

УДК 531.19

О ФЛУКТУАЦИЯХ В АДИАБАТИЧЕСКОМ АНСАМБЛЕ

С. Н. Андреев, А. А. Самохин

Получены выражения для флуктуации энергии в адиабатическом процессе для ансамблей малых (одночастичных и одномерных) независимых "неидеальных" систем: гармонического осциллятора и симметричной кулоновской пары, ограниченных медленно раздвигающимися стенками. Проведено сравнение этих результатов с флуктуациями энергии в квазиравновесном каноническом ансамбле для данных систем и в адиабатическом ансамбле для больших систем.

В работе [1] было получено выражение для функции распределения ρ_{is} в адиабатическом ансамбле независимых осцилляторов, ограниченных адиабатически раздвигающимися стенками, с начальной функцией распределения, имеющей канонический вид ρ_{c0} . Было показано, что средние значения полной и кинетической энергии, вычисленные по такой функции распределения, отличаются от соответствующих выражений, определяемых с помощью квазиравновесной канонической функции распределения ρ_c . В настоящей работе исследуются флуктуации энергии в адиабатическом процессе для системы независимых осцилляторов и симметричных кулоновских пар, ограниченных раздвигающимися стенками.

Вопрос о виде функции распределения в адиабатическом процессе имеет давнюю историю, одним из первых этапов которой было обсуждение проблемы равенства так называемой изолированной κ_{is} и адиабатической κ_s восприимчивостей [1 – 9] в рамках теории линейного отклика. Впоследствии использование соотношений типа $\kappa_{is} = \kappa_s$ позволило получить [10] формально точное (в термодинамическом пределе) выражение для нелинейного отклика изолированной парамагнитной спиновой системы твердого тела с диполь-дипольным взаимодействием без использования явного вида неравновесной матрицы плотности. При достаточно медленном изменении внешнего поля из этого

уравнения получается выражение для нелинейного адиабатического отклика с учетом неадиабатических поправок [10].

В работах [11 – 13] было показано также, что флуктуации энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle_{is}$ в адиабатическом ансамбле

$$\langle(\Delta E)^2\rangle_{is} = (c_0/c)\langle(\Delta E)^2\rangle_c \quad (1)$$

отличаются от флуктуаций энергии $\langle(\Delta E)^2\rangle$ в квазиравновесном каноническом ансамбле на отношение теплоемкостей c_0/c , где $c = \partial\langle E\rangle_c/\partial\Theta$ – частная производная средней полной энергии системы $\langle E\rangle_c$ по температуре Θ в каноническом ансамбле.

Получение явного вида неравновесной функции распределения для неидеальных систем является весьма сложной задачей даже в адиабатическом приближении. В то же время рассмотрение ансамблей малых независимых систем позволяет получить явный вид адиабатической функции распределения с помощью выражения для адиабатических инвариантов этих систем.

В данной работе рассматриваются предельно малые системы, представляющие собой одномерные осциллятор и симметричную кулоновскую пару, движение которых ограничено абсолютно упругими стенками на интервале $[-L, L]$. Из общего выражения для адиабатического инварианта [14]

$$G(E, L) = 2\sqrt{2m} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \sqrt{E - U(r)} dr = \oint p dr, \quad (2)$$

где E – полная энергия частицы, m – ее масса, p – импульс частицы, а $[r_{min}; r_{max}]$ – допустимая для движения частицы область изменения координаты r , для одномерного гармонического осциллятора с гамильтонианом $H(p, r) = p^2/2m + m\omega^2 r^2/2$, ограниченного адиабатически раздвигающимися абсолютно упругими стенками на интервале $[-L, L]$, следует [1]

$$G = G_1 = 2m\omega L^2(\sqrt{y-1} + y \arcsin(1/\sqrt{y})) = \text{const}, \quad (3)$$

где $y = E/U(L) = v^2/\omega^2 L^2 + 1 \geq 1$ – механический параметр идеальности системы, $U(L)$ – потенциальная энергия частицы в точке L , а v – скорость частицы у стенки. Адиабатический инвариант движения симметричной кулоновской пары имеет вид

$$G = G_2 = \sqrt{2\alpha m} \frac{\sqrt{L}}{\sqrt{y}} \left(2\sqrt{y(y-1)} - \text{arcch}(2y-1) \right) = \text{const}, \quad (4)$$

где $y = E/U(L) = EL/\alpha$ – механический параметр идеальности, а $U(L) = \alpha/L$ – потенциальная энергия системы в точке L . Здесь учтено, что движение одномерной

кулоновской пары между упруго отражающими стенками на интервале $[-L, L]$ эквивалентно ограниченному стенками на интервале $[0, L]$ движению одной заряженной частицы с гамильтонианом $H(p, r) = p^2/2m + \alpha/r$ в кулоновском поле отталкивания с потенциальным центром в начале координат.

В пределе $y \rightarrow \infty$ оба выражения (3) и (4) стремятся к известному выражению для адиабатического инварианта свободной частицы $G = G_0(E, L) = 4L\sqrt{2mE}$, движение которой ограничено абсолютно упругими стенками на интервале $[-L, L]$. В обратном пределе $y \rightarrow 1$ адиабатический инвариант ограниченного осциллятора (3) стремится к другому известному выражению $E/\omega = \text{const}$ для адиабатического инварианта свободного осциллятора с медленно меняющейся частотой. В случае симметричной кулоновской пары в пределе $y \rightarrow 1$ выражение (4) сводится к виду $\sqrt{L}(y-1)^{3/2} = \text{const}$ или $vL^{2/3} = \text{const}$, то есть полная энергия кулоновской пары в адиабатическом процессе с увеличением L непрерывно уменьшается, в отличие от ограниченного осциллятора, который при некотором значении L^* перестает взаимодействовать со стенкой [1], после чего его энергия $E = U(L^*)$ не изменяется, причем значение $y = 1$ также считается неизменным. Такое различие в поведении рассматриваемых систем в пределе $y \rightarrow 1$ оказывает существенное влияние на поведение средних энергий в адиабатическом и квазиравновесном каноническом ансамбле.

Прежде чем приступить к рассмотрению адиабатического процесса, проведем сравнение равновесных канонического и микроканонического ансамблей для симметричной кулоновской пары. Соответствующее сравнение ансамблей в случае ограниченного осциллятора было проведено в работе [1].

Функция распределения канонического ансамбля определяется выражением

$$\rho_c(p, r) = \frac{\exp(-H(p, r)/\Theta)}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_0^L \exp(-H(p, r)/\Theta) dp dr} \quad (5)$$

Средняя кинетическая энергия в этом ансамбле для симметричной кулоновской пары имеет свой обычный вид $\langle K \rangle_c = \Theta/2$, а среднее значение полной энергии описывается формулой

$$\langle E \rangle_c = \frac{\Theta}{2} \left(\frac{2\mu e^{-1/\mu}}{W(\mu)} - 1 \right), \quad (6)$$

где $\mu = L\Theta/\alpha$, а $W(\mu) = \int_0^{\mu} e^{-1/t} dt$.

В высокотемпературном пределе, когда $\mu \gg 1$, выражение $W(\mu) \simeq \mu$, а величина $e^{-1/\mu} \rightarrow 1$. В результате получаем среднюю энергию свободной частицы $\langle E \rangle_c = \Theta/2$ и теплоемкость $c_v = \partial \langle E \rangle_c / \partial \Theta = 1/2$.

В низкотемпературном пределе при $\mu \rightarrow 0$, используя правило Лопиталья и соотношение $\frac{d}{d\mu} W(\mu) = e^{-1/\mu}$, находим из (6)

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \langle E \rangle_c = \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\alpha \mu}{2L} \left(\frac{2\mu e^{-1/\mu}}{W(\mu)} - 1 \right) = \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\alpha}{L} (\mu^2 + 3/2\mu + 1) = \frac{\alpha}{L} = U(L).$$

Отметим, что в этом пределе теплоемкость системы неограниченно возрастает, поскольку в этом пределе полная энергия обусловлена в основном потенциальной ее частью, т.е. система является предельно неидеальной.

Функция распределения микроканонического ансамбля имеет вид

$$\rho_m(p, r) = \frac{\delta(E - H(p, r))}{T(E, L)}, \quad (7)$$

где δ – дельта функция Дирака, $T(E, L)$ – период колебаний системы. В микроканоническом ансамбле кинетическая энергия флуктуирует при фиксированной полной энергии. Средняя кинетическая энергия $\langle K \rangle_m$ по микроканоническому распределению для симметричной кулоновской пары дается формулой

$$\langle K \rangle_m = E \frac{\sqrt{y(y-1)} - \ln(\sqrt{y} + \sqrt{y-1})}{\sqrt{y(y-1)} + \ln(\sqrt{y} + \sqrt{y-1})}, \quad (8)$$

где $y = L/2a = LE/\alpha$. В случае $y \gg 1$ ($E \gg \alpha/L$) логарифмами в выражении для кинетической энергии можно пренебречь, в результате получим $\langle K \rangle_m = E$. В обратном пределе, когда $y \rightarrow 1$, величина $\langle K \rangle_m \rightarrow 0$.

При равных E и $\langle E \rangle_c$ сравнение средних кинетических энергий $\langle K \rangle_c$ и $\langle K \rangle_m$ для канонического и микроканонического ансамблей в зависимости от μ показывает (см. рис. 1) существенное отличие в их поведении. Это отличие достигает максимума $\langle K \rangle_m / \langle K \rangle_c = 0.9$ в точке $\mu = 1.91$. В пределе свободной частицы ($\mu \gg 1$) и в обратном пределе при $\mu \ll 1$ имеет место, как и в случае ограниченного осциллятора [1], совпадение средних кинетических энергий, несмотря на различие вида функций распределения.

При рассмотрении адиабатического процесса, который является предельным случаем неравновесных процессов, для нахождения функции распределения необходимо рассматривать динамическую эволюцию систем ансамбля на фазовой плоскости.

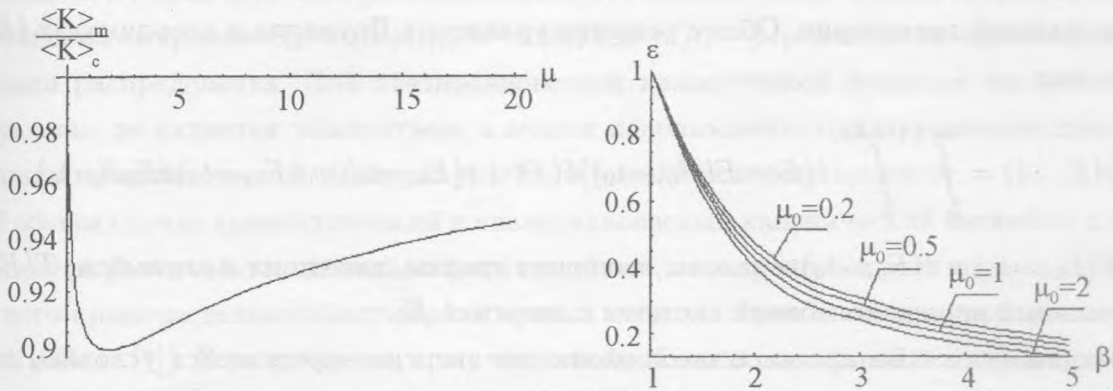


Рис. 1. Отношение средних кинетических энергий в каноническом и микроканоническом ансамблях при равных средних полных энергиях $\langle E \rangle_c = \langle E \rangle_m$ для частицы в кулоновском потенциале в зависимости от параметра $\mu = \Theta/U(L)$.

Рис. 2. Адиабатическая и квазиравновесная средние полные энергии ϵ , нормированные на начальное значение, в зависимости от параметра раздвижения β при различных значениях начального параметра $\mu_0 = \Theta_0/U(L_0)$ для симметричной кулоновской пары.

Если гамильтониан системы не зависит от времени, то каноническая и микроканоническая функции распределения являются равновесными, т.е. не изменяются при динамической эволюции систем, входящих в ансамбль. Это обстоятельство связано с тем, что микроканоническая функция распределения при фиксированной энергии равномерна по всем остальным переменным, а значит равномерна по времени (не зависит от него). При этом, очевидно, имеет место эргодичность для рассматриваемых систем, т.е. среднее по времени совпадает со средним по микроканоническому ансамблю. Канонический ансамбль представляет собой распределенное по оси энергии с плотностью $\sim \exp(-E/\Theta)$ семейство микроканонических ансамблей. Поэтому каноническая функция распределения также равномерна по времени.

Для нахождения функции распределения в неравновесном процессе необходимо решать уравнение Лиувилля, учитывающее динамику всех систем, входящих в ансамбль. При рассмотрении эволюции начального равновесного (зависящего только от энергии) ансамбля в адиабатическом процессе удобно записать общее решение уравнения Лиувилля в энергетических координатах $(E, -t)$ [15], канонически сопряженных координатам (p, r) , в которых координата $E \in [0, \infty]$ – полная энергия, фиксирует фазовую

траекторию на фазовой плоскости, а координата $t \in [0, T(E, L)]$ – положение системы на фазовой траектории. Общее решение уравнения Лиувилля в координатах $(E, -t)$ имеет вид

$$\rho(E, -t) = \int_0^\infty \int_0^{T(E_0, L_0)} \delta(E - E(E_0, -t_0)) \delta(-t + t(E_0, -t_0)) \rho_0(E_0, -t_0) dE_0 d(-t_0), \quad (9)$$

где $E(E_0, -t_0)$ и $t(E_0, -t_0)$ – законы эволюции систем, входящих в ансамбль, $T(E_0, L_0)$ – начальный период колебаний системы с энергией E_0 .

В адиабатическом процессе закон эволюции энергии определяется условием постоянства адиабатического инварианта $G(E, L)$; при этом конечная энергия E системы зависит только от одного начального условия – начальной энергии E_0 и не зависит от положения системы на фазовой траектории, т.е. от t_0 . Закон изменения координаты t имеет более сложный вид – конечное положение системы на траектории зависит как от E_0 , так и от t_0 . Равномерность распределения по времени в адиабатическом процессе будет сохраняться при условии адиабатического включения скорости стенок. Если это условие не выполнено (раздвижение стенок начинается с ненулевой скоростью), то равномерность по времени будет нарушаться, несмотря на малость скорости. Это обстоятельство было продемонстрировано в [1] на конкретном примере свободной частицы между стенками.

В дальнейшем будем считать, что в адиабатическом процессе начальная равномерность по времени не нарушается. В этом случае связь t_0 и t принимает простой вид $t/t_0 = T(E, L)/T(E_0, L_0)$. С учетом вышесказанного, переходя в выражении (9) от начальных переменных $(E_0, -t_0)$ к переменным $(E, -t)$, получим функцию распределения, возникающую из начальной равновесной в адиабатическом процессе:

$$\rho(E, -t) = \rho_0(E_0(E)) \frac{T(E_0, L_0)}{T(E, L)} \frac{dE_0}{dE}. \quad (10)$$

Учитывая, что в адиабатическом процессе $dG(E, L)/dE = T(E, L)$ [16] или $dE_0/dE = T(E, L)/T(E_0, L_0)$, из выражения (10) получим функцию распределения, возникающую из начальной канонической в адиабатическом процессе, в виде

$$\rho_{is}(E, -t) = \frac{\exp(-E_0(E)/\Theta_0)}{\int_0^\infty T(E, L_0) \exp(-E/\Theta_0) dE}. \quad (11)$$

При $L = L_0$ выражение $E_0(E) = E$ и (11) переходит в начальную каноническую функцию распределения ρ_{c0} .

Адиабатическая функция распределения (11) тождественно удовлетворяет условию постоянства энтропии $S_{is} = \langle \ln \rho_{is} \rangle_{is} = \text{const}$, где $\langle \dots \rangle_{is}$ – усреднение по адиабатической функции распределения. Для квазиравновесной канонической функции распределения это условие не является тождеством, а может использоваться как уравнение для определения квазиравновесной температуры Θ_c в адиабатическом процессе.

В общем случае адиабатический и квазиравновесный канонический ансамбли для малых систем различаются не только флуктуациями, но и средними величинами (для конкретного примера независимых ограниченных осцилляторов это было продемонстрировано в работе [1]). В то же время, в случае линейной связи начальной и конечной энергий системы в адиабатическом процессе адиабатический ансамбль совпадает с квазиравновесным каноническим. При этом теплоемкость системы $c = (\partial \langle E \rangle_c / \partial \Theta)$ сохраняется в адиабатическом процессе и равняется своему начальному значению c_0 .

Для рассматриваемых систем независимых ограниченных осцилляторов и симметричных кулоновских пар линейная связь начальной и конечной энергий в адиабатическом процессе имеет место в пределе $y = E/U(L) \rightarrow \infty$, где обе эти системы вблизи стенок ведут себя подобно свободной частице, для которой связь начальной E_0 и конечной E полной энергии в адиабатическом процессе имеет вид прямой пропорциональности $E_0(E) = \beta^2 E$, где $\beta = L/L_0$. Кроме того, для кулоновской пары, в пределе $y \rightarrow 1$, связь начальной и конечной энергий в адиабатическом процессе также становится линейной и дается выражением

$$E_0 = \beta^{4/3} E + \frac{\alpha}{L_0} (1 - \beta^{1/3}), \quad (12)$$

как это следует из формулы $vL^{2/3} = \text{const}$.

На рис. 2 приведены нормированные на начальное значение зависимости средней адиабатической и квазиравновесной канонической полных энергий от β при различных значениях начального параметра $\mu_0 = \Theta_0/U(L_0)$, которые с данной графической точностью практически совпадают. Напомним, что различие в средних для ограниченного осциллятора было существенно большим [1] и составляло несколько процентов. Относительная разность средних энергий для кулоновской пары $\zeta = ((\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_c) / \langle E \rangle) 100\%$ в зависимости от начального параметра μ_0 при различных значениях β приводится на рис. 3. Из рисунка видно, что это различие сначала увеличивается, а затем, пройдя через максимум, начинает уменьшаться, причем положение и величина этого максимума существенно зависят от β . Это связано с тем, что в пределах $\mu_0 \rightarrow 0$ и $\mu_0 \rightarrow \infty$ для большинства кулоновских пар, входящих в ансамбль, связь энергий $E_0(E)$ в адиабатическом процессе имеет линейный вид и адиабатическая функция распределения стремится

к канонической. Заметим, что для ансамбля ограниченных осцилляторов адиабатическая функция распределения имеет канонический вид лишь в пределе свободной частицы $\mu_0 \rightarrow \infty$.

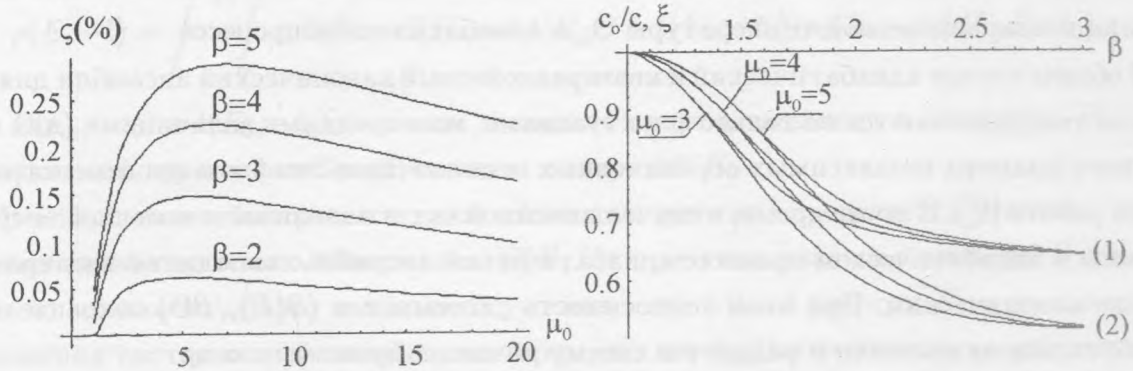


Рис. 3. Величина $\zeta = ((\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_c) / \langle E \rangle) 100\%$ в зависимости от начального параметра μ_0 при различных значениях параметра раздвижения β для симметричной кулоновской пары.

Рис. 4. Отношения $\xi = \langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} / \langle (\Delta E)^2 \rangle_c$ и c_0/c в зависимости от β при различных значениях начального параметра μ_0 для ограниченного осциллятора. Семейство кривых (1) соответствует величине ξ , а семейство (2) – отношению теплоемкостей.

При вычислении флуктуаций в адиабатическом ансамбле в выражениях $E_0(E)$ и $E(E_0)$, связывающих начальную и конечную энергии в адиабатическом процессе, удобно выделить линейную часть:

$$E_0(E) = l(\beta) + k(\beta)E + g(E, \beta), \tag{13}$$

где l и k – коэффициенты, не зависящие от E , а $g(E, \beta)$ – нелинейный остаток. Аналогично

$$E(E_0) = l_1(\beta) + E_0/k(\beta) + f(E_0, \beta), \tag{14}$$

где l_1 – коэффициент, не зависящий от E_0 , а $f(E_0, \beta)$ – соответствующий остаток.

Выражение для средней полной энергии в адиабатическом ансамбле, записанное в "шредингеровской" форме (эволюция определяется функцией распределения) с использованием формулы (13), имеет вид

$$\langle E \rangle_{is} = \frac{\int_0^\infty ET(E, L) \exp(-E_0(E)/\Theta_0) dE}{\int_0^\infty T(E, L) \exp(-E_0(E)/\Theta_0) dE} = \frac{\int_0^\infty E e^{-g/\Theta_0} T(E, L) \exp(-E/\Theta) dE}{\int_0^\infty e^{-g/\Theta_0} T(E, L) \exp(-E/\Theta) dE} =$$

$$= \frac{\langle EB \rangle_c(\Theta, L)}{\langle B \rangle_c(\Theta, L)}, \quad (15)$$

где $\Theta = \Theta_0/k$, величина $B = \exp(-g/\Theta_0)$, а $\langle \dots \rangle_c(\Theta, L)$ – усреднение по каноническому ансамблю с температурой Θ и положением стенок L . Дифференцирование правой и левой частей выражения (15) по Θ дает

$$\frac{\partial \langle E \rangle_{is}}{\partial \Theta} = \frac{1}{\Theta^2} \langle (\Delta E)^2 \rangle_{is}, \quad (16)$$

где $\langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} = \langle E^2 \rangle_{is} - (\langle E \rangle_{is})^2$.

Используя для полной средней энергии в адиабатическом ансамбле "гейзенберговское" представление и выражение (14), получим

$$\langle E \rangle_{is} = \frac{\int_0^\infty E(E_0) T(E_0, L_0) \exp(-E_0/\Theta_0) dE_0}{\int_0^\infty T(E_0, L_0) \exp(-E_0/\Theta_0) dE_0} = l_1 + \frac{\langle E \rangle_c(\Theta_0, L_0)}{k} + \langle f \rangle_c(\Theta_0, L_0),$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle_{is}}{\partial \Theta_0} = \frac{c_0}{k} + \frac{\langle \Delta f \Delta E \rangle_c(\Theta_0, L_0)}{\Theta_0^2}, \quad (17)$$

где $c_0 = \langle (\Delta E)^2 \rangle_c(\Theta_0, L_0)/\Theta_0^2$ – теплоемкость системы в начальном состоянии, а величина $\Delta f = f - \langle f \rangle$.

Отсюда непосредственно следует

$$\frac{\partial \langle E \rangle_{is}}{\partial \Theta_0} = c_0 + k \frac{\langle \Delta f \Delta E \rangle_c(\Theta_0, L_0)}{\Theta_0^2}. \quad (18)$$

Сравнивая (18) с выражением (16), окончательно получим

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} = c_0 \Theta^2 + \frac{1}{k(\beta)} \langle \Delta f \Delta E \rangle_c(\Theta_0, L_0). \quad (19)$$

Флуктуации полной энергии в квазиравновесном каноническом ансамбле связаны с теплоемкостью системы $c = \langle (\Delta E)^2 \rangle_c(\Theta_c, L)/\Theta_c^2$ соотношением $\langle (\Delta E)^2 \rangle_c = c \Theta_c^2$, где Θ_c – температура квазиравновесного ансамбля.

В случае линейной связи $E_0(E)$ в выражении (19) величины $f = \Delta f = 0$, адиабатическая функция распределения совпадает с квазиравновесной канонической, температуры $\langle 2K \rangle_{is} = \Theta_c = \Theta = \Theta_0/k(\beta)$, и теплоемкость системы c остается постоянной в адиабатическом процессе $c = c_0$. При этом формула (1) выполняется тождественно.

Если связь $E_0(E)$ является нелинейной, то адиабатический и квазиравновесный канонический ансамбли различаются по средним величинам, в частности, различаются

адиабатическая $\Theta_{is} = 2\langle K \rangle_{is}$ и квазиравновесная каноническая Θ_c температуры, не совпадающие также и с величиной $\Theta = \Theta_0/k(\beta)$ в выражении (19). Поэтому отношение адиабатических и квазиравновесных канонических флуктуаций полной энергии, вообще говоря, не будет описываться формулой (1), которая была получена для больших систем в термодинамическом пределе. Отличие от формулы (1) хорошо видно из рис. 4, на котором приводятся отношения $\xi = \langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} / \langle (\Delta E)^2 \rangle_c$ и c_0/c в зависимости от β при различных значениях начального параметра μ_0 для ограниченного осциллятора. Отношение теплоемкостей (семейство кривых 2) стремится к значению $1/2$, в то время как отношение флуктуаций ξ (семейство кривых 1) стремится к другому предельному значению 0.59.

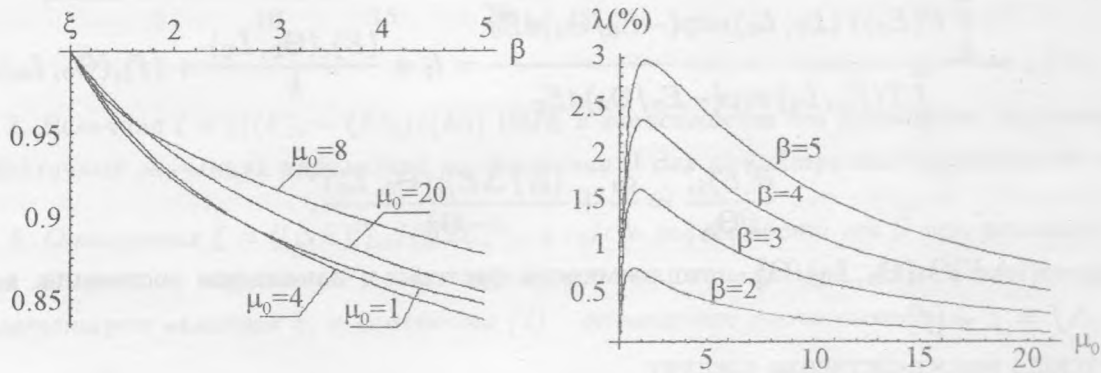


Рис. 5. Зависимость величины $\xi = \langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} / \langle (\Delta E)^2 \rangle_c$ от параметра β при различных μ_0 для симметричной кулоновской пары.

Рис. 6. Отклонение $\lambda = ((\xi - c_0/c)/\xi)100\%$ в зависимости от начального параметра μ_0 при различных значениях параметра β для симметричной кулоновской пары.

В отличие от ограниченного осциллятора, для симметричной кулоновской пары соотношение (1) выполняется с гораздо большей точностью. На рис. 5 приведено отношение $\xi = \langle (\Delta E)^2 \rangle_{is} / \langle (\Delta E)^2 \rangle_c$ в зависимости от β при различных значениях начального параметра μ_0 , которое с графической точностью совпадает с c_0/c . Пересечение кривых на графике связано с уже упомянутым выше тем обстоятельством, что адиабатический ансамбль стремится к каноническому в пределах $\mu_0 \rightarrow \infty$ и $\mu_0 \rightarrow 0$.

Приведенная на рис. 6 величина отклонения от формулы (1) для симметричной кулоновской пары $\lambda = ((\xi - c_0/c)/\xi)100\%$ в рассматриваемом диапазоне параметров, где ξ и c_0/c меняются более чем на 15%, не превышает трех процентов. Таким образом,

поведение флуктуаций энергии в адиабатическом ансамбле для кулоновских пар оказывается весьма близким к тому выражению, которое описывает флуктуации энергии в адиабатическом ансамбле для больших систем [10].

Полученные в настоящей работе результаты демонстрируют особенности статистических ансамблей для предельно малых (одночастичных и одномерных) неидеальных независимых систем – гармонического осциллятора и симметричной кулоновской пары, движение которых ограничено неподвижными или медленно раздвигающимися упругими стенками. Как и ожидалось, канонический и микроканонический ансамбли для таких систем отличаются не только по своим флуктуациям, но по средним значениям. Менее очевидными являются результаты сравнения квазиравновесного канонического и адиабатического ансамблей. Эти ансамбли также отличаются по средним значениям (особенно в случае ограниченного осциллятора), однако поведение флуктуаций энергии в адиабатическом ансамбле для кулоновских пар оказывается весьма близким к тому выражению, которое описывает флуктуации энергии в адиабатическом ансамбле для больших систем [10].

Это обстоятельство демонстрирует глубокую связь между статистическими свойствами больших и малых систем, для которых возможно полное динамическое описание. В связи с этим уместно напомнить о предположениях А. А. Власова, о которых в своих "Воспоминаниях" [17] пишет А. Д. Сахаров: "...Уже после войны Власов опубликовал (или пытался опубликовать) работу, в которой термодинамические понятия вводились для систем с малым числом степеней свободы. Многие тогда с огорчением говорили об этой работе, как о доказательстве окончательного его упадка как ученого. Но, быть может, Власов был не так уж и не прав. При выполнении определенных условий "расхождения траекторий" система с малым числом степеней свободы может быть эргодической (не поясняя термина скажу лишь, что отсюда следует возможность термодинамического рассмотрения). Пример, который я знаю из лекций проф. Синая: движение шарика по бильярдному полю, если стенки сделаны вогнутыми внутрь поля."

Таким образом, результаты настоящей работы можно рассматривать и как дальнейшее развитие и обоснование этой идеи А. А. Власова.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Андреев С. Н., Самохин А. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 4, 3 (2000).

- [2] Broer L. J. F. *Physica*, **17**, 531 (1951).
- [3] Yamamoto T. *Phys. Rev.*, **119**, 701 (1960).
- [4] Rosenfeld A. G., *Physica*, **27**, 67 (1961).
- [5] Saito N. *Phys. Soc. Japan*, **10**, 621 (1961).
- [6] Redfield A. G. *Phys. Rev.*, **128**, 2251 (1962).
- [7] Tjon J. A. *Physica*, **30**, 1; 1314 (1964).
- [8] Mountain R. D. *Physica*, **30**, 808 (1964).
- [9] Caspers W. J. *Theory of Spin Relaxation*, New York, Intersc. Publ., 1964.
- [10] Samokhin A. A. *Physica*, **39**, 541 (1968).
- [11] Samokhin A. A. *Phys. Lett.*, **36A**, 372 (1971).
- [12] Samokhin A. A. *Physica*, **58**, 26 (1972).
- [13] Mashkevich S. V., Mashkevich V. S. *Phys. Rev.*, **E51**, 245 (1995).
- [14] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Механика*, М., Наука, 1973.
- [15] Бакай А. С., Степановский Ю. П. *Адиабатические инварианты*, Киев, Наукова думка, 1981.
- [16] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая Механика нерелятивистская теория*, М., Наука, 1989.
- [17] Сахаров А. Д. *Знамя*, **10**, 3 (1990).

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 22 сентября 2000 г.