть диагональной. В этом случае ее можно привести к виду (1.1), что изменит и U . Однако, так как U взята в виде квадратичной формы общего вида, такое ее преобразование не является существенным.

**) На протяжении всей статьи знак суммирования всегда выписывается в явной форме, поскольку очень часто индекс суммирования встречается более двух раз (как в (5b.1)). Поэтому появление в формуле одинаковых индексов (как в правой части (5a.1)) не означает суммирования.

векторам S_{iv} . Из формулы (5a.1) при $v = \mu$ видно, что $\lambda_v > 0$ в силу положительной определенности матрицы κ_{ij} , т. е. в силу устойчивости положения равновесия $q_i = 0$.

С учетом равенства (5a.1) получаем, что функция Лагранжа (1.1) принимает вид

$$L = \frac{1}{2} \sum_{v=1}^n (\dot{x}_v^2 - \lambda_v x_v^2). \quad (6.1)$$

Отсюда заключаем, что $\lambda_v = \omega_v^2$, где ω_v — частоты нормальных колебаний системы осцилляторов.

Итак, по исходным величинам m_i , κ_{ij} можно найти ω_v^2 , S_{iv} . Согласно (5b.1) справедливо и обратное: по заданным ω_v^2 , S_{iv} и m_i можно однозначно восстановить и исходную матрицу κ_{ij} :

$$\kappa_{ij} = (m_i m_j)^{1/2} \sum_{v=1}^n \omega_v^2 S_{iv} S_{jv}. \quad (5г.1)$$

Поэтому если рассматривается колебательная система общего вида, то всегда можно считать, что она задается совокупностью величин m_i , ω_v^2 , S_{iv} . Именно так мы и будем полагать далее.

Уравнения движения, соответствующие лагранжиану (1.1), имеют вид

$$m_i \ddot{q}_i + \sum_{j=1}^n \kappa_{ij} q_j = 0.$$

Мы включим в правые части этих уравнений внешние силы $F_i(t)$, так что соответствующие уравнения принимают вид

$$m_i \ddot{q}_i + \sum_{j=1}^n \kappa_{ij} q_j = F_i(t). \quad (7.1)$$

Подставляя сюда (2.1), легко получить с учетом (5б.1) и (3.1) уравнения

$$\ddot{x}_v + \omega_v^2 x_v = f_v(t), \quad (8a.1)$$

$$f_v(t) = \sum_{j=1}^n S_{jv} F_j(t) (m_j)^{-1/2}. \quad (8б.1)$$

Их решение имеет вид

$$x_v(t) = x_v(0) \cos \omega_v t + \frac{\dot{x}_v(0)}{\omega_v} \sin \omega_v t + \frac{1}{\omega_v} \int_0^t \sin [\omega_v(t-t')] f_v(t') dt'. \quad (9.1)$$

Вернемся теперь непременным $q_i(t)$. Подставляя (9.1) в (2.1), получим формулу

$$q_i(t) = \frac{1}{m_i^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{iv} \left\{ x_v(0) \cos \omega_v t + \omega_v^{-1} \dot{x}_v(0) \sin \omega_v t + \right. \\ \left. + \omega_v^{-1} \int_0^t \sin [\omega_v(t-t')] f_v(t') dt' \right\}. \quad (10.1)$$

Из этой формулы следует исключить начальные значения $x_v(0)$ и $\dot{x}_v(0)$, выразив их через $q_i(0)$, $\dot{q}_i(0)$. Это можно сделать, если учесть, что преобразование (2.1) легко обращается с учетом (3a.1):

$$x_v(t) = \sum_{j=1}^n m_j^{1/2} S_{jv} q_j(t).$$

Отсюда находим

$$x_v(0) = \sum_{j=1}^n m_j^{1/2} S_{jv} q_j(0), \quad \dot{x}_v(0) = \sum_{j=1}^n m_j^{1/2} S_{jv} \dot{q}_j(0).$$

Подставляя эти выражения в (10.1) и учитывая (86.1) и (2.1), можно получить следующую формулу для решения уравнения (7.1):

$$q_i(t) = \sum_{j=1}^n \left[\dot{G}_{ij}(t) m_j q_j(0) + G_{ij}(t) m_j \dot{q}_j(0) + \int_0^t G_{ij}(t-t') F_j(t') dt' \right]; \quad (11.1)$$

здесь введено обозначение

$$G_{ij}(t) = \frac{1}{(m_i m_j)^{1/2}} \sum_{v=1}^n \frac{S_{iv} S_{jv}}{\omega_v} \sin \omega_v t, \quad (12.1)$$

причем $G_{ij}(t)$ представляет собой функцию Грина задачи (отклик i -го осциллятора на начальный импульс, действующий на j -и осциллятор).

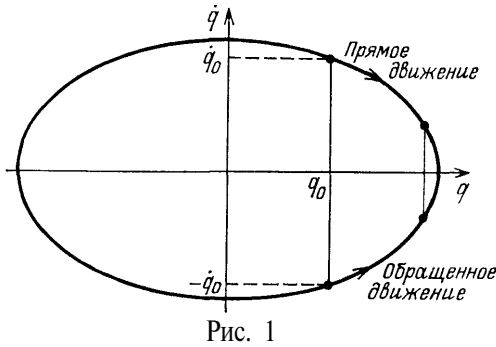


Рис. 1

Рассмотрим некоторые общие свойства функции Грина $G_{ij}(t)$. Из ее определения (12.1) видно, что она *нечетна* по времени. Это фундаментальное свойство вытекает из *обратимости* движения во времени. Чтобы пояснить это, запишем величину $q_i(t)$, задаваемую формулой (11.1) при $F_j = 0$ (т. е. описывающую свободное движение осциллятора) в виде $q_i(t; q^0, \dot{q}^0)$. Тогда обратимость во времени будет означать, что если изменить знаки начальных скоростей и направление времени, то величины q_i остаются неизменными: $q_i(-t; q^0, -\dot{q}^0) = q_i(t; q^0, \dot{q}^0)$. Рис. 1 поясняет это соотношение для движения одного осциллятора. Подставив в это равенство

$$q_i(t; q^0, \dot{q}^0) = \sum_{j=1}^n m_j [\dot{G}_{ij}(t) q_j^0 + G_{ij}(t) \dot{q}_j^0],$$

получаем

$$\sum_{j=1}^n m_j [\dot{G}_{ij}(t) q_j^0 + G_{ij}(t) \dot{q}_j^0] = \sum_{j=1}^n m_j [\dot{G}_{ij}(-t) q_j - G_{ij}(-t) \dot{q}_j^0].$$

Это уравнение удовлетворяется лишь при условии, что функция $G_{ij}(t)$ нечетна: $G_{ij}(-t) = -G_{ij}(t)$. Нечетность функции Грина, описывающей реакцию системы на внешнее воздействие, выводящее ее из положения равновесия, имеет место не только в рассматриваемой частной задаче, но и в более общем случае, когда ее потенциальная энергия рассматривается в малой окрестности точки равновесия и может поэтому быть принята квадратичной функцией координат. В этом случае необходимо, чтобы внешнее воздействие было достаточно слабым, иначе оно выведет систему за пределы этой окрестности.

Из определения (12.1) видно также, что

$$G_{ij}(0) = 0, \quad \dot{G}_{ij}(0) = 0, \quad \ddot{G}_{ij}(0) = \delta_{ij} (m_i)^{-1} \quad (13.1)$$

(последнее равенство имеет место в силу (36.1)).

Отметим, что, зная функцию $G_{ij}(t)$, можно восстановить и матрицу κ_{ij} . Действительно, легко видеть, что из (12.1) вытекает формула *)

$$\kappa_{ij} = -m_i m_j \ddot{G}_{ij}(0). \quad (14.1)$$

2. УСРЕДНЕННОЕ ДВИЖЕНИЕ МАКРОСКОПИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА И ЕГО СОПОСТАВЛЕНИЕ С ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИМ ОПИСАНИЕМ, ОСНОВАННЫМ НА ЗАКОНЕ ОМА

Будем вначале предполагать (затем мы откажемся от этого предположения), что при $-\infty < t < 0$ имеется ансамбль из $K \gg 1$ систем осцилляторов, каждая из которых идентична рассмотренной выше и каждая из которых взаимодействует с «большим» термостатом, находящимся при температуре T . Будем предполагать, что характер этого взаимодействия обеспечивает эргодичность всей системы в целом. Тогда к моменту $t = 0$ координаты и импульсы системы осцилляторов будут описываться распределением Гиббса. Это означает, в частности, что если найти среднее арифметическое значение координаты или скорости i -го осциллятора в момент $t = 0$ по всем K идентичным копиям рассматриваемой системы, то при $K \rightarrow \infty$ мы получим близкие к нулю (порядка $K^{-1/2}$) значения.

Будем пока (в первой части этого раздела) понимать операцию усреднения именно в этом смысле. В момент $t = 0$ мы «выключаем» взаимодействие с «большим» термостатом и получаем K не взаимодействующих между собой систем осцилляторов с такими начальными значениями координат $q_i^{(\alpha)}(0)$

и скоростей $\dot{q}_i^{(\alpha)}(0)$, что при $K \rightarrow \infty$

$$\frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K q_i^{(\alpha)}(0) \equiv \bar{q}_i(0) = O(K^{-1/2}) \rightarrow 0, \quad \frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K \dot{q}_i^{(\alpha)}(0) \equiv \bar{\dot{q}}_i(0) = O(K^{-1/2}) \rightarrow 0$$

(индекс $\alpha = 1, \dots, K$ нумерует копии нашей системы). Будем говорить для краткости, что $q_i(0)$ и $\dot{q}_i(0)$ — случайные величины со средними значениями, равными нулю, а усреднение по K копиям нашей системы будем называть усреднением по тепловым флуктуациям. Пусть макроскопический осциллятор имеет номер $i = 1$, $m_1 = M$, $q_1(t) \equiv q(t)$. Кроме того, будем обозначать $G_{11}(t) = G(t)$, $F_1(t) = F(t)$. Запишем выражение для $q(t)$, полагая в (11.1) $i = 1$ и выделяя слагаемое с $j = 1$:

$$q(t) = M \dot{q}(0) \dot{G}(t) + M \dot{q}(0) G(t) + \int_0^t G(t-t') F(t') dt' + \tilde{q}(t); \quad (1.2)$$

здесь введено обозначение

$$\tilde{q}(t) = \sum_{j=2}^n \left[m_j q_j(0) \dot{G}_{1j}(t) + m_j \dot{q}_j(0) G_{1j}(t) + \int_0^t G_{1j}(t-t') F_j(t') dt' \right] \quad (2.2)$$

для «шумовой» составляющей движения макроскопического осциллятора, обусловленной начальными условиями и внешними силами, связанными с осцилляторами термостата.

*) Следует иметь в виду, что величина κ_{ij}/m_i — это квадрат так называемой парциальной частоты i -го осциллятора, т. е. квадрат его частоты при зафиксированных в положениях равновесия остальных осцилляторах системы. Квадрат собственной частоты i -го осциллятора дается формулой $\Omega_i^2 = \sum_{j=1}^n (\kappa_{ij}/m_i)$, поэтому, например, чтобы найти Ω_i^2 по (14.1), надо знать все функции $G_{1j}(t)$.

Пусть в момент $t = 0$ на макроскопический осциллятор начинает действовать внешняя сила $F(t)$ и ему сообщается большая по сравнению с флуктуациями начальная скорость $\dot{q}(0)$. Тогда в (2.2) все величины $q_j(0)$, $\dot{q}_j(0)$ с $j=2, 3, \dots, n$ являются (в указанном выше смысле) случайными со средними значениями, равными нулю. То же относится и к величине $q(0)$ *). Если мы интересуемся средним значением координаты $\bar{q}(t) \equiv Q(t)$ (черта означает усреднение по тепловым флуктуациям), то для $j = 2, \dots, n$ после усреднения имеем $\bar{q}_j(0) = 0$, $\dot{\bar{q}}_j(0) = 0$ и при $F_j = 0$ (внешняя сила действует только на макроскопический осциллятор) получаем $\bar{q} = 0$. Таким образом, усредненное движение осциллятора описывается формулой

$$Q(t) = M\dot{q}(0)G(t) + \int_0^t G(t-t')F(t')dt'. \quad (3.2)$$

Если ввести для краткости обозначение $A_v \equiv S_{1v}^2$, причем в соответствии с (3.1) $\sum_{v=1}^n A_v = 1$, то, согласно (12.1),

$$G(t) = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^n \frac{A_v}{\omega_v} \sin \omega_v t. \quad (4.2)$$

Сопоставим выражение (3.2) для усредненного движения макроскопического осциллятора, полученное из *микроскопических* уравнений, с движением, описываемым *феноменологическим* уравнением движения осциллятора с линейным трением, пропорциональным скорости (в случае электрических колебаний это закон Ома). Отмечая решение феноменологического уравнения индексом R, имеем

$$M\ddot{Q}_R + R\dot{Q}_R + M\omega_0^2 Q_R = F(t). \quad (5.2)$$

Решение этого уравнения с теми же начальными условиями $Q_R(0) = 0$, $\dot{Q}_R(0) = \dot{Q}_0$ имеет вид

$$Q_R(t) = \dot{Q}_0 \bar{\omega}^{-1} \exp(-\gamma t) \sin \bar{\omega} t + \frac{1}{M\bar{\omega}} \int_0^t \exp[-\gamma(t-t')] [\sin \bar{\omega}(t-t')] F(t') dt', \quad (6.2)$$

где $\bar{\omega}^2 = \omega_0^2 - \gamma^2$, $\gamma = R/2M$ (или $R/2L$ в случае электрических колебаний). Решение (6.2) можно записать в виде (3.2) с функцией Грина $(M\bar{\omega})^{-1} \exp(-\gamma t) \sin \bar{\omega} t$.

Ясно, что, рассматривая колебательную систему общего вида, мы можем считать набор частот ω_v и набор положительных чисел A_v произвольным (он ограничен лишь условием $\sum_{v=1}^n A_v = 1$ **). Поэтому уравнение (5.2) в общем

*) Можно было бы рассмотреть и более общий случай, когда $q(0) \neq 0$. Но при этом средние значения координат всех осцилляторов термостата также были бы отличны от нуля, поскольку за счет связей между ними отклонение макроскопического осциллятора вызывает смещение и других. Чтобы не усложнять вычислений, мы ограничиваемся случаем, когда $q(0) = 0$.

**) Ортогональную матрицу S_v можно задать следующей процедурой: первая ее строка $S_1 = (S_{11}, S_{12}, \dots, S_{1n})$ — произвольный единичный вектор. Вторая строка — произвольный единичный вектор S_2 , ортогональный к S_1 , и т. д. Последняя строка однозначно определяется всеми предыдущими как единичный вектор, ортогональный к $S_1, \dots, S_{n-1}$. Таким образом, первая строка, а значит, и числа A_v могут быть заданы произвольно.

случае не отражает свойств усредненного микроскопического движения. В частности, и закон Ома с не зависящим от частоты сопротивлением не является универсальным следствием (3.2).

Поставим теперь вопрос иначе. Какие следует сделать предположения относительно A_v и ω_v , чтобы уравнение (5.2) являлось *следствием* микроскопического рассмотрения?

Вначале сделаем предположение (от которого потом мы освободимся), что частоты ω_v эквидистантны: $\omega_v = v\Omega$. В этом случае (4.2) будет представлять собой конечную сумму Фурье:

$$G(t) = \frac{1}{M\Omega} \sum_{v=1}^n \frac{A_v}{v} \sin v\Omega t.$$

Очевидно, что $G(t + 2\pi/\Omega) = G(t)$, т. е. $G(t)$ периодична с периодом повторения $T_0 = 2\pi/\Omega$. В частности, $G(T_0) = G(0) = 0$. Далее, $G(T_0/2 + \tau) = -G(T_0/2 - \tau)$, т. е. функция $G(t)$ нечетна относительно середины отрезка $(0, T_0)$. Уже из этих свойств $G(t)$ следует, что функцию $(M\bar{\omega})^{-1} \exp(-\gamma t) \times \sin \bar{\omega} t$ нельзя представить в виде (4.2). Однако суммой Фурье указанного вида можно аппроксимировать (достаточно точно при больших n) функцию, которая на участке $(0, T_0)$ имеет вид

$$G_R(t) = \frac{\exp(-\gamma t) \sin \bar{\omega} t - \exp[-\gamma(T_0 - t)] \sin \bar{\omega}(T_0 - t)}{M\bar{\omega} [1 + \exp(-\gamma T_0)]} \quad (7.2)$$

и периодически продолжена в обе стороны за пределы этого участка; здесь $\bar{\omega} = N\Omega$ и N — целое число. Если $\gamma T_0 \gg 1$, то на начальном участке (при $t \ll T_0/2$) функция (7.2) практически неотличима от $(M\bar{\omega})^{-1} \exp(-\gamma t) \sin \bar{\omega} t$, однако она удовлетворяет необходимым условиям периодичности и нечетности. Функцию (7.2) на участке $(0, T_0)$ можно также представить в виде

$$G_R(t) = \text{ch} \left[\Psi \left(\frac{T_0}{2} - t \right) \right] \sin \bar{\omega} t \cdot \left(M\bar{\omega} \text{ch} \gamma \frac{T_0}{2} \right)^{-1}. \quad (8.2)$$

Нормировочный множитель подобран так, чтобы выполнялось условие $\dot{G}_R(0) = M^{-1}$, которому должна удовлетворять $G(t)$. Из (7.2), (8.2) видно, что $G_R(0) = G_R(T_0) = 0$ (т. е. выполняется условие периодичности) и $G(T_0/2 + \tau) = -G(T_0/2 - \tau)$ — нечетная функция (рис. 2).

Периодичность функции $G(t)$ (или $G_R(t)$) объясняется тем, что при отсутствии внешних сил рассматриваемая система является консервативной и совершает финитное движение. В общем случае отсюда вытекает теорема Пуанкаре⁷⁻⁹ о возвратах системы к исходному состоянию со сколь угодно большой точностью. В случае эквидистантного спектра эти возвраты происходят через период T_0 , причем система возвращается *точно* в исходное состояние.

Если, однако, время T_0 чрезвычайно велико и $\gamma T_0 \gg 1$ (оценки T_0 для некоторых простых ситуаций *) приведены в 2.7), то фактически нас будет интересовать лишь начальная стадия процесса, который (при достаточно-большом числе осцилляторов n) будет практически неотличим от процесса, описываемого решением уравнения (5.2).

Найдем, какими должны быть коэффициенты A_v , чтобы выполнялось «равенство» $G(t) \approx G_R(t)$. Заметим, что при $n = \infty$ мы можем обеспечить точное равенство $G(t) = G_R(t)$, если найдем коэффициенты A_v из разложения функции (7.2) в ряд Фурье по $\sin v\Omega t$. При конечном же, но достаточно

*) По приведенной в⁷ оценке длительность цикла Пуанкаре для одного моля неона, находящегося при комнатной температуре и атмосферном давлении, имеет порядок $\exp(10^7)$ с, тогда как время жизни Вселенной «всего» лишь порядка $\exp(40)$ с.

большом n мы получим достаточно хорошую (наилучшую в смысле среднего квадрата отклонения) аппроксимацию функции $G_R(t)$ конечной суммой Фурье.

Итак, запишем разложение функции (7.2), выраженной через переменную $\tau = t - (T_0/2)$ на участке $|\tau| < T_0/2$, в ряд Фурье вида (4.2), но с бесконечным n :

$$\frac{(-1)^N}{M\bar{\omega} \operatorname{ch}(\gamma T_0/2)} \operatorname{ch} \gamma \tau \cdot \sin N\Omega \tau = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu} A_{\nu}}{\nu \Omega M} \sin \nu \Omega \tau.$$

Умножив это разложение на $\sin \mu \Omega \tau$ и интегрируя по τ от $(-T_0/2)$ до $(T_0/2)$, легко находим коэффициенты A_{ν} . Если учесть равенства $\bar{\omega} = N\Omega$, $\omega_{\nu} = \nu\Omega$

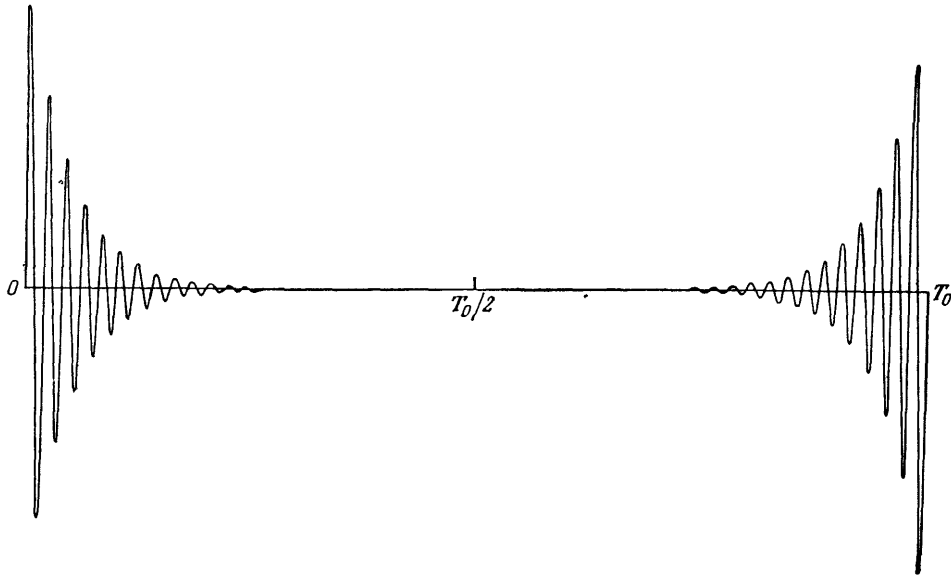


Рис. 2

и ввести собственную частоту ω_0 макроскопического осциллятора по стандартной формуле $\bar{\omega}^2 = \omega_0^2 - \gamma^2$, то после простых преобразований получим

$$A_{\nu} = \frac{4}{\pi} \frac{\gamma \omega_{\nu}^2 \Omega \operatorname{th}(\gamma T_0/2)}{(\omega_{\nu}^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_{\nu}^2}. \quad (9.2)$$

Таким образом, для того чтобы решение задачи о движении осциллятора в термостате, состоящем из набора других осцилляторов, соответствовало на начальном этапе (при $t \ll T_0/2$) решению феноменологического уравнения (5.2), необходим некоторый специальный способ выбора матрицы $S_{i\nu}$ или, в соответствии с формулой (5г.1), некоторый специальный вид матрицы κ_{ij} . А именно, требуется, в соответствии с (9.2), чтобы величины $S_{1\nu}^2$, определяющие связь макроскопического осциллятора с осцилляторами термостата, лежали как функции частот ω_{ν} на лоренцовской резонансной кривой *).

Отсюда вытекает, что феноменологическое уравнение (5.2), в котором действие термостата на макроскопический осциллятор описывается слагаемым $R\dot{Q}_R$ (в частности, законом Ома), не является универсальным. Микро-

*) Этот вид взаимодействия между выделенным осциллятором и осцилляторами термостата (в пределе $n \rightarrow \infty$) осуществляется в следующей механической модели: к осциллятору № 1 в направлении, перпендикулярном его смещениям, прикреплен полубесконечная натянутая струна³⁴. Квантовая задача, соответствующая этой модели, решена в³⁴.

скопическому описанию не будут противоречить и другие, законы убывания амплитуды $C(t)$ колебаний макроскопического осциллятора *). В качестве примера укажем на работу¹⁰, в которой приведены отличные от $\exp(-\gamma t)$ функции $C(t)$ для одномерной цепочки осцилляторов непосредственно в терминах величин m_i и κ_{ij} .

Ясно, что если задаваться произвольным законом убывания амплитуды, совместимым с отмеченными условиями симметрии, то при достаточно большом n можно указать такой термостат из осцилляторов, что в нем микроскопическая функция Грина будет иметь заданный вид

$$\frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{A_{\nu}}{\omega_{\nu}} \sin \omega_{\nu} t = C(t) \sin \bar{\omega} t.$$

Для этого достаточно разрешить последнее уравнение относительно чисел A_{ν} подобно тому, как это делалось при выводе (9.2), а затем построить какую-либо ортогональную матрицу S_{ν} , для которой $S_{\nu}^2 = A_{\nu}$. Формула (5г.1) после этого позволяет найти соответствующую матрицу κ_{ij} .

В работах^{4,5} был приближенно получен экспоненциальный закон убывания амплитуды колебаний как будто бы при менее жестких предположениях относительно вида матрицы κ_{ij} . Эти предположения сводились к следующим:

а) Осцилляторы термостата взаимодействуют только с макроскопическим осциллятором, но не взаимодействуют между собой.

б) Применимо так называемое «приближение вращающейся волны» (см. например,¹¹), эквивалентное методу усреднения. В рассматриваемом случае это приближение сводится к следующей аппроксимации гамильтониана:

$$H = \sum_{i=1}^n \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{\kappa_{ii} q_i^2}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \kappa_{ij} q_i q_j \rightarrow \\ \rightarrow \sum_{i=1}^n \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{\kappa_{ii} q_i^2}{2} \right) + \frac{1}{4} \sum_{i \neq j} \left[\kappa_{ij} q_i q_j + \frac{\kappa_{ij}}{(\kappa_{ii} \kappa_{jj})^{1/2}} \frac{p_i p_j}{(m_i m_j)^{1/2}} \right].$$

в) Применимо приближение Вигнера — Вайскопфа (см., например,¹¹) при котором решение сразу же отыскивается в форме экспоненциально затухающего синусоидального колебания.

Ясно, что с точки зрения рассмотренной выше совокупности решений полученный в^{4,5} экспоненциальный закон является некоторым приближением, охватывающим помимо точного решения указанного вида и некоторые близкие к нему решения.

Очевидно, что если закон убывания амплитуды колебаний не имеет экспоненциального вида, то феноменологическое уравнение (5.2) уже не будет выполняться. Оно, вообще говоря, должно уступить место линейному уравнению более высокого порядка. Ясно, что, исключая из системы уравнений движения переменные осцилляторов термостата, мы можем получить, вообще говоря, уравнение порядка $2n$ для $q(t)$. Однако если мы потребуем, чтобы феноменологическое уравнение соответствовало линейному осциллятору с одной степенью свободы, то неизбежно приходим к (5.2). Тем не менее такое требование далеко не всегда может быть обосновано физически.

Даже в том случае, когда на начальном участке ($t \ll T_0/2$) справедливо уравнение (5.2), описывающее необратимое движение, точное уравнение, которому подчиняется функция (7.2), как легко убедиться, имеет вид

$$\frac{d^4 Q_R}{dt^4} + 2(\omega_0^2 - 2\gamma^2) \frac{d^2 Q_R}{dt^2} + \omega_0^2 Q_R = 0 \quad (10.2)$$

Это уравнение содержит производные только четного порядка, в силу чего оно инвариантно относительно замены $t \rightarrow -t$ и описывает обратимое перио-

*) Разумеется, при этом уравнение (5.2) уже не будет справедливо.

дическое движение, если надлежащим образом выбраны коэффициенты в формуле для его общего решения

$$Q_R(t) = a e^{(i\bar{\omega} - \gamma)t} + b e^{(-i\bar{\omega} - \gamma)t} + c e^{(i\bar{\omega} + \gamma)t} + d e^{(-i\bar{\omega} + \gamma)t}.$$

Несмотря на то, что уравнение (10.2) описывает обратимое движение, оно в явном виде содержит диссипативный параметр — сопротивление $R = 2\gamma L$ *).

Обратим внимание на еще одно существенное обстоятельство. Если исходить из микроскопических уравнений движения, то «диссипативный» (при феноменологическом описании) параметр γ или соответствующее сопротивление $R = 2\gamma L$ появляется как некоторая величина, характеризующая матрицу потенциальной энергии κ_{ij} . А именно, так как параметр γ явно входит в формулу для A_v , то тем самым он входит и в $S_{iv} = (A_v)^{1/2}$, а следовательно, и в κ_{ij} , поскольку эта матрица связана с S_{iv} формулой (5г.1). Иными словами, диссипативный параметр γ содержится в полном гамильтониане как параметр взаимодействия макроскопического осциллятора с осцилляторами термостата (он обязательно входит в формулы для κ_{1i}).

Разумеется, в рассматриваемой модели термостата, состоящего из осцилляторов, мы можем прийти к уравнению (5.2) лишь при весьма искусственных предположениях, сводящихся к справедливости формулы (9.2). Важно лишь, что уравнение (5.2) для $t \ll T_0/2$ не противоречит точным микроскопическим уравнениям.

При иных подходах к рассматриваемой задаче, сразу же основанных на необратимых кинетических уравнениях, экспоненциальный закон затухания колебаний (а вместе с ним и закон Ома) может быть получен при других, более естественных предположениях (например, при соответствующей аппроксимации интеграла столкновений). Разумеется, такой подход практически гораздо более удобен для рассмотрения разнообразных конкретных задач, но мы сознательно не обращаемся к кинетическим уравнениям, поскольку нашей целью является исследование диссипации на основе обратимых микроскопических уравнений.

Наконец, отметим, что мы пришли к формулам (3.2) и (4.2) для усредненного движения, основываясь лишь на равенстве нулю средних значений начальных координат и скоростей осцилляторов термостата; конкретный вид закона распределения вероятностей этих величин при этом не имел значения.

При выводе формулы (9.2) было использовано предположение об эквидистантности спектра нормальных колебаний. Проанализируем теперь, к чему приведет отказ от этого предположения. Пусть частоты $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ не являются эквидистантными, но их отношения — рациональные числа. Тогда каждую из частот можно представить в виде $\omega_v = N_v \Omega$, где N_v — целые числа, а Ω — наибольший масштаб частоты, при котором возможно такое представление. Если обратиться к формуле (4.2), то становится ясно, что и в этом случае $G(t + T_0) = G(t)$, где $T_0 = 2\pi/\Omega$, т. е. $G(t)$ — периодическая функция с периодом T_0 . Как и в случае эквидистантного спектра, $G(t)$ нечетна относительно точки $t = T_0/2$. Набор функций $\sin(N_v \Omega t)$ ортогонален на $(0, T_0)$, но эти функции не образуют полной системы. Впрочем, полной системы не образовывали и функции $\sin(v \Omega t)$, так как их число было конечным. Отличие заключается в том, что в случае эквидистантного спектра из полного набора функций были удалены все высокочастотные гармоники, а в случае неэквидистантного — также и некоторые низкочастотные. Однако ясно, что если в пределах лоренцова контура (9.2) содер-

*) Отметим, что уравнение (10.2) формально эквивалентно системе уравнений движения для двух взаимодействующих осцилляторов, один из которых имеет отрицательную массу и отрицательную потенциальную энергию.

жится достаточно большое число частот $\omega_v = N_v \Omega$ и они распределены на интервале $(\bar{\omega} - \gamma, \bar{\omega} + \gamma)$ хотя бы приблизительно равномерно, то функция вида (7.2) может быть представлена разложением (4.2) весьма точно. Чтобы пояснить это, заметим, что функция $(M\bar{\omega})^{-1} e^{-\gamma|t|} \sin \bar{\omega}t$ может быть представлена интегралом Фурье:

$$\frac{e^{-\gamma|t|}}{M\bar{\omega}} \sin \bar{\omega}t = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \cdot \frac{2i\gamma\omega}{\pi M} \frac{d\omega}{(\omega^2 - \bar{\omega}^2)^2 + 4\gamma^2\omega^2} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \varphi(\omega) d\omega.$$

Интеграл в правой части этого равенства можно аппроксимировать интегральной суммой, так что разложение будет иметь вид

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \varphi(\omega) d\omega \approx \sum_v e^{i\omega_v t} \varphi(\omega_v) \Delta\omega_v.$$

При этом совсем не обязательно брать частоты ω_v эквидистантными. Требуется лишь, чтобы на существенном для интегрирования участке вблизи $\omega \sim \bar{\omega}$ выполнялось условие $\max \Delta\omega_v \ll \gamma$ и чтобы в этот участок попадало достаточно большое число точек ω_v . Таким образом, для неэквидистантного расположения частот ω_v в случае, когда отношения частот рациональны, также существует время T_0 *точного* возврата системы в исходное состояние.

Наконец, если отношения нормальных частот произвольные и в том числе иррациональные, их тем не менее со сколь угодно большой точностью можно аппроксимировать рациональными числами. Тогда с этой точностью мы возвращаемся к предыдущему случаю.

Таким образом, при произвольных ω_v вместо периода точного возврата возникает почти-период $T_0(\epsilon)$, такой, что для любых t выполняется неравенство

$$|G(t + T_0(\epsilon)) - G(t)| < \epsilon$$

и система через время $T_0(\epsilon)$ возвращается к исходному состоянию с ошибкой порядка ϵ . Функции такого вида (ряды Фурье с произвольными частотами) носят название почти-периодических. Теорема Пуанкаре о возвратах⁷⁻⁹ как раз и утверждает, что финитное движение консервативной системы является почти-периодическим. В рассматриваемом в этой статье частном случае это утверждение сводится к тому, что при произвольных ω_v функция $G(t)$ является почти-периодической.

Теперь обратимся к вопросу о способе усреднения, обсуждаемому в начале этого раздела. Отбросим предположение о наличии K копий системы и будем считать, что наша единственная система из n осцилляторов при $t < 0$ исчезающе слабо взаимодействовала с «большим» термостатом, имевшем температуру T . Будем предполагать, что характер этого взаимодействия обеспечивал эргодичность всей системы в целом (в частности, за счет взаимодействия с термостатом энергии отдельных нормальных колебаний не сохранялись). В этом случае, как известно^{7-9,12-15}, в системе устанавливается распределение Гиббса. В момент $t = 0$ взаимодействие системы осцилляторов с «большим» термостатом «выключается». В этот момент все координаты $q_i(0)$ и скорости $\dot{q}_i(0)$ имеют некоторые значения, являющиеся конкретной выборкой из совокупности случайных величин, подчиняющихся распределению Гиббса. Эти величины являются начальными значениями, определяющими дальнейшую эволюцию системы осцилляторов, которая при $t > 0$ протекает уже согласно уравнениям (11.1). При $t > 0$ мы рассматриваем систему осцилляторов с номерами $j \geq 2$ как термостат по отношению к осциллятору с номером 1. В процессе эволюции начальные значения $q_i(0)$, $\dot{q}_i(0)$ фиксированы, и усреднение по ним проводить уже нельзя. При $t > 0$ усреднение можно про-

водить лишь по времени. Однако начальные значения $q_i(0)$, $\dot{q}_i(0)$ сохраняют «память» о контакте с термостатом, который имел место при $t < 0$. В частности, это означает, что характерные значения $q_i(0)$ и $\dot{q}_i(0)$ согласуются с распределением Гиббса

$$W(q, \dot{q}) = \mathcal{N} \exp [-H(q(0), \dot{q}(0)) (kT)^{-1}], \quad (11.2)$$

где $\mathcal{N}$ — нормированный множитель, а

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n m_i \dot{q}_i^2(0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \kappa_{ij} q_i(0) q_j(0)$$

— функция Гамильтона, выраженная через переменные, относящиеся к моменту $t = 0$.

Для дальнейшего удобнее выразить гамильтониан через нормальные координаты x_v . Очевидно, что

$$H = \frac{1}{2} \sum_{v=1}^n [\dot{x}_v^2(0) + \omega_v^2 x_v^2(0)]. \quad (12.2)$$

При $n \rightarrow \infty$ спектр нормальных частот сильно сгущается. Рассмотрим группу из $K \gg 1$ нормальных колебаний с близкими частотами $\omega_{v1} \leq \omega_{v2} \leq \dots \leq \omega_{vK}$, такими, что $\omega_{vK} - \omega_{v1} \ll \gamma_0$, где γ_0 — некоторая заданная разрешающая способность*). Частоты, отличающиеся между собой меньше чем на γ_0 , в эксперименте будут неразличимы. То, что величины $x_{v1}(0), \dots, x_{vK}(0)$, $\dot{x}_{v1}(0), \dots, \dot{x}_{vK}(0)$ являются выборкой из нормально распределенной совокупности, подчиняющейся распределению

$$W(x(0), \dot{x}(0)) = \mathcal{N} \exp \left\{ -\frac{1}{2kT} \sum_{v=1}^n [\dot{x}_v^2(0) + \omega_v^2 x_v^2(0)] \right\}, \quad (13.2)$$

означает, что при достаточно большом K средние арифметические значения (здесь $v = K^{-1} \sum_{\alpha=1}^K v_\alpha$)

$$\bar{x}_v(0) \equiv \frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K x_{v_\alpha}(0) \approx 0, \quad \bar{\dot{x}}_v(0) \equiv \frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K \dot{x}_{v_\alpha}(0) \approx 0 \quad (14a.2)$$

малы, т. е. по абсолютной величине они намного меньше, чем характерные значения каждого из слагаемых $(kT)^{1/2}/\omega_v$ и $(kT)^{1/2}$ соответственно. При этом средние по той же выборке квадраты начальных координат и скоростей близки к среднеквадратичным значениям, определяемым распределением (13.2), т. е.

$$\overline{x_v^2}(0) \equiv \frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K x_{v_\alpha}^2(0) \approx \frac{kT}{\omega_v^2}, \quad \overline{\dot{x}_v^2}(0) \equiv \frac{1}{K} \sum_{\alpha=1}^K \dot{x}_{v_\alpha}^2(0) \approx kT. \quad (14b.2)$$

Соотношения (14.2) являются следствием закона больших чисел теории вероятностей (при $K \rightarrow \infty$ они выполняются с точностью порядка $K^{-1/2}$). При $t > 0$ осреднение по времени в силу выполнения соотношений (14.2) приводит к средним значениям и дисперсиям динамических переменных, соответствующим распределению Гиббса.

*) Теперь, в отличие от предыдущего, K обозначает число близких по частотам нормальных колебаний, объединяемых в одну группу.

Обратимся к процессу измерения среднего значения $\bar{q}(t) = Q$. В реальном эксперименте при $t = 0$ мы сообщаем макроскопическому осциллятору дополнительный начальный импульс $M\dot{Q}_0$, так что начальные условия для движения системы осцилляторов имеют, согласно (10.1), вид

$$\begin{aligned} q_i(0) &= \frac{1}{m_i^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{iv} x_v(0), \quad i = 1, 2, \dots, n. \\ \text{При } i \neq 1 \quad \dot{q}_i(0) &= \frac{1}{m_i^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{iv} \dot{x}_v(0), \quad i = 2, \dots, n. \\ \text{При } i = 1 \quad \dot{q}_0 &= \frac{1}{M^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{1v} \dot{x}_v(0) + \dot{Q}_0 = \dot{Q}_0 + \dot{q}_1(0); \end{aligned} \quad (15.2)$$

здесь $\dot{q}_0$ — начальная скорость макроскопического осциллятора с учетом дополнительного начального импульса $M\dot{Q}_0$.

Дальнейшее движение макроскопического осциллятора происходит согласно формуле (11.1), в которой отдельно выделен вклад от начального импульса $M\dot{Q}_0$:

$$q(t) = M\dot{Q}_0 G(t) + \sum_{j=1}^n m_j [q_j(0) \dot{G}_{1j}(t) + \dot{q}_j(0) G_{1j}(t)]. \quad (16.2)$$

Второе слагаемое представляет собой шумовую составляющую движения, не связанную с начальным импульсом $M\dot{Q}_0$. Пусть, например, спектр системы осцилляторов имеет лоренцову форму, так что $G(t)$ при $t \ll T_0/2$ представляет собой экспоненциально затухающее колебание. (Как будет видно из последующих рассуждений, это предположение не является обязательным; нужно лишь, чтобы на первоначальном этапе эволюции существовало характерное время релаксации, а закон спада амплитуды колебаний может и не быть экспоненциальным.) Тогда при $t \gg \gamma^{-1}$ (но все еще при $t \ll T_0/2$) первое слагаемое в (16.2) в отличие от второго затухнет, т. е. регулярный отклик на начальный импульс «потонет» в шумах. После этого с макроскопической точки зрения мы возвращаемся к исходному положению, каким оно было непосредственно перед моментом $t = 0$, когда начальный импульс $M\dot{Q}_0$ еще не был сообщен системе. Поэтому мы можем «повторить» эксперимент, находясь в таком же (с макроскопической точки зрения) начальном состоянии, т. е. снова сообщить макроскопическому осциллятору в момент времени $t_1 \gg \gamma^{-1}$ (но $t_1 \ll T_0/2$) такой же импульс $M\dot{Q}_0$. Это эквивалентно тому, что в момент t_1 на макроскопический осциллятор действует сила $F_1(t) = M\dot{Q}_0 \delta(t - t_1)$. Тогда, согласно (11.1), при $t > t_1$ будем иметь

$$q(t) = M\dot{Q}_0 G(t) + M\dot{Q}_0 G(t - t_1) + \sum_{j=1}^n m_j [q_j(0) \dot{G}_{1j}(t) + \dot{q}_j(0) G_{1j}(t)].$$

Но так как теперь мы интересуемся значениями $t \gg \gamma^{-1}$, то первое слагаемое здесь экспоненциально мало и им можно пренебречь, так что

$$q(t) = M\dot{Q}_0 G(t - t_1) + \sum_{j=1}^n m_j [q_j(0) \dot{G}_{1j}(t) + \dot{q}_j(0) G_{1j}(t)]. \quad (17.2)$$

При $t - t_1 \gg \gamma^{-1}$ первое слагаемое здесь также затухает и мы снова не можем отличить состояние макроскопического осциллятора от исходного. Тогда в момент времени $t_2 \gg t_1 + \gamma^{-1}$ (но $t_2 \ll T_0/2$) мы снова можем повторить

эксперимент при «тех же начальных условиях» и сообщить ему импульс $M\dot{Q}_0$ (т. е. подействовать силой $F_1(t) = M\dot{Q}_0\delta(t - t_2)$). В результате при $t > t_2$ будем иметь

$$q(t) = M\dot{Q}_0 G(t - t_2) + \sum_{j=1}^n m_j [q_j(0) \dot{G}_{1j}(t) + \dot{q}_j(0) G_{1j}(t)]. \quad (18.2)$$

Рассмотренную процедуру можно повторить $K \gg 1$ раз (при условии, что $K\gamma^{-1} \ll T_0/2$).

Обратим внимание, что вторые слагаемые в (16.2), (17.2), (18.2) и т. д. идентичны; они отличаются только значениями своего аргумента t . В этом смысле они *не являются случайным шумом*, так как в принципе могут быть предсказаны на основе необходимого *конечного* числа измерений. Однако если нас интересует средний по всем экспериментам отклик макроскопического осциллятора на сообщаемый ему импульс $M\dot{Q}_0$, то мы будем сравнивать между собой и усреднять значения координат, равноудаленные от момента начала соответствующего эксперимента. Иными словами, мы будем интересоваться средним значением вида

$$\begin{aligned} Q(t) &= \frac{1}{K+1} [q(t) + q(t_1+t) + q(t_2+t) + \dots + q(t_K+t)] = \\ &= M\dot{Q}_0 G(t) + \sum_{j=1}^n m_j \left[q_j(0) (K+1)^{-1} \sum_{\alpha=0}^K \dot{G}_{1j}(t_\alpha+t) + \right. \\ &\quad \left. + \dot{q}_j(0) (K+1)^{-1} \sum_{\alpha=0}^K G_{1j}(t_\alpha+t) \right] \quad (19.2) \end{aligned}$$

(здесь $t_\alpha = 0$ при $\alpha = 0$). Функции $G_{1j}(t_\alpha+t)$ и $\dot{G}_{1j}(t_\alpha+t)$ состоят из слагаемых вида $\sin(\omega_v t + \omega_v t_\alpha)$ и $\cos(\omega_v t + \omega_v t_\alpha)$. Но поскольку моменты начала повторных измерений t_α никак не согласованы с периодами $2\pi/\omega_v$, то сдвиги фаз $\omega_v t_\alpha$ можно считать случайными. Но тогда, как хорошо известно (см., например, ¹⁶), среднее значение суммы гармонических колебаний со случайными фазами вида

$$(K+1)^{-1} \sum_{\alpha=0}^K \sin \omega_v t_\alpha, \quad (K+1)^{-1} \sum_{\alpha=0}^K \cos \omega_v t_\alpha$$

при увеличении K стремится к нулю как $K^{-1/2}$. Поэтому при усреднении второе слагаемое в (19.2) имеет порядок $K^{-1/2}$ и при больших K становится пренебрежимо малым по сравнению с $M\dot{Q}_0 G(t)$.

Таким образом, несмотря на то, что «помеха» (второе слагаемое в (16.2)) не является случайной, ее роль при усреднении уменьшается подобно тому, как это происходит в процессе «накопления» полезного сигнала на фоне шума. Компенсация помех происходит, как мы видели, за счет внесения элемента случайности при выборе начала осуществления очередного эксперимента.

Мы рассмотрели процедуру усреднения нестационарных процессов, когда повторные измерения должны производиться при одинаковых (с макроскопической точки зрения) начальных условиях. В следующем разделе мы будем рассматривать равновесные флуктуации, когда какое-либо упорядоченное движение макроскопического осциллятора отсутствует и его движение вызвано лишь взаимодействием с осцилляторами термостата. В этом случае с макроскопической точки зрения любой момент времени ничем не выделен среди остальных и усреднение можно проводить по времени. Например, среднее

значение координаты или любой другой величины $f(t)$, зависящей лишь от одного момента времени, можно определить формулой *)

$$\bar{f}(t) = \bar{f} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} f(t) dt. \quad (20a.2)$$

Если же нас будут интересовать средние значения величин, зависящих сразу от двух моментов времени, например корреляций типа $f(t_1) \varphi(t_2)$, то мы будем производить скользящее усреднение по времени при фиксированном значении временного сдвига аргументов:

$$\overline{f(t) \varphi(t+\tau)} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} f(t) \varphi(t+\tau) dt = B_{f\varphi}(\tau). \quad (20b.2)$$

3. РАВНОВЕСНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ. ОБСУЖДЕНИЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННОЙ ТЕОРЕМЫ И ФОРМУЛЫ НАЙКВИСТА

Рассмотрев усредненное движение осцилляторов, обратимся к его флуктуациям. Мы ограничимся здесь рассмотрением *равновесных* флуктуаций, когда средние значения координаты и импульса макроскопического осциллятора равны нулю. Для расчета равновесных флуктуаций координаты $q(t) = q_1(t)$ макроскопического осциллятора удобнее всего воспользоваться формулой (10.1), в которой $f_v = 0$:

$$q(t) = \frac{1}{(M)^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{1v} \left[x_v(0) \cos \omega_v t + \frac{\dot{x}_v(0)}{\omega_v} \sin \omega_v t \right]. \quad (1.3)$$

Напомним, что здесь $x_v(0)$ и $\dot{x}_v(0)$ — фиксированные числа, являющиеся конкретной выборкой из совокупности случайных чисел, подчиняющихся распределению Гиббса и вследствие этого удовлетворяющие условиям (14а, б.2). Очевидно, что среднее по времени значение $q = 0$ (в смысле (20а.2)). Рассмотрим теперь корреляционную функцию

$$B_q(\tau) = \overline{q(t) q(t+\tau)} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} q(t) q(t+\tau) dt. \quad (2.3)$$

Подставим сюда (1.3); при этом возникают легко вычисляемые средние значения

$$\begin{aligned} \overline{\cos \omega_v t \cos \omega_\mu (t+\tau)} &= \overline{\sin \omega_v t \sin \omega_\mu (t+\tau)} = \frac{1}{2} \delta_{v\mu} \cos \omega_v \tau, \\ \overline{\cos \omega_v t \sin \omega_\mu (t+\tau)} &= -\overline{\sin \omega_v t \cos \omega_\mu (t+\tau)} = \frac{1}{2} \delta_{v\mu} \sin \omega_v \tau. \end{aligned} \quad (3.3)$$

(обращаем внимание на знак минус в одном из выражений второй строки). В результате получаем

$$B_q(\tau) = \frac{1}{2M} \sum_{v=1}^n S_{1v}^2 \left[x_v^2(0) + \frac{\dot{x}_v^2(0)}{\omega_v^2} \right] \cos \omega_v \tau. \quad (4.3)$$

Теперь необходимо связать величины $x_v^2(0)$ и $\dot{x}_v^2(0)$ с температурой, для чего мы привлечем формулу (14б.2). Будем предполагать, что в случае достаточно густого спектра нормальных колебаний величины $S_{1v}^2 = A_v$ и $\cos \omega_v \tau$

*) Здесь время усреднения T_0 для простоты рассуждений удобно выбрать равным длине цикла Пуанкаре, хотя это и не обязательно.

плавно зависят от номера ν . В то же время величины $x_\nu(0)$ и $\dot{x}_\nu(0)$ согласно своему «происхождению» могут сильно отличаться друг от друга даже при соседних номерах ν .

Рассмотрим группу входящих в (4.3) слагаемых с близкими номерами ν , такими, что $|\omega_{\nu+K} - \omega_\nu| \ll \gamma_0$, где γ_0 — заданная разрешающая способность (она может соответствовать реальной разрешающей способности анализатора спектра в эксперименте). В этом случае, вынося плавно меняющиеся величины за знак суммы, имеем

$$J \equiv \sum_{|\nu - \nu_0| < K/2} S_{1\nu}^2 \cos \omega_\nu \tau \cdot \left(x_\nu^2(0) + \frac{\dot{x}_\nu^2(0)}{\omega_\nu^2} \right) \approx S_{1\nu_0}^2 \cos \omega_{\nu_0} \tau \sum_{|\nu - \nu_0| < K/2} \left(x_\nu^2(0) + \frac{\dot{x}_\nu^2(0)}{\omega_{\nu_0}^2} \right).$$

Используя основанные на законе больших чисел формулы (146.2), выражающие входящую сюда сумму через температуру, получим

$$J \approx S_{1\nu_0}^2 \cos \omega_{\nu_0} \tau \cdot K \frac{2kT}{\omega_{\nu_0}^2} \approx 2kT \sum_{|\nu - \nu_0| < K/2} S_{1\nu}^2 \cos \omega_\nu \tau \cdot \omega_\nu^{-2}$$

(при написании последнего выражения мы снова представили величину $K S_{1\nu_0}^2 \cos \omega_{\nu_0} \tau / \omega_{\nu_0}^2$ в виде суммы). Подставив полученное значение частичной суммы J в (4.3), получим

$$B_q(\tau) = \frac{kT}{M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu^2} \cos \omega_\nu \tau \quad (A_\nu = S_{1\nu}^2). \quad (5.3)$$

Отметим, что эту формулу можно было бы получить из (1.3) гораздо более простым путем, предположив, что $x_\nu(0)$ и $\dot{x}_\nu(0)$ — случайные величины, подчиняющиеся распределению Гиббса. Однако такой подход требовал бы многократного приготовления начальных условий для системы осцилляторов и усреднения по этому множеству начальных условий. Приведенное же более громоздкое построение имело целью показать, что характерное время установления распределения Гиббса несущественно при выводе формулы (5.3) для корреляционной функции. Имея в виду показанную эквивалентность этих двух логически различных способов вывода формулы (5.3), в дальнейшем, при рассмотрении квантовой ФДТ, мы воспользуемся вторым, более коротким путем и не будем производить предварительное суммирование по группе близких по частотам нормальных колебаний, хотя и в квантовом случае такой способ также возможен.

Обратимся теперь к анализу формулы (5.3). Каждое нормальное колебание дает вклад в $B_q(\tau)$ и наоборот — спектр флуктуации содержит только частоты нормальных колебаний. Сравним (5.3) с формулой (4.2) для функции Грина рассматриваемой системы. Дифференцируя (5.3) по τ , получаем

$$\dot{B}_q(\tau) = -\frac{kT}{M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu} \sin \omega_\nu \tau,$$

что с учетом (4.2) приводит к важному соотношению между $B_q(\tau)$ и $G(\tau)$:

$$\dot{B}_q(\tau) = -kTG(\tau). \quad (6.3)$$

Формула (6.3) является частным случаем классической (не квантовой) флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ)^{12,13,16,17}, которая связывает флуктуации (точнее — корреляционную функцию координаты) с функцией Грина системы, т. е. с функцией $G(t)$, определяющей отклик макроскопиче-

ского осциллятора, *взаимодействующего с термостатом*, на внешнее воздействие. Существенно, что в явном виде все величины ω_q и A_q в (6.3) не фигурируют. Поэтому, чтобы найти $B_q(\tau)$, нет необходимости их знать, а достаточно определить $G(t)$, например сообщив осциллятору начальный импульс $M\dot{Q}_0$ и воспользовавшись формулой

$$G(t) = \frac{Q(t)}{M\dot{Q}_0}.$$

Через функцию Грина $G(t)$ можно выразить и величину $\bar{q}^2 = B_q(0)$. С учетом нечетности $G(t)$ относительно точки $t = T_0/2$ можно получить следующую формулу, справедливую при конечных значениях T_0 :

$$\bar{q}^2 = kT \int_0^{T_0/2} \left(1 - \frac{2t}{T_0}\right) G(t) dt. \quad (7.3)$$

Формула упрощается в предельном случае $T_0 \rightarrow \infty$, когда процесс становится необратимым. Тогда

$$\bar{q}^2 = kT \int_0^\infty G(t) dt. \quad (7a.3)$$

Нетрудно видеть, что эта формула вытекает из (6.3) при условии, что $B_q(\infty) = 0$. В общем же случае, когда справедлива формула (7.3), корреляционная функция $B_q(\tau)$ не падает до нуля и, более того, $B_q(T_0) = B_q(0)$.

Как известно, ФДТ доказывается при весьма общих предположениях для гамильтоновых систем произвольного вида. По существу, она отражает тот факт, что квантовая динамика системы определяется оператором эволюции $\hat{U}(t) = \exp(-it\hat{H}/\hbar)$, в то время как распределение Гиббса задается статистическим оператором $\hat{\rho}(T) = \exp(-\hat{H}/kT)$. Таким образом, $\hat{\rho}(-i\hbar/kt) = \hat{U}(t)$. Это операторное соотношение порождает целый ряд флуктуационно-диссипационных соотношений¹⁸, одним из которых в классическом пределе и является (6.3).

Следует, однако, отметить, что если левая часть (6.3) действительно описывает равновесные флуктуации, то правая часть этого соотношения описывает не диссипацию, а *чисто динамическую* реакцию *гамильтоновой* системы на внешнее воздействие *).

Однако ФДТ применяется обычно не к гамильтоновым системам, а к диссипативным. При этом вместо фигурирующей в ФДТ функции Грина *гамильтоновой* системы в ее правую часть подставляется *феноменологическая* функция Грина, не удовлетворяющая ограничениям, следующим из обратимости исходных уравнений. Такая замена может быть оправдана в том случае, если феноменологическое негамильтоново описание макропроцесса хорошо отражает характер усредненного движения и, следовательно, найдена удовлетворительная *аппроксимация* микроскопической функции Грина гамильтоновой системы на первоначальном (диссипационном) этапе эволюции.

*) Отметим, что функция Грина $G(t)$, входящая в ФДТ, одновременно является как реакцией системы на мгновенный начальный импульс (удар), так и функцией отклика на непрерывно действующую внешнюю силу. Поэтому при формулировке ФДТ вовсе не обязательно, как это обычно делается, добавлять к исходному гамильтониану $\hat{H}$ дополнительное слагаемое $-\hat{F}\hat{q}$. Единственно, для чего вводится это слагаемое, — это возбудить колебания в системе, до этого находящейся в положении равновесия. Но то же самое можно сделать и при помощи соответственно подобранных начальных условий. Поэтому ФДТ относится не только к системе с гамильтонианом $\hat{H} - \hat{F}\hat{q}$, но и к системе с гамильтонианом $\hat{H}$.

Поэтому можно считать, что для $t \ll T_0/2$ феноменологические уравнения позволяют с достаточной точностью найти *микроскопическую* функцию $G(t)$, для которой ФДТ справедлива. Такое построение позволяет переносить ФДТ, доказываемую для гамильтоновых систем, на негамильтоновы (диссипативные) системы и оправдывает вторую часть названия этой теоремы. Именно на этом этапе параметры, которые в полном гамильтониане системы и ее точной функции Грина описывают взаимодействие макроскопического тела с термостатом, выражаются через параметры, описывающие диссипацию. Чтобы избежать логического противоречия с исходными обратимыми уравнениями, из которых получена ФДТ, достаточно лишь иметь в виду, что такая замена законна лишь на первоначальном этапе эволюции системы.

Следует иметь в виду, что так как, по определению, корреляционная функция $B_q(\tau)$ четна, то $\dot{B}_q(\tau)$ — нечетная функция. В правой части (6.3) также стоит нечетная (в силу обратимости уравнений движения) функция $G(t)$. Рассмотрим, как формируется ФДТ не на **временном**, а на частотном языке и, в частности, к чему приводит условие нечетности обеих частей равенства (6.3). Введем спектральные разложения

$$B_q(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega, \quad (8.3)$$

$$G(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad (9a.3)$$

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} G(t) dt. \quad (9b.3)$$

Несмотря на то, что функции $B(\tau)$ и $G(t)$ периодические и разлагаются в ряды Фурье, мы будем использовать более общие и удобные представления в виде интегралов Фурье, имея в виду, что $\Phi(\omega)$ и $\tilde{G}(\omega)$ могут иметь вид суммы дельта-функций.

Рассмотрим некоторые общие свойства функций $\Phi(\omega)$ и $\tilde{G}(\omega)$. Поскольку $B^* = B$ и $G^* = G$, то на действительной оси ω , т. е. при $\omega^* = \omega$, имеют место условия

$$\Phi^*(\omega) = \Phi(-\omega), \quad \tilde{G}^*(\omega) = \tilde{G}(-\omega).$$

Из четности и положительной определенности (см., например, ¹⁶) корреляционной функции $B_q(\tau)$ следует, что

$$\Phi(-\omega) = \Phi(\omega) = \Phi^*(\omega) \geq 0.$$

Из нечетности $G(t)$ вытекает нечетность $\tilde{G}(\omega)$, поэтому $-\tilde{G}(\omega) = \tilde{G}(-\omega) = \tilde{G}^*(\omega)$. Следовательно, $\text{Re } \tilde{G}(\omega) = 0$ и

$$\tilde{G}(\omega) = i \text{Im } \tilde{G}(\omega) \text{ при } \omega^* = \omega. \quad (10.3)$$

Подставив разложения (8.3) и (6.3), получим спектральную форму классической ФДТ:

$$\Phi(\omega) = i \frac{kT}{\pi\omega} \tilde{G}(\omega) = -\frac{kT}{\pi\omega} \text{Im } \tilde{G}(\omega). \quad (11.3)$$

Отметим, что появление *мнимой* части $\tilde{G}(\omega)$ в (11.3) вытекает из (10.3), т. е. из нечетности $G(t)$ и тем самым — из *обратимости* уравнений движения. Однако ФДТ можно записывать как в виде первого, так и в виде второго

из равенств (11.3), причем первое из них не содержит знака Im . Однако это относится лишь к *точной* формулировке ФДТ, когда в ее правой части стоит функция Грина, являющаяся решением обратимых уравнений движения. Если же мы произведем замену точной функции Грина $G(t)$ на некоторую ее аппроксимацию $G_R(t)$, которая не обязательно является нечетной функцией, то ФДТ следует использовать лишь в виде *второго* из равенств (11.3). Это следует из того, что мнимая часть преобразования Фурье от произвольной действительной функции всегда является нечетной функцией.

Часто вместо функции Грина $G(t)$ используется так называемая *запаздывающая* функция Грина

$$G^{\text{ret}}(t) = \theta(t) G(t), \quad \theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{при } t > 0, \\ 0 & \text{при } t < 0. \end{cases} \quad (12.3)$$

Определим ее спектральную плотность $\tilde{G}^{\text{ret}}(\omega)$ соотношениями

$$G^{\text{ret}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) d\omega, \quad \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = \int_0^{\infty} e^{-i\omega t} G(t) dt \quad (13.3)$$

(обращаем внимание на различие численных множителей в (9.3) и (13.3)). В отличие от $\tilde{G}(\omega)$, функция $\tilde{G}^{\text{ret}}(\omega)$ имеет уже и действительную, и мнимую части. Из (13.3) с учетом нечетности $G(t)$ имеем

$$\text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = - \int_0^{\infty} \sin \omega t G(t) dt = - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \sin \omega t G(t) dt = \text{Im } \tilde{G}(\omega), \quad (14.3)$$

т. е. мнимые части функций $\tilde{G}(\omega)$ и $\tilde{G}^{\text{ret}}(\omega)$ при $\omega^* = \omega$ совпадают. В то же время действительная часть функции $\tilde{G}^{\text{ret}}(\omega)$

$$\text{Re } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = \int_0^{\infty} \cos \omega t G(t) dt \quad (15.3)$$

отлична от нуля. Используя известное равенство

$$\cos \omega t = \frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin \omega' t}{\omega' - \omega} d\omega'$$

(перечеркнутый интеграл обозначает главное значение по Коши), формулу (15.3) можно записать в виде преобразования Гильберта (дисперсионного соотношения)

$$\text{Re } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = - \frac{1}{\pi} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega'. \quad (16.3)$$

Вернемся к спектральной формулировке ФДТ. Если использовать равенство (14.3), то (11.3) можно записать в более распространенной форме

$$\Phi(\omega) = - \frac{kT}{\pi\omega} \text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega). \quad (17.3)$$

Отметим, что в квантовом случае общая формулировка ФДТ для одной степени свободы имеет вид (см., например, ^{12,16,17})

$$\Phi(\omega) = - \frac{\theta(\omega, T)}{\pi\omega} \text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega), \quad (18.3)$$

где

$$\theta(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{2} \text{cth } \frac{\hbar\omega}{2kT} \quad (19.3)$$

— средняя энергия осциллятора с собственной частотой ω , учитывающая и вклад нулевых колебаний $\hbar\omega/2$. Так как при $kT \gg \hbar\omega$ имеет место $\theta(\omega, T) \approx kT$, то (17.3) является классическим предельным случаем (18.3). Отметим, что переход от классической ФДТ к ее квантовой формулировке может быть осуществлен при помощи формальной замены

$$kT \rightarrow \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (20.3)$$

Обратимся теперь к формуле Найквиста, позволяющей находить спектральные плотности флуктуации тока или э. д. с. в квазистационарных электрических цепях. Эту формулу можно получить как частный случай ФДТ при некоторых дополнительных конкретных предположениях, не обязательных в общем случае.

Теорема Найквиста утверждает, что спектральная плотность флуктуационной э. д. с., возникающей на концах сопротивления R , находящегося при температуре T , имеет вид

$$g_{\mathcal{E}}(\omega) = \frac{2}{\pi} kTR \quad (21.3)$$

независимо от того, в какую электрическую цепь включено это сопротивление *).

Мы можем получить формулу Найквиста, оставаясь в рамках рассматриваемой в этой статье модели, если будем считать, что обобщенные координаты q_i являются зарядами соответствующих конденсаторов, а скорости $\dot{q}_i$ — токами. Будем искать спектральную плотность равновесных флуктуаций заряда $q(t)$ макроскопического осциллятора (колебательного контура). Ясно, что поскольку формула Найквиста содержит сопротивление R , то мы сможем получить ее, лишь сделав предположение о лоренцовом виде спектра нормальных колебаний, который, как было показано выше, приводит на первоначальном диссипативном этапе эволюции к феноменологическому уравнению (5.2), соответствующему закону Ома с сопротивлением, не зависящим от частоты.

Запишем формулу (5.3) для корреляционной функции заряда в виде

$$B_q(\tau) = \sum_{\nu=1} \Phi_{\nu} \cos \omega_{\nu} \tau, \quad \Phi_{\nu} = \frac{kTA_{\nu}}{L\omega_{\nu}^2}$$

(мы используем дальше обозначения, соответствующие электрической цепи). Подставив сюда выражение (9.2) для коэффициентов A_{ν} , получаем следующую формулу, в числителе которой подставлено $2\gamma = R/L$:

$$\frac{\Phi_{\nu}}{\Omega} = \frac{2kTR}{\pi L^2} \frac{\operatorname{th}(\gamma T_0/2)}{(\omega_{\nu}^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_{\nu}^2} = g_q(\omega_{\nu}).$$

Величина Φ_{ν}/Ω представляет собой спектральную плотность флуктуации заряда. Так как ток $I = \dot{q}$, то спектральная плотность его флуктуации $g_I(\omega_{\nu})$ равна $\omega_{\nu}^2 g_q(\omega_{\nu})$, т. е.

$$g_I(\omega_{\nu}) = \frac{2kTR}{\pi L^2} \operatorname{th} \left(\frac{\gamma T_0}{2} \right) \frac{\omega_{\nu}^2}{(\omega_{\nu}^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_{\nu}^2}.$$

*) Здесь спектральная плотность $g_{\mathcal{E}}(\omega)$ определена так, что средний квадрат флуктуационной э. д. с. равен интегралу по положительным частотам

$$\overline{\mathcal{E}^2} = \int_0^{\infty} g_{\mathcal{E}}(\omega) d\omega$$

То же относится и к спектральным плотностям заряда $g_q(\omega)$ и тока $g_I(\omega)$.

Феноменологическому уравнению (5.2), которому (при $\gamma T_0 \rightarrow \infty$) соответствует эта формула, может быть сопоставлена электрическая цепь, состоящая из последовательно соединенных в «кольцо» индуктивности L , емкости C и сопротивления R . Электрический импеданс Z такой цепи равен $Z = R + i\omega L - (i/\omega C)$. Ток I и э. д. с. $\mathcal{E}$ связаны соотношением $\mathcal{E} = ZI$, откуда для спектральных плотностей $g_{\mathcal{E}}(\omega_{\nu}) = |Z(\omega_{\nu})|^2 g_I(\omega_{\nu})$. Так как $|Z(\omega_{\nu})|^2 = (L/\omega_{\nu})^2 [(\omega_{\nu}^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_{\nu}^2]$, то для $g_{\mathcal{E}}(\omega_{\nu})$ (полагая $\text{th}(\gamma T_0/2) = 1$) получаем

$$g_{\mathcal{E}}(\omega_{\nu}) = \frac{2}{\pi} kTR.$$

Полученная формула отличается от приведенной выше формулы Найквиста (21.3) лишь индексом ν , отмечающим ту нормальную частоту, которая определяет спектральную плотность шума в данном частотном интервале. Однако ясно, что если разрешающая способность измерительного прибора недостаточна для разрешения отдельных нормальных частот, так что в полосу его пропускания $\Delta\omega$ всегда попадает много нормальных колебаний, то отличить таким прибором сигнал с непрерывным спектром от сигнала с дискретным спектром невозможно. Формально это сводится к тому, что очень хорошо выполняется равенство

$$\sum_{\Delta\omega} \varphi_{\nu} \equiv \sum_{\Delta\omega} \frac{\varphi_{\nu}}{\Omega} \Omega \approx \int_{\Delta\omega} g_{\varphi}(\omega) d\omega$$

между интегралом и аппроксимирующей его интегральной суммой. При этих условиях индекс ν в полученной формуле можно отбросить и она становится идентичной формуле Найквиста.

Сопоставим теперь формулу Найквиста (21.3) и ФДТ (17.3). Мы видим, что первая из них является частным случаем второй при некоторых дополнительных предположениях о виде спектра нормальных колебаний. По существу, эти дополнительные предположения оправдывают введение не зависящего от частоты электрического сопротивления R , а формула Найквиста относится именно к этому случаю. Еще одно отличие ФДТ от формулы Найквиста связано с тем, что для применения последней необходимо, чтобы феноменологическое уравнение соответствовало модели линейной системы с одной степенью свободы (осциллятор с трением $R\dot{Q}_R$), тогда как ФДТ применима и к гораздо более общим феноменологическим моделям, учитывающим возможность появления новых степеней свободы в области высоких частот. Так, еще задолго до того, как начинают сказываться квантовые эффекты (см. следующий раздел статьи), формула Найквиста может терять силу из-за таких эффектов, как нарушение применимости квазистационарного приближения, скин-эффекта, появления паразитных емкостей и индуктивностей и т. д. Во всех этих случаях для расчета шумов формулу Найквиста использовать невозможно, тогда как ФДТ позволяет сделать это всегда.

Казалось бы, в оправдание универсальности формулы Найквиста можно было бы привести такое рассуждение: эта формула выводится из весьма общих соображений о детальном равновесии (см., например ^{16,17}), и поэтому неважно, на какой именно конкретной модели она получена. Дело, однако, заключается в том, что еще до применения соображений о детальном равновесии делается неявное предположение применимости закона Ома с сопротивлением, не зависящим от частоты. Действительно, если этот закон выполняется, то можно получить формулу Найквиста. Однако если к рассматриваемому выводу формулы Найквиста не привлекать закон Ома в этой форме, то обосновать ее уже невозможно. В этом случае формула Найквиста уступает место более общему соотношению — ФДТ.

4. КВАНТОВАЯ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАТИВНАЯ ТЕОРЕМА И ФОРМУЛА НАЙКВИСТА

Рассмотрим вопрос об учете квантовых флуктуаций в рассматриваемой задаче. Одним из результатов проводимого ниже анализа будет вывод квантовой формулы Найквиста, явившейся в свое время предметом дискуссии¹⁹⁻²², возобновившейся вновь^{23,24,32}.

Квантовое рассмотрение задачи можно проводить, используя ту или иную из многочисленных эквивалентных формулировок квантовой механики. Мы используем близкий к классическому формализм, основанный на представлении квантовой механики в фазовом пространстве координат и импульсов (формализм функции Вигнера). В этом формализме вместо операторов координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}$ вводятся c -числовые переменные x и p , обладающие свойствами случайных величин, а вместо вектора состояния $|\psi\rangle$ — квазивероятностная функция Вигнера $W(x, p)$, играющая роль совместной плотности вероятностей случайных значений координат и импульсов. Точное равенство между квантовыми средними значениями любых функций от операторов $\langle\psi|f(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle$ и средними значениями, вычисленными при помощи квазивероятностной функции Вигнера, достигается введением специально подбираемых для каждого оператора $f(\hat{x}, \hat{p})$ функций $f_W(x, p)$, называемых вейлевскими символами оператора $f(\hat{x}, \hat{p})$, так что имеет место равенство

$$\langle\psi|f(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_W(x, p) W(x, p) dx dp. \quad (1.4)$$

Отсылая за подробностями к специальным обзорам²⁵⁻²⁷ и монографии²⁸, в которой систематически используется этот формализм, приведем здесь лишь элементарный вывод основной формулы (1.4) и входящих в нее величин, не вдаваясь в подробное обсуждение физического содержания этого представления.

Пусть $|x\rangle$ — собственные функции оператора $\hat{x}$ (т. е. $\hat{x}|x_1\rangle = x_1|x_1\rangle$), образующие ортонормированный ($\langle x_1|x_2\rangle = \delta(x_1 - x_2)$) и полный ($\int |x\rangle dx \langle x| = \hat{1}$) базис. Пусть $f(\hat{x}, \hat{p})$ — оператор некоторой физической величины и $|\psi\rangle$ — вектор состояния квантовой системы ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$), так что $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ и $\langle\psi|x\rangle = \psi^*(x)$ — волновые функции в координатном представлении. Среднее значение $f(\hat{x}, \hat{p})$ в состоянии $|\psi\rangle$ определяется формулой

$$\langle f \rangle \equiv \langle\psi|f(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle.$$

Далее мы проведем цепочку простых тождественных преобразований, приводящих к представлению (1.4). Имеем

$$\langle f \rangle = \langle\psi|f(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{1}f(\hat{x}, \hat{p})\hat{1}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi|x_1\rangle dx_1 \langle x_1|f(\hat{x}, \hat{p})|x_2\rangle dx_2 \langle x_2|\psi\rangle.$$

Полагая $x_1 = x + (\xi/2)$, $x_2 = x - (\xi/2)$ ($dx_1 dx_2 = dx d\xi$), запишем

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\left(x + \frac{\xi}{2}\right) \psi\left(x - \frac{\xi}{2}\right) \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| f(\hat{x}, \hat{p}) \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle dx d\xi = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\left(x + \frac{\xi_1}{2}\right) \psi\left(x - \frac{\xi_1}{2}\right) \delta(\xi_1 - \xi_2) \left\langle x + \frac{\xi_2}{2} \left| f(\hat{x}, \hat{p}) \right| x - \frac{\xi_2}{2} \right\rangle dx d\xi_1 d\xi_2. \end{aligned}$$

Наконец, подставляя

$$\delta(\xi_1 - \xi_2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i\pi(\xi_1 - \xi_2)}{\hbar} d\pi,$$

получим

$$\langle f \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int_{-\infty}^{\infty} \int \psi^* \left(x + \frac{\xi_1}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\xi_1}{2} \right) e^{i\pi\xi_1/\hbar} \left\langle x + \frac{\xi_2}{2} \left| f(\hat{x}, \hat{\pi}) \right| x - \frac{\xi_2}{2} \right\rangle \times \\ \times e^{-i\pi\xi_2/\hbar} dx d\pi d\xi_1 d\xi_2.$$

Введем две функции: плотность квазивероятности, или функцию Вигнера,

$$W(x, \pi) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(x + \frac{\xi}{2} \right) \psi \left(x - \frac{\xi}{2} \right) e^{i\pi\xi/\hbar} d\xi \quad (2.4)$$

и вейлевский символ $f_W(x, \pi)$ оператора $f(\hat{x}, \hat{\pi})$:

$$f_W(x, \pi) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| f(\hat{x}, \hat{\pi}) \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi. \quad (3.4)$$

(Соответствие между $f(\hat{x}, \hat{\pi})$ и $f_W(x, \pi)$ иногда будем обозначать как $f(\hat{x}, \hat{\pi}) \rightarrow f_W(x, \pi)$.) Тогда последнее равенство для $\langle f \rangle$ принимает указанный выше вид (1.4).

Функция $W(x, \pi)$, квадратично зависящая от ψ , т. е. от состояния системы, является аналогом совместной плотности вероятностей случайных s -числовых значений координаты и импульса. Функция $f_W(x, \pi)$ называется вейлевским символом оператора $f(\hat{x}, \hat{\pi})$ и представляет этот оператор в фазовом пространстве (x, π) . Формула (1.4) может быть истолкована в терминах теории вероятностей как усреднение функции $f_W(x, \pi)$ от случайных s -числовых координат и импульсов по плотности вероятностей $W(x, \pi)$. Действительно, функция Вигнера обладает многими характерными для плотности вероятности свойствами и допускает (при помощи (1.4)) точное вычисление квантовых средних значений. В частности,

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x, \pi) d\pi = |\langle x | \psi \rangle|^2 = W(x), \quad \int_{-\infty}^{\infty} W(x, \pi) dx = |\langle \pi | \psi \rangle|^2 = W(\pi)$$

— истинные плотности вероятности координаты и импульса.

Вместе с тем функция W не допускает безукоризненной вероятностной интерпретации. Это связано в основном со следующими двумя ее свойствами.

1. В некоторых областях плоскости (x, π) W может принимать отрицательные значения.

2. Если $\langle f \rangle = \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \int \int f_W^{(1)}(x, \pi) W(x, \pi) dx d\pi$ — среднее значение величины f , то для ее среднего квадрата $\langle f^2 \rangle = \langle \psi | \hat{f}^2 | \psi \rangle$ имеет место формула того же типа

$$\langle f^2 \rangle = \int \int f_W^2(x, \pi) W(x, \pi) dx d\pi,$$

но если $f^2(\hat{x}, \hat{\pi})$ зависит сразу от *обеих* переменных $\hat{x}, \hat{\pi}$, то $f_W^{(2)} \neq (f_W^{(1)})^2$.

Для гармонического осциллятора с собственной частотой ω_v функция $W(x, \pi)$ известна для любого возбужденного состояния $|n\rangle (\hat{H}(\hat{x}_v, \hat{\pi}_v) |n\rangle = \hbar\omega_v (n + \frac{1}{2}) |n\rangle$ (см., например, ²⁶):

$$W_n(x_v, \pi_v) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega_v} H(x_v, \pi_v)\right] L_n\left(\frac{4}{\hbar\omega_v} H(x_v, \pi_v)\right); \quad (4.4)$$

здесь v отмечает как собственную частоту, так и фазовые переменные v -го нормального колебания, а

$$H(x_v, \pi_v) = \frac{1}{2} (\pi_v^2 + \omega_v^2 x_v^2). \quad (5.4)$$

Фигурирующие в (4.4) полиномы Лагерра $L_n(x)$ определяются производящей функцией

$$(1-z)^{-1} \exp[-zx(1-z)^{-1}] = \sum_{n=0}^{\infty} z^n L_n(x) \quad (6.4)$$

$L_0(x) = 1$, $L_1(x) = 1 - x$, $L_2(x) = 1 - 2x + (x/2^2)$, . . .). Как видно из (4.4), при $n \geq 1$ функции $W_n(x_v, \pi_v)$ могут принимать отрицательные значения.

Если осциллятор находится в одном из чистых состояний $|n\rangle$, то любые средние значения его параметров можно находить при помощи формулы (1.4), если только предварительно найти при помощи (3.4) вейлевский символ соответствующего оператора.

Нас, однако, будет интересовать другая задача. После контакта с («большим») термостатом, имевшим место при $t < 0$ (более подробно об этом говорилось выше), каждый из нормальных осцилляторов оказывается в смешанном состоянии, таком, что его вероятность находиться в n -м возбужденном состоянии $|n\rangle$ определяется распределением Гиббса

$$p_n = (1 - e^{-\hbar\omega_v/kT}) e^{-n\hbar\omega_v/kT}. \quad (7.4)$$

Смешанное состояние v -го осциллятора описывается равновесной функцией Вигнера

$$\overline{W}_v(x_v, \pi_v) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n W_n(x_v, \pi_v). \quad (8.4)$$

Эту функцию легко найти, если подставить (4.4) и (7.4) в (8.4), а для суммирования воспользоваться формулой (6.4). После простых вычислений получаем равновесную функцию Вигнера v -го нормального колебания

$$\overline{W}_v(x_v, \pi_v) = \left(\pi\hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_v}{2kT}\right)^{-1} \exp\left[-\frac{\pi_v^2}{2\theta(\omega_v, T)} - \frac{x_v^2}{2\theta(\omega_v, T)/\omega_v^2}\right], \quad (9.4)$$

где

$$\theta(\omega_v, T) = \frac{\hbar\omega_v}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega_v}{2kT} \quad (10.4)$$

— средняя энергия осциллятора, имеющего собственную частоту ω_v , при температуре T , включающая энергию нулевых колебаний.

Распределение (9.4) является гауссовским и полностью определяется средними значениями и вторыми моментами величин x_v , π_v :

$$\begin{aligned} \overline{\langle x_v \rangle} &= 0, \quad \overline{\langle \pi_v \rangle} = 0, \\ \overline{\langle x_v^2 \rangle} &= \frac{\theta(\omega_v, T)}{\omega_v^2}, \quad \overline{\langle \pi_v^2 \rangle} = \theta(\omega_v, T), \quad \overline{\langle x_v \pi_v \rangle} = 0. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Здесь угловые скобки относятся к усреднению по квантовым, а черта сверху — по тепловым флуктуациям. Таким образом, равновесная функция Вигнера (9.4) одновременно и единым образом описывает и квантовые, и тепловые флуктуации координаты и импульса осциллятора.

Можно проверить, что распределение (9.4) является стационарным, т. е. не меняется со временем (для этого пришлось бы привлечь квантовое уравнение Лиувилля, которое здесь не приводим).

Обратимся теперь к корреляционным функциям флуктуаций. Для их расчета необходимо располагать сведениями о состоянии системы в два различных произвольных момента времени. Поэтому знания функции Вигнера, относящейся к одному моменту времени, уже недостаточно. Мы воспользуемся поэтому гейзенберговскими уравнениями движения для операторов $\hat{x}_v$ и $\hat{\pi}_v$:

$$\frac{d\hat{\pi}_v(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H(\hat{x}_v, \hat{\pi}_v), \hat{\pi}_v] = -\omega_v^2 \hat{x}_v(t),$$

$$\frac{d\hat{x}_v(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H(\hat{x}_v, \hat{\pi}_v), \hat{x}_v] = \hat{\pi}_v(t). \quad (12.4)$$

Легко убедиться, что решение этих уравнений имеет вид

$$\hat{x}_v(t) = \hat{x}_v(0) \cos \omega_v t + \frac{\hat{\pi}_v(0)}{\omega_v} \sin \omega_v t,$$

$$\hat{\pi}_v(t) = \hat{\pi}_v(0) \cos \omega_v t - \omega_v \hat{x}_v(0) \sin \omega_v t. \quad (13.4)$$

Нас будет интересовать корреляционная функция координаты. С учетом (13.4) соответствующий ей оператор легко вычисляется:

$$B_v(t_1, t_2) \equiv \frac{1}{2} [\hat{x}_v(t_1) \hat{x}_v(t_2) + \hat{x}_v(t_2) \hat{x}_v(t_1)] =$$

$$= \frac{1}{2} \left[\hat{x}_v^2(0) + \frac{\hat{\pi}_v^2(0)}{\omega_v^2} \right] \cos \omega_v(t_1 - t_2) + \frac{1}{2} \left[\hat{x}_v^2(0) - \frac{\hat{\pi}_v^2(0)}{\omega_v^2} \right] \cos \omega_v(t_1 + t_2) +$$

$$+ \omega_v^{-1} [\hat{x}_v(0) \hat{\pi}_v(0) + \hat{\pi}_v(0) \hat{x}_v(0)] \sin \omega_v(t_1 + t_2). \quad (14.4)$$

Теперь следует произвести усреднение этого выражения. В используемом нами формализме начальным значениям операторов $\hat{\pi}_v(0)$, $\hat{x}_v(0)$ и их комбинациям сопоставляются случайные числа, являющиеся их вейлевскими символами, распределение вероятностей которых описывается функцией Вигнера (9.4). Поэтому следует сначала найти вейлевские символы операторов, входящих в (14.4), чтобы подставить их вместе с (9.4) в формулу (1.4).

Вейлевский символ оператора $F(\hat{x}_v)$, как легко проверить, равен $F(x_v)$; действительно, используя определение (3.4), имеем (опуская индекс v)

$$\int \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| F(\hat{x}) \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi = \int F\left(x - \frac{\xi}{2}\right) \delta(\xi) e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi = F(x).$$

Точно так же доказывается (с переходом к базису из собственных векторов оператора импульса), что $F(\hat{\pi}) \rightarrow F(\pi)$. Остается найти вейлевский символ оператора $\hat{x}\hat{\pi} + \hat{\pi}\hat{x}$ (для краткости в промежуточных выкладках мы не пишем индекс v и аргумент $t = 0$). По определению имеем

$$\int \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{x}\hat{\pi} + \hat{\pi}\hat{x} \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi = \int \left[\left(x + \frac{\xi}{2} \right) \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{\pi} \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle + \right.$$

$$\left. + \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{\pi} \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle \left(x - \frac{\xi}{2} \right) \right] e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi = 2x \int \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{\pi} \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi.$$

Учитывая, что

$$\langle x_1 | F(\hat{\pi}) | x_2 \rangle = F\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta}\right) \delta(\eta) |_{\eta=x_1-x_2},$$

получаем *)

$$\hat{x}_v(0) \hat{\pi}_v(0) + \hat{\pi}_v(0) \hat{x}_v(0) \rightarrow -2i\hbar x \int \delta'(\xi) e^{-i\pi\xi/\hbar} d\xi = 2x_v(0) \pi_v(0).$$

Чтобы получить теперь корреляционную функцию флуктуации координаты v -го осциллятора, достаточно заменить входящие в (14.4) операторы $\hat{x}_v^2(0)$, $\hat{\pi}_v^2(0)$ и $\hat{x}_v(0) \hat{\pi}_v(0) + \hat{\pi}_v(0) \hat{x}_v(0)$ на их вейлевские символы $x_v^2(0)$, $\pi_v^2(0)$ и $2x_v(0) \pi_v(0)$, которые являются, согласно (9.4), гауссовскими случайными числами, и произвести усреднение по этому гауссовскому распределению. Естественно, что результат дается формулами (11.4) и для корреляционной функции координаты $B_v(t_1, t_2)$ мы получаем

$$B_v(t_1, t_2) = \frac{\theta(\omega_v, T)}{\omega_v^2} \cos \omega_v \tau, \quad \tau = t_1 - t_2 \quad (15.4)$$

Отметим, что если бы мы предварительно произвели в (14.4) усреднение по времени $t = (t_1 + t_2)/2$ при фиксированном τ , то получили бы зависимость $B_v \sim \cos \omega_v \tau$. Таким образом, зависимость от времени вида $\cos \omega_v \tau$ определяется лишь динамикой системы, в то время как численный коэффициент в (15.4) зависит от соотношения квантовых и тепловых флуктуаций.

Корреляционная функция (15.4) получена для нормального колебания, т. е. для *изолированного*, ни с чем не связанного осциллятора. Как видно из (15.4), средний квадрат флуктуации координаты такого осциллятора определяется величиной $\theta(\omega_v, T)$, т. е. энергией осциллятора на его *собственной* частоте.

Обратимся теперь к флуктуациям координаты макроскопического осциллятора, *взаимодействующего* с системой остальных $(n-1)$ осцилляторов. Оператор координаты $\hat{q}_1(t)$ макроскопического осциллятора связан с операторами $\hat{x}_v(t)$ формулой

$$\hat{q}_1(t) = \frac{1}{M^{1/2}} \sum_{v=1}^n S_{1v} \hat{x}_v(t). \quad (16.4)$$

Прежде всего отметим, что все результаты, относящиеся к усредненному движению классического макроскопического осциллятора, без изменений переносятся на усредненное движение квантового осциллятора. Это вытекает из того, что после усреднения по любому квантовому состоянию гейзенберговские уравнения движения линейного осциллятора переходят в соответствующие классические уравнения. Это является следствием общей теоремы Эренфеста для движения в квадратичном потенциале. Поэтому все результаты, полученные для усредненного движения классического макроскопического осциллятора, остаются верными и в квантовом случае.

*) В рассмотренных трех примерах оказалось, что вейлевский символ оператора получился из самого оператора при помощи замены $\hat{\pi}_v \rightarrow \pi_v$, $\hat{x}_v \rightarrow x_v$. В общем случае это не так. Например,

$$\hat{x} \hat{\pi}^2 \hat{x} \rightarrow x^2 \pi^2 + \frac{\hbar^2}{2}.$$

Обратимся теперь к расчету корреляционной функции флуктуаций координаты макроскопического осциллятора. На основании (16.4) имеем

$$\begin{aligned}\hat{B}_q(t_1, t_2) &= \frac{1}{2} [\hat{q}_1(t_1) \hat{q}_1(t_2) + \hat{q}_1(t_2) \hat{q}_1(t_1)] = \\ &= \frac{1}{2M} \sum_{\nu, \mu=1}^n S_{1\nu} S_{1\mu} [\hat{x}_\nu(t_1) \hat{x}_\mu(t_2) + \hat{x}_\nu(t_2) \hat{x}_\mu(t_1)].\end{aligned}\quad (17.4)$$

Прежде чем усреднять это выражение, отметим, что при $\nu \neq \mu$ операторы $\hat{x}_\nu(t_i)$, $\hat{x}_\mu(t_j)$ действуют в различных пространствах состояний и поэтому усредняются независимо:

$$\langle \psi_\nu, \psi_\mu | \hat{x}_\nu \hat{x}_\mu | \psi_\nu, \psi_\mu \rangle = \langle \psi_\nu | \hat{x}_\nu | \psi_\nu \rangle \langle \psi_\mu | \hat{x}_\mu | \psi_\mu \rangle.$$

Как уже было установлено выше (см. (11.4)), равновесные средние $\overline{\langle x_\nu \rangle} = 0$. Поэтому при усреднении (17.4) следует оставить лишь слагаемые с $\nu = \mu$; с учетом (14.4) и (15.4) это приводит к формуле

$$B_q(t_1, t_2) = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu^2} \theta(\omega_\nu, T) \cos \omega_\nu \tau. \quad (18.4)$$

Отметим, что, как и в классическом случае, функция $B_q(\tau)$ периодична (или почти-периодична), что отражает обратимость исходных уравнений. В предельном случае $\hbar \omega_\nu \ll kT$ из формулы (18.4) вытекает классическая формула (5.3).

Из формулы (18.4) можно получить квантовую формулировку ФДТ. Как и выше, введем разложения $B_q(\tau)$ и $G^{\text{ret}}(t)$ в интегралы Фурье:

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\omega\tau} B_q(\tau) d\tau = \frac{\hbar}{4M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu} \text{cth} \left(\frac{\hbar \omega_\nu}{2kT} \right) [\delta(\omega + \omega_\nu) + \delta(\omega - \omega_\nu)].$$

Воспользовавшись тождеством $F(\omega_\nu) \delta(\omega_\nu \pm \omega) = F(\mp \omega) \delta(\omega_\nu \pm \omega)$, а также четностью функции $F(\omega_\nu) = \omega_\nu^{-1} \text{cth}(\hbar \omega_\nu / 2kT)$ по ω_ν , имеем

$$\Phi(\omega) = \frac{\hbar}{4M\omega} \text{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2kT} \right) \sum_{\nu=1}^n A_\nu [\delta(\omega + \omega_\nu) + \delta(\omega - \omega_\nu)]. \quad (19.4)$$

Как уже отмечалось, функция Грина системы осцилляторов относится к усредненному движению и поэтому в квантовой теории совпадает с полу-

ченным выше классическим выражением (4.2): $G(t) = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu} \sin \omega_\nu t$. Вос-

пользуемся мнимой частью разложения в интеграл Фурье запаздывающей функции $G^{\text{ret}}(t) = \theta(t) G(t)$:

$$\begin{aligned}\text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) &= - \int_0^\infty \sin \omega t \cdot \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu} \sin \omega_\nu t dt = \\ &= \frac{\pi}{2M} \sum_{\nu=1}^n \frac{A_\nu}{\omega_\nu} [\delta(\omega - \omega_\nu) - \delta(\omega + \omega_\nu)].\end{aligned}$$

Поскольку $\omega_\nu^{-1} \delta(\omega + \omega_\nu) = -\omega^{-1} \delta(\omega + \omega_\nu)$ и $\omega_\nu^{-1} \delta(\omega - \omega_\nu) = \omega^{-1} \delta(\omega - \omega_\nu)$, то

$$\text{Im } \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = - \frac{\pi}{2M\omega} \sum_{\nu=1}^n A_\nu [\delta(\omega + \omega_\nu) + \delta(\omega - \omega_\nu)]. \quad (20.4)$$

Сравнение формул (19.4) и (20.4) дает квантовую ФДТ

$$\Phi(\omega) = -\frac{\hbar}{2\pi} \operatorname{cth}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \operatorname{Im} \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega) = -\frac{\theta(\omega, T)}{\pi\omega} \operatorname{Im} \tilde{G}^{\text{ret}}(\omega). \quad (21.4)$$

Отметим, что равенство (21.4) имеет место при произвольных ω . Если $\omega \neq \pm \omega_v$, то обе части этого равенства равны нулю, если же $\omega = \pm \omega_v$, то имеет место равенство отличных от нуля величин — обобщенных функций. Как обычно, такое равенство следует понимать как равенство интегралов от обоих его частей, предварительно умноженных на некоторую гладкую функцию. При физических измерениях роль этой функции играет частотная характеристика фильтра, которая всегда имеет конечную полосу пропускания $\Delta\omega$. Поэтому в реальном эксперименте при заданной $\Delta\omega$, удовлетворяющей условию $\Delta\omega \gg T_0^{-1}$, нет возможности ответить на вопрос — является ли спектр непрерывным или дискретным, поскольку в полосе пропускания фильтра $\Delta\omega$ сразу находится много дискретных частот ω_v . В связи с этим нет и необходимости специально переходить к пределу непрерывного спектра (соответственно к пределу $T_0 \rightarrow \infty$), так как с точки зрения эксперимента эти ситуации неотличимы. Поэтому формула (21.4) одинаково пригодна в обоих случаях — как до, так и после перехода к пределу $T_0 \rightarrow \infty$.

Заметим также, что полное время измерения τ_0 и полоса пропускания $\Delta\omega$ связаны соотношением $\tau_0 \Delta\omega \sim 1$, поэтому из условия $T_0 \Delta\omega \gg 1$ вытекает и $\tau_0 \ll T_0$, т. е. измерение всегда может быть произведено в пределах первоначального («диссипативного») этапа эволюции системы.

Рассмотрим теперь квантовую формулу Найквиста. Ясно, что к ней можно перейти от общей формулировки ФДТ, если предположить, что спектр нормальных колебаний определяется формулой (9.2), соответствующей экспоненциальному спаду колебаний макроскопического осциллятора. В этом случае формула (18.4) принимает вид (мы подставляем $2\gamma = R/L$)

$$B_q(\tau) = \sum_{v=1}^n \Phi_v \cos \omega_v \tau, \quad \Phi_v = \frac{\Omega}{\pi} \frac{\hbar R}{L^2} \operatorname{th}\left(\frac{\gamma T_0}{2}\right) \frac{\omega_v \operatorname{cth}(\hbar\omega_v/2kT)}{(\omega_v^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega_v^2}. \quad (22.4)$$

При $\gamma T_0 \gg 1$ можно считать $\operatorname{th}\left(\frac{\gamma T_0}{2}\right) = 1$. Кроме того, в этом случае $\Omega \ll \gamma$ и в пределах резонансной ширины контура γ укладывается очень много дискретных частот, расстояние между которыми равно Ω . В этом случае даже вблизи максимума резонансной кривой, т. е. при $\omega_v \sim \omega_0$, сумму $\sum \Phi_v \cos \omega_v \tau$ с большой точностью можно заменить интегралом, тем более это приближение законно и вдали от резонанса. Таким образом, обозначая $\Delta\omega = \Omega$, имеем

$$B_q(\tau) = \sum_{v=1}^n \Phi_v \cos \omega_v \tau = \sum_{v=1}^n \frac{\Phi_v}{\Omega} \cos \omega_v \tau \Delta\omega \approx \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} g_q(\omega) \cos \omega \tau d\omega;$$

здесь $g_q(\omega) = \frac{\Phi_v}{\Omega}$ — спектральная плотность флуктуаций заряда, т. е. вклад в средний квадрат флуктуаций, вносимый единицей частотного интервала. Итак, формула (22.4) дает для спектральной плотности флуктуаций заряда

$$g_q(\omega) = \frac{\hbar R}{\pi L^2} \frac{\omega \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT)}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2}. \quad (23.4)$$

В этой формуле мы уже не пишем индекс v , отличающий различные нормальные частоты, поскольку показали, что суммирование по всем ω_v в (22.4) и интегрирование по переменной ω в (23.4) приводит к одинаковым значениям $B_q(\tau)$ или $\overline{q^2}$.

Спектральная плотность тока $I = q$ может быть получена умножением правой части (23.4) на ω^2 : $g_I(\omega) = \omega^2 g_q(\omega)$. Аналогично тому, как это было сделано выше при выводе классической формулы Найквиста, перейдем к спектральной плотности э. д. с. $g_g(\omega) = |Z(\omega)|^2 g_I(\omega)$, где $|Z|^2 = (L/\omega)^2 [(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + 4\gamma^2 \omega^2]$. Это приводит к квантовой формуле Найквиста

$$g_g(\omega) = \frac{2}{\pi} \theta(\omega, T) R = \frac{2}{\pi} \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{cth} \left(\frac{\hbar \omega}{2kT} \right) R. \quad (24.4)$$

Как уже отмечалось, квантовая формулировка ФДТ может быть получена из классической путем замены (20.3), т. е. замены

$$kT \rightarrow \theta(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2kT}. \quad (25.4)$$

Точно такая же замена переводит классическую формулу Найквиста в квантовую формулу (22.4), что и было сделано в оригинальной работе Найквиста *).

В упоминавшейся дискуссии^{23,24} о квантовой формуле Найквиста обсуждалась возможность альтернативной замены

$$kT \rightarrow \theta(\omega_0, T) = \frac{\hbar \omega_0}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega_0}{2kT}, \quad (26.4)$$

в которой ω_0 — собственная частота макроскопического осциллятора. Эта формула существенно отличается от (25.4), так как в ней эквивалентная температура, в противоположность (25.4), не зависит от частоты. Это приводит к существенно иной асимптотике шумов в области высоких частот. Отметим, что замена (26.4) действительно справедлива для изолированного осциллятора с *бесконечно большой* добротностью, как это можно видеть из формулы (15.4). Но колебания такого осциллятора не затухают (его корреляционная функция пропорциональна $\cos \omega_v \tau$). Если же мы рассматриваем осциллятор, *взаимодействующий* с другими осцилляторами и тем самым способный отдавать им свою энергию, т. е. *затухающий* осциллятор с конечной добротностью, то, как видно из формул (18.4), (22.4), его шумы вызваны именно вкладами нормальных колебаний других частот $\omega_v \neq \omega_0$, каждая из которых, согласно (26.4), обладает «эквивалентной температурой», соответствующей своей нормальной частоте. В итоге мы и получаем формулу (25.4), в которой «эквивалентная температура» оказывается зависящей от частоты.

То, что замена (26.4) пригодна лишь в единственном случае осциллятора бесконечной добротности, но не может быть правильной в общем случае ясно по следующей простой причине. Одна и та же замена $kT \rightarrow \theta(\omega, T)$ переводит классическую ФДТ в квантовую независимо от того, к какой конкретной системе ФДТ прилагается. В частности, это может быть не колебательный контур, а система, в которой вообще отсутствует какая-либо выделенная частота ω_0 , либо система, в которой имеется несколько таких выде-

*) Работа Найквиста²⁹ посвящена в основном обоснованию классической формулы (21.3). Квантовой формуле в работе посвящены следующие заключительные строки:

«Выше использовался закон равномерного распределения, означающий, что полная энергия на одну степень свободы равна kT . Если же взять энергию на одну степень свободы равной

$$\hbar \nu (e^{\hbar \nu / kT} - 1)^{-1},$$

где h — постоянная Планка (Найквист не включает сюда энергию нулевых колебаний), выражение для э. д. с. в интервале частот $d\nu$ становится равным

$$E_v^2 d\nu = 4R_v \hbar \nu d\nu (e^{\hbar \nu / kT} - 1)^{-1}.$$

В интервале частот и температур, в котором справедливы экспериментальные данные (имеется в виду работа Джонсона, помещенная непосредственно перед статьей Найквиста), это выражение неотличимо от того, которое получено на основе закона равномерного распределения энергии».

ленных частот. Во всех этих случаях совершенно неясно, что следует понимать под величиной ω_0 в формуле (26.4) *).

Рассмотрим еще вопрос о средней кинетической (магнитной) энергии макроскопического осциллятора. Оператор импульса $\hat{p}_1$, канонически сопряженный с $\hat{q}_1$, выражается через $\hat{\pi}_\nu$, как легко проверить, при помощи формулы

$$\hat{p}_1 = M^{1/2} \sum_{\nu=1}^n S_{1\nu} \hat{\pi}_\nu. \quad (27.4)$$

Отсюда для его среднего квадрата получим, учитывая независимость $\hat{\pi}_\nu$ и $\hat{\pi}_\mu$ при $\nu \neq \mu$ и используя (11.4):

$$\langle \overline{p_1^2} \rangle = M \sum_{\nu=1}^n S_{1\nu}^2 \langle \overline{\pi_\nu^2} \rangle = M \sum_{\nu=1}^n A_\nu \theta(\omega_\nu, T).$$

Таким образом, средняя кинетическая энергия равна

$$\langle \overline{K} \rangle = \frac{\langle \overline{p_1^2} \rangle}{2M} = \frac{1}{2} \sum_{\nu=1}^n A_\nu \theta(\omega_\nu, T). \quad (28.4)$$

В классическом пределе, когда $\hbar\omega_\nu \ll kT$, $\theta(\omega_\nu, T) \approx kT$ и из (28.4) в силу равенства $\sum_{\nu=1}^n A_\nu = 1$ следует

$$\langle \overline{K} \rangle = \frac{1}{2} kT \sum_{\nu=1}^n A_\nu = \frac{1}{2} kT \quad (29.4)$$

в согласии с теоремой о равномерном распределении энергии по степеням свободы. Отметим, что формула (28.4) также может быть получена из классической формулы (29.4) при помощи той же замены (25.4), если предварительно в формулу $\langle \overline{K} \rangle = kT/2$ ввести множитель $1 = \sum_{\nu=1}^n A_\nu$.

В квантовом случае, как видно из (28.4), средняя кинетическая энергия *зависит* от соотношения между различными A_ν , т. е., например, в случае спектра лоренцовского типа — и от сопротивления R . К такому же выводу приводит и прямой расчет взаимодействия заряженного осциллятора с тепловым электромагнитным полем, приведенный в ³⁰.

Последний вопрос, который мы рассмотрим в связи с дискуссией о квантовой формуле Найквиста, заключается в анализе тех аргументов, которые приводились по поводу того, может или не может диссипативный параметр R входить в выражение для среднего квадрата флуктуаций заряда и тока. Казалось бы, поскольку R не входит в гамильтониан осциллятора $H_0 = (LI^2/2) + (q^2/2C)$, сопротивление не содержится в распределении Гиббса для осциллятора $W \sim \exp(-H_0/kT)$ и не может поэтому входить и в выражения для $\overline{I^2}$, $\overline{q^2}$. Однако мы можем использовать распределение Гиббса $\exp(-H_0/kT)$ для изолированного осциллятора лишь в том случае, если его взаимодействие с термостатом *настолько слабо*, что сказывается лишь на распределении значений его энергии, но не уширяет его бесконечно узкую резонансную кривую (см., например, ¹⁴). Если же мы хотим учесть конечность ширины резонансной кривой, то должны рассматривать не изолированный

*) При использовании (26.4) величина $g_{\mathcal{C}}(\omega)$ в соответствующей формуле Найквиста зависела бы не только от R , но и от значений реактивных параметров L , C , определяющих ω_0 , т. е. шумовая э. д. с. зависела бы не только от свойств шумящего элемента цепи, но и от того, что к нему подключено.

осциллятор, который уже в этом случае сам по себе гамильтонианом не описывается, а осциллятор, взаимодействующий с термостатом, т. е. должны использовать распределение Гиббса для всей системы в целом.

Но, как неоднократно отмечалось, величина R содержится в полном гамильтониане. В классическом случае, если спектр нормальных колебаний имеет лоренцову форму, так что можно ввести сопротивление R , оно тем не менее выпадает из окончательных выражений для $\bar{q}^2$, $\bar{I}^2$. Однако это не является следствием каких-либо фундаментальных причин, а в какой-то мере «случайно». Легко можно сконструировать феноменологическую модель с другим спектром нормальных колебаний, для которой выпадение диссипативных параметров из классических формул для $\bar{q}^2$, $\bar{I}^2$ уже не будет иметь места. Лоренцова модель спектра имеет тот недостаток, что огибающая соответствующей функции Грина недифференцируема в нуле, т. е. допускает сколь угодно быструю реакцию на внешнее воздействие. Даже небольшое видоизменение этой модели, например замена феноменологической функции Грина (при $\gamma T_0 \rightarrow \infty$)

$$G_R^{\text{ret}}(t) = \frac{\theta(t)}{M\bar{\omega}} \exp(-\gamma t) \sin \bar{\omega} t \quad (30.4)$$

на другую феноменологическую модель (также при $\gamma T_0 \rightarrow \infty$)

$$G_R^{\text{ret}}(t) = \frac{\theta(t)}{M\bar{\omega}} \frac{\gamma' \exp(-\gamma t) - \gamma \exp(-\gamma' t)}{\gamma' - \gamma} \sin \bar{\omega} t, \quad (31.4)$$

в которой $\gamma' \gg \gamma$, как снимает расходимости при использовании квантовой формулы Найквиста *), так и приводит к появлению диссипативных параметров γ , γ' не только в квантовых (как это уже было показано и на модели (30.4)), но и в классических формулах для $\bar{q}^2$, $\bar{I}^2$ **). В то же время функции (30.4) и (31.4) практически неотличимы вне области $t < (\gamma\gamma')^{-1/2}$. Таким образом, выпадение R из выражений для $\bar{q}^2$, $\bar{I}^2$ в случае применимости классической формулы Найквиста не является «грубым» признаком и теряет силу сразу же, как только перестают выполняться условия применимости этой формулы. В частности, даже при незначительном отклонении от закона Ома или при переходе от классической формулы Найквиста к квантовой R уже входит в выражения для $\bar{q}^2$, $\bar{I}^2$. Отметим, что отклонения от формулы Найквиста, связанные, например, с появлением частотной дисперсии, вполне возможны и не противоречат ФДТ. Однако обсуждающиеся в³¹ поправки к формуле Найквиста носят другой характер и основаны на неверной интерпретации ФДТ. Эта теорема является *точным* соотношением между спектром шумов и откликом системы, в общем случае обязательно рассчитанным в первом приближении нестационарной квантовомеханической теории возмущений (см., например,¹²). Если же для отклика использовать какое-либо другое приближение, то равенство между входящими в ФДТ величинами нарушится. Именно так в³¹ и производится «уточнение» ФДТ и вытекающей из нее формулы Найквиста (вместо теории возмущений используется приближение Вигнера — Вайскопфа).

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Ясно, что рассмотренная простейшая модель не может претендовать на общее описание различных физических явлений. Цель ее рассмотрения заключалась в другом: поскольку это — точно решаемая на уровне обратимых микроскопических уравнений модель, на ее примере можно прояснить

*) Отметим, что расходимости, связанные с использованием квантовой формулы Найквиста, вызваны нулевыми колебаниями, которые не регистрируются при измерениях. Поэтому после вычитания из $\theta(\omega, T)$ величины $\hbar\omega/2$ расходимости устраняются.

**) В этом легко убедиться, подставив (31.4) в (7а.3).

логическую связь между различными способами описания диссипативных процессов и уточнить те предпосылки, которые необходимо при этом использовать.

Резюмируя, хотелось бы отметить следующее. Диссипативный процесс с точки зрения микроскопических обратимых уравнений можно рассматривать как хотя и «бесконечно долгую», но начальную стадию периодического (или почти-периодического) движения всей системы. Переход к необратимому движению совершается при устремлении к бесконечности времени возврата T_0 , для чего необходимо увеличивать и полное число осцилляторов термостата.

Характер усредненного движения макроскопического тела не зависит от конкретного вида распределения вероятностей координат и скоростей частиц термостата, а определяется только видом спектра нормальных колебаний системы. На начальном (диссипативном) этапе может происходить затухание колебаний макроскопического осциллятора, которое затем сменяется их ростом. Но даже на диссипативном этапе усредненное движение не обязательно подчиняется обычному уравнению затухающих колебаний с силой трения, пропорциональной скорости (или с падением напряжения, пропорциональным току). Параметры, описывающие диссипацию энергии на первоначальном этапе движения системы, в частности и сопротивление, выражаются через параметры полного гамильтониана системы.

Если обратиться теперь к равновесным флуктуациям макроскопического осциллятора, то наиболее общее их описание в рамках вторых статистических моментов дается флуктуационно-диссипационной теоремой Каллена — Вельтона. В области высоких температур, где несущественны квантовые эффекты, она может быть сформулирована как утверждение о пропорциональности производной от корреляционной функции флуктуации координаты и микроскопической функции Грина, являющейся в силу обратимости уравнений движения во времени нечетной функцией времени.

Следует обратить внимание, что ФДТ доказывается для гамильтоновых систем, в целом не обладающих диссипацией. Однако при применении ФДТ вместо функции Грина микроскопических уравнений движения (которая обычно не может быть найдена в силу сложности задачи) используется функция Грина, определяемая для начального этапа эволюции системы из решения феноменологических уравнений (макроскопических или микроскопических), приближенно описывающих усредненное движение и уже содержащих введенные в них диссипативные параметры. Именно на этапе этой замены функции Грина в ФДТ и появляются диссипативные параметры.

Что касается формулы Найквиста, то она вытекает из ФДТ в случае, когда возможно пренебречь частотной дисперсией и усредненное движение на диссипативном этапе эволюции может быть описано при помощи трения, пропорционального скорости (току). На уровне микроскопического описания в рамках рассмотренной модели этому соответствует специальный (лоренцов) вид спектра нормальных колебаний *).

Аналогичные результаты могут быть получены и в квантовом случае. Здесь точное решение рассмотренной модельной задачи приводит к результату, указанному еще Найквистом: квантовая ФДТ и квантовая формула Найквиста могут быть получены (в спектральной форме) из соответствующих классических формул при помощи замены температуры на среднюю энергию квантового осциллятора, собственная частота которого совпадает с интересующей нас частотой в спектре флуктуаций (текущей частотой).

*) Как известно, в реальных условиях и закон Ома, и формула Найквиста очень хорошо выполняются. Это означает, что экспоненциальное затухание является не только точным решением в некоторой весьма частной модели (как в настоящей статье), но и хорошим приближением при гораздо более общей постановке задачи. Поскольку мы не рассматривали здесь приближенных решений, то вопрос о причине столь широкой применимости формулы Найквиста выходит за рамки работы.

Автор благодарен В. Л. Гинзбургу, Д. А. Киржницу, В. И. Манько и Л. П. Питаевскому, прочитавшим рукопись статьи, за целый ряд полезных советов и критических замечаний. Я признателен Ю. Л. Климонтовичу, беседы с которым стимулировали интерес к теме этой статьи. Хотя нам не удалось согласовать свои точки зрения по поводу квантовой формулы Найквиста, проведенные обсуждения способствовали, как можно надеяться, более четкому изложению материала. Ряд полезных советов и замечаний высказали участники руководимого С. М. Рытовым семинара по статистической радиофизике, где докладывалась эта работа. Особенно мне хочется поблагодарить С. М. Рытова, внимательно прочитавшего рукопись и сделавшего множество полезных замечаний по существу работы.

Институт физики атмосферы
АН СССР

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пригожин И. От существующего к возникающему.— М.: Наука, 1985.
2. Заславский Г. М. Стохастичность динамических систем.— М.: Наука, 1984.
3. Caldeira A. O., Leggett A. J.// *Ann. Phys.* 1983. V. 149. P. 374.
4. Глаубер Р.// Когерентные состояния в квантовой теории.— М.: Мир, 1972.— С. 26.
5. Глаубер Р., Манько В. И.// *ЖЭТФ*. 1984, Т. 87. С. 790.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика.— М.: Физматгиз, 1958.
7. Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика.— М.: Мир, 1980.
8. Кац М. Вероятность и смежные вопросы в физике.— М.: Мир, 1965.
9. Уленбек Дж., Форд Дж. Лекции по статистической механике.— М.: Мир, 1965.
10. Разаву М.// *Can. J. Phys.* 1980. V. 58. P. 1019.
11. Люиселл У. Излучение и шумы в квантовой электронике.— М.: Наука, 1972.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1964.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред.— М.: Гостехиздат, 1957.
14. Леонтович М. А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. Ч. II.— М.: Наука, 1983.
15. Фейнман Р. П. Статистическая механика.— М.: Мир, 1975.
16. Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику. Ч. I.— М.: Наука, 1976.
17. Гинзбург В. Л. Теоретическая физика и астрофизика.— М.: Наука, 1981 (2-е изд.); 1987 (3-е изд.).
18. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е.// *ЖЭТФ*. 1977. Т. 72. С. 238.
19. Горелик Г. С.// *УФН*. 1951. Т. 44. С. 33.
20. Гинзбург В. Л.// *УФН*. 1952. Т. 46. С. 348.
21. Левин М. Л.// *УФН*. 1954. Т. 52. С. 486.
22. Гинзбург В. Л.// *УФН*. 1954. Т. 52. С. 494.
23. Климонтович Ю. Л. Статистическая физика.— М.: Наука, 1982.— С. 229.
24. Климонтович Ю. Л.// *УФН*. 1986. Т. 151. С. 309 (в этом номере).
25. Татарский В. И.// *УФН*. 1983. Т. 139. С. 587.
26. Hilleary M., O'Connell R. F., Scully M. O., Wigner E. P.// *Phys. Rept.* 1984. V. 106. P. 123.
27. Березин Ф. А.// *УФН*. 1980. Т. 132. С. 497.
28. Де Гроот С. Р., Сатторп Л. Г. Электродинамика.— М.: Наука, 1982.
29. Nyquist H.// *Phys. Rev.* 1928. V. 32. P. 110.
30. Ford G. W., Lewis J. T., O'Connell R. F.// *Phys. Rev. Lett.* 1985. V. 55. P. 2273.
31. Dirk E. H.// *Nuovo Cimento. Ser. B.* 1985. V. 87. P. 55.
32. Гинзбург В. Л., Питаевский Л. П.// *УФН*. 1987. Т. 151. С. 333 (в этом номере).
33. Dekker H.// *Phys. Rept.* 1981. V. 80. P. 1.
34. Мельников В. И., Мешков С. В.// *Письма ЖЭТФ*. 1983. Т. 38. С. 111.