Краткие сообщения по физике № 1, 2 — 1992 г.

УДК 533.91

О ФЛУКТУАЦИОННО-ПАССИВНОЙ ТЕОРЕМЕ. ОБ ОДНОМ ОБОБЩЕНИИ ФОРМУЛЫ КУБО

Р.Х. Галеев

Получен пространственно-временной аналог формулы Р. Кубо /1/, связывающий коммутант коррелятора физической величины с адмитансом пассивной системы.

Известна важная роль флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ) в теории флуктуаций физических величин /1—7/. ФДТ, впервые полученная в работе Каллена и Велтонена /6/, в дальнейшем получила свое развитие, с одной стороны, в рамках классического рассмотрения М.А. Леонтовичем и С.М. Рытовым /3/, В.П. Силиным /4/ и А.А. Рухадзе и др. /5/, а с другой стороны, в случае квантовой статистической физики — А.И. Ахиезером /6/, Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшицем /7, 8/ и др.

В данной работе приводится расширение ФДТ — флуктуационно-пассивная теорема, дающая обобщение формулы Кубо на пространственно-временной случай. Название теоремы выбрано с целью подчеркнуть тесную связь ФПТ с теорией пассивных операторов, являющейся аппаратом хорошо известной линейной теории функции отклика /1, 8/. Рассматривается случай квантовой статистики. Хотя в рассуждениях используется модельная задача из физики плазмы, утверждение носит общий характер и не зависит от рассматриваемой модели.

Рассматривается идеальная бесстолкновительная однородная плазма, на которую накладывается малое внешнее возмущение в виде электромагнитного поля (ЭМП); необходимо определить корреляцию индуцированных токов в плазме. Плотности тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}_1,t_1)$ соответствует оператор плотности тока $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}_1,t_1)$ в точке $\mathbf{r}_1$ в момент времени t_1. Носителями тока являются свободные электроны. Для простоты ограничимся одноэлектронным приближением и учетом связанных состояний. Диссипация энергии ЭМП в среде происходит в процессах поглощения излучения. При учете свободных состояний нужно использовать спектральное разложение оператора. $\hat{H}$ — гамильтониан невозмущенной квантовой системы, т.е. в отсутствие внешнего ЭМП, $\hat{V}$ — малое возмущение поля, накладываемого на квантовую систему. Тогда $\hat{H}' = \hat{H} + \hat{V}$. В гильбертовом пространстве H со скалярным произведением $\langle\varphi,\psi\rangle_H = \langle\psi|\varphi\rangle = \int\varphi(\xi)\psi^*(\xi)d^3\xi$ выделена полная ортонормированная система собственных функций стационарного оператора Шредингера для одноэлектронной квантовой системы: $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$, E_n — собственные значения гамильтониана $\hat{H}$ (энергия связи электрона). Среднее значение физической величины j или соответствующего оператора $\hat{J}$ обозначаем через $\langle j\rangle = \langle\hat{J}\rangle = \int\psi\hat{J}\psi d^3\xi = \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 \langle\hat{J}\psi_n,\psi_n\rangle_{H}$, $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n\psi_n$.

Плотность индуцированного тока **j** связана с потенциалом **A** ЭМП пассивным оператором (адмитансом):

$$\langle j_e\rangle(\mathbf{r},t) = (\langle\hat{Z}\rangle*\mathbf{A})_l = \int\langle\hat{Z}_{lk}\rangle(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')A_k(\mathbf{r}',t')d^3r'dt', \qquad (1)$$

где $\langle\hat{Z}_{lk}\rangle$ — вещественная обобщенная функция — ядро пассивного оператора (адмитанса). Считаем, что выполнено условие причинности supp $\langle\hat{Z}\rangle \subset V_+ = \{(\mathbf{r},t):r^2\leqslant c^2t^2\}$, где V_+ — световой конус будущего, c — скорость света в вакууме и условие диссипативности:

$$\int(\langle\hat{Z}\rangle*\mathbf{A})\mathbf{A}\,d^3r\,dt \geqslant 0.$$

Причинность при доказательстве используется для сходимости соответствующих несобственных интегралов, и если не требовать сходимости, то причинности можно не предполагать.

В дальнейшем для исходной функции $f(\mathbf{r},t)$ преобразование Фурье обозначается как $f(k,\nu)$ или $f(\xi)$.

Адмитансный оператор $\langle\hat{Z}_{lk}\rangle$ имеет следующие свойства (подробно в /9, 10/): а) $\langle\hat{Z}_{lk}\rangle$ — обобщенная функция медленного роста, б) существует преобразование Лапласа $\langle\hat{Z}_{lk}\rangle(\zeta)$ в трубчатой области $T^{V_+} = R^4 + iV_+$ над конусом V_+, в) антиэрмитова часть матрицы $\langle\hat{Z}_{lk}\rangle(\zeta)$ неотрицательна при $\zeta = p + iq \in T^{V_+}$: $(-i)\langle\hat{Z}_{lk} - \hat{Z}^+_{kl}\rangle(\zeta) \geqslant 0$.

Установим связь между ядром пассивной системы $\langle\hat{Z}\rangle*$ и флуктуациями плотности тока в плазме, т.е. $\langle\hat{J}_l\hat{J}_k\rangle(\mathbf{r},t)$.

ФДТ устанавливает связь спектральной функции коррелятора некоторой физической величины с антиэрмитовой частью спектральной функции адмитанса. Более подробно этот вопрос рассмотрен в /5/.

$$\langle\hat{J}_l\hat{J}_k\rangle(\mathbf{k},\nu) = i\hbar[\exp(\hbar/T-1)]^{-1}\{\langle\hat{Y}^+_{kl}\rangle(\mathbf{k},\nu) - \langle\hat{Y}_{lk}\rangle(\mathbf{k},\nu)\},\ \hat{Z}_{lk} = -i\nu\hat{Y}_{lk}.$$

Встает вопрос об обращении флуктуационно-диссипативного соотношения. Этот вопрос был рассмотрен Р. Кубо /1/ (см. также /8/). Здесь мы получим аналог формулы Кубо в рамках теории пассивных систем, являющейся математическим вариантом линейной теории функции отклика. Результат получен в операторном виде и не зависит от базиса в H. Все выражения, появляющиеся в доказательстве, имеют строгий математический смысл, т.е. не будут расходящимися. Теорема вытекает из двух положений: 1. $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{Z}}^*\mathbf{A}$. 2. Энергия возмущения $V = -\int \mathbf{jA}\, d^3r\, dt$ идет только на процессы поглощения в среде.

Мы будем использовать следующие обозначения:

$$\langle \hat{J}\varphi,\psi\rangle_H = \int \hat{J}\varphi\psi^* d^3\xi = \langle \psi|\hat{J}|\varphi\rangle,\ \langle \hat{J}\varphi,\psi\rangle_H = \langle \varphi\hat{J}^+\psi\rangle_H,$$

где $\hat{J}^+$ — сопряженный оператор в H. Для физических величин $\hat{J} = \hat{J}^+$.

Корреляционная функция флуктуаций плотности тока в точках $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ и в моменты времени t_1, t_2

$$\langle \hat{J}_l(\mathbf{r}_1,t_1)\hat{J}_k(\mathbf{r}_2,t_2)\rangle = \langle \hat{J}_l(\mathbf{r}_1,t_1)\hat{J}_k(\mathbf{r}_2,t_2)\psi,\psi\rangle_H =$$

$$= \int [\hat{J}_l(\mathbf{r}_1,t_1)\hat{J}_k(\mathbf{r}_2,t_2)\psi(\xi)]\,\psi(\xi)d^3\xi = \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 \langle \hat{J}_l(\mathbf{r}_1,t_1)\hat{J}_k(\mathbf{r}_2,t_2)\psi_n,\psi_n\rangle_H, \tag{2}$$

где $\psi(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n\psi_n(\xi)$, для пространственно-однородной среды зависит только от разности координат и времени, т.е. $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $t = t_2 - t_1$. Спектральная функция коррелятора плотности тока равна

$$\langle \hat{J}_l\hat{J}_k\rangle(\mathbf{k},\nu) = \int \langle \hat{J}_l\hat{J}_k\rangle(\mathbf{r},t)\ \exp[i(\mathbf{kr} + \nu t)]\, d^3r\, dt$$

и связана с средними от произведения $\hat{J}_l^+(\mathbf{k},\nu)\hat{J}_k(\mathbf{k}',\nu')$ соотношением

$$\langle \hat{J}_l^+(\mathbf{k},\nu)\hat{J}_k(\mathbf{k}',\nu')\rangle = \langle \hat{J}_l\hat{J}_k\rangle(\mathbf{k}',\nu')\,\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\,\delta(\nu' - \nu), \tag{3}$$

где $\hat{J}_l(\mathbf{k},\nu)$ — преобразование Фурье операторных функций.

Флуктуационно-пассивная теорема. Средние значения оператора и флуктуации плотности тока связаны соотношением:

$$\langle \hat{Z}_{lk}\rangle(\mathbf{r},t) = (2\pi)^{-4}\hbar^{-2}\langle \hat{J}_k[\hat{J}_l,\hat{H}]\rangle(\mathbf{r},t), \tag{4}$$

где $[\hat{J}_l,\hat{H}]$ — коммутатор.

Покажем, что это так. Энергия, вкладываемая в среду внешним полем за все время от $t = -\infty$ до $t = +\infty$, есть

$$V = -\int \mathbf{j}\mathbf{A}\, d^3r\, dt. \tag{5}$$

Применим к (5) равенство Парсеваля для интеграла Фурье:

$$\int f(x-x')\varphi(x')d^4x' = \frac{1}{(2\pi)^4}\int f(\xi)\varphi(\xi)\exp(i\xi x)d^4\xi.$$

Получим (по повторяющимся индексам предполагается суммирование)

$$V = -\frac{1}{(2\pi)^4}\int A_l^*(\mathbf{k},\nu)\left\langle \hat{j}_l\right\rangle(\mathbf{k},\nu)d^3k\, d\nu. \tag{6}$$

Возьмем преобразование Фурье от (1) и подставим в (6). Получим

$$V = -\frac{1}{(2\pi)^4}\int A_l^*(\mathbf{k},\nu)\left\langle \hat{Z}_{lk}\right\rangle(\mathbf{k},\nu)A_k(\mathbf{k},\nu)d^3k\, d\nu. \tag{7}$$

С другой стороны, энергия, поглощенная средой за все время, есть

$$Q = \sum_{mn} f(E_n)w_{nm}h\omega_{mn},\ h\omega_{mn} = E_m - E_n, \tag{8}$$

где w_{nm} — вероятность перехода под воздействием возмущающего поля с энергией (5). Вероятность перехода за все время в случае нестационарной теории возмущений в первом приближении (см. /11/) $w_{nm} = \hbar^{-2}|\hat{V}_{nm}|^2$,

$$\hat{V}_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \hat{V}\Psi_n,\Psi_m\right\rangle_H dr,\ \Psi_n(\xi,\tau) = \psi_n(\xi)\exp(-iE_n\tau/\hbar),$$

где $\hat{V}_{nm}$ — соответствующая матрица перехода, $\hat{V}$ — оператор энергии

$$\hat{V} = -(2\pi)^{-4}\int A_l^*(\mathbf{k},\nu)\hat{J}_l(\mathbf{k},\nu)d^3k\, d\nu.$$

Учитывая последнее соотношение, а также, что

$$\hat{V}^*_{nm} = -(2\pi)^{-4}\int A_l(\mathbf{k},\nu)\hat{J}^*_{l,nm}(\mathbf{k},\nu)d^3k\, d\nu,$$

получим после подстановки в (8) и в силу равенства $\hat{J}^*_{l,nm} = \hat{J}^+_{l,mn}$

$$Q = \sum_{nm} f(E_n)\frac{h\omega_{mn}}{(2\pi)^8\hbar^2}\iint A_l^*(\mathbf{k},\nu)\hat{J}_{l,nm}(\mathbf{k},\nu)A_k(\mathbf{k}',\nu')\hat{J}^+_{k,mn}(\mathbf{k}',\nu')d^3k\, d\nu\, d^3k'\, d\nu'.$$

Меняя местами суммирование и интегрирование и сравнивая с (7), получаем

$$\left\langle \hat{Z}_{lk}\right\rangle(\mathbf{k}',\nu')\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\delta(\nu'-\nu) = -(2\pi)^{-4}\hbar^{-2}\sum_{nm} f(E_n)(E_n - E_m)\hat{J}_{l,nm}(\mathbf{k},\nu)\hat{J}^+_{k,mn}(\mathbf{k}',\nu'). \tag{9}$$

Учитывая, что $|\alpha_n|^2 = f(E_n)$ и правая часть преобразуется к виду $\left\langle \hat{J}^+_k(\mathbf{k}',\nu')[\hat{J}_l,H](\mathbf{k},\nu)\right\rangle$, получим $\left\langle \hat{Z}_{lk}\right\rangle(\mathbf{k},\nu) = (2\pi)^{-4}\hbar^{-2}\left\langle \hat{J}_k\{\hat{J}_l\hat{H} - \hat{H}\hat{J}_l\}\right\rangle(\mathbf{k},\nu)$. Беря обратное преобразование Фурье от последнего соотношения, получаем утверждение теоремы.

В асимптотическом пределе при $t \to \infty$ после выхода на стационарное состояние соотношение (4) приводится к более простому виду:

$$\langle \hat{Z}_{lk} \rangle (\mathbf{k},\nu) = \frac{\nu}{(2\pi)^2 \hbar} \langle \hat{J}_k \hat{J}_l \rangle (\mathbf{k},\nu). \tag{10}$$

Из соотношения (10) получается известная ФДТ, если взять от входящих операторов антиэрмитову часть.

Для доказательства (10) произведем изменения в рассуждении для ФПТ. В случае стационарной теории возмущений вероятность перехода есть $w_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\hat{V}_{nm}|^2$, $\hat{V}_{nm} = \langle \hat{V}\Psi_n, \Psi_m \rangle_H$.

Кроме того, $\langle \hat{J}_l \Psi_n, \Psi_m \rangle_H (\mathbf{r}_1, t_1) = \langle \hat{J}_l \psi_n, \psi_m \rangle_H (\mathbf{r}_1) \exp\,(i\nu_{mn} t_1)$. Тогда $\hat{J}_{l,nm}(\mathbf{k},\nu) = \hat{J}_{l,nm}(\mathbf{k})\,\delta(\nu+\nu_{mn})$, $\hat{J}^+_{l,nm}(\mathbf{k},\nu) = \hat{J}^+_{l,nm}(\mathbf{k})\,\delta(\nu+\nu_{mn})$. С учетом последних выражений и (2), (3) соотношение (9) приводится к виду:

$$\langle \hat{Z} \rangle (\mathbf{k},\nu)\,\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\,\delta(\nu'-\nu) = \frac{\hbar\nu}{(2\pi)^2 \hbar^2} \sum_{nm} f(E_n) \hat{J}_{l,nm}(\mathbf{k})\,\delta(\nu+\nu_{mn}) \hat{J}^+_{k,mn}(\mathbf{k}')\,\delta(\nu'+\nu_{mn}),$$

и после преобразований получаем соотношение (10).

Теперь беря антиэрмитову часть от соотношения (10) и принимая во внимание, что в случае равновесного распределения квантовых состояний $-f(E_n) = \exp\left(\frac{\mathcal{F}-E_n}{T}\right)$ (формула Гиббса), где $\mathcal{F}$ — свободная энергия, T — температура системы, получаем флуктуационно-диссипативную теорему.

Антиэрмитова часть тензора отклика и спектральная функция коррелятора тока связаны соотношением:

$$\langle \hat{Z}_{lk} - \hat{Z}^+_{kl} \rangle (\mathbf{k},\nu) = \frac{i\nu}{(2\pi)^2 \hbar} \left\{ \exp\left(\frac{\hbar\nu}{T}\right) - 1 \right\} \langle \hat{J}_k \hat{J}_l \rangle (\mathbf{k},\nu).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Kubo R. J. Phys. Soc. Japan, **12**, 570 (1957).
2. Callen H.B., Welton T.A. Phys. Rev., **83**, 34 (1951).
3. Леонтович М.А., Рытов С.М. ЖЭТФ, **23**, 246 (1952).
4. Силин В.П. Радиофизика **2**, 198 (1959).
5. Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. Основы электродинамики плазмы. М., Высшая школа, 1988.
6. Электродинамика плазмы, под редакцией А.И. Ахиезера. М., Наука, 1974.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика, ч. 1. М., Наука, 1976.
8. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика, ч. 2. М., Наука, 1978.
9. Владимиров В.С. Обобщенные функции в математической физике. М., Наука, 1979.
10. Галеев Р.Х. Дифференц. уравнения, **17**, 278 (1981).
11. Бете Г. Квантовая механика. М., Мир, 1965.

Институт общей физики РАН

Поступила в редакцию 26 августа 1991 г.