сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-81-128

Нгуен Танг

ОБОБЩЕНИЕ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННОЙ ТЕОРЕМЫ

1981

1. Как известно, обычная флуктуационно-диссипационная теорема /ФДТ/ устанавливает связь между линейной восприимчивостью и равновесной корреляционной функцией двух величин [1,2]. При рассмотрении флуктуаций в нелинейных неравновесных системах устанавливают также соотношения, связывающие нелинейные восприимчивости с равновесными корреляционными функциями более высокого порядка [3-7]. Эти соотношения показывают, что каждая равновесная корреляционная функция связывается только с одной соответствующей восприимчивостью и не зависит от сил, действующих на систему. В действительности корреляция величин в неравновесной системе должна зависеть от сил и, более того, относиться не к одной, а ко всем восприимчивостям системы. Для этого рассмотрим неравновесные корреляционные функции и найдем связи их спектральных интенсивностей с восприимчивостями.

2. Пусть неравновесная система создается мгновенным действием переменных сил $f_i(t)$, начиная с момента времени $t_0=-\infty$. Гамильтониан системы имеет вид

$$H_t = H_0 - \sum_i f_i(t) Q_i .$$

Среднее значение величины Q_k определяется выражением

$$\langle Q_k(t)\rangle = Sp(U^+(t)\, Q_k U(t)\, \rho_0), \qquad /1/$$

где $U(t)$ - оператор эволюции по времени.

В первом приближении оператор $U(t)$ равен

$$\left.\begin{aligned} U(t) &\approx U_{(0)}(t) + U_{(1)}(t), \\ U_{(0)}(t) &= \exp\left(-\frac{iH_0 t}{h}\right), \\ U_{(1)}(t) &= -\frac{1}{ih}\exp\left(-\frac{iH_0 t}{h}\right)\sum_i \int_{-\infty}^{t} f_i(t')\, Q_i^{\circ}(t')\, dt' \end{aligned}\right\} \qquad /2/$$

где $Q_i^{\circ}(t)$ записывается в представлении Гейзенберга с гамильтонианом H_0 .

Аналогично /1/, рассмотрим теперь корреляционную функцию

$$\langle Q_i(t_i)\, Q_k(t_k)\rangle \equiv Sp(Q_i(t_i)\, Q_k(t_k)\, \rho_0), \qquad /3/$$

$$Q_i(t_i) = U^+(t_i)\, Q_i\, U(t_i).$$

Эта функция, конечно, зависит от сил, действующих на систему, и имеет смысл корреляции двух величин Q_i и Q_k в моменты t_i и t_k для неравновесной системы. Назовем ее неравновесной корреляционной функцией.

Если действующие на систему силы относительно малы, то с помощью /2/ получаем

$$
\begin{aligned}
&\langle Q_i(t_i)Q_k(t_k)\rangle = \langle Q_i^\circ(t_i)Q_k^\circ(t_k)\rangle_0 + \\
&+\frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_i} f_j(t')\langle [Q_j^\circ(t'), Q_i^\circ(t_i)]_- Q_k^\circ(t_k)\rangle_0\, dt' + \\
&+\frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_k} f_j(t')\langle Q_i^\circ(t_i)[Q_j^\circ(t'), Q_k^\circ(t_k)]_-\rangle_0\, dt',
\end{aligned}
\qquad /4/
$$

где берем лишь пропорциональные $f_j(t)$ члены; $\langle\ldots\rangle_0$ выражает усреднение по равновесному ансамблю. Выражение /4/ показывает, что в данном приближении неравновесная корреляционная функция двух величин определяется равновесными корреляциями трех величин. Аналогично /4/, можем написать выражение для $\langle Q_k(t_k)Q_i(t_i)\rangle$. Таким образом, симметризованная неравновесная корреляционная функция выражается через равновесные корреляционные функции формулой

$$
\begin{aligned}
&\langle [Q_i(t_i), Q_k(t_k)]_+\rangle = \langle [Q_i^\circ(t_i), Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0 + \\
&+\frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_i} f_j(t')\langle [Q_k^\circ(t_k)[Q_j^\circ(t'), Q_i^\circ(t_i)]_-]_+\rangle_0\, dt' + \\
&+\frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_k} f_j(t')\langle [Q_i^\circ(t_i)[Q_j^\circ(t'), Q_k^\circ(t_k)]_-]_+\rangle_0\, dt'.
\end{aligned}
\qquad /5/
$$

Определим теперь спектральную интенсивность этой функции. Вообще говоря, функция $\langle [Q_i(t_i), Q_k(t_k)]_+\rangle$ явно зависит от времени t_1 и t_2. Поэтому спектральная интенсивность этой функции определяется преобразованием

$$
J_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k) = \iint_{-\infty}^{\infty} \langle [Q_i(t_i), Q_k(t_k)]_+\rangle \exp(i\omega_i t_i + i\omega_k t_k)\, dt_i\, dt_k. \qquad /6/
$$

Подставляя /5/ в /6/, выводим выражение

$$
\left.
\begin{aligned}
&J_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k) = J^{(0)}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k) + J^{(1)}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k), \\
&J^{(1)}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k) = \sum_j J^{(1),j}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k),
\end{aligned}
\right\} \qquad /7/
$$

где $J^{(0)}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k)$ и $J^{(1),j}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k)$ есть спектральные интенсивности при преобразовании типа /6/ для функций $\langle [Q_i^\circ(t_i), Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0$ и

$$
\frac{1}{ih}\left\{ \int_{-\infty}^{t_i} f_j(t')\langle [Q_k^\circ(t_k)[Q_j^\circ(t'), Q_i^\circ(t_i)]_-]_+\rangle_0\, dt' + \int_{-\infty}^{t_k} f_j(t')\langle [Q_i^\circ(t_i)[Q_j^\circ(t'), Q_k^\circ(t_k)]_-]_+\rangle_0\, dt' \right\}. \qquad /8/
$$

С другой стороны, как известно, функцию $\langle [Q_i^\circ(t_i), Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0$ можно написать в виде[8]

$$
\left.
\begin{aligned}
&\langle [Q_i^\circ(t_i), Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} I^\circ_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega)\, e^{-i\omega(t_i - t_k)}\, d\omega, \\
&I^\circ_{Q_i Q_k}(\omega) = \frac{2\pi}{Z}\sum_{\nu,\mu} (\psi_\nu^{\circ *} Q_i \psi_\mu^\circ)(\psi_\mu^{\circ *} Q_k \psi_\nu^\circ)\, e^{-E_\nu^\circ/\theta}\, \delta\left(\frac{E_\mu^\circ - E_\nu^\circ}{h} - \omega\right)
\end{aligned}
\right\}. \qquad /9/
$$

Поэтому нетрудно найти соотношение

$$
J^{(0)}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k) = 2\pi I^\circ_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i)\delta(\omega_i + \omega_k). \qquad /10/
$$

Найдем теперь $J^{(1),j}_{[Q_i, Q_k]_+}(\omega_i, \omega_k)$. Так как функция $\langle [[Q_j^\circ(t'), Q_i^\circ(t_i)]_- Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0$ зависит только от $t' - t_k$ и $t_i - t_k$, то она может записываться в виде*

$$
\begin{aligned}
&\langle [[Q_j^\circ(t'), Q_i^\circ(t_i)]_- Q_k^\circ(t_k)]_+\rangle_0 = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2}\iint_{-\infty}^{\infty} I^\circ_{[[Q_j, Q_i]_- Q_k]_+}(\omega_1', \omega_2') \exp[-i\omega_1'(t_i - t_k) - i\omega_2'(t_k - t')]\, d\omega_1'\, d\omega_2'.
\end{aligned}
\qquad /11/
$$

Разлагая функцию $f_j(t')$ в интеграл Фурье

$$
f_j(t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f_j(\Omega) \exp(-i\Omega t')\, d\Omega
$$

---

*Спектральные интенсивности $I^\circ_{Q_j Q_i Q_k}(\omega_i, \omega_k)$..... имеют вид

$$
\begin{aligned}
I^\circ_{Q_j Q_i Q_k}(\omega_i, \omega_k) = {}& \frac{(2\pi)^2}{Z}\sum_{\nu,\mu,\gamma} (\psi_\nu^{\circ *} Q_j \psi_\mu^\circ)(\psi_\mu^{\circ *} Q_i \psi_\gamma^\circ)(\psi_\gamma^{\circ *} Q_k \psi_\nu^\circ)\, e^{-E_\nu^\circ/\theta} \times \\
& \times \delta\left(\frac{E_\mu^\circ - E_\nu^\circ}{h} - \omega_i\right)\delta\left(\frac{E_\gamma^\circ - E_\nu^\circ}{h} - \omega_k\right).
\end{aligned}
$$

и используя /11/, находим фурье-компоненту первого члена в выражении /8/

$$\frac{1}{2\pi h} f_j(\omega_i+\omega_k) \int_{-\infty}^{\infty} \xi(\omega_i-\omega_1') I^{\circ}_{[Q_k[Q_j,Q_i]_-]_+}(\omega_1',\omega_1'+\omega_k)\,d\omega_1' .$$

Аналогично, фурье-компонента второго члена в /8/ равна

$$\frac{1}{2\pi h} f_j(\omega_i+\omega_k) \int_{-\infty}^{\infty} \zeta(\omega_i+\omega_k-\omega_1') I^{\circ}_{[Q_i[Q_j,Q_k]_-]_+}(\omega_i,\omega_1')\,d\omega_1' ,$$

где $\xi(x)$ обозначает функцию

$$\zeta(x) = -i\int_0^{\infty} e^{isx}\,ds = \frac{p}{x} - i\pi\delta(x),$$

в которой p/x понимается в смысле главного значения. Таким образом, получаем формулу спектральной интенсивности $J_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_i,\omega_k)$:

$$\begin{aligned} J_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_i,\omega_k) &= 2\pi I^{\circ}_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_i)\,\delta(\omega_i+\omega_k) + \\ &+ \frac{1}{2\pi h}\sum_j f_j(\omega_i+\omega_k)\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1' [\zeta(\omega_i-\omega_1') I^{\circ}_{[Q_k[Q_j,Q_i]_-]_+}(\omega_1',\omega_1'+\omega_k) + \\ &+ \zeta(\omega_i+\omega_k-\omega_1') I^{\circ}_{[Q_i[Q_j,Q_k]_-]_+}(\omega_i,\omega_1')] . \end{aligned} \qquad /12/$$

Согласно обычной флуктуационно-диссипационной теореме, функция $I^{\circ}_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega)$ связывается с линейной восприимчивостью

$$I^{\circ}_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega) = h\chi''_{ik}(\omega)\,\mathrm{cth}\frac{h\omega}{2\theta} . \qquad /13/$$

А функции $I^{\circ}_{[Q_k[Q_j,Q_i]_-]_+}(\omega_1,\omega_2)$ и $I^{\circ}_{[Q_i[Q_j,Q_k]_-]_+}(\omega_1,\omega_2)$ могут определяться на основе метода производной по параметру [9]:

$$I^{\circ}_{[Q_k[Q_j,Q_i]_-]_+}(\omega_1,\omega_2) = (2h)^2\,\mathrm{cth}\frac{h(\omega_1-\omega_2)}{2\theta}[\chi'_{ijk}(\omega_1,\omega_2)-\chi'_{jik}(\omega_1,\omega_2)], \qquad /14/$$

$$I^{\circ}_{[Q_i[Q_j,Q_k]_-]_+}(\omega_1,\omega_2) = (2h)^2\,\mathrm{cth}\frac{h\omega_1}{2\theta}[\chi'_{jki}(\omega_1,\omega_2)-\chi'_{kji}(\omega_1,\omega_2)], \qquad /15/$$

где χ'_{ijk} - вещественная часть фурье-компоненты соответствующей восприимчивости.

Заметим, что по сравнению с теорией возмущений результаты для нелинейных откликов, вычисленные по методу производной по параметру [9], являются более полными, поэтому имеем $\chi_{ijk}(\omega_1,\omega_2) \neq \chi_{jik}(\omega_1,\omega_2)$. Соотношения взаимности играют роль лишь для $\chi_{ijk}(\omega_1,\omega_2) = \chi_{ikj}(\omega_1,\omega_2)$.

Используя соотношения /13/, /14/, /15/, и на основе выражения /12/, можно записать

$$\begin{aligned} J_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_i,\omega_k) &= 2\pi h\chi''_{ik}(\omega_i)\,\delta(\omega_i+\omega_k)\,\mathrm{cth}\frac{h\omega_i}{2\theta} + \\ &+ \frac{2h}{\pi}\sum_j f_j(\omega_i+\omega_k)\{\mathrm{cth}\frac{h\omega_k}{2\theta}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1'\zeta(\omega_i-\omega_1')[\chi'_{jik}(\omega_1',\omega_1'+\omega_k) - \\ &- \chi'_{ijk}(\omega_1',\omega_1'+\omega_k)] + \mathrm{cth}\frac{h\omega_i}{2\theta}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1'\zeta(\omega_i+\omega_k-\omega_1')[\chi'_{jki}(\omega_i,\omega_1')-\chi'_{kji}(\omega_i,\omega_1')]\}. \end{aligned} \qquad /16/$$

Эта формула выражает связь между спектральной интенсивностью неравновесной корреляционной функции и восприимчивостями. Поэтому она может быть рассмотрена как обобщенная теорема Кэллена-Вильтона. В отличие от известной флуктуационно-диссипационной теоремы, спектральная интенсивность $J_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_1,\omega_2)$ в данном приближении зависит от внешних сил и нелинейных восприимчивостей χ'_{ijk} .... . В приближении более высших порядков, конечно, величина $J_{[Q_i,Q_k]_+}(\omega_1,\omega_2)$ должна зависеть от многоиндексных нелинейных восприимчивостей.

3. По аналогичному пути можем найти выражение для симметризованной неравновесной корреляционной функции скорости и координаты. В первом приближении по силам она равна

$$\begin{aligned} <[\dot{Q}_i(t_i), Q_k(t_k)]_+> &= <[\dot{Q}^{\circ}_i(t_i), Q^{\circ}_k(t_k)]_+>_0 + \\ &+ \frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_i} f_j(t_j) <[Q^{\circ}_k(t_k)[Q^{\circ}_j(t_j), \dot{Q}^{\circ}_i(t_i)]_-]_+>_0 dt_j + \\ &+ \frac{1}{ih}\sum_j \int_{-\infty}^{t_k} f_j(t_j) <[\dot{Q}^{\circ}_i(t_i)[Q^{\circ}_j(t_j), Q^{\circ}_k(t_k)]_-]_+>_0 dt_j . \end{aligned} \qquad /17/$$

Ее спектральная интенсивность имеет вид

$$\begin{aligned} J_{[\dot{Q}_i,Q_k]_+}(\omega_i,\omega_k) &= 2\pi h L''_{ik}(\omega_i)\,\delta(\omega_i+\omega_k)\,\mathrm{cth}\frac{h\omega_i}{2\theta} + \\ &+ \frac{2h}{\pi}\sum_j f_j(\omega_i+\omega_k)\{\mathrm{cth}\frac{h\omega_k}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1'\zeta(\omega_i-\omega_1')[L'_{jik}(\omega_1',\omega_1'+\omega_k) - \end{aligned}$$

$$-L'_{ijk}(\omega'_1, \omega'_1+\omega_k)] + \mathrm{cth}\frac{h\omega_1}{2\theta}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'_1 \zeta(\omega_1+\omega_k-\omega'_1) \times$$

$$\times [L'_{jki}(\omega_i, \omega'_1) - L'_{kji}(\omega_i, \omega'_1)]\}, \qquad /18/$$

где L''_{ik}, L'_{ijk} - мнимая и вещественная части соответствующих тензоров кинетических коэффициентов.

Соотношение /18/ играет роль обобщенной ФДТ для кинетических коэффициентов.

Аналогично мы можем построить соотношения для интенсивностей неравновесных корреляционных функций более высоких порядков.

В заключение автор выражает искренною благодарность профессорам Я.П.Терлецкому и В.К.Федянину за помощь при выполнении этой работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Callen H.B., Welton T.A. Phys.Rev., 1951, 83, p.34.
2. Kubo R.J. J.Phys.Soc.Jap., 1957, 12, p.570.
3. Golden K.I., Kalman G., Silevitch M.B. J.Stat.Phys., 1972, 6, p.87.
4. Bernard W., Callen H.B. Rev.Mod.Phys., 1959, 31, p.1017.
5. Ефремов Г.Ф. ЖЭТФ, 1968, 55, с.2322.
6. Ситенко А.Г. ЖЭТФ, 1978, 75, с.104.
7. Стратонович Р.Л. ДАН СССР, 1979, 247, с.86.
8. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. "Наука", М., 1971.
9. Нгуен Танг. ДАН СССР, 1980, 251, с.1365.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 февраля 1981 года.