Физическая Кинетика

Билеты к экзамену

ФОПФ 62X

Эти билеты составлены студентами и могут содержать смысловые ошибки – будьте осторожны.
Примечание для составителей: используйте окружение
\paper{номер билета}{формулировка билета},
чтобы автоматически добавить билет в оглавление, выделить ему новую страницу, оформить все билеты одинаковым шрифтом.

Содержание

1. Уравнение Лиувилля для одночастичной функции распределения. Сохранение фазового объема. Качественный вывод ур. Больцмана для классических и квантовых газов.

Качественный вывод уравнения Больцмана для классического газа

Рассмотрим идеальный газ. Пусть $q = (r, p)$ - координата молекулы в фазовом пространстве. Для начала найдем аналог уравнения непрерывности. Плотность частиц в фазовом пространстве:

$$f(q,t) = \sum_i \delta(q - q_i(t))$$

$$\int f(q,t) dp dr = N$$

$$n(r) = \int f(q,t) dp$$

$$\vec{j}(r,t) = \int \overrightarrow{v}(q,t) f(q,t) dp$$

где N — число частиц, $n(r)$ — плотность частиц в реальном пространстве, $\vec{j}(r,t)$ — поток частиц.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(q,t)d\Gamma = \sum_i \int \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\frac{d}{dq_i}\delta\left(q - q_i(t)\right)d\Gamma = -\sum_i \int \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\frac{d}{dq}\delta\left(q - q_i(t)\right)d\Gamma = -\int \operatorname{div}(J) d\Gamma$$

где введено обозначение J тока точек в фазовом пространстве.

$$J = \sum_i \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \operatorname{div} J = 0$$

Это и есть аналог уравнения неразрывности.

Определим непрерывное векторное поле $v(q,t)$ такое, что в местах нахождения частиц оно совпадает со скоростью: $v(q_i, t) = \dot{r}_i$. Аналогично с силовым полем.

$$J = \sum_i \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \to \begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t) f(q,t) \\ F(q,t) f(q,t) \end{pmatrix}$$

Преобразуем получившееся выражение с учетом конкретной формы функции распределения:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t) f(q,t) \\ F(q,t) f(q,t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t) \sum\limits_i \delta\left(q - q_i(t)\right) \\ F(q,t) \sum\limits_i \delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i \mathrm{v}(q,t)\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i F(q,t)\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} \sum\limits_i \mathrm{v}\left(q_i(t), t\right)\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i F\left(q_i(t), t\right)\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i \frac{\partial r_i}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i \frac{\partial p_i}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix}$$

Из этого получим уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{v}(q,t) f) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t) f) = 0$$

А теперь учтем столкновения частиц друг с другом, просто добавив в правую часть новые члены:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(q,t)+\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{\text{v}}(q,t)f)+\frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t)f)=\Gamma_{\text{in}}(t)-\Gamma_{\text{out}}(t)$$

где $\Gamma_{\text{in}}(t)$, $\Gamma_{\text{out}}(t)$ - вероятности входа и выхода из фазового объема в единицу времени.

$I=\Gamma_{\text{in}}(t)-\Gamma_{\text{out}}(t)$ называется интегралом столкновений.

Качественный вывод уравнения Больцмана для квантового газа

В равновесии функция распределения идеального квантового газа

$$f=\frac{1}{\exp\left(\varepsilon_p/T\right)\pm 1}$$

Аналогично классическому газу найдем

$$\int f(q,t)\frac{dpdr}{(2\pi\hbar)^d}=N$$

$$n(r)=\int f(q,t)\frac{dp}{(2\pi\hbar)^d}$$

$$\vec{j}(r,t)=\int \overrightarrow{\text{v}}(q,t)f(q,t)\frac{dp}{(2\pi\hbar)^d}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f(q,t)+\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{\text{v}}(q,t)f)+\frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t)f)=0$$

Отличие заключается в множителе $(2\pi\hbar)^d$, где d - размерность пространства (одномерная, двумерная, трёхмерная система).

Уравнение Лиувилля для одночастичной функции распределения

Рассмотрим случай, когда все силы потенциальные (система консервативна), то есть у системы есть гамильтониан и можно написать уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(q,t)+\{f,H\}=0$$

где $\{A,B\}=\frac{\partial A}{\partial r}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial r}$ - скобка Пуассона.

В стационарном состоянии гамильтониан это энергия потенциальная и внутренняя $H=(\varphi+\varepsilon(r,p))$. Подставим это выражение в уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(q,t)+\frac{\partial\varepsilon(q)}{\partial p}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}}+\left(F_{ext}-\frac{\partial\varepsilon(q)}{\partial r}\right)\frac{\partial f}{\partial \vec{p}}=0$$

Вспомним, что $\frac{\partial\varepsilon(q)}{\partial p}=v(q)$, $\frac{\partial\varepsilon(q)}{\partial r}=0$. В стационарном случае интеграл столкновений равен 0:

$$\{f\left(\varepsilon_p\right),\varepsilon_p\}=0$$

$$0=\frac{\partial}{\partial t}f(q,t)+\frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{\text{v}}(q,t)f)+\frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t)f)=\Gamma_{\text{in}}(t)-\Gamma_{\text{out}}(t)$$

Тогда получим, что уравнение Лиувилля дает тот же результат, что и кинетическое уравнение.

2. Уравнение Лиувилля для многочастичной функции распределения. Сохранение фазового объема.

Уравнение Лиувилля для многочастичной функции распределения

Рассмотрим некоторый набор частиц с координатами $Q = (\{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N\}, \{\vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N\})$. Обозначим $R = \{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N\}$, $P = \{\vec{p}_1, \ldots, \vec{p}_N\}$. Их функция распределения в фазовом пространстве:

$$f^{(N)}(Q,t) = \delta(Q - Q(t))$$

Получим уравнение непрерывности для этой системы:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f^{(N)}(Q,t)d\Gamma = \int \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\frac{d}{dQ(t)}\delta(Q-Q(t))d\Gamma = -\int \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\frac{d}{dQ}\delta(Q-Q(t))d\Gamma = -\int \mathrm{div}(J)d\Gamma$$

$$J = \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\delta(Q-Q(t))$$

Тогда в качестве уравнения непрерывности получим:

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(N)}(Q,t) + \mathrm{div}\, J = 0$$

Аналогично предыдущему билету преобразуем ток:

$$J = \frac{\partial Q(t)}{\partial t}\delta(Q-Q(t)) = \begin{pmatrix} \frac{\partial H[Q]}{\partial P} f^{(N)}(Q,t) \\ -\frac{\partial H[Q]}{\partial R} f^{(N)}(Q,t) \end{pmatrix}$$

Поставим выражение для тока, тогда получим уравнение Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(N)}(Q,t) + \left\{f^{(N)}(Q,t), H(Q,t)\right\} = 0$$

Подставив явное выражение для гамильтониана в стационарном случае $H = \sum_i \varepsilon_i(q_i)$ и упросив результат, получим кинетическое уравнение для многочастичной системы:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N}\mathbf{v}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{N}\mathbf{F}_i\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right)f^{(N)} = 0$$

Введем оператор Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(N)}(Q,t) + \left\{f^{(N)}(Q,t), H(Q,t)\right\} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f^{(N)}(Q,t) = -i\hat{L}f^{(N)}(Q,t)$$

Если гамильтониан не зависит от времени, то получим

$$f^{(N)}(Q,t) = \exp\left(-i\hat{L}t\right)f^{(N)}(Q,t=0)$$

Сохранение фазового объема

Рассмотрим некоторый набор точек фазового пространства (Рис. 1) $\mathcal{D}_0$ в момент времени t_0. С течением времени $\mathcal{D}_0$ переходит в $\mathcal{D}_1$, объем которого равен объему $\mathcal{D}_0$, то есть, фазовый объем сохраняется при сдвиге времени:

$$\int_{\Gamma(t)} dp^N dr^n = const$$

При доказательстве можно положить, что $f = 1$, если точка находится в фазовом пространстве, и $f = 0$, если вне его. Исходя из уравнения Лиувилля $\frac{df}{dt} = 0$, поэтому и $\frac{d}{dt}\int_{\Gamma(t)} f dp^N dr^n = 0 \Longrightarrow \int_{\Gamma(t)} dp^N dr^n = const$. Вообще говоря можно на теормех отослаться.

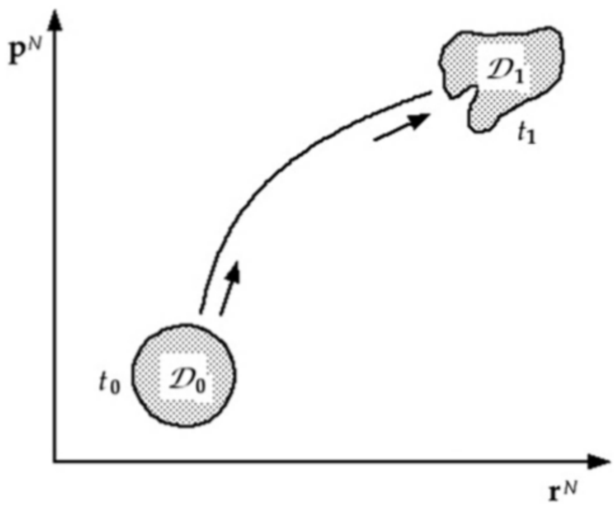


Рис. 1: Сохранение объема фазового пространства.

3. Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда (ББГК). Уравнение ББГК для одночастичной функции распределения (случай, n=1).

Рассмотрим редуцированную многочастичную функцию распределения для системы тождественных частиц:

$$f^{(n)}\left(r^n, p^n, t\right) = \frac{N!}{(N-n)!} \iint f^{(N)}\left(r^N, p^N, t\right) dr^{(N-n)} dp^{(N-n)}$$

Сведем задачу к многочастичной функции для какой-то $n < N$, для этого необходимо проинтегрировать по ненужным переменным (остальным $N - n$ координатам и импульсам, учитывая тождественность частиц)

Рассмотрим частный случай, когда сила, действующая на частицу, равна сумме потенциальной силы $\mathbf{X}_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial r_i}$ и силы парного взаимодействия $\mathbf{F}_{ij}$, $\mathbf{F}_{ii} = 0$.

По второму закону Ньютона:

$$\dot{\mathbf{p}}_i = \mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^{N} \mathbf{F}_{ij}$$

Уравнение Лиувилля:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{X}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right) f^{(N)} = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} F_{ij} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i}$$

умножим обе части уравнения на $\frac{N!}{(N-n)!}$ и проинтегрируем по $3(N-n)$ координатам и $3(N-n)$ импульсам. Тогда получим:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{n} \mathbf{X}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right) f^{(n)} = -\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \mathbf{F}_{ij} \frac{\partial f^{(n)}}{\partial \mathbf{p}_i} -$$

$$-\frac{N!}{(N-n)!} \iint \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=n+1}^{N} \mathbf{F}_{ij} \frac{\partial f^{(N)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}^{(N-n)} d\mathbf{p}^{(N-n)}$$

Тождественность частиц означает симметрию функции распределения по перестановке индексов координат и импульсов. Тогда получим уравнение Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \mathbf{v}_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{n} \left(\mathbf{X}_i + \sum_{j=1}^{n} \mathbf{F}_{ij}\right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\right) f^{(n)} = -\iint \sum_{i=1}^{n} \mathbf{F}_{i,n+1} \frac{\partial f^{(n+1)}}{\partial \mathbf{p}_i} d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1}$$

Это означает, что можно получить точное кинетическое уравнение для многочастичной системы. Но для этого нужно знать функции распределения высшего порядка и решить всю цепочку уравнений во всех порядках.

Рассмотрим случай $n = 1$.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{X}_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1}\right) f^{(1)}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, t\right) = -\iint \mathbf{F}_{1,2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} f^{(2)}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t\right) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{X} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \Gamma_{in} - \Gamma_{out} = -\left\langle \iint \mathbf{F}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'\right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f^{(2)}\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}'; t\right) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}' \right\rangle_{\text{small scales}}$$

4. Цепочка уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда (ББГК). Приближение слабых корреляций. Уравнения Власова.

Этот билет существенно (полностью) опирается на предыдущий.

Сделаем приближение слабых корреляций:

$$f^{(2)}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t\right) \approx f^{(1)}\left(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2; t\right)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{X}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = -\iint \mathbf{F}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t\right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f^{(2)}\left(\mathbf{r}, \mathbf{p}; \mathbf{r}', \mathbf{p}'; t\right) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'$$

Получим бесстолкновительное уравнение Власова:

$$\begin{gathered}\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + [\mathbf{X} + \overline{\mathbf{F}}]\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0 \\ \overline{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{F}\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t\right) f\left(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t\right) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'\end{gathered}$$

где $\overline{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)$ является средней силой, оказываемой другими частицами, расположенными в точках $\mathbf{r}'$, на частицу, которая в момент времени t находится в точке $\mathbf{r}$.

Хотя уравнение Власова явно не подходит для жидкостей, оно широко используется в физике плазмы, где дальнодействующий характер кулоновского потенциала оправдывает обработку взаимодействий в среднем поле.

Приближение слабых корреляций становится точным асимптотически, когда $|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'| \to \infty$. Таким образом, применение этого приближения подразумевает угрубление - усреднение по малым масштабам.

5. Локально-равновесное распределение. Уравнение теплового (и энергетического) баланса. Уравнение баланса энтропии.

Кинетическое уравнение Больцмана

В билет писать не стоит, чисто теоретические введение.

Одночастичная функция распределения: $f(t, \vec{r}, \vec{p})$. Если $d\Gamma = \frac{d\vec{p}d\vec{r}}{(2\pi\hbar)^d} = \frac{d^d p d^d r}{(2\pi\hbar)^d}$ - число возможных состояний в элементе фазового объема, где d - размерность пространства, то среднее число частиц:

$$dN(t, \vec{r}, \vec{p}) = f(t, \vec{r}, \vec{p})d\Gamma$$

Кинетическое уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F}\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = I(f)$$

$$\vec{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{p}}$$

$$\vec{F} = -\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{r}}$$

$E(\vec{p}, \vec{r}) = E(\vec{p}) + U(\vec{r})$ - энергия частиц.

$I(f) = 0$ - называется бесстолкновительным, тогда кинетическое уравнение переходит в Уравнение Лиувилля.

Из закона сохранения массы: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j} = 0$, где ρ - плотность, $\vec{j}$ - плотность потока массы

Из закона сохранения импульса: $\frac{\partial j}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} = 0$, где Π_{ik} - тензор плотности потока импульса.

Из закона сохранения энергии: $\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{Q} = 0$, где $\vec{Q}$ - плотность потока энергии.

Интеграл столкновений должен удовлетворять следующим свойствам, чтобы обеспечить удовлетворение законов сохранения:

- $\int I(f)d\Gamma_p = 0$
- $\int \vec{p}I(f)d\Gamma_p = 0$
- $\int EI(f)d\Gamma_p = 0$

τ-приближение

При рассмотрении малых возмущений системы для состояния полного термодинамического равновесия (f_0) $I(f_0) = 0$, а при слабом отклонении $\delta f = f - f_0$:

$$I(f) = \frac{f - f_0}{\tau}$$

$$\frac{1}{\tau} = -\left(\frac{\delta}{\delta f}I(f)\right)_{f=f_0}$$

τ - время релаксации.

Локально равновесное приближение

Локально равновесное приближение: свое термодинамическое равновесие в каждом малом $V_{\text{сред}}$ в отдельности, так что состояние среды в целом можно охарактеризовать температурой $T = T(\vec{r}, t)$, химическим потенциалом $\mu = \mu(\vec{r}, t)$ и другими термодинамическими переменными, зависящими от $\vec{r}$ и t.

Обосновать в локальном равновесном приближении уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial S(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\vec{r},t)}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)}\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t}$$

В приближении локального равновесия запишем основное уравнение термодинамики:

$$dE(\vec{r},t) = T(\vec{r},t)dS(\vec{r},t) + \mu(\vec{r},t)dn(\vec{r},t)$$

где $E(\vec{r},t)$ - плотность энергии, $S(\vec{r},t)$ - плотность энтропии, $n(\vec{r},t)$ - плотность числа частиц.

Считая локальное равновесное состояние стационарным:

$$dS(\vec{r},t) = \frac{dE(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)}dn(\vec{r},t)$$

$$\frac{dS(\vec{r},t)}{dt} = \frac{1}{T(\vec{r})}\frac{dE(\vec{r},t)}{dt} - \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})}\frac{dn(\vec{r},t)}{dt}$$

$$\frac{\partial S(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\vec{r})}\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r})}{T(\vec{r})}\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t}$$

Для закона сохранение числа частиц выражение точное:

$$\frac{dn(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div}\vec{j} = 0$$

Для закона сохранения энергии (оно же уравнение баланса энергии из требуемого в условии) возможно еще диссипативное слагаемое в правой части, которое мы получим ниже:

$$\frac{dE(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div}\vec{J}_E = \text{dissipation}$$

preds: Далее будут обозначения: j — ток частиц, $j_e = e * j$ — ток заряда, j_E — энергии, j_Q — тепла, j_S —энтропии.

Вывод закона сохранения числа частиц:

$$n(\vec{r},t) = \sum_i \delta(r - r_i(t))$$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{dr_i(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial r}\delta(r - r_i(t)) = -\sum_i \vec{v}_i(t)\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\delta(r - r_i(t)) = -\operatorname{div}\vec{J}$$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{J} = 0$$

$$\vec{J} = \sum_i \vec{v}_i(t)\delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f((\vec{r},\vec{p},t))\vec{v}(\vec{p})$$

Вывод закона сохранения энергии:

$$E(\vec{r},t) = \sum_i \varepsilon(p_i(t))\delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\vec{p}) f((\vec{r},\vec{p},t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} = \sum_i v(p_i(t))\left(\frac{\partial}{\partial t}p_i(t)\right)\delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i)\left(\frac{\partial}{\partial t}r_i(t)\right)\frac{\partial}{\partial r_i}\delta(r - r_i(t)) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div} \vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\sum_i \varepsilon(\vec{p_i}) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) \right) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div} \vec{j}_E$$

$$\vec{j}_E = \sum_i \varepsilon(\vec{p_i}) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\vec{p}) \vec{v}(\vec{p}) f((\vec{r}, \vec{p}, t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_E = \vec{F_{ext}} \vec{j}$$

Возвращаясь к основному уравнению термодинамики

$$dE(\vec{r}, t) = T(\vec{r}, t) dS(\vec{r}, t) + \mu(\vec{r}, t) dn(\vec{r}, t),$$

перенося температуру в левую часть и подставляя в уравнение законы сохранения (*) и (**),

$$\frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_E + \vec{E}_e \vec{j}_e \qquad (*)$$

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\operatorname{div} \vec{J}_e}{e} \qquad (**)$$

получаем выражение для потока тепла (оно же уравнение баланса тепла из требуемого в билете):

$$T(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(\vec{r}, t) - \mu(\vec{r}, t) \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \overset{\text{ЗС}}{=}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e \right) + \left(\vec{E}_e - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \right) \vec{j}_e = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q + \vec{\varepsilon} \vec{j}_e$$

preds: Если вы внимательные, то вы заметите, что получилось четыре члена вместо трех, а если вы дохуя внимательные, то поймете что из-за производной у левой скобки их на самом деле пять, и два (с градиентом μ) сократятся, восстанавливая справедливость. Скажите спасибо, что засейвил вам 5 минут.

Получаем следующие важные соотношения:

$$\frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q = \vec{\varepsilon} \vec{j}_e$$

$$\vec{j}_Q = \vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e$$

$$\vec{\varepsilon} = \vec{E}_{ext} - \frac{\nabla \mu}{e}$$

Для энтропии окончательно получаем уравнение баланса (вообще, есть подозрение, что то, что было до подстановки законов сохранения уже было уравнением баланса, но на всякий случай вот и другая формула)(получается явной подстановкой потока энтропии$\vec{J}_S = \frac{\vec{J}_Q}{T(\vec{r}, t)}$ в уравнение баланса тепла):

$$\frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_s = -\vec{J}_Q \frac{\nabla T}{T^2} + \vec{J}_e \frac{\vec{\varepsilon}}{T} = \vec{J}_Q \nabla \left(\frac{1}{T(\vec{r}, t)} \right) + \vec{J}_e \frac{\vec{\varepsilon}}{T(\vec{r}, t)}$$

$$\vec{J}_S = \frac{\vec{J}_Q}{T(\vec{r}, t)}$$

где $\vec{J}_Q$ - поток тепла, $\vec{J}_e$ - электрический ток, $\vec{\varepsilon}$ - эффективное поле.

6. Уравнение теплового баланса. Уравнение баланса энтропии. Обоснование формулы, выражающей поток тепла через функцию распределения. Можно ли теплу (потоку тепла) сопоставить квантовый оператор?

Этот билет существенно (полностью) опирается на предыдущий.

Как с помощью кинетического уравнения найти поток тепла?

Поток тепла:

$$\vec{J}_Q = \vec{J}_e - \mu\vec{J} = \vec{J}_e - \frac{\mu}{e}\vec{J} =$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(p)\vec{v}(p)f(\vec{r},\vec{p},t) - \mu\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\vec{v}(p)f(\vec{r},\vec{p},t) =$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}(\varepsilon(p)-\mu)\vec{v}(p)f(\vec{r},\vec{p},t)$$

Спектр $\varepsilon(p)$ определен с точностью до константы - начала отсчета энергии.

ЭТИ РАССУЖДЕНИЯ НИКЕМ НЕ ОДОБРЕНЫ, но могут быть похожими на правду.

Теорема Нетер: "Для физической системы, дифференциальные уравнения движения которой могут быть получены из вариационного принципа, каждому непрерывному однопараметрическому преобразованию, оставляющему неизменным (инвариантным) действие, соответствует закон сохранения".

У нас есть закон сохранения энергии, уравнение баланса тепла и всякое такое. Значит у нас есть такое вот волшебное преобразование. А преобразование - это оператор.

Лектор сказал, что можно через формулу Кубо получить нечто подобное. Но этот оператор будет работать только в теории линейного отклика. На некоторых нелинейных поправках он будет выдавать полную чушь.

7. Кинетическое уравнение на одночастичную функцию распределения (общий вид интеграла столкновений). Вывести закон сохранения числа частиц и уравнение баланса энергии.

Качественный вывод уравнения Больцмана для классического газа

Рассмотрим идеальный газ. Пусть $q = (r, p)$ - координата молекулы в фазовом пространстве. Для начала найдем аналог уравнения непрерывности. Плотность частиц в фазовом пространстве:

$$f(q,t) = \sum_i \delta(q - q_i(t))$$

$$\int f(q,t) d^3p d^3r = N$$

$$n(r) = \int f(q,t) d^3p$$

$$\vec{j}(r,t) = \int \overrightarrow{\mathrm{v}}(q,t) f(q,t) d^3p$$

где N — число частиц, $n(r)$ — плотность частиц в реальном пространстве, $\vec{j}(r,t)$ — поток частиц.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f(q,t)d\Gamma = \sum_i \int \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\frac{d}{dq_i}\delta\left(q - q_i(t)\right)d\Gamma = -\sum_i \int \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\frac{d}{dq}\delta\left(q - q_i(t)\right)d\Gamma = -\int \operatorname{div}(J) d\Gamma$$

,

где введено обозначение J тока точек в фазовом пространстве.

$$J = \sum_i \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \operatorname{div} J = 0$$

Это и есть аналог уравнения неразрывности.

Определим непрерывное векторное поле $v(q,t)$ такое, что в местах нахождения частиц оно совпадает со скоростью: $v(q_i, t) = \dot{r_i}$. Аналогично с силовым полем.

$$J = \sum_i \frac{\partial q_i(t)}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \to \begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t)f(q,t) \\ F(q,t)f(q,t) \end{pmatrix}$$

Преобразуем получившееся выражение с учетом конкретной формы функции распределения:

$$\begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t)f(q,t) \\ F(q,t)f(q,t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{v}(q,t)\sum\limits_i \delta\left(q - q_i(t)\right) \\ F(q,t)\sum\limits_i \delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i \mathrm{v}(q,t)\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i F(q,t)\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sum\limits_i \mathrm{v}\left(q_i(t), t\right)\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i F\left(q_i(t), t\right)\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i \frac{\partial r_i}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \\ \sum\limits_i \frac{\partial p_i}{\partial t}\delta\left(q - q_i(t)\right) \end{pmatrix}$$

Из этого получим уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{\mathrm{v}}(q,t)f) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t)f) = 0$$

А теперь учтем столкновения частиц друг с другом, просто добавив в правую часть новые члены:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(q,t) + \frac{\partial}{\partial \vec{r}}(\overrightarrow{v}(q,t)f) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}}(\vec{F}(q,t)f) = \Gamma_{\text{in}}(t) - \Gamma_{\text{out}}(t)$$

где $\Gamma_{\text{in}}(t)$, $\Gamma_{\text{out}}(t)$ - вероятности входа и выхода из фазового объема в единицу времени.

$I = \Gamma_{\text{in}}(t) - \Gamma_{\text{out}}(t)$ называется интегралом столкновений.

Свойства интеграла столкновений

$I(f) = 0$ - называется бесстолкновительным, тогда кинетическое уравнение переходит в Уравнение Лиувилля.

Из закона сохранения массы: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$, где ρ - плотность, $\vec{j}$ - плотность потока массы

Из закона сохранения импульса: $\frac{\partial j}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial r_k} = 0$, где Π_{ik} - тензор плотности потока импульса.

Из закона сохранения энергии: $\frac{\partial E}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{Q} = 0$, где $\vec{Q}$ - плотность потока энергии.

Интеграл столкновений должен удовлетворять следующим свойствам, чтобы обеспечить удовлетворение законов сохранения:

- $\int I(f) d\Gamma = 0$
- $\int \vec{p} I(f) d\Gamma = 0$
- $\int E I(f) d\Gamma = 0$

Интеграл столкновений в общем виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{X}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}\right) f(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \Gamma_{in} - \Gamma_{out} = -\left\langle \iint \mathbf{F}\left(\mathbf{r},\mathbf{r}'\right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f^{(2)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p};\mathbf{r}',\mathbf{p}';t\right) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}' \right\rangle_{\text{smallscales}}$$

Воспользовавшись принципом ослабления корреляций

$$f^{(2)}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t\right) \approx f^{(1)}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1;t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{r}_2,\mathbf{p}_2;t\right)$$

можем получить интеграл столкновений в привычном нам виде

$$I(f) = \int w'\left(f' f_1' - f f_1\right) d\Gamma_1 d\Gamma' d\Gamma_1',$$

где w' - вероятность при столкновении перехода $\Gamma' + \Gamma_1' \to \Gamma + \Gamma_1$

$$I(f) = \int dp' \left(W\left(p|p'\right) f\left(r,p',t\right) - W\left(p'|p\right) f(r,p,t)\right)$$

preds: у лектора этот переход не обоснован. Он предложил взять его как доп вопрос в качестве презентации на 10 минут для того, чтобы не писать кр

Закон сохранения числа частиц (феноменологический вывод)

Как альтернатива - см. билет 5, там "лекторский"вывод этого уравнения. (Точнее в обозначениях лектора (уже исправили на человеческие обозначения))

Посчитаем плотность частиц в единице объема $n(r,t) = \int f d\Gamma$. Запишем уравнение Больцмана и проинтегрируем его по $d\Gamma$

$$\int (\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\nabla f) d\Gamma = -\int I(f) d\Gamma$$

Число частиц остается постоянным, поэтому интеграл в правой части зануляется. $\vec{v}$ не зависит от координат, поэтому вынесем наблу за знак интеграла.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f d\Gamma + \nabla \int \vec{v} f d\Gamma = 0$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (n\vec{v}) = 0$$

Учитывая, что $n * \vec{v} = \vec{J}$, запишем в виде

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\vec{J}\right) = 0$$

Уравнение баланса энергии

Вывод закона сохранения энергии:

$$\Delta E(\vec{r},t) = \sum_i \varepsilon(p_i(t))\delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\vec{p})f((\vec{r},\vec{p},t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} = \sum_i v(p_i(t))\left(\frac{\partial}{\partial t}p_i(t)\right)\delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i)\left(\frac{\partial}{\partial t}r_i(t)\right)\frac{\partial}{\partial t}\delta(r - r_i(t)) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t))F_i\delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div}\vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\left(\sum_i \varepsilon(\vec{p}_i)\vec{v}_i(t)\delta(r - r_i(t))\right) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t))F_i\delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div}\vec{j}_E$$

$$\vec{j}_E = \sum_i \varepsilon(\vec{p}_i)\vec{v}_i(t)\delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\vec{p})\vec{v}(\vec{p})f((\vec{r},\vec{p},t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{j}_E = F_{ext}\vec{j}$$

8. Уравнение баланса энтропии. Обобщенные силы и обобщенные потоки. Теоремы Онзагера. Привести примеры выполнения теорем Онзагера из задания.

Уравнение баланса энтропии

$$\frac{\partial S(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\vec{r},t)}\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)}\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t}$$

В приближении локального равновесия запишем основное уравнение термодинамики:

$$dE(\vec{r},t) = T(\vec{r},t)dS(\vec{r},t) + \mu(\vec{r},t)dn(\vec{r},t)$$

где $E(\vec{r},t)$ - плотность энергии, $S(\vec{r},t)$ - плотность энтропии, $n(\vec{r},t)$ - плотность числа частиц.

Считая локальное равновесное состояние стационарным:

$$dS(\vec{r},t) = \frac{dE(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r},t)}dn(\vec{r},t)$$

$$\frac{dS(\vec{r},t)}{dt} = \frac{1}{T(\vec{r})}\frac{dE(\vec{r},t)}{dt} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r})}\frac{dn(\vec{r},t)}{dt}$$

$$\frac{\partial S(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{1}{T(\vec{r})}\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r},t)}{T(\vec{r})}\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t}$$

Для закона сохранение числа частиц выражение точное:

$$\frac{dn(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div}\vec{J}_n = 0$$

Для закона сохранения энергии возможно еще диссипативное слагаемое в правой части, которое мы получим ниже:

$$\frac{dE(\vec{r},t)}{dt} + \operatorname{div}\vec{J}_E = \text{dissipation}$$

Вывод закона сохранения числа частиц:

$$n(\vec{r},t) = \sum_i \delta(r - r_i(t))$$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} = -\sum_i \frac{dr_i(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial r}\delta(r - r_i(t)) = -\sum_i \vec{v}_i(t)\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\delta(r - r_i(t)) = -\operatorname{div}\vec{J}$$

$$\frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{J} = 0$$

$$\vec{J} = \sum_i \vec{v}_i(t)\delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f((\vec{r},\vec{p},t))\vec{v}(\vec{p})$$

Вывод закона сохранения энергии:

$$\Delta E(\vec{r},t) = \sum_i \varepsilon(p_i(t))\delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\vec{p})f((\vec{r},\vec{p},t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r},t)}{\partial t} = \sum_i v(p_i(t))\left(\frac{\partial}{\partial t}p_i(t)\right)\delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i)\left(\frac{\partial}{\partial t}r_i(t)\right)\frac{\partial}{\partial t}\delta(r - r_i(t)) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t))F_i\delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div}\vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\left(\sum_i \varepsilon(\vec{p}_i)\vec{v}_i(t)\delta(r - r_i(t))\right) =$$

$$= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div} \vec{j}_E$$

$$\vec{j}_E = \sum_i \varepsilon(\vec{p}_i) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\vec{p}) \vec{v}(\vec{p}) f((\vec{r}, \vec{p}, t))$$

$$\frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_E = F_{ext} \vec{j}$$

Возвращаясь к основному уравнению термодинамики

$$dE(\vec{r}, t) = T(\vec{r}, t) dS(\vec{r}, t) + \mu(\vec{r}, t) dn(\vec{r}, t),$$

перенося температуру в левую часть и подставляя в уравнение законы сохранения (*) и (**),

$$\frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_E + \vec{E}_e \vec{j}_e \tag{*}$$

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\operatorname{div} \vec{J}_e}{e} \tag{**}$$

получаем выражение для потока тепла:

$$T(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(\vec{r}, t) - \mu(\vec{r}, t) \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \overset{\text{ЗС}}{=}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{J}_e \right) + \left(\vec{E}_e - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \right) \vec{j}_e = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q + \varepsilon \vec{j}_e$$

Отсюда имеем следующие важные соотношения:

$$\frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q = \varepsilon \vec{j}_e$$

$$\vec{j}_Q = \vec{j}_e - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e$$

$$\varepsilon = E_{ext} - \frac{\nabla \mu}{e}$$

Для энтропии окончательно получаем уравнение баланса (вообще, есть подозрение, что то, что было до подстановки законов сохранения уже было уравнением баланса, но на всякий случай вот и другая формула):

$$\frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_s = -\vec{J}_Q \frac{\nabla T}{T^2} + \vec{J}_e \frac{\vec{\varepsilon}}{T} = \vec{J}_Q \nabla \left(\frac{1}{T(\vec{r}, t)} \right) + \vec{J}_e \frac{\varepsilon}{T(\vec{r}, t)}$$

$$\vec{J}_S = \frac{\vec{J}_Q}{T(\vec{r}, t)}$$

где $\vec{J}_Q$ - поток тепла, $\vec{J}_e$ - электрический ток, $\vec{\varepsilon}$ - электрическое поле.

Обобщенные силы и обобщенные потоки

Пусть энтропия есть функция термодинамических переменных $Y_1, Y_2, ..., Y_n$, то есть $S = S(Y_1, Y_2, ..., Y_n)$, и пусть $X_i = -\frac{\partial S}{\partial Y_i}$ - сопряженные силы. Тогда сопряженные потоки выражаются линейным образом (в линейном приближении!) через сопряженные силы: $\dot{Y}_i = -\sum_j L_{ij} X_j$; при этом должно быть $\frac{dS}{dt} = -\sum_i X_i \dot{Y}_i = \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j > 0$

Теоремы Онзагера

Соотношения Онзагера утверждают, что для таких переменных $L_{ij} = L_{ji}$

Привести примеры выполнения теорем Онзагера из задания

Задача номер 7 из задания.
В нашем случае $dE = TdS + (\mu + U)dN = TdS + (\mu - e\varphi)dN$. Для соответствующих плотностей $d\epsilon = Tds + (\mu - e\varphi)dn$. Тогда $ds = d\epsilon/T - (\mu - e\varphi)dn/T$.

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T}\frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \frac{(\mu - e\varphi)}{T}\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{T}\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{(\mu - e\varphi)}{eT}\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$\rho = -en$. Учитываем $\partial\rho/\partial t + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0, \partial\epsilon/\partial t + \operatorname{div}\mathbf{q} = 0$, где $\mathbf{q}$ - поток полной энергии.

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{1}{T}\operatorname{div}\mathbf{q} - \frac{(\mu - e\varphi)}{eT}\operatorname{div}\mathbf{j} = -\operatorname{div}\frac{\mathbf{q}}{T} + \mathbf{q}\nabla\frac{1}{T} - \operatorname{div}\frac{(\mu - e\varphi)\mathbf{j}}{eT} + \frac{\mathbf{j}}{e}\nabla\frac{(\mu - e\varphi)}{T}$$
$$\frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}\left[\frac{\mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e}{T}\right] = \frac{\mathbf{j}}{T}(\mathbf{E} + \nabla\mu/e) + \{\mathbf{q} + \mathbf{j}(\mu - e\varphi)/e\}\nabla\frac{1}{T} \quad \Rightarrow$$
$$\frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}\frac{\mathbf{q}'}{T} = \mathbf{j}\frac{(\mathbf{E} + \nabla\mu/e)}{T} + \mathbf{q}'\nabla\frac{1}{T}$$

В результате мы имеем, что сопряженные потоки

$$\dot{Y}_1 = \mathbf{j}, \dot{Y}_2 = \mathbf{q}'$$

сопряженные силы

$$X_1 = -(\mathbf{E} + \nabla\mu/e)/T, X_2 = -\nabla(1/T), \mathbf{j} = L_{11}(\mathbf{E} + \nabla\mu/e)/T + L_{12}\nabla(1/T),$$
$$\mathbf{q}' = L_{21}(\mathbf{E} + \nabla\mu/e)/T + L_{22}\nabla(1/T), L_{11} = \sigma T, L_{22} =\sim T^2 + \sigma\alpha^2 T^3, L_{12} = L_{21} = \alpha\sigma T^2$$

9. Термоэлектрические эффекты. Эффект Зеебека. Термоэлектрический коэффициент α в металле и полупроводнике (вычислить и сравнить).

Эффект Зеебека - это термоэлектрический эффект, при котором появляется разность потенциалов на контакте двух проводников разной температуры.
Рассмотрим электрический и ток тепла:

$$\vec{J}_e = \sigma\vec{\varepsilon} - \beta\nabla T$$

$$\vec{J}_Q = \chi\vec{\varepsilon} - \kappa\nabla T$$

Выразим все через электрическое поле и поток тепла:

$$\vec{\varepsilon} = \rho\vec{J}_e + \alpha\nabla T$$

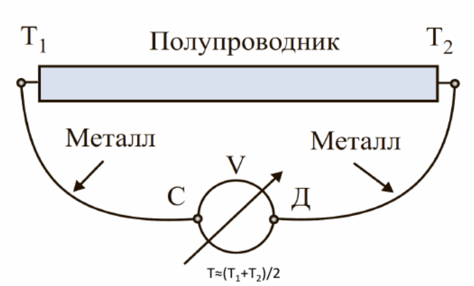
$$\vec{J}_Q = \Pi\vec{J}_e - \tilde{\kappa}\nabla T$$

где

$$\rho = \sigma^{-1} \qquad \alpha = \sigma^{-1}\beta \qquad \Pi = \chi\rho \qquad \tilde{\kappa} = \kappa - \chi\alpha$$

Рассмотрим систему - контакт двух материалов, в которой есть градиент температур, но нет тока:

$$\vec{J}_e = 0 \qquad \nabla T \neq 0$$



Тогда мы имеем:

$$\vec{\varepsilon} = \alpha\nabla T$$

$$\vec{J}_Q = -\tilde{\kappa}\nabla T$$

Посчитаем разность потенциалов:

$$V_{\text{СД}} = \int_{\text{С}}^{\text{Д}} \alpha\nabla T\,dr$$

Далее,

$$E_F(\text{С}) = E_F(\text{Д})$$

$$\int_{\text{С}}^{\text{Д}} \alpha\nabla T\,dr = \alpha_{\text{М}}\left(T_1 - \frac{T_1+T_2}{2}\right) + \alpha_{\Pi}(T_2 - T_1) + \alpha_{\text{М}}\left(\frac{T_1+T_2}{2} - T_2\right) = (\alpha_{\Pi} - \alpha_{\text{М}})(T_2 - T_1)$$

Оценим значения коэффицента α.
В металле:

$$\alpha = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_{\text{Б}}}{e}\frac{k_{\text{Б}}T}{\zeta}(3/2 + r) \approx 10^{-8} \ (B/K)$$

В полупроводнике:

$$\alpha = \frac{k_{\text{Б}}}{e\sigma}\left[\sigma_n\left(5/2 + r - \frac{\zeta}{k_{\text{Б}}T}\right) - \sigma_p\left(5/2 + r' - \frac{\zeta_p}{k_{\text{Б}}T}\right)\right] \approx 10^{-4} \ (B/K)$$

где $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ - полная проводимость. Как видно из этой формулы **полупроводники p-типа имеют** $\alpha < 0$**, n-типа имеют** $\alpha > 0$. Видно, что для металлов коэффициент домножается на $T/E_F \approx 10^{-2}$, поэтому он получается почти ноль.
Тогда:

$$\int_{\text{С}}^{\text{Д}} \alpha \nabla T \, dr = \alpha_{\Pi}(T_2 - T_1)$$

10. Эффект Пельтье на контакте металла и полупроводника. Коэффициенты Пельте в металле и полупроводнике (вычислить и сравнить).

Эффект Пельтье - это термоэлектрическое явление переноса энергии при прохождении электрического тока в месте контакта (спая) двух разнородных проводников, от одного проводника к другому.

Рассмотрим электрический и ток тепла:

$$\vec{J}_e = \sigma\vec{\varepsilon} - \beta\nabla T$$

$$\vec{J}_Q = \chi\vec{\varepsilon} - \kappa\nabla T$$

Выразим все через электрическое поле и поток тепла:

$$\vec{\varepsilon} = \rho\vec{J}_e + \alpha\nabla T$$

$$\vec{J}_Q = \Pi\vec{J}_e - \tilde{\kappa}\nabla T$$

где

$$\rho = \sigma^{-1} \qquad \alpha = \sigma^{-1}\beta \qquad \Pi = \chi\rho \qquad \tilde{\kappa} = \kappa - \chi\alpha$$

Рассмотрим систему - контакт двух материалов, в которой есть ток, но нет градиента температур $\nabla T = 0$:

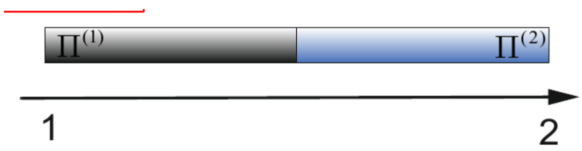


Рис. 2: Стрелочка указывает поток электронов

$$\vec{\varepsilon} = \rho\vec{J}_e$$
$$\vec{J}_Q = \Pi\vec{J}_e$$

Из соотношений Онсагера мы получаем связь:

$$\hat{\Pi} = \hat{\alpha}T$$

Далее, для тепла можно записать:

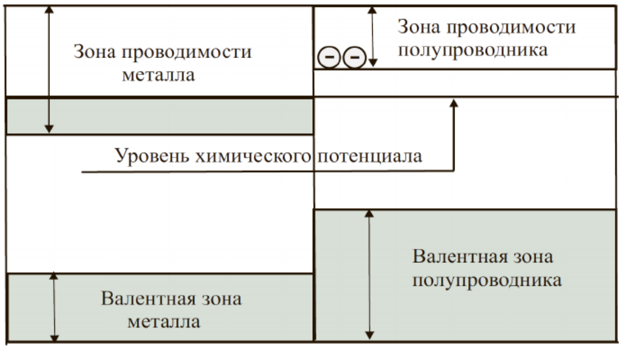
$$\frac{\partial Q(r,t)}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{J}_Q = \vec{J}_e \cdot \vec{\varepsilon} = \rho\vec{J}_e^2$$

Правая часть этого уравнения является квадратично малой, поэтому ей мы пренебрегаем. Тогда полное тепло получается:

$$Q_\Pi \approx -t\int \mathrm{div}\vec{J}_Q dV = tS\left(\vec{J}_Q^{(1)} - \vec{J}_Q^{(2)}\right) = t(\Pi^{(1)} - \Pi^{(2)})I_e$$

заметим, что в конечном выражении стоит ток электронов. Тем самым мы посчитали тепло, которое выделяется/поглощается при протекании тока через контакт.
Оценим значения коэффициента α, через который выражается коэффициент Пельтье.
В металле:

$$\alpha = \frac{\pi^2}{3}\frac{k_Б}{e}\frac{k_Б T}{\zeta}(3/2 + r) \approx 10^{-8} \ \ (B/K)$$



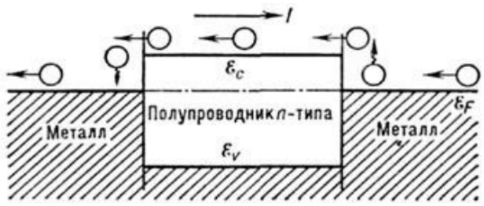


Рис. 3: Электронам приходится преодолевать разницу энергий на границе метал-полупроводник, поэтому выделяется/поглощается тепло

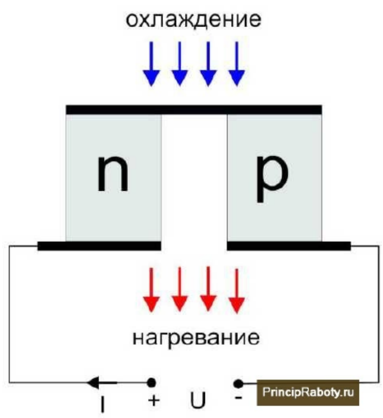


Рис. 4: Принцип работы элемента Пельтье

В полупроводнике:

$$\alpha = \frac{k_Б}{e\sigma}\left[\sigma_n\left(5/2 + r - \frac{\zeta}{k_Б T}\right) - \sigma_p\left(5/2 + r' - \frac{\zeta_p}{k_Б T}\right)\right] \approx 10^{-4}\ (B/K)$$

где $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ - полная проводимость. Как видно из этой формулы **полупроводники p-типа имеют** $\alpha < 0$, **n-типа имеют** $\alpha > 0$. Видно, что для металлов коэффициент домножается на $T/E_F \ll 1$, поэтому он получается почти ноль.

11. Случайные процессы. Марковский случайный процесс. Пропагатор. Уравнение Чепмена-Колмогорова в интегральной и дифференциальной форме.

Марковские случайные процессы

У меня есть презентация по основным техникам сэмплирования, но там это рассказывается с другой стороны и для других целей, но на всякий случай кину ссылку: https://www.overleaf.com/read/jhwrcmrdrffy. С уверенностью могу сказать, что если бы мне так рассказали про марковские процессы в первый раз, я бы ничего не поняла.

Случайный процесс - последовательность случайных величин $x_1, ..., x_n$. Случайные величины при этом могут быть векторными (и чаще всего будут).

Условная вероятность случайного процесса - $P(x_n|x_{n-1})$, вероятность перейти в состояние x_n из состояния x_{n-1}. Еще она может зависеть от времени: $P(x_n|x_{n-1}, t)$ - условная вероятность перейти в состояние x_n из состояния x_{n-1} в момент времени t.

Марковский процесс - случайный процесс, в котором вероятность перехода в следующее состояние зависит исключительно от предыдущего состояния и ни от чего больше (то есть от состояний до предыдущего не зависит). Например, мы получили некоторую последовательность случайных величин $x_1, x_2, ..., x_{n-1}$ и думаем, как бы получить x_n. Тогда вероятности перехода в разные значения x_n могут зависеть только от x_{n-1} и не могут зависеть от $x_1, x_2, ..., x_{n-2}$:

$$P(x,t|x_m,t_m;...;x_1,t_1) = p(x,t|x_m,t_m)$$

Наш лектор рассматривает марковский процесс как некоторую эволюцию физической системы:

$$\frac{dx}{dt} = g(x(t), t)$$

$$T(x,t|x',t') = \delta(x - \Phi_{t-t'}(x'))$$

где $\Phi_{t-t'}(x')$ - решение уравнения эволюции физической системы с начальным условием $x(t = t') = x'$

Если говорить простым языком, то пропагатор - вероятность перехода из одного состояния системы (x') в другое (x) через некоторое время $(t - t')$.

$$\int T(x,t|x',t')dx = 1$$

$$\lim_{t\to t'} T(x,t|x',t') = \delta(x - x')$$

Теорема Чепмена-Колмогорова

Обозначение условной плотности вероятности:

$$p_{l|k}(x_{k+l}, t_{k+l}; \dots; x_{k+1}, t_{k+1}|x_k, t_k; \dots; x_1, t_1) \equiv \frac{p_{k+l}(x_{k+l}, t_{k+l}; \dots; x_1, t_1)}{p_k(x_k, t_k; \dots; x_1, t_1)},$$

при этом пропагатор обозначается так:

$$T(x,t|x',t') \equiv p_{1|1}(x,t|x',t').$$

Уравнение Чепмена-Колмогорова из презентации (непрерывный случай):

$$\begin{aligned} p_3(x_3,t_3;x_2,t_2;x_1,t_1) &= p_{1|2}(x_3,t_3|x_2,t_2;x_1,t_1)\, p_2(x_2,t_2;x_1,t_1) \\ &= p_{1|1}(x_3,t_3|x_2,t_2)\, p_{1|1}(x_2,t_2|x_1,t_1)\, p_1(x_1,t_1) \end{aligned}$$

$$p_2\left(x_3, t_3; x_1, t_1\right) = p_1\left(x_1, t_1\right) \int dx_2 p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) p_{1|1}\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

$$p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_1, t_1\right) = \int dx_2 p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) p_{1|1}\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

$$T\left(x_3, t_3 | x_1, t_1\right) = \int dx_2 T\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) T\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

то есть, следующее распределение получается из предыдущего с помощью усреднения (интегрирования) по промежуточным координатам. Это следует из формулы полной вероятности.

Уравнение Чепмена-Колмогорова из Википедии (дискретный случай):

$$P(t+s) = P(t)P(s)$$

где $P(t)$ — оператор, преобразующий распределение вероятностей в начальный момент времени в распределение вероятности в момент времени $t > 0$.

Теперь про то, как это понимать: P - матрица вероятностей перехода (то есть P_{ij} равен вероятности перейти из состояния j в состояние i). Для марковского процесса она постоянная по координатам (потому что следующее состояние зависит только от предыдущего). Суть теоремы заключается в том, что эволюция матрицы не зависит от промежутка времени, в который мы ее начали. Для дискретных марковских процессов P это матрица переходов. Для непрерывных марковских процессов эта теорема следует из определения полной вероятности перехода.

Дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова (из презентации):

$$\begin{gathered}\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | x', t'\right) = \int dx_2 \lim_{\substack{\Delta t \to 0 \\ t_2 \to t}} \frac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t | x_2, t_2\right) - T\left(x, t | x_2, t_2\right)\right) T\left(x_2, t_2 | x', t'\right) = \\ = \int dx_2 \lim_{\Delta t \to +0} \frac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t | x_2, t\right) - \delta\left(x - x_2\right)\right) T\left(x_2, t | x', t'\right) = -\hat{\mathrm{L}} T\left(x, t | x', t'\right)\end{gathered}$$

$$\hat{\mathrm{L}}(x,t) \cdot \varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}(T(x, t+\Delta t | z, t) - \delta(x-z))\varphi(z)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | x', t'\right) = -\hat{\mathrm{L}}(x,t) \cdot T\left(x, t | x', t'\right)$$

Стационарное состояние физической системы это стационарное состояние марковского процесса, то есть

$$T\left(x, t+\tau | x', t'+\tau\right) = T\left(x, t | x', t'\right)$$

тогда

$$T_t\left(x | x'\right) = \exp\Bigl(-\hat{\mathrm{L}}(x) t\Bigr) \delta\left(x - x'\right)$$

Дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова (из Википедии):

$$\partial_t P(n,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (W(n|m,t)P(m,t) - W(m|n,t)P(n,t))$$

где $W(n|m,t)$ - вероятность перейти из состояния m в состояние n. Уравнение Чепмена-Колмогорова справедливо для всех дискретных марковских процессов. Почему это так: первый член можно воспринимать как "приток" в состояние из всех состояний системы (поэтому и сумма), второе - как "отток". Сумму можно заменить на интеграл, тогда $W(n,m|t)$ это плотность.

12. Уравнение Чепмена-Колмогорова для детерминистического процесса. Дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова для марковских процессов с «разрывными» траекториями.

Этот билет является началом 13 билета и сильно с ним связан. **Определение детерминистического процесса**(вообще такого слова нет - его лектор сам придумал)мб имеется ввиду детерминированный, тогда это строго определенный процесс.(?)

Согласно презентации это процесс, описываемый уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = g(x(t), t) \\ T\left(x, t|x', t'\right) = \delta\left(x - \Phi_{t-t'}\left(x'\right)\right) \end{cases} \tag{1}$$

Где $\Phi_{t-t'}\left(x'\right)$ - решение 1 с начальным условием: $x\left(t = t'\right) = x'$, что эквивалентно $T\left(x, t+0|x', t\right) = \delta\left(x - x'\right)$

Формально он является «случайным процессом».

Уравнение Чепмена-Колмогорова

$$T\left(x_3, t_3|x_1, t_1\right) = \int T\left(x_3, t_3|x_2, t_2\right) T\left(x_2, t_2|x_1, t_1\right) dx_2$$

Найдем оператор Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t|x', t'\right) = -\hat{\mathrm{L}} \cdot T\left(x, t|x', t'\right) \tag{2}$$

Воспользуемся уравнением Чепмена-Колмогорова, определением производной и свойством пропагатора:

$$\begin{aligned} &\tfrac{\partial}{\partial t} T\left(x, t|x', t'\right) = \int dx_2 \lim_{\substack{\Delta t \to 0 \\ t_2 \to t}} \tfrac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t|x_2, t_2\right) - T\left(x, t|x_2, t_2\right)\right) T\left(x_2, t_2|x', t'\right) = \\ &= \int dx_2 \lim_{\Delta t \to +0} \tfrac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t|x_2, t\right) - \delta\left(x - x_2\right)\right) T\left(x_2, t|x', t'\right) \end{aligned}$$

Заменим x_2 на z, $T\left(z, t|x', t'\right)$ на $\varphi(z)$ и подставим.

$$\hat{\mathrm{L}}(x, t) \cdot \varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}(T(x, t+\Delta t|z, t) - \delta(x - z))\varphi(z) \tag{3}$$

Теперь поговорим про разрывные траектории. Это значит, что есть ненулевая вероятность скачка из одного состояния в другое.

Золотое правило Ферми определяет вероятность перехода в другое состояние за единицу времени так:

$$W_{i \to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle f\left|H'\right| i\right\rangle\right|^2 \rho$$

Введем плотность вероятности скачка из состояния x' в состояние x за промежуток времени dt:

$$W\left(x|x', t\right) dt$$

Тогда вероятность скачка из состояния x' в какое-нибудь другое состояние(в единицу времени):

$$\Gamma\left(x', t\right) = \int dx W\left(x|x', t\right) \tag{4}$$

Есть два варианта для перехода из состояния x в состояние x' за время dt:

1) Скачок с вероятностью $W\left(x|x', t\right) dt$

2) Непрерывная эволюция $\frac{dx}{dt} = g(x(t))$ с вероятностью отсутствия скачка $1 - \Gamma\left(x', t\right) dt$

Тогда вероятность перейти из состояния x' в состояние x за промежуток времени Δt имеет вид:

$$T\left(x, t+\Delta t | x', t\right) = \left(1 - \Gamma\left(x'\right)\Delta t\right)\delta\left(x - x' - g\left(x'\right)\Delta t\right) + W\left(x|x'\right)\Delta t + \mathcal{O}\left(\Delta t^2\right)$$

Подставим в 3:

$$\hat{\mathrm{L}}(x,t)\cdot\varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}(T(x,t+\Delta t|z,t) - \delta(x-z))\varphi(z) =$$

$$= -\int dz \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}((1-\Gamma(z,t)\Delta t)\delta(x-z-g(z)\Delta t) + W(x|z)\Delta t - \delta(x-z))\varphi(z) =$$

Интеграл разбивается на 2 части

$$= -\int dz\delta'(x-z)g(z)\varphi(z) + \int dz(\Gamma(z,t)\delta(x-z) - W(x|z))\varphi(z) =$$

По свойству дельта-функции и 4

$$= \frac{d}{dx}(g(x)\varphi(x)) + \int dz(W(z|x)\varphi(x) - W(x|z)\varphi(z))$$

13. Вывести уравнение Лиувилля, используя уравнение Чепмена-Колмогорова. Получить кинетическое уравнение со столкновительным членом, используя уравнение Чепмена-Колмогорова. При каких условиях столкновительный член становится локальным в координатном пространстве?

Этот билет является продолжением 12 билета.

Вывести уравнение Лиувилля, используя уравнение Чепмена-Колмогорова.

Найдем оператор Лиувилля:

$$\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | x', t'\right) = -\hat{\mathrm{L}} \cdot T\left(x, t | x', t'\right) \tag{5}$$

Воспользуемся уравнением Чепмена-Колмогорова, определением производной и свойством пропагатора:

$$\begin{aligned} &\tfrac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | x', t'\right) = \int dx_2 \lim_{\substack{\Delta t \to 0 \\ t_2 \to t}} \tfrac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t | x_2, t_2\right) - T\left(x, t | x_2, t_2\right)\right) T\left(x_2, t_2 | x', t'\right) = \\ &= \int dx_2 \lim_{\Delta t \to +0} \tfrac{1}{\Delta t}\left(T\left(x, t+\Delta t | x_2, t\right) - \delta\left(x - x_2\right)\right) T\left(x_2, t | x', t'\right) \end{aligned}$$

Заменим x_2 на z, $T\left(z, t | x', t'\right)$ на $\varphi(z)$ и подставим.

$$\hat{\mathrm{L}}(x, t) \cdot \varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t}(T(x, t+\Delta t | z, t) - \delta(x - z))\varphi(z) \tag{6}$$

Иначе говоря, $\hat{\mathrm{L}}$ - интегральный оператор с ядром $\left[\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | z, t'\right)\right]_{t' \to t}$:

$$\hat{\mathrm{L}}(x, t)\varphi(x) = -\int dz \left[\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | z, t'\right)\right]_{t' \to t} \varphi(z)$$

Преобразуем немного ядро данного оператора:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} T\left(x, t | x', t'\right)\right]_{t' \to t} &= -\left[\frac{\partial}{\partial t} \delta\left(x - \Phi_{t-t'}\left(x'\right)\right)\right]_{t' \to t} = -\left[\frac{\partial \Phi_{t-t'}(x')}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \Phi_{t-t'}(x')} \delta\left(x - \Phi_{t-t'}(x')\right)\right]_{t' \to t} = \\ &= \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \Phi_{t-t'}\left(x'\right)\right) \frac{\partial}{\partial x} \delta\left(x - \Phi_{t-t'}\left(x'\right)\right)\right]_{t' \to t} = g\left(x', t\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} \delta\left(x - x'\right)\right) \end{aligned}$$

Вернемся к 6, используя тождество $\left(\frac{\partial}{\partial z} \delta(x - z)\right) = -\left(\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - z)\right)$

$$\hat{\mathrm{L}} T\left(x, t | x', t'\right) = \int g(z)\left(\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - z)\right) T\left(z, t | x', t'\right) dz = -\int g(z)\left(\frac{\partial}{\partial z} \delta(x - z)\right) T\left(z, t | x', t'\right) dz =$$

/сначала интегрируем по частям, а затем интегрируем дельта функцию/

$$= \int \delta(x - z) \frac{\partial}{\partial z}\left(g(x) T\left(z, t | x', t'\right)\right) dz = \frac{\partial}{\partial x}\left(g(x) T\left(x, t | x', t'\right)\right)$$

Заменим $T\left(x, t | x', t'\right)$ на плотность вероятности $p(x, t)$.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) + \frac{d}{dx}(g(x) p(x, t)) = 0 \tag{7}$$

А если сделать еще замену $j(x, t) = g(x) p(x, t)$ получится кинетическое уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) + \operatorname{div}(j(x, t)) = 0$$

Формула Эйлера из механики:

$$\begin{cases} \dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial r} \end{cases}$$

Координаты заданы так $x = q = (r, p)$. Определим функцию из 7

$$g(x) = (\dot{r}, \dot{p}) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial r}\right) = (\mathrm{v}(p), F(r))$$

Плотность вероятности обозначим $p(x,t) = f(r,p,t)$. Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r,p,t) + \frac{\partial}{\partial r}(\mathrm{v}(p) f(r,p,t)) + \frac{\partial}{\partial p}(F(r) f(r,p,t)) = 0$$

Откуда сразу следует

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r,p,t) + \mathrm{v}(p)\frac{\partial}{\partial r}(f(r,p,t)) + F(r)\frac{\partial}{\partial p}(f(r,p,t)) = 0$$

Фактически получено уравнение Больцмана без столкновительного члена. Представим в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} f(r,p,t) + \hat{L} f = 0, \text{ где } \hat{L} = \sum_{i=1}^{d} \left[\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial r_i} - \frac{\partial H}{\partial r_i}\frac{\partial}{\partial p_i}\right]$$

Тогда эволюция вероятности описывается уравнением Лиувилля.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\{f, H\}$$

Получить кинетическое уравнение со столкновительным членом, используя уравнение Чепмена-Колмогорова.

Из предыдущего билета:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}(g(x)p(x,t)) + \int dz (W(x|z)p(z,t) - W(z|x)p(x,t))$$

Можно переобозначить переменные и получить кинетическое уравнение со столкновительным членом.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = \int dz (W(x|z)p(z,t) - W(z|x)p(x,t))$$

При каких условиях столкновительный член становится локальным в координатном пространстве?

Золотое правило Ферми (ЗПВ) определяет вероятность перехода в единицу времени. При выводе ЗПВ рассматривался промежуток времени, много больший времени взаимодействия τ_0. W часто зависит от $f(r,p,t)$, следовательно $f(r,p,t)$ вообще не должно меняться на временах порядка τ_0. Пусть τ_3 - характерный масштаб изменения макроскопических параметров, а τ_2 – время между столкновениями частиц. Значит кинетика – наука о разреженных газах при $\tau_3 \gg \tau_2 \gg \tau_0$. Аналогично ограничены пространственные масштабы.

14. Уравнение Чепмена-Колмогорова в интегральной форме. Запись пропагатора через функциональный интеграл. Почему квантовая механика не может интерпретироваться в терминах марковских случайных процессов?

Обозначение условной плотности вероятности:

$$p_{l|k}(x_{k+l}, t_{k+l}; \ldots; x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k; \ldots; x_1, t_1) \equiv \frac{p_{k+l}(x_{k+l}, t_{k+l}; \ldots; x_1, t_1)}{p_k(x_k, t_k; \ldots; x_1, t_1)},$$

при этом пропагатор обозначается так:

$$T(x, t|x', t') \equiv p_{1|1}(x, t|x', t').$$

Уравнение Чепмена-Колмогорова из презентации (непрерывный случай):

$$\begin{aligned} p_3\left(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1\right) &= p_{1|2}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2; x_1, t_1\right) p_2\left(x_2, t_2; x_1, t_1\right) \\ &= p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) p_{1|1}\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right) p_1\left(x_1, t_1\right) \end{aligned}$$

$$p_2\left(x_3, t_3; x_1, t_1\right) = p_1\left(x_1, t_1\right) \int dx_2 p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) p_{1|1}\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

$$p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_1, t_1\right) = \int dx_2 p_{1|1}\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) p_{1|1}\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

$$T\left(x_3, t_3 | x_1, t_1\right) = \int dx_2 T\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) T\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right)$$

это и называется уравнением Чепмена-Колмогорова в интегральной форме. Его можно рассматривать как функциональный интеграл по траекториям. Что имеется ввиду под функциональным интегралом, можно понять по картинке Рис. 5. По сути это маргинализация по параметрам x_2.

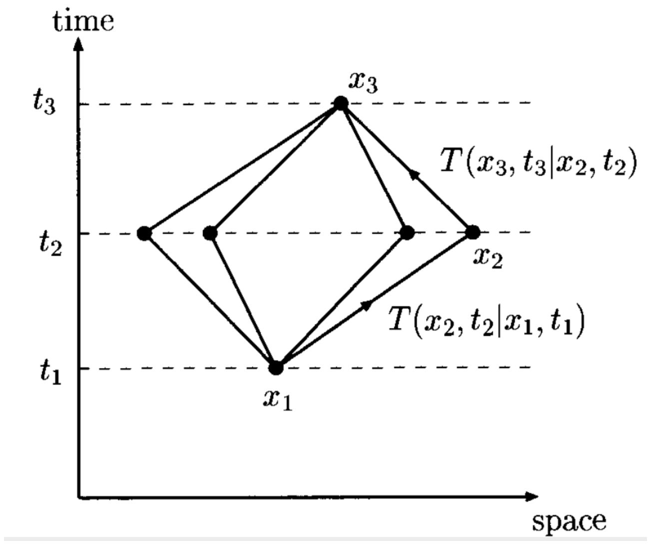


Рис. 5: Функциональный интеграл

Для произвольного числа состояний:

$$T\left(x_f, t_f | x_i, t_i\right) = \int dx_n \ldots dx_3 dx_2 dx_1 T\left(x_f, t_f | x_n, t_n\right) \ldots T\left(x_3, t_3 | x_2, t_2\right) T\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right) T\left(x_1, t_1 | x_i, t_i\right)$$

А теперь выражение функционального интеграла через оператор Лиувилля:

$$T\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right) \propto \exp\left(-S\left[x_2, t_2 | x_1, t_1\right]\right)$$

$$S\left[x_2, t_2 | x_1, t_1\right] \approx L\left[x_2, t_2\right] dt, \quad dt = t_2 - t_1 \to 0$$

$$T\left(x_2, t_2 | x_1, t_1\right) \approx A\left(x_2, t_2, dt\right) \exp\left(-L\left[x_2, t_2\right] dt\right) \xrightarrow{dt \to 0} \delta\left(x_2 - x_1\right)$$

$$T\left(x_f, t_f | x_i, t_i\right) = \int A_n dx_n \ldots A_2 dx_2 A_1 dx_1 \exp\left(-dt\left(L\left[x_f, t_f\right] \ldots + L\left[x_2, t_3\right] + L\left[x_2, t_2\right] + L\left[x_1, t_1\right]\right)\right)$$

$$= \lim_{n\to\infty} \iint \prod_{i=1,\ldots,n} A_i dx_i \exp\left(-\int_{t_i}^{t_f} L[x(t), t] dt\right) \equiv \int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} Dx \exp\left(-\int_{(x_i, t_i)}^{(x_f, t_f)} L[x, t] dx\right)$$

Почему квантовая механика не может интерпретироваться в терминах марковских случайных процессов?

Если записать аналогичное выражение для квантовомеханического случая, то такой процесс не будет марковским.

Там есть похожее интегральное равенство на функции Грина. Отличие в том, что они являются комплексными величинами. Описывают интерференцию. и поэтому не получаются (объясения лектора строились примерно на этом).

15. Дискретные марковские случайные процессы. Однородные марковские цепи. Обратимая марковская цепь, условие детального баланса. Дискретная форма ур. Чепмена-Колмогорова. Привести пример дискретной марковской цепи из задания.

Дискретный марковский случайный процесс - марковский процесс с конечным количеством состояний, то есть $x_i \sim p_i$, где p_i - распределение. Из определения марковского процесса:

$$p(x_1, ..., x_n) = p_n(x_n|x_{n-1})p_{n-1}(x_{n-1}|x_{n-2})...p_2(x_2|x_1)p(x_1)$$

Марковская цепь называется однородной (гомогенной), если $\forall i \hookrightarrow p_i = p$ (все распределения одинаковые).

$$p_{12}(x_1, x_2) = p_2(x_2|x_1)p_1(x_1)$$
$$p_2(x_2) = \sum_{x_1} p_{12}(x_1, x_2) = \sum_{x_1} p_2(x_2|x_1)p_1(x_1)$$
$$p_3(x_3) = \sum_{x_2} p_3(x_3|x_2)p_2(x_2) = \sum_{x_1}\sum_{x_2} p_3(x_3|x_2)p_2(x_2|x_1)p_1(x_1)$$

Для однородной цепи получим:

$$p_3(x_3) = \sum_{x_1}\sum_{x_2} p(x_3|x_2)p(x_2|x_1)p(x_1)$$

По сути это и есть дискретная форма уравнения Чепмена-Колмогорова. Было бы неплохо, если бы это все сходилось к стационарному распределению.

Теорема 1. Если для однородной цепи Маркова $\forall x', x'' \hookrightarrow p(x''|x') > 0$, то $\forall p_1(x) \exists!$ стационарное распределение $p_0(x)$ такое, что

$$\int p(x_{n+1}|x_n)p_0(x_n)dx_n = p_0(x_{n+1})$$

Теорема 2. Если для однородной цепи Маркова выполнено уравнение детального баланса

$$\forall x, y \hookrightarrow p(x|y)r(y) = p(y|x)r(x),$$

то $r(x)$ - стационарное распределение для этой цепи (обратное не верно).

Цепь является обратимой, если из состояния x_n можно перейти в состояние x_{n+1} и из состояния x_{n+1} можно перейти обратно в x_n. В необратимых цепях стационарного распределения нет. Это можно заметить, посмотрев на уравнение детального баланса.

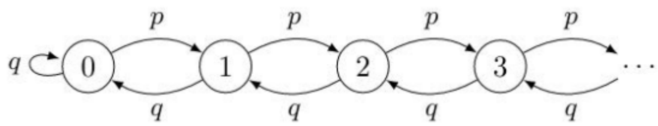
Дискретная марковская цепь из задания - пуассоновский процесс. Является примером необратимой цепи.

Дискретный марковский процесс (случайное блуждание) соответствует графику. Исследовать, возможен ли возврат в какое-нибудь состояние за конечное время, если

а) $p < 0.5$

б) $p > 0.5$

в) $p = 0.5$



Решение:
$p + q = 1$. Стационарное распределение (уравнение детального баланса)

$$\begin{cases} p(i)p + p(i)q = p(i-1)p + p(i+1)q, \ \forall i > 1 \\ p(0)p = qp(1) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} p(i) = p(i-1)p + p(i+1)q \\ p(0)p = qp(1) \end{cases} \Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow qp(i) = pp(i-1), \ \forall i > 1 \Longrightarrow p(i) = \left(\frac{p}{q}\right)^i p(0)$$

$$\sum_{i=0}^{+\infty} p(i) = \frac{p(0)}{1 - \frac{p}{q}} = \frac{p(0)q}{q-p} = \frac{1-p}{1-2p} p(0) = 1$$

$$1 - 2p > 0 \Longrightarrow p < \frac{1}{2} \Longrightarrow \text{а) да, б) нет, в) нет}$$

16. Рассеяние электронов на примесях. Качественный вывод интеграла столкновения. Транспортное время и транспортное сечение рассеяния. Проводимость.

1. Вывод интеграла столкновений при рассеянии на примесях.

Рассмотрим электронный газ, в котором случайным образом разбросаны неподвижные примеси. Рассеяние электронов на примесях будем считать упругим. В данном случае, кинетическое уравнение для электронов будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)}{\partial t}+\boldsymbol{v}(\boldsymbol{p})\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}(\boldsymbol{p},t)\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)}{\partial \boldsymbol{p}}=\sum_{\boldsymbol{p}'}\big(W(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}')f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}',t)-W(\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p})f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\big)$$

Примем во внимание то, что при рассеянии электрон переходит из состояния $\boldsymbol{p}$ в состояние $\boldsymbol{p}'$, то есть состояние $\boldsymbol{p}'$ должно быть свободным $[W(\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}')=\omega_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}(1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))]$. Следовательно правая часть кинетического уравнения перепишется в следующем виде:

$$\sum_{\boldsymbol{p}'}\left[\omega_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}',t)(1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))-\omega_{\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}'}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)(1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}',t))\right]$$

Для поиска вероятностей переходов $\omega_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}$ и $\omega_{\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}'}$ воспользуемся золотым правилом Ферми:

$$\omega_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{p}'|U|\boldsymbol{p}\rangle|^2\delta(\varepsilon_p-\varepsilon_{p'})$$

Где U в данном случае - потенциал примесей, который выглядит следующим образом:

$$U(\boldsymbol{r})=\sum_{j=1}^{N_{imp}}u(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j),$$

а u - потенциал каждой отдельно взятой примеси. Для нахождения $\omega_{\boldsymbol{p}'\to\boldsymbol{p}}$ осталось вычислить матричный элемент потенциала. Перепишем его в представление Фурье (базис плоских волн):

$$\hat{u}(\boldsymbol{p})=\int d^3r u(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}}$$

Тогда его вид сведется к следующему:

$$|\langle\boldsymbol{p}'|U|\boldsymbol{p}\rangle|^2=\left|\sum_{j=1}^{N_{imp}}\left\langle\boldsymbol{p}'\middle|\int\frac{d^3q}{V}\hat{u}e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j)}\middle|\boldsymbol{p}\right\rangle\right|^2=\left|\sum_{j=1}^{N_{imp}}\int\frac{d^3q}{V}\left\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}\right\rangle e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j)}\hat{u}\right|^2=$$

$$=\left|\sum_{j=1}^{N_{imp}}\int\frac{d^3q}{V}\hat{u}(\boldsymbol{q})e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_j}\underbrace{\int d^3re^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}}}_{=\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p})}\right|^2=V^{-2}|u(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')|^2\left|\sum_{j=1}^{N_{imp}}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_j}\right|^2,$$

где V объем твердого тела. Так как примеси распределены случайно, будем работать с их средним (то есть вычисляемые величины будем усреднять по всем возможным расположениям примесей). Посчитаем сумму:

$$\overline{\left|\sum_{j=1}^{N_{imp}}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_j}\right|^2}=\overline{\sum_{j=1}^{N_{imp}}|e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{r}_j}|^2+\sum_{k\neq j}e^{i(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')(r_j-r_k)}}=$$

$$=N_{imp}+\sum_{k\neq j}\delta_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}',0}=N_{imp}+N_{imp}(N_{imp}-1)\delta_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}',0}$$

Подставляя в усреднение матричного элемента получаем следующее соотношение:

$$\overline{|\langle \boldsymbol{p'}|U|\boldsymbol{p}\rangle|^2} = \frac{N_{imp}}{V^2}|u(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p'})|^2 + \frac{N_{imp}(N_{imp}-1)}{V^2}|u(0)|^2\delta_{\boldsymbol{pp'}}$$

Заметим, что $\omega_{\boldsymbol{p'}\to\boldsymbol{p}} = \omega_{\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p'}}$. Тогда, подставляя в кинетическое уравнение и пренебрегая вторым членом в выражении матричного элемента (обоснование будет позже), получаем:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \sum_{\boldsymbol{p'}} \omega_{\boldsymbol{p'}\to\boldsymbol{p}}(f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p'},t) - f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)) =$$

$$= \sum_{\boldsymbol{p'}} \frac{2\pi}{\hbar}\frac{N_{imp}}{V^2}|u(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p'})|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p'}})(f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p'},t) - f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))$$

Перейдем от суммирования к интегрированию по фазовому пространству, то есть:

$$\sum_{\boldsymbol{p}}[\ldots] = \int \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3}[\ldots] = V\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}[\ldots]$$

Почему интеграл по пространству дает объем вне зависимости от $f(\mathbf{r},\mathbf{p},t)$ не известно. Так в источнике, на которые опираются лекции написано даже.

Также, заменяя отношение числа примесей к объему на концентрацию примесей, получаем итоговое выражение для интеграла столкновений:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \boldsymbol{F}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{2\pi}{\hbar}n_{imp}\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}|u(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p'})|^2\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p'}})(f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p'},t) - f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))$$

Или, используя борновское приближение:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + e\boldsymbol{E}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp}\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p'}})\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p'}})(f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p'},t) - f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))$$

$$\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p'}}) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2|u(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p'})|^2, \quad m = m_e$$

2. Транспортное сечение рассеяния, транспортное время рассеяния

Будем искать функцию распределения в τ-приближении (в виде суммы равновесной функции распределения и малой добавки):

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} \tag{*}$$

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \boldsymbol{r}} = 0, \quad I_{\mathrm{st}} = -\frac{f^{(1)}}{\tau} \tag{**}$$

$$f^{(1)} = -\tau e\boldsymbol{E}\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon} \tag{***}$$

Будем также считать электрическое поле постоянным, то есть функция распределения будет зависеть только от импульса. Тогда, используя факты (*), (**) и (***), получим:

$$e\boldsymbol{E}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = e\boldsymbol{E}\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon} = \tau e\boldsymbol{E}\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp}\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p'}})\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p'}})\left(\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \boldsymbol{v'}\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon}\right)$$

$$\overset{g(\varepsilon)-\text{плотность состояний}}{=} \tau e\boldsymbol{E}\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp}\int \frac{d\Omega}{4\pi}d\varepsilon' g(\varepsilon')\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p'}})\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \varepsilon_{\boldsymbol{p'}})\times$$

$$\times\left(\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \boldsymbol{v'}\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon}\right) = \tau e\boldsymbol{E}\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp} g(\varepsilon)\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}\int \frac{d\Omega}{4\pi}\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p'}})\left(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v'}\right)$$

Для лучшего понимания вынесем полученное равенство еще раз:

$$e\boldsymbol{E}\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial\varepsilon} = \tau e\boldsymbol{E}\frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp}g(\varepsilon)\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\int\frac{d\Omega}{4\pi}\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'})\left(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}'\right)$$

В силу упругости рассеяния, скорость не меняется, а меняется ее направление. Поэтому левую и правую часть можно разделить на $\tau e\boldsymbol{E}\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}$, получая:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 n_{imp}g(\varepsilon)\int\frac{d\Omega}{4\pi}\sigma(\theta_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'})(1-\cos\theta_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}) = \Big/ g(\varepsilon) = \frac{4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3 v}\Big/ =$$
$$= n_{imp}v\int d\Omega\sigma(\theta)(1-\cos\theta) = n_{imp}v\int d\sigma(1-\cos\theta) = nv\sigma_{tr},$$

где мы ввели *транспортное сечение рассеяния* σ_{tr}.

Исследуем полученное выражение. Фактор $(1-\cos\theta)$ показывает, что рассеяние "вперед"(при нулевом угле) не вносит вклада в скорость рассеяния (что оправдывает пренебрежение вторым членом в матричном элементе потенциала). Это означает, что полученная τ - есть транспортное время рассеяния. В отличии от времени релаксации, эта величина учитывает влияние обратных столкновений (т.е. приход).

3. Проводимость

Выведем формулу Друде.

$$j(\boldsymbol{r},t) = e\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\boldsymbol{v} = e\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}f^{(1)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\boldsymbol{v} = -e^2\tau\boldsymbol{E}\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\boldsymbol{v}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial\boldsymbol{p}} =$$
$$= \frac{e^2\tau\boldsymbol{E}}{m}\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}f^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = \frac{ne^2\tau}{m}\boldsymbol{E} = G\boldsymbol{E}$$

$$\boxed{G = \frac{ne^2\tau}{m}}$$

17. Феноменологическая гидродинамика. Идеальная жидкость. Уравнение Эйлера. Уравнение баланса импульса. Тензор потоков импульса, тензор напряжений. Пределы применимости гидродинамики. В задачи о диффузии тяжелой частицы в газе легких частиц, когда можно использовать формулу Стокса, а когда нельзя?

Выделим в жидкости некоторый объем. Тогда полная сила, действующая на выделенный объем жидкости, равна интегралу от давления

$$-\oint p d\mathbf{f}, \tag{8}$$

взятому по поверхности рассматриваемого объема. Преобразуем его в интеграл по объему (два варианта: либо по теореме Остроградского-Гаусса, применяя ее трижды - для каждой компоненты векторного интеграла (подставляя вместо давления вектор, одна из компонент которого равна давлению, остальные нулевые) и потом собирая результаты в вектор, либо интуитивно поняв, как связаны сила и давление, что быстрее):

$$-\oint p d\mathbf{f} = -\int \boldsymbol{\nabla} p dV. \tag{9}$$

Так как для единицы объема силу можно выразить как массу этого объема (т.е. плотность), помноженную на ускорение, то имеем:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla} p. \tag{10}$$

Теперь распишем ускорение:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{d\mathbf{v}}{d\mathbf{x}}\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}. \tag{11}$$

Собираем два последних уравнения в кучу и получаем уравнение Эйлера - одно из основных уравнений гидродинамики:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p \tag{12}$$

В поле тяжести в правой части появится еще одно слагаемое - просто $\mathbf{g}$.

Рассмотрим теперь в тензорных обозначениях, как меняется импульс единицы объема (произведение плотности на скорость) во времени, то есть баланс импульса:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} v_i. \tag{13}$$

Так как уравнение Эйлера в тензорных обозначениях имеет вид:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}, \tag{14}$$

а уравнение непрерывности (которое придется вспомнить) записывается вот так:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k}, \tag{15}$$

то, снова собирая все в кучу, получим для изменения импульса следующее соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho v_i v_k). \tag{16}$$

Вытащим из уравнения вот такой тензор:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k, \tag{17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}. \tag{18}$$

Это - тензор плотности потока импульса. Его физический смысл такой: это i-я компонента количества импульса, протекающего в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k. То есть:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho v_i dV = -\int \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} dV = -\int \Pi_{ik} df_k. \tag{19}$$

Вязкая жидкость - жидкость с внутренним трением. Вязкость проявляется в наличии дополнительного (необратимого) переноса импульса из мест с большей скоростью в места с меньшей. Поэтому уравнение движения вязкой жидкости можно получить, добавив к идеальному потоку импульса дополнительный член, определяющий вязкий (необратимый) перенос импульса в жидкости.

Уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}. \tag{20}$$

остается справедливым.

Добавим поправку в тензор потока импульса:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k. \tag{21}$$

Здесь σ_{ik} - тензор напряжений, σ'_{ik} - тензор вязких напряжений, который в рассматриваемом случае идеальной жидкости равен нулю.

Пределы применимости гидродинамики заключаются в том, что средняя скорость должна слабо меняться на микроскопических масштабах, то есть времена порядка времени свободного пробега и длины порядка длины свободного пробега

При решении задачи о диффузии тяжелого газа в легком нельзя использовать формулу Стокса (лучше гуглится закон Стокса), если размер частиц тяжелого газа меньше или порядка длины свободного пробега легких частиц. Здесь нужно уточнить этот вопрос. Скорее всего это связано с тем, что закон Стокса рассматривается исходя из достаточно простых физических соображений и не учитывает достаточно точно столкновения с легкими частицами. При уменьшении радиуса тяжелой частицы легкие частицы при столкновениях (которых в целом происходит поменьше) могут рассеиваться в большем диапазоне углов, что уже нужно учитывать при нахождении силы, действующей на тяжелые частицы. Возможно тут можно сказать что-то умное про сечение рассеяния. Проще говоря, для применимости закона Стокса должны быть выполнены условия применимости гидродинамики.

18. Феноменологическая гидродинамика, неидеальная жидкость. Тензор вязкости, обосновать его форму. Уравнение Навье-Стокса в двух видах: 1) в тензорной форме, через тензор потоков импульса, 2) в векторной форме. Обосновать, почему коэффициент (первая вязкость) в тензоре вязкости должен быть положительным. Пределы применимости гидродинамики.

Сначала рассмотри идеальную жидкость, так как уравнения для неидеальной потом определяются поправками к идеальной.

Выделим в жидкости некоторый объем. Тогда полная сила, действующая на выделенный объем жидкости, равна интегралу от давления

$$-\oint p d\mathbf{f}, \tag{22}$$

взятому по поверхности рассматриваемого объема. Преобразуем его в интеграл по объему (два варианта: либо по теореме Остроградского-Гаусса, применяя ее трижды - для каждой компоненты векторного интеграла (подставляя вместо давления вектор, одна из компонент которого равна давлению, остальные нулевые) и потом собирая результаты в вектор, либо интуитивно поняв, как связаны сила и давление, что быстрее):

$$-\oint p d\mathbf{f} = -\int \boldsymbol{\nabla} p dV. \tag{23}$$

Так как для единицы объема силу можно выразить как массу этого объема (т.е. плотность), помноженную на ускорение, то имеем:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\boldsymbol{\nabla} p. \tag{24}$$

Теперь распишем ускорение:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{d\mathbf{v}}{d\mathbf{x}}\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}. \tag{25}$$

Собираем два последних уравнения в кучу и получаем уравнение Эйлера - одно из основных уравнений гидродинамики:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p \tag{26}$$

В поле тяжести в правой части появится еще одно слагаемое - просто $\mathbf{g}$.

Рассмотрим теперь в тензорных обозначениях, как меняется импульс единицы объема (произведение плотности на скорость) во времени, то есть баланс импульса:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} v_i. \tag{27}$$

Так как уравнение Эйлера в тензорных обозначениях имеет вид:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}, \tag{28}$$

а уравнение непрерывности (которое придется вспомнить) записывается вот так:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k}, \tag{29}$$

то, снова собирая все в кучу, получим для изменения импульса следующее соотношение:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_i} - v_i \frac{\partial(\rho v_k)}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_k}\rho v_i v_k. \tag{30}$$

Вытащим из уравнения вот такой тензор:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k, \tag{31}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}. \tag{32}$$

Это - тензор плотности потока импульса. Его физический смысл такой: это i-я компонента количества импульса, протекающего в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k. То есть:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho v_i dV = -\int \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k} dV = -\int \Pi_{ik} df_k. \tag{33}$$

Вязкая жидкость - жидкость с внутренним трением. Вязкость проявляется в наличии дополнительного (необратимого) переноса импульса из мест с большей скоростью в места с меньшей. Поэтому уравнение движения вязкой жидкости можно получить, добавив к идеальному потоку импульса дополнительный член, определяющий вязкий (необратимый) перенос импульса в жидкости.

Уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}. \tag{34}$$

остается справедливым.

Добавим поправку в тензор потока импульса:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k - \sigma'_{ik} = -\sigma_{ik} + \rho v_i v_k. \tag{35}$$

Здесь σ_{ik} - тензор напряжений, σ'_{ik} - тензор вязких напряжений.

Процессы внутреннего трения в жидкости возникают только в тех случаях, когда различные участки жидкости движутся с различной скоростью, так что имеет место движение частей жидкости друг относительно друга. Поэтому тензор вязких напряжений должен зависеть от производных от скорости по координатам. Если скорость жидкости равна нулю, вязкость не проявляется. Если вся жидкость как целое совершает равномерное вращение - вязкость не проявляется.

При равномерном вращении с угловой скоростью $\mathbf{\Omega}$ скорость $\mathbf{v}$ равна векторному произведению $[\mathbf{\Omega}, \mathbf{r}]$. Из производных от скорости по координат в данном случае можно составить следующие линейные комбинации, которые будут обращаться в ноль:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}. \tag{36}$$

Поэтому тензор вязких напряжений должен содержать именно эти суммы производных.

Наиболее общим видом тензора второго ранга, удовлетворяющего всем этим условиям, является тензор:

$$\sigma'_{ik} = \eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right) + \zeta\delta_{ik}\frac{\partial v_l}{\partial x_l},\ \eta > 0,\ \zeta > 0. \tag{37}$$

Слагаемые сгруппированы так, что при свертке тензора (при $i = k$) слагаемое в скобочках обращается в ноль после суммирования (будет удвоенная сумма производных в левой части скобочки минус две трети от утроенной из-за символа Кронекера суммы производных в правой части скобочки, то есть ноль).

Коэффициенты η и ζ - соответственно, первая и вторая вязкость.

Полученное ранее уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}. \tag{38}$$

называется уравнением Навье-Стокса. Часто уравнением Навье-Стокса называют это уравнение, но в полной записи (подставляем, группируем, что-то переносим через скобочки, где-то сворачиваем символ Кронекера):

$$\rho\left(\frac{\partial v_i}{\partial t}+v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}\right)=-\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_k}\left[\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\delta_{ik}\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\zeta\frac{\partial v_l}{\partial x_l}\right). \tag{39}$$

Полагая вязкости не зависящими от координат, имеем в векторном виде:

$$\rho\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}+(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v}=-\boldsymbol{\nabla}p+\eta\Delta\mathbf{v}+\left(\zeta+\frac{\eta}{3}\right)\boldsymbol{\nabla}\operatorname{div}\mathbf{v}. \tag{40}$$

В случае несжимаемой жидкости $\operatorname{div}\mathbf{v}=0$.
Покажем положительность первой вязкости.
Полная кинетическая энергия несжимаемой жидкости равна:

$$E_{\text{кин}}=\frac{\rho}{2}\int v^2dV. \tag{41}$$

Производная подинтегральной части этой энергии по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\rho v^2}{2}=\rho v_i\frac{\partial v_i}{\partial t}. \tag{42}$$

Из уравнения Навье-Стокса подставляем:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t}=-v_k\frac{\partial v_i}{\partial x_k}-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k}, \tag{43}$$

то есть получаем:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\rho v^2}{2}=-\rho\mathbf{v}(\nabla\mathbf{v})\mathbf{v}-\mathbf{v}\nabla p+v_i\frac{\partial\sigma'_{ik}}{\partial x_k}=-\rho(\mathbf{v}\nabla)\left(\frac{v^2}{2}+\frac{p}{\rho}\right)+\operatorname{div}(\mathbf{v}\sigma')-\sigma'_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}, \tag{44}$$

где обозначено

$$(\mathbf{v}\sigma')_k=v_i\sigma'_{ik}. \tag{45}$$

В несжимаемой жидкости дивергенция скорости равна нулю, поэтому в правой части формулы заносим еще один член под дивергенцию:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\rho v^2}{2}=-\operatorname{div}\left[\rho\mathbf{v}\left(\frac{v^2}{2}+\frac{p}{\rho}\right)-(\mathbf{v}\sigma')\right]-\sigma'_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}, \tag{46}$$

Интегрируем по объему, преобразуя один из интегралов в поверхностный:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\frac{\rho v^2}{2}dV=-\oint\left[\rho\mathbf{v}\left(\frac{v^2}{2}+\frac{p}{\rho}\right)-(\mathbf{v}\sigma')\right]d\mathbf{f}-\int\sigma'_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}dV. \tag{47}$$

Далее по поверхностный интеграл обнуляется (жидкость условно течет в трубе, на границах которой либо обнуляется скорость сама, либо скалярное произведение скорости на элемент площади, а на удаленных концах трубы сколько втекает, столько и вытекает (+ можно считать, что они на бесконечности), то есть выполняются различные законы сохранения), и остается:

$$\frac{\partial}{\partial t}E_{\text{кин}}=-\int\sigma'_{ik}\frac{\partial v_i}{\partial x_k}dV=-\frac{1}{2}\int\sigma'_{ik}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)dV. \tag{48}$$

Так как в несжимаемой жидкости тензор вязких напряжений имеет вид

$$\sigma'_{ik}=\eta\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right), \tag{49}$$

то имеем

$$\frac{\partial}{\partial t}E_{\text{кин}} = -\frac{\eta}{2}\int\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_k}+\frac{\partial v_k}{\partial x_i}\right)^2 dV. \tag{50}$$

Отсюда следует положительность первой вязкости, иначе кинетическая энергия жидкости возрастала бы со временем из-за трения, что бред.

Пределы применимости гидродинамики заключаются в том, что средняя скорость должна слабо меняться на микроскопических масштабах, то есть времена порядка времени свободного пробега и длины порядка длины свободного пробега

19. Вывести уравнения Навье-Стокса из кинетического уравнения Больцмана. Учесть рассеяние на вмороженном беспорядке.

В силу исторических причин у билета есть бонус - формула Друде, полученная из уравнения Навье-Стокса. Может быть доп.вопросом к билету; этот факт не перегружает билет, то есть без Друде он был бы лишь на пару строк короче.

В общем напишем кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t}f + v\frac{\partial}{\partial r}f + F\frac{\partial}{\partial \Gamma}f = I_{st},\ f = f(r, \Gamma, t). \tag{51}$$

Запишем теперь уравнение на плотность (плотность импульса, плотность энергии, и т.д.):

$$n\langle A(\mathbf{r}, t)\rangle = \int d\Gamma f(\mathbf{r}, \Gamma, t) A(\Gamma). \tag{52}$$

Домножим теперь кинетическое уравнение на A и проинтегрируем по Γ:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int A f d\Gamma + \int A v \frac{\partial}{\partial r} f d\Gamma + \int A F \frac{\partial}{\partial \Gamma} f d\Gamma = \int A I_{st} d\Gamma. \tag{53}$$

Обозначив

$$\mathbf{j}_A = \int A v f d\Gamma, \tag{54}$$

заметив, что

$$\int A F \frac{\partial}{\partial \Gamma} f d\Gamma = F \int A \frac{\partial}{\partial \Gamma} f d\Gamma = -F \int f \frac{\partial}{\partial \Gamma} A d\Gamma, \tag{55}$$

и использовав исходное уравнение на плотность, приведем проинтегрированное кинетическое уравнение к следующему виду:

$$\frac{\partial}{\partial t} n\langle A\rangle + \mathrm{div}(\mathbf{j}_A) = nF\left\langle \frac{\partial A}{\partial \Gamma}\right\rangle + \int A I_{st} d\Gamma. \tag{56}$$

Рассмотрим теперь это уравнение для плотности импульса, то есть положим

$$A = p_i. \tag{57}$$

Имеем:

$$\frac{\partial}{\partial t} n\langle p_i\rangle + \nabla_j \int p_i v_j f d\Gamma = nF_j\left\langle \frac{\partial p_i}{\partial p_j}\right\rangle + \int p_i I_{st} d\Gamma. \tag{58}$$

Немножко свернем индексы:

$$\frac{\partial}{\partial t} n\langle p_i\rangle + \nabla_k \int p_i v_k f d\Gamma = nF_i + \int p_i I_{st} d\Gamma. \tag{59}$$

Теперь важно - считаем, что внешние силы отсутствуют, и что столкновения сохраняют импульс. Тогда члены в правой части уравнения обнуляются. Сравнивая оставшуюся часть уравнения с уравнением гидродинамики

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho v_i = -\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_k}, \tag{60}$$

обнаруживаем, что:

$$\Pi_{ik} = \int p_i v_k f d\Gamma. \tag{61}$$

В итоге получаем уравнение Навье-Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t} n\langle p_i\rangle + \nabla_k \Pi_{ik} = nF_i + \int p_i I_{st} d\Gamma. \tag{62}$$

Так как плотность электрического тока

$$j_i = e\int v_i f d\Gamma, \tag{63}$$

то

$$\frac{\partial}{\partial t} j_i + \frac{e}{m}\nabla_k \Pi_{ik} = \frac{e^2 n}{m} E_i + \frac{e}{m}\int p_i I_{st} d\Gamma. \tag{64}$$

Остается разобраться с интегралом столкновения. Интеграл столкновений может быть двух типов - либо парные столкновения в газе, сохраняющие импульс

$$I_1 \approx -\frac{f - f_0}{\tau}, \tag{65}$$

либо столкновения на неподвижных примесях, не сохраняющие импульс

$$I_2 \approx -\frac{f - f_0(\langle \mathbf{v}\rangle = 0)}{\tau_{tr}}. \tag{66}$$

Вклад первого оказывается нулевым, для второго имеем:

$$\int p_i I_2 d\Gamma = \int p_i \left(-\frac{f - f_0(\langle \mathbf{v}\rangle = 0)}{\tau_{tr}}\right) d\Gamma = -\frac{m}{e\tau_{tr}} j_i. \tag{67}$$

То есть:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau_{tr}}\right) j_i + \frac{e}{m}\nabla_k \Pi_{ik} = \frac{e^2 n}{m} E_i. \tag{68}$$

Так как условие применимости гидродинамики и локально-равновесного распределения требует медленного изменения скорости на микроскопических масштабах, то член с дифференцированием и член с тензором плотности потока импульса выкидываем и остается искомая формула Друде:

$$j_i = \frac{e^2 n \tau_{tr}}{m} E_i = \sigma_D E_i. \tag{69}$$

20. Вывести уравнение Фоккера-Планка из уравнения Ланжевена в общем случае, используя уравнения Чепмена-Колмогорова. Соотношения Эйнштейна.

Уравнение Чепмена-Колмогорова:

$$T(x_2,t_2|x_0,t_0) = \int dx_1 T(x_2,t_2|x_1,t_1)T(x_1,t_1|x_0,t_0) \tag{70}$$

$$T(x,t+\delta t|x_0,t_0) = \int dx' T(x,t+\delta t|x',t)T(x',t|x_0,t_0) \tag{71}$$

$T(x',t'|x,t)$ - плотность вероятности обнаружить систему в состоянии x' в момент времени t', если в момент t на находилась в x. Если $f(x,t)$ - распределение по x в момент t, то

$$f(x',t') = \int T(x',t'|x,t)f(x,t)dx$$

Стохастическое уравнение Ланжевена:

$$\frac{dx}{dt} = g(x(t)) + \xi(t), \quad x(t=t') = x' \tag{72}$$

Здесь $\xi(t)$ - случайный процесс (в каждый момент времени t $\xi(t)$ - некоторая случайная величина, распределение которой зависит от t). Пусть $\Phi_{t-t'}(x')$ - решение стохастического уравнения (т.е. некоторый случайный процесс). Тогда

$$T(x,t|x',t') = \langle \delta(x - \Phi_{t-t'}(x')) \rangle_\xi \tag{73}$$

Честно говоря, не очень понимаю, что это значит. По-моему так: пусть в каждый момент времени реализовалось какое-то значение случайной величины $\xi(t)$. Обозначим их как $\xi^{fix}(t)$. Далее подставим в уравнение, получим обычное решение (не процесс, а функцию) $\Phi^{\xi^{fix}(t)}_{t-t'}(x')$, и затем усредним $\delta(x - \Phi^{\xi^{fix}(t)}_{t-t'}(x'))$ по всем $\xi^{fix}(t)$ (с учетом того, что разные $\xi^{fix}(t)$ реализуются с разной вероятностью) (формально для этого придется взять функциональный интеграл).

Есть другая интерпретация. Пусть пространство элементарных событий $\omega \in \Omega$. Тогда $\xi(t) = \xi(\omega,t)$ - реализация любого случайного события определяет значение случайной величины. Тогда решение стохастического уравнения $\Phi_{t-t'}(\omega,x')$ для фиксированных x,t,x',t' мы усредняем как обычную случайную величину $\int_\Omega d\omega \delta(x - \Phi_{t-t'}(\omega,x'))$.

Я не знаю, являются ли эти интерпретации эквивалентными и является ли правильной хотя бы одна из них. Тем не менее, продолжим. Пусть в уравнении 73 переобозначим $t' \to t,\ t \to t+\delta t$, тогда имеем

$$\Phi_{\delta t}(x') = x(t+\delta t) = (x(t+\delta t) - x(t)) + x(t) = \delta x(t) + x'$$

$$T(x,t+\delta t|x',t) = \langle \delta(x - \delta x(t) - x') \rangle$$

Под знаком усреднения раскладываем в ряд Тейлора по малому $\delta x(t)$ и, поскольку стохастичность есть только в малом члене, перекидываем усреднение на него:

$$T(x,t+\delta t|x',t) = \left\{ 1 + \langle \delta x(t) \rangle \frac{d}{dx'} + \frac{1}{2}\langle [\delta x(t)]^2 \rangle \frac{d^2}{dx'^2} \dots \right\} \delta(x - x') =$$

Теперь постулируем для малых δt:

1. $\langle \delta x(t) \rangle = F_1(x(t))\delta t$
2. $\langle (\delta x(t))^2 \rangle = F_2(x(t))\delta t$
3. $\langle (\delta x(t))^n \rangle = O((\delta t)^2), \quad n > 2$

Подставим и получим

$$T(x,t+\delta t|x',t) = \delta(x-x') + \delta t F_1(x')\frac{d}{dx'}\delta(x-x') + \frac{1}{2}\delta t F_2(x')\frac{d^2}{dx'^2}\delta(x-x') + O((\delta t)^2)$$

Домножим левую и правую части на $T(x',t|x_0,t_0)$, вынесем производные по x за знак интеграла и проинтегрируем по dx', используем второе уравнение Чепмена-Колмогорова 71. Получим

$$T(x,t+\delta t|x_0,t_0) = T(x,t|x_0,t_0) - \delta t\frac{d}{dx}[F_1(x)T(x,t|x_0,t_0)] + \frac{1}{2}\delta t\frac{d^2}{dx^2}[F_2(x)T(x,t|x_0,t_0)]$$

Теперь заметим, что

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x_0,t_0) = \frac{T(x,t+\delta t|x_0,t_0) - T(x,t|x_0,t_0)}{\delta t}$$

И получаем уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x_0,t_0) = -\frac{d}{dx}[F_1(x)T(x,t|x_0,t_0)] + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}[F_2(x)T(x,t|x_0,t_0)] \tag{74}$$

Можно связать $F_1(x)$ и $F_2(x)$ с $g(x(t))$ и $\xi(t)$ из уравнения Ланжевена. Интегрируя уравнение Ланжевена 72 по t от t до $t+\delta t$ получим

$$x(t+\delta t) - x(t) \approx g(x(t))\delta t + \int_t^{t+\delta t}\xi(t')dt'$$

В левой части уравнения стоит $\delta x(t)$ и для $F_1(x)$ и $F_2(x)$ по определению имеем

$$F_1(x)\delta t = \langle\delta x(t)\rangle = g(x(t))\delta t + \int_t^{t+\delta t}\langle\xi(t')\rangle dt' = \Big|\mathbb{E}(\xi) = 0,\quad \xi \text{ - случайная сила, шум}\Big| =$$
$$= g(x)\delta t \to F_1(x) = g(x)$$

$$F_2(x)\delta t = \langle[\delta x(t)]^2\rangle \approx \left\langle\left[g(x(t))\delta t + \int_t^{t+\delta t}\xi(t')dt'\right]^2\right\rangle = \int_t^{t+\delta t}\langle\xi(t_1)\xi(t_2)\rangle dt_1dt_2 + O((\delta t)^2) =$$
$$= \Big|\langle\xi(t_1)\xi(t_2)\rangle = D\delta(t_1-t_2)\Big| = D\delta t \to F_2(x) = \frac{1}{\delta t}\int_t^{t+\delta t}\langle\xi(t_1)\xi(t_2)\rangle dt_1dt_2 = D$$

Теперь конкретизируем общий вид уравнения Фоккера-Планка 74.

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p}$$
$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial r}$$
$$x = q = (r,p)$$
$$g(x) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial r}\right) = (v(p), F(r))$$
$$\frac{dx}{dt} = g(x(t)) \to \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} r \\ p\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v(p) \\ -\gamma p - \nabla U\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \xi_p(t)\end{pmatrix} = g(r,p)$$

$$T(x,t|x_0,t_0) = \langle f(r,p,t)\rangle_\xi$$

Собирая все вместе, получим уравнение Фоккера-Планка (в более конкретизированном виде)

$$\frac{\partial\langle f(r,p,t)\rangle_\xi}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial r}[v(p)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi]+\frac{\partial}{\partial p}[(-\gamma p-\nabla U)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi]-\frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial p^2}\langle f(r,p,t)\rangle_\xi=0$$

Получим из последнего выражения соотношение Эйнштейна. Пусть установилось равновесное состояние в потенциале U. Опуская усреднение получим

$$v=\frac{p}{m}$$

$$f^0(r,p)=n_0\exp\Big(-\frac{\varepsilon_p+U}{T}\Big)\text{ - равновесное распределение - больцмановское}$$

$$\frac{d}{dr}f^0(r,p)=n_0\exp\Big(-\frac{\varepsilon_p+U}{T}\Big)\Big(-\frac{\nabla U}{T}\Big)=-\frac{\nabla U}{T}f^0(r,p)$$

$$\frac{d}{dp}f^0(r,p)=n_0\exp\Big(-\frac{\varepsilon_p+U}{T}\Big)\Big(-\frac{1}{T}\frac{\partial\varepsilon_p}{\partial p}\Big)=-\frac{p}{mT}f^0(r,p)$$

$$\frac{\partial f(r,p,t)}{\partial t}=0=\frac{p\nabla U}{mT}f^0(r,p)+\frac{d}{dp}\Big[\gamma p-\frac{pD}{2mT}\Big]f^0(r,p)-\frac{p\nabla U}{mT}f^0(r,p)=\frac{d}{dp}\Big[\gamma p-\frac{pD}{2mT}\Big]f^0(r,p)\to$$

$$\boxed{D=2mT\gamma}$$

$D=2mT\gamma$ и есть соотношение Эйнштейна.

21. Диффузия в импульсном пространстве. Вывести уравнение Фоккера-Планка из уравнения Ланжевена, используя кинетическое уравнение Больцмана. Соотношения Эйнштейна.

Кинетическое уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r,p,t)+\frac{\partial}{\partial r}[v(p)f(r,p,t)]+\frac{\partial}{\partial p}[F(r)f(r,p,t)]=0$$

Уравнение Ланжевена (здорового человека):

$$\frac{dp}{dt}=-\gamma p-\nabla U+\xi_p(t),\quad \langle\xi_p(t)\rangle=0,\quad \langle\xi_p(t)\xi_p(t')\rangle=D\delta(t-t')$$

Слагаемые силы: сопротивления, внешняя и случайная. Подставим в кинетическое уравнение $F(r,p)=-\gamma p-\nabla U+\xi_p(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r,p,t)+\frac{\partial}{\partial r}[v(p)f(r,p,t)]+\frac{\partial}{\partial p}[(-\gamma p-\nabla U+\xi_p(t))f(r,p,t)]=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f(r,p,t)=\hat{\Omega}f=-\Big[\frac{\partial}{\partial r}[v(p)f(r,p,t)]+\frac{\partial}{\partial p}[(-\gamma p-\nabla U+\xi_p(t))f(r,p,t)]\Big]$$

Далее разложим $f(r,p,t+dt)$ обозначая производные введенным оператором:

$$f^{(0)}(r,p,t)=f(r,p,t)-\text{нулевой порядок разложения}$$

$$f^{(1)}(r,p,t)=\int_t^{t+dt}dt'\frac{\partial}{\partial t'}f(r,p,t')=\int_t^{t+dt}dt'\hat{\Omega}(t')f-\text{первая поправка}$$

$$f^{(2)}(r,p,t)=\int_t^{t+dt}dt'\frac{\partial}{\partial t'}f^{(1)}(r,p,t')=\int_t^{t+dt}dt'\hat{\Omega}(t')\int_t^{t'}dt''\hat{\Omega}(t'')f-\text{вторая поправка}$$

$$f(r,p,t+dt)=\Big[1+\int_t^{t+dt}\hat{\Omega}(t_1)dt_1+\int_t^{t+dt}\hat{\Omega}(t_1)dt_1\int_t^{t_1}\hat{\Omega}(t_2)dt_2+\dots\Big]f(r,p,t)$$

Усредним левую и правую части равенства по флуктуациям случайной силы при $t\in[t,t+dt]$ (из-за такого промежутка $f(r,p,t)$ уходит из под усреднения).

$$\langle f(r,p,t+dt)\rangle_\xi=\Big\langle\Big[1+\int_t^{t+dt}\hat{\Omega}(t_1)dt_1+\int_t^{t+dt}\hat{\Omega}(t_1)dt_1\int_t^{t_1}\hat{\Omega}(t_2)dt_2+\dots\Big]\Big\rangle_\xi f(r,p,t)=$$

$$=\Big[1+\int_t^{t+dt}\langle\hat{\Omega}(t_1)\rangle dt_1+\int_t^{t+dt}\int_t^{t_1}\langle\hat{\Omega}(t_1)\hat{\Omega}(t_2)\rangle dt_1dt_2+\dots\Big]f(r,p,t)$$

Теперь усредним левую и правую части по флуктуациям ξ в «прошлом». Так как эволюция f описывается марковским процессом, то левая часть не зависит от флуктуаций в «прошлом», видимо, по той же причине операторам тоже пофиг. В итоге все сводится к переходу $f(r,p,t)\to\langle f(r,p,t)\rangle_\xi$, которое заключается в загрублении по временам на порядок корреляционного времени случайной силы. Перенося f влево и деля на dt получаем:

$$\frac{\langle f(r,p,t+dt)\rangle_\xi-\langle f(r,p,t)\rangle_\xi}{dt}=\frac{1}{dt}\Big[\int_t^{t+dt}dt_1\langle\hat{\Omega}(t_1)\rangle+\int_t^{t+dt}dt_1\int_t^{t_1}dt_2\langle\hat{\Omega}(t_1)\hat{\Omega}(t_2)\rangle+\dots\Big]\langle f(r,p,t)\rangle_\xi$$

При усреднении оператора $\hat{\Omega}$ пропадает $\xi_p(t)$, сделанный переход $f(r,p,t) \to \langle f(r,p,t)\rangle_\xi$ позволяет пренебречь изменениями f на временах dt и свести интеграл к домножению на dt:

$$\int_t^{t+dt} dt_1 \langle \hat{\Omega}(t_1)\rangle \langle f(r,p,t)\rangle_\xi = -dt\Big[\frac{\partial}{\partial r}[v(p)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi] + \frac{\partial}{\partial p}[(-\gamma p - \nabla U)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi]\Big]$$

При подсчете корреляции $\langle \hat{\Omega}(t_1)\hat{\Omega}(t_2)\rangle$ константные и перекрестные члены уйдут (свойство ковариации), останутся только стохастические:

$$\langle \hat{\Omega}(t_1)\hat{\Omega}(t_2)\rangle = \langle \frac{\partial}{\partial p}\xi_p(t_1), \frac{\partial}{\partial p}\xi_p(t_2)\rangle = \langle \xi_p(t_1)\xi_p(t_2)\rangle \frac{\partial^2}{\partial p^2} = D\delta(t_1 - t_2)\frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

$$\int_t^{t+dt} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 \langle \hat{\Omega}(t_1)\hat{\Omega}(t_2)\rangle \langle f(r,p,t)\rangle_\xi = \int_t^{t+dt} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 D\delta(t_1 - t_2)\frac{\partial^2}{\partial p^2}\langle f(r,p,t)\rangle_\xi =$$

$$= \int_t^{t+dt} dt_1 \frac{D}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\langle f(r,p,t)\rangle_\xi = \frac{Ddt}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\langle f(r,p,t)\rangle_\xi$$

Собирая все вместе, получим уравнение Фоккера-Планка (в более конкретизированном виде, чем это было в предыдущем билете)

$$\frac{\partial \langle f(r,p,t)\rangle_\xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}[v(p)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi] + \frac{\partial}{\partial p}[(-\gamma p - \nabla U)\langle f(r,p,t)\rangle_\xi] - \frac{D}{2}\frac{\partial}{\partial p^2}\langle f(r,p,t)\rangle_\xi = 0$$

Получим из последнего выражения соотношение Эйнштейна. Пусть установилось равновесное состояние в потенциале U. Опуская усреднение получим

$$v = \frac{p}{m}$$

$$f^0(r,p) = n_0 \exp\Big(-\frac{\varepsilon_p + U}{T}\Big) \text{ - равновесное распределение - больцмановское}$$

$$\frac{d}{dr}f^0(r,p) = n_0 \exp\Big(-\frac{\varepsilon_p + U}{T}\Big)\Big(-\frac{\nabla U}{T}\Big) = -\frac{\nabla U}{T}f^0(r,p)$$

$$\frac{d}{dp}f^0(r,p) = n_0 \exp\Big(-\frac{\varepsilon_p + U}{T}\Big)\Big(-\frac{1}{T}\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial p}\Big) = -\frac{p}{mT}f^0(r,p)$$

$$\frac{\partial f(r,p,t)}{\partial t} = 0 = \frac{p\nabla U}{mT}f^0(r,p) + \frac{d}{dp}\Big[\gamma p - \frac{pD}{2mT}\Big]f^0(r,p) - \frac{p\nabla U}{mT}f^0(r,p) = \frac{d}{dp}\Big[\gamma p - \frac{pD}{2mT}\Big]f^0(r,p) \to$$

$$\boxed{D = 2mT\gamma}$$

$D = 2mT\gamma$ и есть соотношение Эйнштейна.

22. Вывести уравнение Смолуховского, исходя из уравнения Ланжевена. Использовать кинетическое уравнение Больцмана. Обсудить соотношение Эйнштейна.

Вывести уравнение Смолуховского, исходя из уравнения Ланжевена. Использовать кинетическое уравнение Больцмана.

Уравнение Ланжевена выглядит следующим образом:

$$\ddot{x} = -\frac{1}{m}\frac{\partial V(x)}{\partial x} - \gamma\dot{x} + \frac{1}{m}R(t) \tag{75}$$

Физически нужно его понимать на примере частицы в потенциале V с вязким трением, в которую случайным образом ударяется множество разных частиц. В пределе очень вязкой жидкости – $\gamma \gg 1$ (маленького времени термальной γ^{-1} релаксации по сравнению с другими характеристическими временами системы, но не по сравнению со временем релаксации окружающей среды). При маленьком времени релаксации, скорость $v = \dot{x}$ очень быстро стабилизируется, поэтому можно ожидать, что $\dot{v} = \ddot{x} = 0$. Тогда уравнение Ланжевена в этом пределе примет вид:

$$\dot{x} = \frac{1}{\gamma m}\left(-\frac{\partial V(x)}{\partial x} + R(t)\right) \tag{76}$$

Для случайной силы $R(t)$ естественно предполагать, что $\langle R(t)\rangle = 0$, а также, что функция $S(t-t')$, определяемая из соотношения

$$\left\langle R(t)R(t')\right\rangle = DS(t-t') \tag{77}$$

имеет резкий пик в $t = t'$. Для простоты мы будем полагать, что $S(t-t') = \delta(t-t')$. Из общих соображений ($\left\langle mv^2\right\rangle = k_BT$) для уравнения (75) можно понять, что $D = 2\gamma m k_B T$. Это соотношение Эйнштейна, но мы пока этим всё равно не будем пользоваться, мы выведем во второй части билета это немного по другому, хотя и эквивалентным способом.

Remark. D – здесь это не коэффициент диффузии, но связан с ним делением на $2\gamma^2 m^2$. Мы используем обозначения лектора, поэтому такая странная прескрипция.

Понять, что можно пренебречь $\dot{v}$ можно из следующих соображений. Обозначим за $F(t) = R(t) - \frac{\partial V(x)}{\partial x}$. $x = x(t)$ Если эта сила имеет характерную частоту ω: $F(t) \sim F_\omega \cos\omega t = \mathrm{Re}\left\{F_\omega e^{i\omega t}\right\}$, то уравнение на $v = \mathrm{Re}\left\{v_\omega e^{i\omega t}\right\}$ выглядит следующим образом

$$v_\omega = \frac{F_\omega}{m(\gamma + i\omega)} \sim \frac{F_\omega}{\gamma m} + O(\omega/\gamma) \qquad \Rightarrow \qquad v(t) \approx \frac{F(t)}{\gamma m} \tag{78}$$

что, смотря на уравнение Ланжевена (75), означает, что $\dot{v} = \ddot{x} \approx 0$. Этот вывод ни коим образом не строгий, но иллюстрирует почему (76) и есть нужный предел.

Рассмотрим концентрацию частиц

$$n(x,t) = \int\limits_p f(x,p,t) \tag{79}$$

С точностью до полных производных по импульсу, имеем из кинетического уравнения:

$$\frac{\partial f(x,p,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(vf(x,p,t)\right) + \text{total derivatives by } p \tag{80}$$

Поэтому, используя уравнения (76), получаем (что есть просто уравнение непрерывности, на самом деле):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\dot{x}n) = -\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\left[-\frac{\partial V(x)}{\partial x} + R(t)\right]n\right) \tag{81}$$

Решение уравнения записывается стандартным образом через Texp (“time ordered exponential”). Давайте проделаем эту выкладку для наглядности. Удобным бывает обезразмерить время $\tau = \frac{t}{\gamma m}$. Тогда получается уравнение:

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial V(x)}{\partial x} - \rho(\tau)\right) n\right] = \hat{\Omega}(\tau) n \tag{82}$$

где функция $\rho(\tau) = R(\gamma m \tau)$. Она удовлетворяет следующим свойствам:

$$\langle \rho \rangle = 0 \qquad \left\langle \rho(\tau)\rho(\tau') \right\rangle = D\delta(t-t')|_{t=\gamma m\tau, t'=\gamma m \tau'} = \frac{D}{\gamma m}\delta(\tau - \tau') \tag{83}$$

Если $n(x,\tau)$ концентрация частиц в какой-то момент безразмерного времени τ, то через промежуток времени $\Delta\tau$, мы получим:

$$n(x, \tau + \Delta\tau) = n(x,\tau) + \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \, \hat{\Omega}(\tau_1) n(x, \tau_1) \tag{84}$$

Интеграл содержит в операторе $\hat{\Omega}$ случайную функцию $\rho(\tau)$. Это уравнение просто прямое интегрирование уравнения (82). Для $n(x,\tau_1)$ под интегралом можно подставить то же самое соотношение и получить:

$$n(x, \tau + \Delta\tau) = n(x,\tau) + \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \, \hat{\Omega}(\tau_1) \left[n(x,\tau) + \int\limits_{\tau}^{\tau_1} d\tau_2 \, \hat{\Omega}(\tau_2) n(x, \tau_2)\right] \tag{85}$$

Теперь понятно, что в принципе, мы можем продолжать этот процесс и дальше с $n(x,\tau_2)$ и так до бесконечности и получаемый ряд и есть решение уравнения (82):

$$n(x, \tau + \Delta\tau) = \left[1 + \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \, \hat{\Omega}(\tau_1) + \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \, \hat{\Omega}(\tau_1) \int\limits_{\tau}^{\tau_1} d\tau_2 \, \hat{\Omega}(\tau_2) + \dots \right] n(x,\tau) \tag{86}$$

Это всё, конечно, хорошо, но мы не воспользовались пока статистическими свойствами $\rho(\tau)$, которые нам известны. Далее мы будем именно усреднять по этой случайной функции.

Также, когда мы пишем такие ряды, нужно помнить о вопросах сходимости, то есть, когда вообще осмысленно писать такой ряд. Про его сходимость мне ничего неизвестно, лектор об этом ничего не говорит, я в своей практике видел, чтобы похожий ряд (по сути тот же, “path ordered exponential”) расходился в каких-то случаях. Поэтому я полагаю есть некоторые условия, которые мы должны наложить, но, возможно, разрешается думать, что $\Delta\tau \ll \tau$, но, возможно, не разрешается. Возможно, нужно накладывать условия на потенциал и на моменты случайной функции $\rho(\tau)$. Но тем не менее, если предположить, что ряд довольно быстро сходится (хотя бы после усреднения по случайной функции, наверное, в целом бессмысленно говорить о сходимости этого ряда до усреднения).

Ну, с учетом всего сказанного, давайте усреднять, шо там:

$$\left\langle \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \hat{\Omega}(\tau_1) n(x,\tau) \right\rangle_{\rho(\tau)} = \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \left\langle \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial V}{\partial x} n(x,\tau)\right) - \rho(\tau_1)\frac{\partial n}{\partial x}(x,\tau) \right\rangle \tag{87}$$

Можно сразу сказать (вообще всё дальше про причинность это моя больная фантазия, правильно это или нет хз), что $\left\langle \frac{\partial n(x,\tau)}{\partial x} \rho(\tau_1) \right\rangle = 0$ для $\tau_1 > \tau$, из-за причинности. Ну это можно увидеть и явно, я думаю. Я думаю, что при малых $\Delta\tau$ мы можем пользоваться теорией линейного отклика:

$$n(x,\tau) = \int\limits_{-\infty}^{\tau} d\tau' \alpha_n(x, \tau - \tau')\rho(\tau') \tag{88}$$

где $\alpha_n(x,\tau-\tau')$ – обобщенная восприимчивость (функция линейного отклика). Получается, у нас

$$\sim \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \alpha_n(\dots) \left\langle \rho(\tau_1)\rho(\tau') \right\rangle \sim \int_{-\infty}^{\tau} \alpha_n \delta(\tau_1-\tau') \tag{89}$$

Но $\tau_1 > \tau > \tau'$, поэтому дельта функция которая стоит под интегралом просто убивает интеграл в ноль. Это манифестация принципа причинности, $n(x,\tau)$ не может зависеть от случайной силы в будущие моменты времени $\rho(\tau_1)$. Поэтому получается, что $\left\langle \frac{\partial n(x,\tau)}{\partial x}\rho(\tau_1)\right\rangle = 0$ для $\tau_1 > \tau$.

В связи с написанным получаем:

$$\left\langle \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \hat{\Omega}(\tau_1) n(x,\tau) \right\rangle_{\rho(\tau)} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial V(x)}{\partial x}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle\right)\Delta\tau \tag{90}$$

Далее мы будем следить за слагаемыми порядка $O(\Delta\tau)$. В слагаемом с двумя интегрированиями в ряде (86) мы имеем слагаемые типа $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial V}{\partial x}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle$, двойное интегрирование по которому дает $O(\Delta\tau^2)$. Есть так же перекрёстные слагаемые, в которые ρ входит линейно, соответственно, после усреднения дает ноль. Есть ещё слагаемое в котором усредняется $\rho(\tau_1)\rho(\tau_2)$ (опять таки, умноженное на $n(x,\tau)$ и, опять, усреднение можно“отщепить”, из-за причинности, которую мы выше явно наблюдали по средствам теории линейного отклика. И поэтому получаем:

$$\left\langle \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1\, \hat{\Omega}(\tau_1) \int\limits_{\tau}^{\tau_1} d\tau_2\, \hat{\Omega}(\tau_2) n(x,\tau) \right\rangle = \int\limits_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \int\limits_{\tau}^{\tau_1} d\tau_2\, \left\langle \rho(\tau_1)\rho(\tau_2)\right\rangle \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle + O(\Delta\tau^2) =$$

$$= \frac{D}{2\gamma m}\Delta\tau \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle \tag{91}$$

Теперь перенося в ряде (86) “единичку” (которая умножается на $\langle n(x,\tau)\rangle$, деля на $\Delta\tau$ и устремляя $\Delta\tau \to 0$, откидывая все оставшиеся члены в ряде (если ряд быстро сходится, то это неплохое приближение, так считает лектор, но, вообще, кажется, что там высшие слагаемые порядка $O(\Delta\tau^2)$, правда, для этого по хорошему нужно знать более высокие моменты случайной силы), получим:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle = \lim_{\Delta\tau\to 0}\frac{\left\langle n(x,\tau+\Delta\tau)\right\rangle - \left\langle n(x,\tau)\right\rangle}{\Delta\tau} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle\right) + \frac{D}{2\gamma m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left\langle n(x,\tau)\right\rangle \tag{92}$$

Возвращая время $t = \gamma m \tau$ и выделяя полную производную, получаем *уравнение Смолуховского:*

$$\boxed{\frac{\partial\left\langle n(x,t)\right\rangle}{\partial t} = \frac{1}{\gamma m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial V}{\partial x}\left\langle n(x,t)\right\rangle + \frac{D}{2\gamma m}\frac{\partial\left\langle n(x,t)\right\rangle}{\partial x}\right]} \tag{93}$$

Соотношения Эйнштейна

Уравнение Смолуховского:

$$\frac{\partial\left\langle n(x,t)\right\rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial V}{\partial x}\left\langle n(x,t)\right\rangle + \frac{D}{2(\gamma m)^2}\frac{\partial\left\langle n(x,t)\right\rangle}{\partial x}\right] \tag{94}$$

Подставляя равновесную функцию $\left\langle n(x,t)\right\rangle = n_0 \exp\left\{-\frac{V}{k_B T}\right\}$ в уравнение, получим

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{1}{\gamma m}\frac{\partial V}{\partial x}\exp\left\{-\frac{V}{k_B T}\right\} - \frac{D}{2(\gamma m)^2 k_B T}\frac{\partial V}{\partial x}\exp\left\{-\frac{V}{k_B T}\right\}\right] = 0 \tag{95}$$

и получаем $D = 2\gamma m k_B T$, что лектор называет соотношением Эйнштейна.
Remark. Коэффициент диффузии из D получается делением на $2\gamma^2 m^2$

$$\mathcal{D} = \frac{D}{2\gamma^2 m^2} = \frac{k_B T}{\gamma m}$$

В этих терминах, уравнение Смолуховского есть расширение уравнения диффузии:

$$\frac{\partial \langle n(x,t)\rangle}{\partial t} = \mathcal{D}\frac{\partial^2 \langle n(x,t)\rangle}{\partial x^2} + \frac{1}{\gamma m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial V}{\partial x}\langle n(x,t)\rangle\right)$$

Remark. К слову, у нас тут ещё используется (в след за лектором) не общепринятое обозначение по коэффициенту трения γ, от общепринятого отличие лишь в делении на массу броуновской частицы, то есть γm есть коэффициент диффузии, который используется чаще всего в книжках по физике.

23. Дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова для вероятности квазинепрерывного случайного марковского процесса (процесс с разрывными траекториями). Вывести уравнение Фоккера-Планка из столкновительного члена в уравнении Чепмена-Колмогорова.

Дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова есть:

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t') = -\hat{\mathrm{L}}(x,t)T(x,t|x',t') \tag{96}$$

где $\hat{\mathrm{L}}$ есть оператор Лиувилля:

$$\hat{\mathrm{L}}(x,t)\varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}(T(x,t+\Delta t|z,t) - \delta(x-z))\varphi(z) \tag{97}$$

В билете 12, было получено *дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова для марковского процесса с разрывными траекториями* (оно же общее кинетическое уравнение):

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t') + \frac{\partial}{\partial x}(g(x)T(x,t|x',t')) = \int dz(W(x|z,t)T(z,t|x',t') - W(z|x,t)T(x,t|x',t')) \tag{98}$$

Оно описывает **марковские** процессы с “разрывными траекториями” или в другой терминологии *квазинепрерывные марковские процессы.* Фактически они изучают системы, которые удовлетворяют уравнению:

$$\frac{dx}{dt} = g(x(t)) + \xi(t) \tag{99}$$

Здесь случайные силы приводят, помимо самого вероятностного характера непрерывного движения, который они вносят, к “спонтанным скачкам” (переходам системы из одного положения в другое за бесконечно малое время, с вероятностью перехода $W(x|z,t)dt$ из точки z в точку x в бесконечно малый промежуток времени $t \div t+dt$). В след за лектором, мы будем предполагать, что начальные условия (x',t') как-то заданы и фиксированы, мы будем их опускать, но их наличие предполагается: $p(x,t) \equiv T(x,t|x',t')$. За выводом смотри билет 12.

Выведем уравнение Фоккера-Планка из столкновительного члена в дифференциальном уравнении Чепмена-Колмогорова:

$$\underbrace{\int dz(W(x|z,t)p(z,t) - W(z|x,t)p(z,t))}_{\text{столкновительный член}} \tag{100}$$

Введём новое обозначение, как это сделано и у лектора:

$$W(x|z,t) = \Omega(z,y,t) \qquad\qquad y = x-z \tag{101}$$

То есть это будет теперь плотностью вероятности сделать скачок из точки z на y (призываю помнить, что здесь $x, y, z, \ldots$ – векторные величины, а t – время). Тогда делая замену переменной интегрирования, столкновительный член становится:

$$\int dy(\Omega(x-y,y,t)p(x-y,t) - \Omega(x,-y,t)p(x,t)) = \int dy(\Omega(x-y,y,t)p(x-y,t) - \Omega(x,y,t)p(x,t)) \tag{102}$$

Тут мы во втором слагаемом сделали замену $y \to -y$ (интеграл умножается на модуль детерминанта, поэтому всё хорошо). Если смотреть на $\Omega(x-y,y,t)p(x-y,t)$ как функцию аргумента $x-y$, то мы имеем из разложения в ряд Тейлора:

$$\Omega(x-y,y,t)p(x-y,t) = \Omega(x,y,t)p(x,t) - \sum_i y_i \frac{\partial}{\partial x_i}(\Omega(x,y,t)p(x,t)) + \\ + \frac{1}{2}\sum_{i,j} y_i y_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}(\Omega(x,y,t)p(x,t)) + \ldots \tag{103}$$

Введём:

$$\int dy\ y_i\Omega(x,y,t) = A_i(x,t) \qquad\qquad \int dy\ y_iy_j\Omega(x,y,t) = D_{ij}(x,t) \tag{104}$$

Тогда получаем *уравнение Фоккера-Планка:*

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}(g(x)T(x,t|x',t')) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}(A_i(x,t)p(x,t)) + \frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}(D_{ij}(x,t)p(x,t)) \tag{105}$$

Remark. В науке о стохастических процессах, дифференциальное уравнение Чепмена Колмогорова пишется по другому (можете дальше не читать, но знать это не будет вредно, если кто-то попадется, кто действительно шарит, то может это пригодится):

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}(A_i(x,t)p(x,t)) + \frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}(D_{ij}(x,t)p(x,t)) + \\ + \int dz(W(x|z,t)p(z,t) - W(z|x,t)p(z,t)) \tag{106}$$

Вероятность $W(x|z,t)$ определяется также, почти как у нас в курсе (для любого $\epsilon > 0$):

$$W(x|z,t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}p(x,t+\Delta t|z,t) \qquad\qquad ||x-z||\geq \epsilon \tag{107}$$

Вот, если эта величина 0, то марковский процесс называется *непрерывным*, и диф. ур. Ч-К станет уравнением Фоккера-Планка. Если не 0, но предел существует (равномерный по параметрам), то такой процесс называется квазинепрерывным или скачкообразным (именно для таких процессов и пишется уравнение), и имеются jump процессы. jump процессы описываются столкновительным членом. По моему, в этом курсе проблемы фундаментального характера. Btw, величины A_i и D_{ij} тоже определяются похожим образом:

$$A_i(x,t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int\limits_{||x-z||<\epsilon} dz(x_i-z_i)p(x,t+\Delta t|z,t) \tag{108}$$

$$D_{ij}(x,t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int\limits_{|x-z|<\epsilon} dz(x_i-z_i)(x_j-z_j)p(x,t+\Delta t|z,t) \tag{109}$$

24. Двухвременные функции Грина (ФГ). Запаздывающая, опережающая и Келдышевская. Фурье представление функций Грина в случае усреднения по равновесной матрице плотности. Доказать, что ФГ зависят только от разности времен в этом случае. Флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ).

а) $G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t') = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0}dx$,
б) $G^a_{AB}(\omega) = \int G^a_{AB}(t-t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t') = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x - i0}dx$,
$A_{spf}(\omega) = (\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu))\, A_{\mu\nu}B_{\nu\mu}\delta\left(\omega - E_\mu + E_\nu\right) = -\frac{1}{\pi}ImG^R_{AB}(\omega)$,
в) $G^K_{AB}(\omega) = \int G^K_{AB}(t-t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t') = -2\pi i\left(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu}B_{\nu\mu}\delta\left(\omega - E_\mu + E_\nu\right)$.

Запаздывающая, опережающая и келдышевская функции Грина

Пусть $A(t)$, $B(t)$ - операторы в представлении Гайзенберга. То есть если $U(t)$ - оператор эволюции, то соотношения $A(t) = U^\dagger(t)AU(t),\ B(t) = U^\dagger(t)BU(t)$ определяют зависимость операторов от времени, а векторы состояний не эволюционируют. Определим двухвременные функции Грина:

$$G^K_{AB}(t,t') = -i\langle\{A(t), B(t')\}_+\rangle \text{ - Келдышевская функция Грина (Keldysh),}$$

$$G^r_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\langle\big[A(t), B(t')\big]_-\rangle \text{ - запаздывающая функция Грина (retarded),}$$

$$G^a_{AB}(t,t') = i\theta(t'-t)\langle\big[A(t), B(t')\big]_-\rangle \text{ - опережающая функция Грина (advanced),}$$

где $\{A(t), B(t')\}_+ = A(t)B(t') + B(t')A(t)$ - антикоммутатор, $[A(t), B(t')]_- = A(t)B(t') - B(t')A(t)$ - коммутатор. Усреднение производится по некоторой матрице плотности ρ:

$$G^K_{AB}(t,t') = -i\langle\{A(t), B(t')\}_+\rangle = -iSp\left(\rho\{A(t), B(t')\}_+\right), \tag{110}$$

$$G^r_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\langle\big[A(t), B(t')\big]_-\rangle = -i\theta(t-t')Sp\left(\rho\left[A(t), B(t')\right]_-\right) \overset{\text{def}}{\equiv} \langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle, \tag{111}$$

$$G^a_{AB}(t,t') = i\theta(t'-t)\langle\big[A(t), B(t')\big]_-\rangle = i\theta(t'-t)Sp\left(\rho\left[A(t), B(t')\right]_-\right). \tag{112}$$

Доказательство соотношений а), б), в)

Итак, мы рассматриваем операторы в представлении Гайзенберга, так что векторы состояний и матрица плотности не зависят от времени. Будем предполагать, что:
1. Гамильтониан H не зависит от времени. Тогда $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, $A(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Ae^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, $B(t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}Be^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$.
В дальнейшем мы будем полагать постоянную Планка $\hbar = 1$ для упрощения, но её всегда можно восстановить из соображений размерности.
2. Будем усреднять по равновесной матрице плотности $\rho = Z^{-1}e^{-\beta H}$, где $\beta = \frac{1}{T}$, $Z = Sp\left(e^{-\beta H}\right)$. Также:
3. Будем писать функции Грина в базисе собственных функций Гамильтониана $H|n\rangle = E_n|n\rangle$;
4. Будем использовать условия полноты и ортонормированности базиса: $\hat{1} = \sum\limits_n |n\rangle\langle n|$, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$;
5. Для любого оператора A и произвольного полного ортонормированного базиса $\{|n\rangle\}$: $A = \sum\limits_{n,m}|n\rangle\langle m|A_{nm}$, $A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$, $Sp(A) = \sum\limits_n\langle n|A|n\rangle$.

Сначала докажем соотношение а). Согласно (111) рассмотрим след

$$Sp\left(\rho\left[A(t), B(t')\right]_-\right) = Z^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}\left[e^{iHt}Ae^{-iHt}, e^{iHt'}Be^{-iHt'}\right]_-\right) =$$
$$= Z^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} - e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) =$$
$$= Z^{-1}\sum_n\langle n|\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} - e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right)|n\rangle$$

Рассмотрим первое слагаемое в сумме, вставляя единичные операторы и пользуясь пунтками 3-5:

$$\sum_{n,k,m,l} \langle n|e^{-\beta H}e^{iHt}|k\rangle\langle k|A|m\rangle\langle m|e^{-iHt}e^{iHt'}|l\rangle\langle l|Be^{-iHt'}|n\rangle =$$

$$= \sum_{n,k,m,l} e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}\delta_{nk}A_{km}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}\delta_{ml}\langle l|B|n\rangle e^{-iE_nt'}\delta_{mn} = \sum_{n,m} e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'}.$$

Делая то же самое со вторым слагаемым, переписываем след в виде:

$$Sp\left(\rho\left[A(t), B(t')\right]_-\right) = Z^{-1}\sum_{n,m}(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} -$$
$$-e^{-\beta E_n}e^{iE_nt'}B_{nm}e^{-iE_mt'}e^{iE_mt}A_{mn}e^{-iE_nt})$$

Теперь во втором слагаемом переобозначим индексы суммирования и приведём подобные члены:

$$Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} - e^{-\beta E_m}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}\right) =$$
$$= Z^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right).$$

Тогда для запаздывающей двухвременной функции Грина мы имеем выражние

$$G^r_{AB}(t,t') \equiv \langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t')Z^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = G^r_{AB}(t-t').$$

Теперь надо найти преобразование Фурье от этой корреляционной функции:

$$G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t').$$

Обозначим $\tau = t - t'$ и заменим ω на $\omega + i\delta, \delta \to +0$ для сходимости интеграла. Тогда:

$$G^r_{AB}(\omega) = -iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n-E_m)\tau+i\omega\tau-\delta\tau}\theta(\tau)\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}d\tau =$$
$$= -iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{0}^{+\infty} e^{i(E_n-E_m)\tau+i\omega\tau-\delta\tau}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)d\tau =$$
$$= \frac{-iZ^{-1}}{i(E_n-E_m)+i\omega-\delta}e^{i(E_n-E_m)\tau+i\omega\tau-\delta\tau}\Big|_0^{+\infty}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) =$$
$$= \frac{iZ^{-1}}{i(E_n-E_m)+i\omega-\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = \frac{Z^{-1}}{(E_n-E_m)+\omega+i\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right), \tag{113}$$

где предполается суммирование по индексам n, m.

Замечание: полюс этой функции $-(E_n - E_m) - i\delta$ находится в нижней полуплоскости комплексной переменной ω. Поэтому, если мы будем брать обратное преобразование Фурье $\int G^r_{AB}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi}$, то в случае $t - t' < 0$, контур нужно замыкать в верхней полуплоскости, которая не содержит полюсов функции $G^r_{AB}(\omega)$, поэтому интеграл в этом случае равен 0. Если же $t - t' > 0$, то контур замыкается снизу и интеграл вычисляется с помощью вычетов. Поэтому появится нужная для запаздывающей функции Грина тэта-функция $\theta(t-t')$. Таким образом, замена ω на $\omega + i\delta, \delta \to +0$ (или просто $\omega + i0$) определяет правильное правило обхода полюсов.

Выражение (113) можно преобразовать с помощью введения дельта-функции и нового интегрирования:

$$G^r_{AB}(\omega) = \int \frac{Z^{-1}}{\omega - x + i\delta} A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\delta(x - E_m + E_n)dx = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0}dx, \quad (114)$$

где мы обозначили

$$A_{spf}(x) = Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}\delta(x - E_m + E_n).$$

С другой стороны, пользуясь формулой Сохоцкого из курса УМФ

$$\frac{1}{\omega + (E_n - E_m) \pm i0} = \mathcal{P}\frac{1}{\omega + (E_n - E_m)} \mp i\pi\delta(\omega + (E_n - E_m)),$$

получаем из формулы (113), что

$$\mathrm{Im} G^r_{AB}(x) = -\pi Z^{-1}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\delta(\omega - E_m + E_n).$$

Тогда окончательно имеем то, что требовалось:

$$G^r_{AB}(\omega) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega + i\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0}dx, \quad (115)$$

$$A_{spf}(x) = Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}\delta(x - E_m + E_n) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im} G^r_{AB}(x). \quad (116)$$

Теперь получим соотношение б). В опережающей функции Грина стоит тот же след, что и в запаздывающей, мы его уже вычислили. Остаётся сделать преобразование Фурье ($\tau = t - t'$):

$$G^a_{AB}(\omega) = \int G^a_{AB}(t - t')e^{i\omega(t-t')}d(t - t') =$$

$$= iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n - E_m)\tau + i\omega\tau}\theta(-\tau)\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}d\tau = \Big/ \tau \to -\tau \Big/ =$$

$$= iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau}\theta(\tau)\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}d\tau =$$

$$= iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{0}^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}d\tau.$$

В этом случае мы должны заменить ω на $\omega - i\delta, \delta \to +0$. Тогда

$$G^a_{AB}(\omega) = iZ^{-1}\sum_{n,m}\int\limits_{0}^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau - \delta\tau}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)d\tau =$$

$$= \frac{iZ^{-1}}{-i(E_n - E_m) - i\omega - \delta}e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau - \delta\tau}\Big|_0^{+\infty}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) =$$

$$= \frac{-iZ^{-1}}{-i(E_n - E_m) - i\omega - \delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega - i\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right). \quad (117)$$

Так же, как и в (114) с помощью введения дельта-функции получаем соотношение б):

$$G^a_{AB}(\omega) = \int \frac{Z^{-1}}{\omega - x - i\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\delta(x - E_m + E_n)dx = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x - i0}dx, \quad (118)$$

где A_{spf} определено в (116), а по индексам n, m везде предполагается суммирование.

Наконец, докажем соотношение в). Для этого нужно вычислить след, который стоит в формуле для келдышевской функции Грина (110). Это делается аналогично выше разобранному случаю:

$$
\begin{gathered}
Sp\left(\rho\{A(t),B(t')\}_+\right) = Z^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}\{e^{iHt}Ae^{-iHt}, e^{iHt'}Be^{-iHt'}\}_+\right) = \\
= Z^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} + e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) = \\
= Z^{-1}\sum_n \langle n|\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} + e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right)|n\rangle = \\
= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_n t}A_{nm}e^{-iE_m t}e^{iE_m t'}B_{mn}e^{-iE_n t'} + e^{-\beta E_n}e^{iE_n t'}B_{nm}e^{-iE_m t'}e^{iE_m t}A_{mn}e^{-iE_n t}\right) = \\
= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_n t}A_{nm}e^{-iE_m t}e^{iE_m t'}B_{mn}e^{-iE_n t'} + e^{-\beta E_m}e^{iE_m t'}B_{mn}e^{-iE_n t'}e^{iE_n t}A_{nm}e^{-iE_m t}\right) = \\
= Z^{-1}\sum_{n,m} A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right).
\end{gathered}
$$

Делаем преобразование Фурье, где используем Фурье-представление дельта-функции $\delta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\frac{dk}{2\pi}$:

$$
\begin{gathered}
G^K_{AB}(\omega) = \int G^K_{AB}(t-t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t') = \\
= -iZ^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n-E_m)(t-t')+i\omega(t-t')}\left(e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_m}\right)d(t-t') = \\
= -2\pi i\left(e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_m}\right)A_{nm}B_{mn}\delta(\omega+E_n-E_m), \qquad (119)
\end{gathered}
$$

что и требовалось.

Замечание: из полученных выражений для следов видно, что функции Грина зависят от разности времён при усреднении по равновесной матрице плотности. Это также можно показать с помощью свойства цикличности следа $Sp(AB) = Sp(BA)$. Например, для Келдышевской функции Грина:

$$
\begin{gathered}
G^K_{AB}(t,t') = -i\langle\{A(t)|B(t')\}_+\rangle = -iSp\left(\rho\{A(t),B(t')\}_+\right) = \\
= -iZ^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}\{e^{iHt}Ae^{-iHt}, e^{iHt'}Be^{-iHt'}\}_+\right) = \\
= -iZ^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} + e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) = \\
= \Big/ \text{переставляем во 2ом слагаемом } e^{-\beta H}e^{iHt'} = e^{iHt'}e^{-\beta H} \Big/ = \\
= -iZ^{-1}Sp\left(e^{-iHt'}e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}B + e^{iHt'}e^{-\beta H}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) = \\
= -iZ^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}e^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}B + e^{-\beta H}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}\right) = \\
= -iZ^{-1}Sp\left(e^{-\beta H}\left(e^{iH(t-t')}Ae^{-iH(t-t')}B + Be^{iH(t-t')}Ae^{-iH(t-t')}\right)\right) = \\
= -i\langle\{A(t-t')|B(0)\}_+\rangle
\end{gathered}
$$

и аналогично для остальных.

Доказательство флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ)

Используя полученные соотношения (115), (116), (118) и формулу Сохоцкого, получаем

$$G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega) = \int \left[\frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0} - \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x - i0}\right] dx = -2\pi i \int A_{spf}(x)\delta(\omega - x)dx = -2\pi i A_{spf}(x) = \\ = 2i \mathrm{Im} G^r_{AB}(\omega). \tag{120}$$

Домножим полученное выражение на $\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$ и упростим

$$\begin{aligned}
(G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = 2i\mathrm{Im}G^r_{AB}(\omega)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \\
= \Big/ (116),\ \delta(\omega - y)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \delta(\omega - y)\coth\left(\frac{\hbar y}{2T}\right), \hbar = 1 \Big/ = \\
= -2\pi i Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) A_{nm}B_{mn}\delta(\omega - E_m + E_n)\coth\left(\frac{-E_n + E_m}{2T}\right) = \\
= -2\pi i Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) A_{nm}B_{mn}\delta(\omega - E_m + E_n)\frac{e^{\beta(E_m - E_n)} + 1}{e^{\beta(E_m - E_n)} - 1} = \\
= -2\pi i Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) A_{nm}B_{mn}\delta(\omega - E_m + E_n)\frac{e^{\beta(-E_n)} + e^{\beta(-E_m)}}{e^{\beta(-E_n)} - e^{\beta(-E_m)}} = \\
= -2\pi i Z^{-1}\left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right) A_{nm}B_{mn}\delta(\omega - E_m + E_n) = G^K_{AB}(\omega)
\end{aligned}$$

Итак, мы получили требуемое утверждение:

$$G^K_{AB}(\omega) = (G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = 2i\mathrm{Im}G^r_{AB}(\omega)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right). \tag{121}$$

25. Представление Шредингера, Гейзенберга и взаимодействия. Операторы наблюдаемых и матрица плотности в этих представлениях. Теория линейного отклика. Выразить поправку к среднему от наблюдаемой $\hat{x}$ в момент времени t через запаздывающую формулу Грина оператора $\hat{x}$ и оператора взаимодействия $\hat{V}$. Пусть $\hat{V} = -\hat{y}f(t)$. Найти обобщенную восприимчивость α и выразить $\langle\hat{x}\rangle$ через α.

Представление Шредингера и Гейзенберга были еще в квантах на 3 курсе. Суть в том, у нас есть базис из состояний, система меняется, и можно смотреть на это так, что векторы стоят, а меняются операторы наблюдаемых (Гейзенберг), а можно наоборот: операторы остаются как были, а состояние меняется (Шредингер).

Представление взаимодействия – это промежуточный случай, когда меняется и оператор, и волновые функции, но единообразно. В этом представлении удобно работать с взаимодействием (например расчеты среднего поля для уравнения Шредингера для многих частиц).

Исправи
выход за
границы
таблицы

Табличка из вики: (https://en.wikipedia.org/wiki/Interaction_picture)

Evolution of:	Picture		
	Heisenberg	Interaction	Schrödinger
Ket state	constant	$\lvert\psi_I(t)\rangle = e^{iH_{0,S}t/\hbar}\lvert\psi_S(t)\rangle$	$\lvert\psi_S(t)\rangle = e^{-iH_St/\hbar}\lvert\psi_S(0)\rangle$
Observable	$A_H(t) = e^{iH_St/\hbar}A_Se^{-iH_St/\hbar}$	$A_I(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar}A_Se^{-iH_{0,S}t/\hbar}$	constant
Density matrix	constant	$\rho_I(t) = e^{iH_{0,S}t/\hbar}\rho_S(t)e^{-iH_{0,S}t/\hbar}$	$\rho_S(t) = e^{-iH_St/\hbar}\rho_S(0)e^{iH_St/\hbar}$

Что такое $H_{0,S}$?

Разделим Шредингеровский гамильтониан на 2 части: $H_{\mathrm{S}} = H_{0,\mathrm{S}} + H_{1,\mathrm{S}}$

$H_{0,S}$ – легко решаемая часть, например не зависящая от времени

$H_{1,S}$ – все остальное.

Понятно, что хорошо когда $H_{1,S}$ мелкое возмущение, а $H_{0,S}$ – система, которую мы уже умеем решать. Это подходит для **теории линейного отклика**

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

Переход от представления взаимодействия (I – Interaction) к представлению Шредингера (S – Schrödinger):

$$\begin{aligned}
&|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle \\
&\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\hat{A}_S(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar} \\
&\hat{V}_{\mathrm{I}}(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\hat{V}_S(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar} \\
&\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}
\end{aligned}$$

Про переходы между Гейзенбергом и Шредингером – см таблицу.

Для того чтобы найти **среднее от наблюдаемой** мы знаем два пути:

$$\langle A_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \langle\psi_{\mathrm{I}}(t)\,|A_{\mathrm{I}}(t)|\,\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \left\langle\psi_{\mathrm{S}}(t)\left|e^{-iH_{0,\mathrm{S}}t}e^{iH_{0,\mathrm{S}}t}A_{\mathrm{S}}e^{-iH_{0,\mathrm{S}}t}e^{iH_{0,\mathrm{S}}t}\right|\psi_{\mathrm{S}}(t)\right\rangle = \langle A_{\mathrm{S}}(t)\rangle$$

и $\langle A_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho_{\mathrm{I}}(t)A_{\mathrm{I}}(t)\right)$.

Выберем формулу покороче. Для этого найдем $\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)$:
(работаем с линейным откликом)

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = \left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\right]$$

Решим данное уравнение методом последовательных приближений. Малый параметр – взаимодействие.

$$\begin{aligned}
&i\hbar\tfrac{d}{dt}\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = \left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\right] \\
&\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0) + \tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0)\right]\mathrm{dt}'
\end{aligned}$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0) + \tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(0)\right] = \hat{\rho}_0 + \tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0\right]\mathrm{dt}'$$
$$\hat{\rho}_0 = Z^{-1}e^{-\hat{H}_0/T}, \text{ при } t_0 \to -\infty$$

Тогда:

$$\langle\hat{x}\rangle_t = \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t)\right) \approx \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}_0\hat{x}_I(t)\right) + \operatorname{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0\right]\hat{x}_I(t)\mathrm{dt}'\right)$$

Из теории возмущений в курсе квантовой механики мы знаем, что большая производная по времени возмущения может вызвать переходы, даже если само возмущение очень мало...

Здесь мы договоримся, что возмущение включается очень медленно, адиабатически. Будем далее считать время включения $t_0 = -\infty$.

Сейчас мы будем циклически переставлять подынтегральные величины чтобы получить усреднение по матрице плотности:

$$\operatorname{tr}\left(\tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0\right]\hat{x}_I(t)\mathrm{dt}'\right) = \operatorname{tr}\left(\tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right)\hat{x}_I(t)\mathrm{dt}'\right) =$$
$$= \operatorname{tr}\left(\tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(\hat{x}_I(t)\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{x}_I(t)\right)dt'\right) = \operatorname{tr}\left(\tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\rho}_0\left[\hat{x}_I(t), \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right]_{-}dt'\right) =$$
$$= \tfrac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left\langle\left[\hat{x}_I(t), \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right]_{-}\right\rangle\mathrm{dt}'$$

Подведем итоги. В линейном приближении по возмущению:

$$\langle\hat{x}\rangle_t = \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t)\right) \approx \langle\hat{x}\rangle_{V=0} + \tfrac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\left\langle\left\langle\hat{x}_I(t)|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right\rangle\right\rangle\mathrm{dt}'$$
$$\left\langle\left\langle\hat{x}_I(t)|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right\rangle\right\rangle = -i\theta(t-t')\left\langle\left[\hat{x}_I(t), \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right]_{-}\right\rangle_{\rho_0}$$

Таким образом, **поправка к среднему:**

$$\delta\hat{x}(t) = \hat{x}_I(t) - \langle\hat{x}\rangle_{\rho_0, V=0}$$
$$\langle\delta\hat{x}\rangle_t \approx \tfrac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\left\langle\left\langle\delta\hat{x}(t)|\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right\rangle\right\rangle\mathrm{dt}'$$

Это – **запаздывающая функция Грина**

Вернемся к специальному виду гамильтониана взаимодействия и выразим теперь $\hat{x}$ через **обобщенную восприимчивость** α

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

$$\langle\hat{x}\rangle_t \approx \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0} - \tfrac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle\langle\hat{x}_I(t)|\hat{x}_I(t')\rangle\rangle f(t')\mathrm{dt}' = \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t}\alpha(t,t')f(t')\mathrm{dt}'$$
$$-\alpha(t,t') = \tfrac{1}{\hbar}\langle\langle\hat{x}_I(t)|\hat{x}_I(t')\rangle\rangle = -\tfrac{i}{\hbar}\theta(t-t')\left\langle[\hat{x}_I(t), \hat{x}_I(t')]_{-}\right\rangle_{\rho_0}$$

Если матрица плотности равновесная (см. предыдущий билет условие для функций Грина №2): $-\alpha(t,t') = \langle\langle\hat{x}_I(t)|\hat{x}_I(t')\rangle\rangle = -\alpha(t-t')$

$$\langle\hat{x}\rangle_t \approx \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0} + \int^{t}\alpha(t-t')f(t')\mathrm{dt}'$$

Тогда:

$$-\alpha(t-t') = \frac{1}{\hbar}\langle\langle\hat{x}_I(t)|\hat{x}_I(t')\rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\left\langle[\hat{x}_I(t), \hat{x}_I(t')]_{-}\right\rangle_{\rho_0}$$

Чтобы получить удобный вид в фурье-пространстве, распишем:

$$\langle\hat{x}\rangle_t \approx \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha\left(t-t'\right) f\left(t'\right) \mathrm{d}t'$$
$$\delta\hat{x} = \hat{x} - \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0}$$
$$\langle\delta\hat{x}\rangle_t \approx \int_{-\infty}^{t} \alpha\left(t-t'\right) f\left(t'\right) \mathrm{d}t' = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha\left(t-t'\right) f\left(t'\right) \mathrm{d}t'$$

Подведем итоги: так как фурье от свертки это произведение образов...

$$\delta\hat{x} = \hat{x} - \langle\hat{x}\rangle_{\hat{V}=0}$$
$$\langle\delta\hat{x}\rangle_\omega = \alpha(\omega) f(\omega)$$

26. Диссипация энергии в теории линейного отклика. Показать, что мнимая часть обобщенной восприимчивости положительна на всех частотах в устойчивых системах. Найти обобщенную восприимчивость осциллятора с трением, на который действует внешняя сила $\boldsymbol{F}(t)$.

Рассмотрим диссипацию энергии

$$\frac{dE}{dt} = \overline{\frac{\partial H}{\partial t}}$$

$$\frac{dE}{dt} = -x\frac{\partial f}{\partial t}$$

$$\langle \hat{x} \rangle_t \approx \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha\left(t-t'\right) f\left(t'\right) \mathrm{d}t'$$

$$\langle \delta\hat{x} \rangle_\omega = \alpha(\omega) f(\omega)$$

$$q(t) = \frac{\partial E}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{V} \right\rangle = -\left\langle \hat{x}\frac{\partial}{\partial t} f(t) \right\rangle = -\langle \hat{x} \rangle_t \dot{f}(t)$$

где $f(t)$ в представлении Шредингера

$$\int_{-\infty}^{\infty} q(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} \delta q(t)dt = -\int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta\hat{x} \rangle_t \dot{f}(t)dt = -\int \langle \delta\hat{x} \rangle_{-\omega} \dot{f}(\omega)\frac{d\omega}{2\pi} =$$

$$= -\int \alpha(-\omega) f(-\omega)(-\mathrm{i}\omega) f(\omega)\frac{d\omega}{2\pi} = -i\int \omega\alpha(\omega)|f(\omega)|^2\frac{d\omega}{2\pi} =$$

$$= 2\int_0^{\infty} \omega|f(\omega)|^2 \mathrm{Im}\,\alpha(\omega)\frac{d\omega}{2\pi}$$

Диссипация энергии:

$$Q = \int_{-\infty}^{\infty} \delta q(t)dt = 2\int_0^{\infty} \omega|f(\omega)|^2 \mathrm{Im}\,\alpha(\omega)\frac{d\omega}{2\pi}$$

В устойчивых процессах тепло поглощается, то есть $Q > 0$. Тогда получаем, что устойчивая система удовлетворяет условию

$$\mathrm{Im}\alpha(\omega) > 0$$

Найти обобщенную восприимчивость осциллятора с трением, на который действует внешняя сила F(t). Суть этой задачи станет понятна через два билета, сначала прочитайте их.

Уравнение Ланжевена:

$$\dot{p} + \gamma\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) = 0$$

Спектральная плотность случайных сил:

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar\,\mathrm{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}$$

Линеаризуем уравнение:

$$\dot{p} + \gamma\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) = 0$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x}) = f(t)$$

Введем обозначение

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x}) = m\Omega^2$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x m\Omega^2 = f(t)$$

$$-m\omega^2\delta x_\omega - i\gamma\omega\delta x_\omega + \delta x_\omega m\Omega^2 = f_\omega$$

$$\delta x_\omega = \frac{f_\omega}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2} \Rightarrow \alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2}$$

Получили обобщенную восприимчивость.

Найдем флуктуацию координаты:

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \hbar\,\mathrm{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2T\,\mathrm{Im}(\alpha(\omega))/\omega$$

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \frac{2T\gamma}{m^2\left(\omega^2 - \Omega^2\right)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

27. Соотношения Крамерса-Кронига. Их доказательство. Флуктуационно - диссипативная теорема для обобщенной восприимчивости. Найти флуктуацию координаты осциллятора с трением в пределе высоких температур.

$$\alpha(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\alpha(\omega)\mathrm{e}^{-i\omega t}\frac{d\omega}{2\pi}\propto\theta(t),\quad \alpha(\omega)=\int_{0}^{\infty}\alpha(t)\mathrm{e}^{i\omega t}dt$$

Общие свойства обобщенной восприимчивости:

- $\alpha(\omega)$ не имеет особенностей в верхней полуплоскости
- $\alpha(-\omega^*)=\alpha^*(\omega)$
- $\alpha(i\omega'')=\alpha^*(i\omega'')$, на мнимой оси восприимчивость вещественна и монотонна,
- $\alpha(\omega)$ не имеет нулей в верхней полуплоскости
- $\alpha(\omega=0)=\alpha_0>0$

Пусть α' и α'' — действительная и комплексная части обобщенной восприимчивости соответственно.

Выведем соотношения Крамерса-Кронига:

- $\alpha'(\omega)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\xi)}{\xi-\omega}d\xi$
- $\alpha''(\omega)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha'(\xi)}{\xi-\omega}d\xi$

Рассмотрим

$$\int_C\frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0}d\omega$$

где C - верхняя полуплоскость, $\omega_0\in\mathbb{R}$

$$0=\int_C\frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0+i0}d\omega=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0+i0}d\omega=-i\pi\alpha\left(\omega_0\right)+P\int\frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0}d\omega$$

Также рассмотрим

$$\int_C\frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}d\omega$$

где C - верхняя полуплоскость, $\omega_0\in\mathbb{R}$

$$0=\int_C\frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}d\omega=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}d\omega=i\pi\alpha\left(\mathrm{i}\omega_0\right)$$

$$\alpha(i\omega)=\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\xi\alpha''(\xi)}{\omega^2+\xi^2}d\xi$$

Из этого получим:

$$\alpha'(\omega)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\xi)}{\xi-\omega}d\xi$$

$$\alpha''(\omega)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha'(\xi)}{\xi-\omega}d\xi$$

Найти флуктуацию координаты осциллятора с трением в пределе высоких температур.

Суть этой задачи станет понятна через один билет, сначала прочитайте его.

Уравнение Ланжевена:

$$\dot{p} + \gamma\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) = 0$$

Спектральная плотность случайных сил:

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}$$

Линеаризуем уравнение:

$$\dot{p} + \gamma\dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) = 0$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x}) = f(t)$$

Введем обозначение

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x}) = m\Omega^2$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x m\Omega^2 = f(t)$$

$$-m\omega^2\delta x_\omega - i\gamma\omega\delta x_\omega + \delta x_\omega m\Omega^2 = f_\omega$$

$$\delta x_\omega = \frac{f_\omega}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2} \Rightarrow \alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2}$$

Получили обобщенную восприимчивость.

Найдем флуктуацию координаты:

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2T \operatorname{Im}(\alpha(\omega))/\omega$$

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \frac{2T\gamma}{m^2\left(\omega^2 - \Omega^2\right)^2 + (\gamma\omega)^2}$$

В классическом пределе:

$$\left\langle\delta x^2\right\rangle = \int \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 4T\int_0^\infty \frac{\operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega}\frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega = 0) = \frac{T}{m\Omega^2}$$

28. Флуктуации под действием случайных сил в теории линейного отклика. Флуктуационно-диссипативная теорема и спектральная плотность флуктуаций случайных сил. На осциллятор с трением действуют случайные силы. Найти спектральную плотность их флуктуаций.

Флуктуационно-диссипативная теорема

Вспомним, что:

$$G_{AB}^{K}\left(t,t'\right)=-\tfrac{i}{\hbar}\operatorname{tr}\left(\rho_{\text{Gibbs}}\left\{A(t),B\left(t'\right)\right\}_{+}\right)=-\tfrac{i}{\hbar}\left\langle\left\{A(t),B\left(t'\right)\right\}_{+}\right\rangle$$
$$G_{AB}^{R}\left(t,t'\right)=-\tfrac{i}{\hbar}\theta\left(t-t'\right)\operatorname{tr}\left(\rho_{\text{Gibbs}}\left[A(t),B\left(t'\right)\right]_{-}\right)=-\theta\left(t-t'\right)\tfrac{i}{\hbar}\left\langle\left[A(t),B\left(t'\right)\right]_{-}\right\rangle=\left\langle\left\langle A(t)|B\left(t'\right)\right\rangle\right\rangle$$

Флуктуационно-диссипативная теорема:

$$G_{AB}^{K}(\omega)=2i\operatorname{Im}\left(G_{AB}^{R}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$$

Применим ее:

$$G_{xx}^{K}\left(t-t'\right)=-i\operatorname{tr}\left(\rho_{\text{Gibbs}}\left\{\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}\left(t'\right)\right\}_{+}\right)=-i\left\langle\left\{\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}\left(t'\right)\right\}_{+}\right\rangle$$
$$G_{xx}^{R}\left(t-t'\right)=-i\theta\left(t-t'\right)\operatorname{tr}\left(\rho_{\text{Gibbs}}\left[\hat{x}(t),\hat{x}\left(t'\right)\right]_{-}\right)=-\theta\left(t-t'\right)i\left\langle\left[\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}\left(t'\right)\right]_{-}\right\rangle=-\hbar\alpha\left(t-t'\right)$$

$$\left\langle\left\{\delta x(t),\delta x\left(t'\right)\right\}_{+}\right\rangle=2\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\operatorname{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)e^{-i\omega(t-t)}\frac{d\omega}{2\pi}=4\hbar\int_{0}^{\infty}\operatorname{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)e^{-i\omega(t-t)}\frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\left\langle(\delta x)^{2}(t)\right\rangle=2\hbar\int_{0}^{\infty}\operatorname{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\frac{d\omega}{2\pi}$$

В квазиклассическом пределе:

$$\left\langle\delta x^{2}(t)\right\rangle=2\hbar\int_{0}^{\infty}\operatorname{Im}(\alpha(\omega))\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\frac{d\omega}{2\pi}=\int_{0}^{\infty}\left(\delta x^{2}\right)_{\omega}\frac{d\omega}{2\pi}$$

Из соотношений Краменса Кронига (предыдущий билет), получаем:

$$\left\langle\delta x^{2}(t)\right\rangle=4T\int_{0}^{\infty}\frac{\operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega}\frac{d\omega}{2\pi}=T\alpha(\omega=0)$$

Флуктуации под действием случайных сил в теории линейного отклика

При включении взаимодействия, помимо известных сил, на систему действуют еще и случайные флуктуации этих сил. Рассмотрим флуктуации под действием случайных сил.

$$\langle\delta x(\mathrm{t})\rangle=\int\alpha\left(\mathrm{t}-\mathrm{t}'\right)f\left(\mathrm{t}'\right)dt'$$

Тут квадрат не должен быть внутри усреднения? Если нет то под следующей тудухой смотрите.

$$\langle\delta x(\mathrm{t})\rangle^{2}=\int\alpha\left(\mathrm{t}-\mathrm{t}'\right)\alpha\left(\mathrm{t}-\mathrm{t}''\right)\overline{f\left(\mathrm{t}'\right)f\left(\mathrm{t}''\right)}dt'dt''$$

$$\overline{f\left(\mathrm{t}'\right)f\left(\mathrm{t}''\right)}=\int\left(f^{2}\right)_{\omega}e^{-i\omega\left(t'-t''\right)}\frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\langle\delta x(\mathrm{t})\rangle^{2}=\int\alpha\left(\omega_{1}\right)\alpha\left(\omega_{2}\right)\left(f^{2}\right)_{\omega}e^{-i\omega_{1}(\mathrm{t}-\mathrm{t})}e^{-i\omega_{2}\left(t-t''\right)}e^{-i\omega\left(t'-t''\right)}\frac{d\omega_{1}}{2\pi}\frac{d\omega_{2}}{2\pi}\frac{d\omega}{2\pi}dt'dt''=$$

$$=\int|\alpha(\omega)|^{2}\left(f^{2}\right)_{\omega}\frac{d\omega}{2\pi}$$

При этом должна выполняться ФДТ:

Эта штука приравнивается к предыдущей. почему <dx>^2 = <dx^2>

$$\left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

В результате получаем

$$\int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2} \xrightarrow{\coth(x)=1/x+O(x)} \frac{2T \operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega|\alpha(\omega)|^2}$$

Выводы:

$$\left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}$$

$$\overline{f\left(\mathrm{t}'\right) f\left(\mathrm{t}''\right)} = \int \left(f^2\right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi}$$

На осциллятор с трением действуют случайные силы. Найти спектральную плотность их флуктуаций.

Уравнение Ланжевена:

$$\dot{p} + \gamma \dot{x} + \frac{\partial}{\partial t}(U(x) - f(t)x) = 0$$

Спектральная плотность случайных сил:

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}$$

Линеаризуем уравнение:

$$\dot{p} + \gamma \dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) = 0$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(\bar{x}) = f(t)$$

Введем обозначение

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} U(\bar{x}) = m\Omega^2$$

$$m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x m\Omega^2 = f(t)$$

$$-m\omega^2 \delta x_\omega - i\gamma\omega\delta x_\omega + \delta x_\omega m\Omega^2 = f_\omega$$

$$\delta x_\omega = \frac{f_\omega}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2} \Rightarrow \alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2}$$

Получили обобщенную восприимчивость.

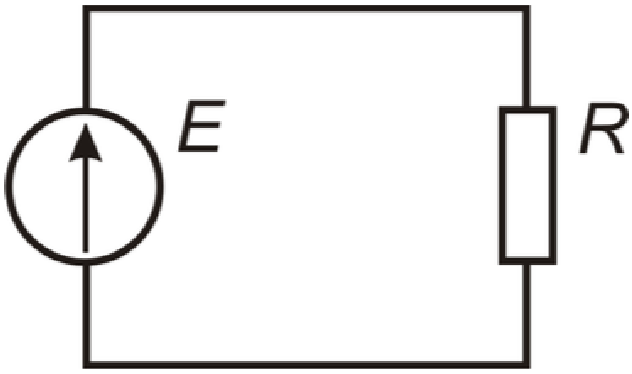
В классическом пределе

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{2T \operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega|\alpha(\omega)|^2} = 2T\gamma$$

$$\overline{f(t) f\left(t'\right)} = \int e^{-i\omega t} \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 2T\gamma\delta\left(t - t'\right)$$

29. Флуктуации под действием случайных сил в теории линейного отклика. Флуктуационно-диссипативная теорема и спектральная плотность флуктуаций случайных сил. Вывести формулу найквиста для тепловых флуктуаций напряжения на резисторе.

Этот билет почти полностью повторяет предыдущий, за исключением последнего вопроса.
Вывести формулу Найквиста для тепловых флуктуаций напряжения на резисторе.



Джоулево тепло:

$$Q = J\varepsilon$$

$$Q(t) = \frac{\partial E}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{V} \right\rangle = -\left\langle \hat{x}\frac{\partial}{\partial t}f(t) \right\rangle = -\langle \hat{x}\rangle_t \dot{f}(t)$$

$$J = \langle \hat{x}\rangle_t$$
$$\varepsilon = -\dot{f}(t)$$

$$\varepsilon_\omega = i\omega f_\omega = Z_\omega J_\omega$$
$$J_\omega = \frac{i\omega}{Z_\omega} f_\omega$$
$$\langle \hat{x}\rangle_\omega = \alpha_\omega f_\omega \Rightarrow \alpha_\omega = \frac{i\omega}{Z_\omega}$$

Из ФДТ:

$$\left\langle \delta x^2 \right\rangle = \int \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\operatorname{Im}\alpha_\omega = \operatorname{Im}\frac{i\omega}{Z_\omega} = \frac{\omega}{|Z_\omega|^2} R_{\omega_\omega}$$

$$\overline{\left\langle \delta x^2 \right\rangle} = \int \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\left(\delta J^2\right)_\omega = \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$$

В классическом пределе:

$$\left(\delta J^2\right)_\omega = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow \frac{2TR_\omega}{|Z_\omega|^2} \to \frac{2T}{R}$$

Это и есть формула Найквиста.

30. Теория линейного отклика. Тождество Кубо. Альтернативная форма записи обобщенной восприимчивости (без коммутаторов). Высокотемпературный предел обобщенной восприимчивости.

Замечания: Я не ставлю шляпки над операторами, чтобы не усложнять себе жизнь. Формулы и так должна быть понятны. С этой же целью $\hbar = 1$. Когда дело доходит до представления взаимодействия, индекс I я не пишу, так как все операторы и так в нем записаны и это не должно приводить к путанице. Все вопросы, пожелания, предложения, угрозы писать в личку.
Используемая литература

- Представление взаимодействия очень подробно описано в книге Mahan G. D. «Many-Particle Physics», пункт 2.1, стр. 82.
- Про матрицу плотности в представлении взаимодействия подробно написано в книге Колоколов И. В. «Физическая кинетика», пункт 10.2, стр. 100 (сто).
- Про адиабатическое включение взаимодействия можно прочитать в АГД (Абрикосов, Горьков, Дзялошинский) «Методы квантовой теории поля в статистической физике», стр. 82 (но лучше не надо).

Что такое представление взаимодействия? Измеримыми в квантовой механике являются средние от операторов. Описывать изменение средних можно двумя способами:
Представление Шредингера: Состояния зависят от времени, их эволюция описывается УШ:

$$|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle\,, \quad i\partial_i\,|\psi(r)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle\,.$$

Операторы же от времени не зависят. Это уравнение имеет тривиальное решение:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}\,|\psi(0)\rangle\,.$$

Тогда для эволюции среднего получаю:

$$\langle O\rangle\,(t) = \langle\psi(t)|\,O\,|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\,e^{iHt}Oe^{-iHt}\,|\psi(0)\rangle\,.$$

Представление Гейзенберга: Пусть теперь состояния не зависят от времени, от времени зависят только операторы, причем для системы с гамильтонианом H их зависимость описывается как

$$O(t) = e^{iHt}O(0)e^{-iHt}.$$

Посчитаю среднее в таком предположении:

$$\langle O\rangle\,(t) = \langle\psi|\,O(t)\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,e^{iHt}O(0)e^{-iHt}\,|\psi\rangle\,.$$

Из различных подходов получен один и тот же результат.
Представление взаимодействия: Рассмотрю теперь систему с гамильтонианом

$$H = H_0 + V.$$

Какое бы из двух представлений, описанных выше, я не выбрал, заранее знаю, что получу

$$\langle O\rangle\,(t) = \langle\psi(0)|\,e^{i(H_0+V)t}Oe^{-i(H_0+V)t}\,|\psi(0)\rangle\,.$$

Рассматриваю общий случай, в котором $[H_0, V] \neq 0$, то есть

$$e^{H_0+V} \neq e^{H_0}e^{V}.$$

Тривиальными преобразованиями, выражение можно переписать как

$$\langle O\rangle(t) = \langle\psi(0)| e^{iHt} O e^{-iHt} |\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)| e^{iHt} e^{-iH_0 t} \left(e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}\right) e^{iH_0 t} e^{-iHt} |\psi(0)\rangle .$$

Оказывается, к такому же результату для среднего можно было прийти, сказав, что от времени зависят как состояния, так и операторы. Причем, зависимость эта имеет следующий вид:

$$|\psi(t)\rangle = e^{iH_0 t} e^{-iHt} |\psi(0)\rangle , \quad O(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t}.$$

Эволюция операторов происходит за счет части H_0 гамильтониана. Исследую зависимость состояний от времени. Для этого продифференцирую $|\psi(t)\rangle$ по времени:

$$\partial_t |\psi(t)\rangle = ie^{iH_0 t}(H_0 - H)e^{-iHt} |\psi(0)\rangle = -ie^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} \left(e^{iH_0 t} e^{-iHt} |\psi(0)\rangle\right) = -iV(t) |\psi(t)\rangle .$$

Таким образом, эволюция состояний описывается уравнением типа Шредингера, где вместо гамильтониана стоит его часть V. Осталось научиться решать данное уравнение. Для этого, определю оператор эволюции как

$$U(t) = e^{iH_0 t} e^{-iHt}, \quad |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle .$$

Еще если интересует эволюция не от $t = 0$, а от $t = t_0$, удобно определить S-матрицу как

$$S(t, t_0) = U(t)U^\dagger(t_0), \quad |\psi(t)\rangle = S(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle .$$

Очевидно, что $U(0) = 1$. Составлю дифференциальное уравнение на этот оператор. Его дифференцирование дает:

$$\partial_t U(t) = ie^{iH_0 t}(H_0 - H)e^{-iHt} = -i\left(e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}\right) e^{iH_0 t} e^{-iHt} = -iV(t)U(t).$$

Для решения этого уравнения, проинтегрирую его от 0 до t:

$$U(t) - U(0) = -i\int_0^t dt_1\, V(t_1)U(t_1).$$

Подставляя $U(0)$ и перенеся его в правую часть:

$$U(t) = 1 - i\int_0^t dt_1\, V(t_1)U(t_1).$$

Далее решаю уравнение итеративно. То есть подставляю вместо $U(t_1)$ в правой части выражение через интеграл. Это позволяет получить выражение для $U(t)$ в виде ряда:

$$U(t) = 1 - i\int_0^t dt_1\, V(t_1) + (-i)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, V(t_1)V(t_2) + \ldots$$

В общем виде же

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{n-1}} dt_n\, V(t_1)V(t_2)\ldots V(t_n).$$

Оказывается, это выражение можно записать в удобной форме, если ввести так называемый оператор T-упорядочения. Он упорядочивает операторы, зависящие от времени, отправляя самые ранние моменты времени вправо. Например:

$$T\left[V(t_1)V(t_2)\right] = \theta(t_1 - t_2)V(t_1)V(t_2) + \theta(t_2 - t_1)V(t_2)V(t_1).$$

Если взглянуть на полученный ряд еще раз, можно обнаружить, что операторы уже упорядочены, так как $t_1 > t_2 > \dots$. Тут на помощь приходит свойство T-упорядочения, которое позволяет переставлять операторы в его аргументе как угодно, так как под действием упорядочения, они все равно будут хронологически упорядочены. Выражение для ряда можно тождественно переписать:

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \, T\left[V(t_1)V(t_2)\dots V(t_n)\right].$$

Осталась последняя деталь: интегрировать до t_n не очень удобно. Нетрудно заметить, что интегрирование ведется по симплексу (если вас пугают эти страшные слова, просто посмотрите в книгу Махана, где проделаны выкладки для первых нескольких порядков). Используя то, что операторы можно переставлять под аргументом упорядочения, интегрирование по симплексу могу заменить на интегрирование по многомерному кубу. (то есть все интегралы, которые шли до t_1, t_2 и т.д., продлить до t). Однако, таким образом, я учту намного большую область. Нетрудно показать, что полученный интеграл будет в $n!$ больше требуемого. Учтя это, записываю итоговый ответ:

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t} dt_2 \dots \int_0^{t} dt_n \, T\left[V(t_1)V(t_2)\dots V(t_n)\right].$$

Это выражение называют T-экспонентой и записывают как

$$U(t) = T \exp\left[-i \int_0^t dt_1 \, V(t_1)\right].$$

Выражение для S-матрицы имеет вид

$$S(t, t_0) = T \exp\left[-i \int_{t_0}^t dt_1 \, V(t_1)\right].$$

Вопрос: Чего мы добились?
Ответ: Мы смогли перейти к представлению, в котором эволюция состояния происходит за счет части V гамильтониана, а эволюция операторов — за счет части H_0.
Вопрос: Зачем нам это нужно?
Ответ: Это помогает писать теорию возмущений в случае, если мы знаем точное решение для гамильтониана H_0.
Матрицы плотности и представление взаимодействия. Рассмотрю описание эволюции матрицы плотности в представлении взаимодействия. Если вернуться к истокам и вспомнить определение, можно получить, что

$$\rho(t) = \sum_{nm} |\psi_n(t)\rangle \, \rho_{nm} \, \langle \psi_m(t)| = S(t, t_0) \left(\sum_{nm} |\psi_n(t_0)\rangle \, \rho_{nm} \, \langle \psi_m(t_0)| \right) S^{\dagger}(t, t_0) = S(t, t_0)\rho(t_0)S^{\dagger}(t, t_0).$$

Чтобы получить уравнение, которому удовлетворяет матрица плотности в представлении взаимодействия, продифференцирую ее по времени:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(t) &= \left[\left(\partial_t S(t, t_0)\right) \rho(t_0) S^{\dagger}(t, t_0) + S(t, t_0)\rho(t_0) \left(\partial_t S(t, t_0)\right)^{\dagger} \right] = \\ &= \left[-iV(t)\hat{\rho}(t) + i\rho(t)V(t)\right] = i\left[\rho(t), V(t)\right]. \end{aligned}$$

Постановка задачи: Далее H_0 будет рассматриваться как невозмущенный гамильтониан, а V — как возмущение. Задача будет рассматриваться в случае адиабатически медленного включения взаимодействия. Иными словами, в бесконечном прошлом возмущения не было, или $V(-\infty) = 0$ + система находилась в термодинамическом равновесии. Это нужно для того, чтобы теорию возмущений можно было свести к эволюции из бесконечно далекого момента времени. Вообще это удобно при построении диаграммной техники, но здесь от этого нужно понимать только то, что везде дальше $t_0 = -\infty$. гамильтониан H_0 не зависит от времени. Доказать, что в линейном порядке по возмущению,

$$\rho_I(t) \approx \rho_0 + \frac{1}{i}\int\limits_{-\infty}^{t} dt' \, \left[V_I(t'), \rho_0\right], \quad \rho_0 = \frac{1}{Z}e^{-\beta H_0}, \quad \beta = \frac{1}{T},$$

можно двумя способами, продемонстрирую каждый из них.
Первый способ: Действуем, исходя из определения, и раскладываем экспоненты:

$$\rho(t) = S(t,-\infty)\rho_0 S(-\infty,t) = T\exp\left(-i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right)\rho_0 T\exp\left(i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right) \approx$$
$$\approx \left(1 - i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right)\rho_0\left(1 + i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right) \approx \rho_0 - i\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1\, \left[V(t_1), \rho_0\right].$$

Второй способ: Проинтегрируем дифференциальное уравнение от $-\infty$ до t:

$$\rho(t) = \rho_0 + i\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1\, \left[\rho(t_1), V(t_1)\right].$$

Далее уравнение можно решить в каком угодно порядке точности методом последовательных приближений. Меня интересует первый порядок по возмущению. Так как V уже в правой части присутствует, первый шаг метода последовательных приближений эквивалентен замене $\rho(t_1)$ на ρ_0:

$$\rho(t) = \rho_0 + i\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1\, \left[\rho_0, V(t_1)\right].$$

Таким образом, получился один и тот же результат двумя разными способами (sick!).
Формула Кубо. Теперь найду выражение для эволюции среднего для произвольного оператора:

$$\langle x\rangle(t) = \mathrm{Tr}\left[\rho(t)x(t)\right] =$$
$$= \mathrm{Tr}\left[S(t,-\infty)\rho_0 S(-\infty,t)x(t)\right] \approx \mathrm{Tr}\left[\left(1 - i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right)\rho_0\left(1 + i\int_{-\infty}^{t} dt_1\, V(t_1)\right)x(t)\right] \approx$$
$$\approx \mathrm{Tr}\left(\rho_0 x(t)\right) + i\,\mathrm{Tr}\left\{\int_{-\infty}^{t} dt_1\, \left[\rho_0 V(t_1)x(t) - V(t_1)\rho_0 x(t)\right]\right\} = \langle x\rangle_{\rho_0}(t) - i\int\limits_{-\infty}^{t} dt_1 \Big\langle \left[x(t), V(t_1)\right] \Big\rangle_{\rho_0} =$$
$$= \langle x\rangle_{\rho_0}(t) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt_1\, \langle\langle x(t)|V(t_1)\rangle\rangle, \quad \langle\langle x(t)|V(t_1)\rangle\rangle = -i\theta(t-t_1)\Big\langle \left[x(t), V(t_1)\right] \Big\rangle_{\rho_0}.$$

Чтобы осознать результат, потребуется приложить определенное умственное усилие. Получилась почти формула Кубо. Пусть ставится задача о поиске обобщенной восприимчивости. А именно, пусть приложено некоторое (пусть однородное) поле $f(t)$. Пусть имеются две измеримые величины $\hat{x}(t)$ и $\hat{y}(t)$. Пусть приложенное поле действует на систему посредством величины $\hat{y}(t)$, то есть возмущение имеет вид

$$\hat{V} = -f(t)\hat{y}(t).$$

Можно сразу привести пример: если $f(t)$ — электрическое поле, то $\hat{y}(t)$ — оператор плотности заряженных частиц. Нас интересует изменение величины $\hat{x}(t)$, в момент времени t, вызванное приложенным полем $f(t)$. Ответ, вообще говоря, зависит от значений поля $f(t)$ во все моменты времени в прошлом. Поэтому, в общем случае, ответ записывается как

$$\delta x(t) = \int dt_1\, f(t_1)\chi_{xy}(t, t_1).$$

Величина $\chi_{xy}(t, t_1)$ называется обобщенной восприимчивостью. Вернусь теперь к полученному ранее уравнению и подставлю $V(t) = -f(t)y(t)$. Это приводит к

$$\delta x(t) = i\theta(t - t_1) \int dt_1\, f(t_1) \Big\langle\, [x(t), y(t_1)]\, \Big\rangle_{\rho_0}.$$

Сравнивая это выражение с определением обобщенной восприимчивости, прихожу к формуле Кубо:

$$\chi_{xy}(t, t_1) = i\theta(t - t_1) \Big\langle\, [x(t), y(t_1)]\, \Big\rangle_{\rho_0}.$$

Стоит также отметить, что $\chi_{xy}(t, t_1)$ всегда равна нулю при $t_1 > t$, так как система, реагируя на внешнее воздействие, не может знать каким оно будет в моменты времени, которые еще не наступили (свойство причинности).

Альтернативная форма записи обобщенной восприимчивости (без коммутаторов). Высокотемпературный предел обобщенной восприимчивости

Дописать

31. Формула Кубо для проводимости. Оператор обращения времени в квантовой механике. Доказать соотношение Онзагера для тензора проводимости.

Литература

1. Л97 Введение в теорию кинетических уравнений: Учебное пособие/ И. И. Ляпилин. Екатеринбург: УГТУУПИ, 2004. 332 с. ISBN5-321-00053-0;

2. Перезентация (лекция) 11.

3. Давыдов А. С. Квантовая механика: учеб. пособие. — 3 изд., стереотипное. — СПб.: БВХ-Петербург, 2011. — 704 с.:ил.—(Учебная литература для вузов) ISBN 978-5-9775-0548-2

Формула Кубо для проводимости [1, раздел 5.4]

В качестве примера использования метода Кубо рассмотрим влияние на систему заряженных частиц включения однородного в пространстве переменного электрического поля, периодического во времени, которому соответствует оператор

$$\hat{H}_1(t) = -e\sum_i \boldsymbol{r}_i \boldsymbol{E}(t),$$

где e - заряд частицы, $\boldsymbol{r}_i$ - радиус-вектор её положения (имеем в виду, что $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$). Поле задано как: $\boldsymbol{E}(t) = \boldsymbol{E}_0 e^{(i\omega+\varepsilon)t}$. Малый параметр ε введен для того, чтобы $\boldsymbol{E} \to 0$ при $t \to -\infty$.

Под влиянием внешнего возмущения $\hat{H}_1(t)$ в соответствии с обозначением $\langle \dots \rangle_0 = \int \dots f^{(0)} d\Gamma$ системе возникает электрический ток:

$$\langle J_k \rangle = \int\limits_{-\infty}^{t} \frac{1}{i\hbar} \left\langle [J_k(t), \hat{H}_1(t', t')] \right\rangle_0 dt',$$

где $J_k(t) = \sum\limits_i e\dot{r}_{ik}(t)$ — оператор электрического тока, $\dot{r}_i$ — компонента k оператора скорости i-ой частицы. Постоянное слагаемое $\langle J_k \rangle_0 = 0$, поскольку в статистическом равновесии средний ток равен нулю.

Определяя электрическую проводимость как коэффициент пропорциональности между плотностью тока и средним полем в среде имеем:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar} \int\limits_{-\infty}^{0} e^{-i\omega t + \varepsilon t} \mathrm{Sp}([P_\beta(t), \rho_0] J_\alpha) dt,$$

где $\boldsymbol{P}(t) = \sum\limits_i e\boldsymbol{r}_i$ - вектор поляризации.

Воспользовавшись тождеством Кубо, согласно которому

$$[P_\beta, \rho_0] = -i\hbar\rho_0 \int\limits_0^\beta e^{\lambda\hat{H}} \dot{P}_\beta(t) e^{-\lambda\hat{H}} d\lambda,$$

получаем:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \int\limits_0^{+\infty}\int\limits_0^\beta e^{-\varepsilon t} e^{i\omega t} \left\langle e^{\lambda\hat{H}} J_\beta(t) e^{-\lambda\hat{H}} J_\alpha(t) \right\rangle_0 d\lambda dt = \int\limits_0^{+\infty}\int\limits_0^\beta e^{-\varepsilon t} e^{i\omega t} \left\langle J_\beta J_\alpha(t + i\hbar\lambda) \right\rangle_0 d\lambda dt$$

В классическом случае $\hbar \to 0$ для тензора проводимости имеем:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \beta \int\limits_0^{+\infty} e^{-\varepsilon t} e^{i\omega t} \left\langle J_\beta J_\alpha(t) \right\rangle_0 dt.$$

Следует помнить, что предельный переход $\varepsilon \to 0$ совершается после термодинамического перехода $V \to 0$ Такая последовательность предельного перехода соответствует наложению условия причинности на решение уравнения Лиувилля.

Доказать соотношение Онзагера для тензора проводимости [2, слайд 115]

У лектора в презентации написана всего одна формула. В наших обозначениях она будет выглядеть вот так:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega \to 0) = \int\limits_0^{+\infty} \int\limits_0^{\beta} e^{-\varepsilon t} \left\langle J_\beta J_\alpha(t + i\hbar\lambda) \right\rangle_0 d\lambda dt = \int\limits_0^{+\infty} I_{\alpha\beta}(t) e^{-\varepsilon t} dt,$$

$$I_{\alpha\beta}(t) = \int\limits_0^{\beta} \left\langle J_\beta J_\alpha(t + i\hbar\lambda) \right\rangle_0 d\lambda$$

Оператор обращения времени в квантовой механике [3, §119]

По отношению к операции обращения времени, $t \to -t$ все физические величины делятся на два класса. Первые не изменяются при обращении времени (координата, полная энергия, кинетическая энергия...), вторые содержат время в нечётной степени (скорость, импульс, угловой момент...).

Рассмотрим уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_a}{\partial t} = H\psi_a,$$

определяющее изменение с течением времени некоторого состояния ψ_a. Обозначим через ψ_{-a} волновую функцию состояния, которое получится из состояния ψ_a путём обращения времени. В состоянии, описываемом функцией ψ_{-a} все физические величины первого класса имеют те же значения, что и в состоянии ψ_a, а физические величины второго класса имеют другой знак.

Перейдём к отысканию оператора обращения времени $\hat{\Theta}$, преобразующего волновую функцию ψ_a в ψ_{-a}. По определению функция ψ_{-a} удовлетворяет уравнению Шрёдингера:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_{-a}}{\partial t} = H\psi_{-a},$$

так как оператор H инвариантен относительно обращения времени. Рассмотрим уравнение, комплексно сопряжённое уравнению Шрёдингера на функцию ψ_a:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi_a^*}{\partial t} = H^* \psi_a^*.$$

Если имеется некоторые унитарный оператор $\hat{O}$, удовлетворяющий условию

$$\hat{O} H^* = H \hat{O}, \quad \hat{O}^+ \hat{O} = \mathrm{Id}, \tag{122}$$

то, действуя на обе части комплексно сопряжённого уравнения оператором $\hat{O}$, мы получим:

$$-i\hbar \frac{\partial (\hat{O}\psi_a^*)}{\partial t} = H\hat{O}\psi_a^*$$

Сравнив полученное уравнение с уравнением на ψ_{-a}, убедимся, что

$$\psi_{-a} = \hat{O}\psi_a^* = \hat{O}\hat{K}\psi_a = \hat{\Theta}\psi_a.$$

Таким образом, оператор обращения времени $\hat{\Theta}$, преобразующий функцию ψ_a в ψ_{-a} имеет вид

$$\hat{\Theta} = \hat{O}\hat{K},$$

где $\hat{K}$ — оператор комплексного сопряжения, а $\hat{O}$ — унитарный оператор, удовлетворяющий операторному равенству $\hat{O}H^* = H\hat{O}$.

Оператор комплексного сопряжения $\hat{K}$ является антилинейным оператором. Примеры действия этого оператора:

$$\hat{K}\sum a_i\psi_i = \sum a_i^*\hat{K}\psi_i; \quad \left|\left\langle \hat{K}\psi|\hat{K}\Phi\right\rangle\right| = |\langle\psi^*|\Phi^*\rangle| = |\langle\psi|\Phi\rangle|.$$

32. Теория открытых систем. Редуцированная матрица плотности. Операторы Крауса. Уравнение Линдблада. Уравнение Линдблада для наблюдаемых. Привести пример ур. Линдблада для спина-1/2 или двухуровневой системы.

Операторы Крауса и весь staff из этого билета постоянно используется для описания открытых квантовых систем. Дело в том, что эволюция квантовой системы, взаимодействующей с внешней средой — другой квантовой системой, называемой обычно термостатом; уже не описывается унитарной эволюцией. Мы вынуждены прибегнуть к описанию состояний с помощью матриц плотности и вполне положительных отображений. Судя по устройству лекций на вполне положительных отображениях останавливаться не нужно, вместо этого я напомню важные места с частичным следом и т.п.
Тут будет много воды, но читать это должно быть легче, чем презентации дорогого Лектора)))

Частичный след, матрицы плотности подсистемы, редуцированная матрица плотности

Мы переходим от формализма bra- и ket-векторов к матрицам плотности. Для состояния $|\psi\rangle$ матрица плотности определяется $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, очевидно, что отображения такого вида биективны с точностью до *незначащей* общей фазы (состояния $|\psi\rangle$ и $e^{i\varphi}|\psi\rangle$ физически неразличимы...). Состояния, которые можно записать как $|\psi\rangle\langle\psi|$ для некоторого ψ называются *чистыми*, остальные - *смешанными*.
Если рассмотреть свойства матриц плотности чистых состояний то мы увидим $\rho^\dagger = \rho$, $\mathrm{tr}\{\rho\} = 1$, $\rho \geq 0$. **Эти три свойства станут новым определением состояния квантовой системы.** Классический пример смешанного состояния — $\frac{I}{\mathrm{tr}\, I}$[1]. Проверить состояние на чистоту можно так: $\mathrm{tr}(\rho^2) = 1 \Leftrightarrow \rho$ — чистое состояние.

Любое смешанное состояние можно представить суммой чистых: $\rho = \sum_\lambda \lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|$ (спектральное разложение..)

Вычисление средних:

Рассмотрим как вычисляются средние для чистых состояний: $\overline{A} = \langle\psi| A |\psi\rangle = \mathrm{tr}\{|\psi\rangle\langle\psi| A\}$, что легко доказать взяв базис, первым вектором которого является ψ, и воспользоваться инвариантностью следа.
Аналогично (это можно увидеть разложив смешанное состояние в сумму чистых) вычисляются средние величины для смешанных состояний, т.е. $\overline{A} = \mathrm{tr}\{\rho A\}$.

Мне кажется, что лектор на этом вообще не останавливался, полагая это известным из квантовой механики, поэтому расписал ± подробно, на всякий случай..

Наконец, перейдем к задаче, которой посвящен весь билет: рассматривается взаимодействующие квантовые системы: одна из них относительно «простая» (мало степеней свободы — низкая размерность пространства) с индексом s и резервуар с индексом r. Резервуар может иметь размерность Гильбертова пространства, например, 10^6. Системы взаимодействуют по гамильтониану:

$$H = \underset{\text{гамильтониан системы}}{H_s} + \underset{\text{гамильтониан резервуара}}{H_r} + \underset{\text{гамильтониан взаимодействия}}{H_{sr}}.$$

Более строго (и чуть более понятно) формулу можно написать так:

$$H = H_s \otimes I_r + I_s \otimes H_r + H_{sr},$$

[1] I - единичный оператор: $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$

а их общая матрица плотности ρ будет эволюционировать под действием общего гамильтониана по стандартному правилу:

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle \mapsto ih\partial_t\rho = [H, \rho]\,^{2},$$

возникает проблема — из-за гамильтониана взаимодействия переменные системы и резервуара запутываются, так что даже если при $t = 0$ матрица плотности представляла просто тензорное произведение состояний системы и резервуара $\rho(0) = \rho_s \otimes \rho_r$, то потом они перепутаются и разделить на подобное произведение матрицу плотности будет нельзя. Тем не менее, средние значения для системы всё еще интересны, т.е. задача состоит в вычислении $\overline{A_s \otimes I_r}$ в нужный момент времени. **И нет никакого желания вычислять эволюцию всего (огромного) оператора ρ**

Рассмотрим среднее:

$$\overline{A_s \otimes I_r} = \operatorname{tr}\{(A_s \otimes I_r)\rho\} = \operatorname{tr}\left\{(A_s \otimes I_r)\sum_{km,\alpha\beta} \rho_{km,\alpha\beta} |k\rangle |\alpha\rangle \langle m| \langle\beta|\right\},$$

здесь латинскими буквами обозначены степени свободы системы, а греческими — резервуара. Матрица плотности просто разложена по своим матричным элементам. Выбирая тот же базис вычисляем след:

$$\overline{A_s \otimes I_r} = \sum_{km,\alpha\beta} \rho_{km,\alpha\beta} \langle m| \langle\beta| A_s \otimes I_r |k\rangle |\alpha\rangle = \sum_{km,\alpha\beta} \rho_{km,\alpha\beta} \langle m| A_s |k\rangle \langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{km,\alpha} \rho_{km,\alpha\alpha} \langle m| A_s |k\rangle$$

Видим, что введение нового оператора: $\rho_s = \sum_{km,\alpha} \rho_{km,\alpha\alpha} |k\rangle\langle m|$ позволяет вычислять средние очень просто. Это и называется **приведенной матрицей плотности**. Пишут:

$$\rho_s = \operatorname{tr}_r \rho,$$

tr_r называется **частичным следом** по системе r, т.е. по резервуару. Как уже было показано:

$$\operatorname{tr}_r \rho = \sum_\alpha \Big(I_s \otimes \langle\alpha|\Big)\rho\Big(I_s \otimes |\alpha\rangle\Big),$$

иногда пишут $\operatorname{tr}_r \rho = \sum_\alpha \langle\alpha| \rho |\alpha\rangle$, опуская единичный оператор. Отсюда следует:

$$\operatorname{tr}\{\operatorname{tr}_r(\rho)A\} = \overline{A} \Rightarrow \operatorname{tr}\{\operatorname{tr}_r \rho\} = \operatorname{tr}\{\rho\}.$$

Т.е. частичный след сохраняет след. Нетрудно видеть, что он также сохраняет положительную определенность и эрмитовость. Значит частичный след от состояния — состояние! Более того:

$$\operatorname{tr}_r(A_s \otimes B_r) = \operatorname{tr}\{B_r\}A_s \quad \forall A_s, B_r.$$

Т.е. частичный след разделяет составную систему на подсистемы... Проблема в запутанных состояниях, у них $\rho \neq \operatorname{tr}_r(\rho) \otimes \operatorname{tr}_s(\rho)$, так что обращаться с ним нужно осторожно.

Операторное уравнение на эволюцию квантовой системы

Эта часть хорошо разобрана на слайдах (13 лекция), я перепишу с комментариями, слава mathpix! Пусть в начальный момент времени состояние сепарабельно, т.е. $\rho(0) = \rho_s(0)\rho_r(0)$, причем $\rho_r(0) = |in\rangle\langle in|$ (initial). Гамильтониан индуцирует эволюцию: $\mathcal{U}(t) = \exp\left\{\int -i\hbar^{-1} H \,\mathrm{d}\,\tau\right\}$. Тогда по определению матрица плотности системы:

$$\begin{aligned}\rho_s(t) &= \operatorname{tr}_r\Big(\mathcal{U}(t)\rho_s(0)\rho_r(0)\mathcal{U}^\dagger(t)\Big) = \\ &= \operatorname{tr}_r\Big(\mathcal{U}(t)|in\rangle \rho_s(0) \langle in| \mathcal{U}^\dagger(t)\Big)\end{aligned}$$

[2]это даже дебил докажет

Выберем некоторый базис в системе r и напишем частичный след:

$$\rho_s(t) = \sum_k \langle k|\mathcal{U}(t)\,|in\rangle\,\rho_s(0)\,\langle in|\mathcal{U}(t)\,|k\rangle = \sum_k M_k \rho_s M_k^\dagger \tag{123}$$

Операторы

$$M_k(t) = \Big(I_s \otimes \langle k|\Big)\mathcal{U}\Big(I_r \otimes |in\rangle\Big)$$

называются операторами Крауса, и описывают **неунитарную** динамику подсистемы. Это также называется представлением операторной суммы для эволюции подсистемы. Очевидное из определения свойство (поэтому-то и надо писать единичные операторы, а то не докажите):

$$\sum_k M_k^\dagger M_k = I_s.$$

Операторы Крауса существуют для любых допустимых трансформаций квантовых состояний и представляют наиболее общий способ описания квантовой динамики... Про это лектор ничего не говорил.

Вывод уравнения Линдблада:

Рассмотрим эволюцию на малом промежутке времени Δt. В зависимости от выбора базиса при вычислении частичного следа мы можем изменять операторы Крауса (— разложение не единственно..), выберем $|k=0\rangle$ так, чтобы нулевой оператор Крауса слабо отличался от единицы $M_0(\Delta t) = I_s + \Delta M_0$. Разложим ΔM_0 как сумму эрмитового и антиэрмитового операторов (можно сделать с любым оператором) а в остальные операторы сделаем подстановку:

$$\begin{gathered} M_0(t) = I_s + \left(L_0 - \tfrac{iH}{\hbar}\right)\Delta t \\ M_k(t) = L_k\sqrt{\Delta t} \quad \text{при} \quad k \neq 0 \end{gathered}$$

Здесь H и L_0 два эрмитовых оператора. Подставим эти операторы в уравнение эволюции (123), оставляя только линейные по Δt члены и записывая $\rho_s(t) \approx \rho_s(0) + \Delta\rho_s(t)$.

$$\rho_s(0) + \Delta\rho_s(t) = \rho_s(0) + \Delta t\left(\frac{1}{i\hbar}[H, \rho_s(0)] + \{L_0, \rho_s(0)\} + \sum_{k\neq 0} L_k \rho_s(0) L_k^\dagger\right),$$

теперь устремляем Δt к нулю, получаем диф. уравнение...

$$\partial_t \rho_s(t) = \left(\frac{1}{i\hbar}[H, \rho_s(0)] + \{L_0, \rho_s(0)\} + \sum_{k\neq 0} L_k \rho_s(0) L_k^\dagger\right),$$

H тут уже не тот же, что и из начала билета))

Казалось бы, это уравнение может даже не сохранять след (мы же обрезали решение на линейных по Δt членах). Однако, если подставить M_0, M_k в свойство нормировки операторов Крауса, получим, что

$$L_0 = -\frac{1}{2}\sum_{k\neq 0} L_k^\dagger L_k,$$

прямой подстановкой этого тождества в уравнение выше, получим

$$\mathrm{tr}\{\partial_t \rho_s(t)\} \equiv 0.$$

Т.е. нормировка состояний сохраняется. Необходимо, конечно, воспользоваться тем, что $\mathrm{tr}\{[A, B]\} = 0$ и свойством цикличности следа: $\mathrm{tr}\{AB\} = \mathrm{tr}\{BA\}$.

Но у этого уравнения есть преимущество: все операторы не зависят от времени (см. подстановку), что делает его относительно легким для решения. Перепишем результат в канонической форме:

$$\partial_t \rho_s(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho_s(t)] + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\left([L_k\rho_s(t), L_k^\dagger] + [L_k, \rho(t)L_k^\dagger]\right)$$

Это т.н. **уравнение Линдблада**, оно описывает неунитарную эволюцию редуцированной матрицы плотности.

Обратите внимание, как строится взаимодействие резервуара и системы: мы ждем очень маленький промежуток времени, и строим на нем эволюцию системы, затем обрубаем, и начинаем новый интервал Δt, которому всё равно, что было ранее. Время отклика резервуара полагается бесконечно коротким (Марковость процесса..). Это т.н. квантовая марковская цепь, и это понятие часто встречается вместе с операторами Линдблада.

Можно увидеть, что здесь оператор H вообще то может не совпадать с гамильтонианом системы. (просто выбрали какое то M_0 и так далее) Однако существуют другие выводы (не представленные на лекциях) в которых показывается, что H это действительно гамильтониан.

Уравнение Линдблада для наблюдаемых

Мы можем изучать кв. динамику, считая что эволюционирует система (представление Шрёдингера) а наблюдаемые от времени не зависят, или наоборот, считая что эволюционируют наблюдаемые, а система остается постоянной. Вероятности изменится не должны, поэтому

$$p_k = \mathrm{tr}\{\rho(t)F_k\} = \langle f_k|\,\rho(t)\,|f_k\rangle$$

здесь F_k - элемент наблюдаемой, характеризующий статистику измерений. Например. $|x\rangle\langle x|$ и т.п..

$$\mathrm{const} = p_k =: \mathrm{tr}\{F_k\rho(t)\} = \mathrm{tr}\left\{F_k\sum_j M_j\rho M_j^\dagger\right\} = \mathrm{tr}\left\{\sum_j M_j^\dagger F_k M_j\rho\right\} = \mathrm{tr}\{F^H(t)\rho_0\}.$$

Мы воспользовались цикличностью следа, и увидели, что в представлении Гейзенберга эволюция наблюдаемых описывается сопряженными операторами Крауса. Значит (см. определение) операторы Л. тоже будут сопряженными. Итого:

$$\frac{d}{dt}\hat\rho_A^S = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat H, \hat\rho_A^S\right] + L_k\hat\rho_A^S L_k^+ - \frac{1}{2}\left\{L_k^+L_k, \hat\rho_A^S\right\}$$

$$\frac{d}{dt}\hat F_A^H(t) = \frac{\partial}{\partial t}\hat F_A^H(t) - \frac{1}{i\hbar}\left[\hat H, \hat F_A^H(t)\right] + L_k^+\hat F_A^H(t)L_k - \frac{1}{2}\left\{L_kL_k^+, \hat F_A^H(t)\right\}$$

Уравнение Блоха

Это было на лекциях, но в билеты не включено. Мб будет как задачка. Запомните хотя бы, что получается в итоге и какое предположение.

Это самый простой пример на уравнения Линдблада, может быть на экзамене.

Попробуем придумать какие-нибудь операторы Л., и посмотрим что получится (классная мотивировка, правда?). Система — спин $\frac{1}{2}$, т.е. $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^2$

$$H = \frac{\hbar}{2}(\vec\Omega, \vec\sigma)$$

Уравнение Л. в немного другой форме (проверьте очевидное равенство)

$$\partial_t \rho_s(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho_s(0)] + \frac{1}{2}\sum_{k\neq 0}\left(L_k \rho_s(t) L_k^\dagger - \{L_k^\dagger L_k, \rho_s(t)\}\right)$$

Возьмем какую-нибудь комбинацию матриц паули и единичного оператора в качестве единственного оператора Л. $L = \sqrt{\frac{\gamma}{2}}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)$. Мы разложим матрицу плотности через действительную линейную комбинацию базисных векторов в пространстве ССО над $\mathbb{C}^2$, учтем нормировку и получим:

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{r}\vec{\sigma}), \quad \|\vec{r}\| \leq 1.$$

Вычисляя средний спин (усредняя оператор спина по матрице плотности) получаем $\rho = \frac{1}{2}(I + 2\langle \mathbf{S}(t)\rangle \cdot \vec{\sigma})$, где $\vec{S}$ - средний спин... Теперь видим

$$(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)(\sigma_i)(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) = -\sigma_i$$

так что уравнение в итоге принимает вид:

$$\begin{array}{l} \frac{\gamma}{2}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)(\rho)(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) - \frac{3\gamma}{4}\{I, \hat{\rho}\} = -2\gamma\langle \mathbf{S}(t)\rangle \cdot \vec{\sigma} \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{S}(t)\rangle = -\langle \mathbf{S}(t)\rangle \times \vec{\Omega} - \gamma\langle \mathbf{S}(t)\rangle \end{array}$$

Получили затухание и прецессию, какая радость.

Fun fact: из-за взаимодействия с термостатом матрица со временем (экспоненциальное затухание) лишается внедиагональных элементов, а диагональные стремятся к распределению Гиббса. В базисе с.в. гамильтониана, конечно. Если вас спросят почему — делайте возмущенный вид, и говорите, что это было на статистической физике. Называется потеря когерентности, знаменитый пример — кот Шрёдингера...

Пример уравнения Л. для двухуровневой системы:

Уравнения Л. идеально подходят для описания сложной динамики некоторых систем, которая обычными методами квантовой механики берется нетривиально. Например, было показано, что с помощью оператора Л.: $\sqrt{\frac{\Gamma}{\hbar}}\,|0\rangle\langle 1|$ описывается динамика излучения двухуровнего атома. $|0\rangle := (1,0)^T$, $|1\rangle := (0,1)^T$. 1 - возбужденное состояние, 0 - основное.
Гамильтониан традиционно записывается

$$H = E_0\,|0\rangle\langle 0| + E_1\,|1\rangle\langle 1|\,.$$

Матрицу плотности тоже удобно написать в этом базисе: $\rho = \sum_{ij}\rho_{ij}\,|i\rangle\langle j|$.

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right] = i\omega_{10}\rho_{01}\left|0^{(A)}\right\rangle\left\langle 1^{(A)}\right| - i\omega_{10}\rho_{10}\left|1^{(A)}\right\rangle\left\langle 0^{(A)}\right| \quad \omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$$

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\Gamma}{\hbar}\rho_{11}(t) & \left(i\omega_{01} - \frac{\Gamma}{2\hbar}\right)\rho_{01}(t) \\ -\left(i\omega_{01} + \frac{\Gamma}{2\hbar}\right)\rho_{10}(t) & -\frac{\Gamma}{\hbar}\rho_{11}(t) \end{pmatrix}$$

Решение этого уравнения тоже известно:

$$\begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar} & \rho_{01}(0)e^{i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar} \\ \rho_{10}(0)e^{-i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar} & \rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar} \end{pmatrix}$$

Как и было известно, популяция возбужденных атомов падает экспоненциально.

33. Уравнение Линдблада. Переход к уравнению Паули (Master equation). Условие детального баланса. Доказательство H-теоремы для ур. Паули. Привести пример физической системы, описываемой уравнениями Паули, где энтропия будет немонотонно зависеть от времени (возрастать и убывать).

Уравнения Паули (Master equation)

Рассмотрим матрицу диагонального вида (выше написано, как её получить) $\rho_{ik} = \delta_{ik} P_i$ и потупому подставим её в уравнение Л.:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i = \sum_k L_{ik} P_k L^*_{ki} - \frac{1}{2}\left(L^*_{ik} L_{ki} P_i + P_i L^*_{ki} L_{ki}\right) = \sum_k W_{ik} P_k - W_{ki} P_i$$

$$W_{ik} = |L_{ik}|^2$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_k (W_{ik} P_k - W_{ki} P_i)$$

Отмечу, что диагональные матрицы плотности соответствуют "классическим состояниям"т.к. представляют из себя вероятностную смесь нескольких ортогональных кв. состояний.

Полученное уравнение это частный случай уравнения Чепмена — Колмогорова. Член с Гамильтонианом исчез, т.к. матрица диагонализуется именно в этом базисе, но можно рассмотреть и более общий случай, и новый член даст вклад как в кинетическом уравнении, т.к. коммутатор переходит в скобку Пуассона в классическом пределе. Так что из уравнения Паули можно получить и кинетическое уравнение. **это могут спросить на экзамене**.

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}(g(x)p(x,t)) = \int dz (\mathrm{W}(x|z) p(\mathrm{z}, t) - \mathrm{W}(z|x) p(x,t)).$$

H-теорема

Рассмотрим уравнение Паули, отбросив член со скобкой пуассона (он дает нулевой вклад в прирост энтропии, как мы показывали еще на статистической физике, что из уравнения фон-неймана, которое по-факту лишь часть уравнения Л., следует сохранение энтропии)

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j (W_{ij} P_j - W_{ji} P_i)$$

преобразуем его к виду:

$$\frac{dP_i}{dt} = -\sum_j \Gamma_{ij} P_j$$

$$\Gamma_{ij} = \begin{cases} -W_{ij} & \text{if } i \neq j \\ \sum_k' W_{kj} & \text{if } i = j \end{cases}$$

Может лучше через дельту это записать?

теорема обыкновенно доказывается для двух случаев — симметричного и общего.

Симметричный случай

Введем функцию, равную неравновесной энтропии (с минусом)

$$H(t) = \sum_i P_i(t) \ln P_i(t)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{dt} &= \sum_i \frac{dP_i}{dt}\left(1+\ln P_i\right) = \sum_i \frac{dP_i}{dt}\ln P_i \\
&= -\sum_{i,j} \Gamma_{ij} P_j \ln P_i \\
&= \sum_{i,j} \Gamma_{ij} P_j \left(\ln P_j - \ln P_i\right)
\end{aligned}$$

Понятное дело, что сумма всех вероятностей константа, поэтому один из членов во второй строчке обращается в ноль; кроме того в последней строчке мы добавили еще один «умный ноль», т.к. $\sum_j \Gamma_{ij} = \sum_i \Gamma_{ij} = 0$. Теперь воспользуемся симметрией Γ, поменяем индексы местами (получив такое же выражение, противоположное по знаку...) вычтем его и получим новое выражение

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} \Gamma_{ij}\left(P_i - P_j\right)\left(\ln P_i - \ln P_j\right),$$

ясно, что член с $i=j$ вклада не дает, а все $\Gamma_{ij} = -W_{ij} \le 0$. Используем неравенство

$$(x-y)(\ln x - \ln y) \ge 0 \quad \forall x, y \in [0,1]$$

и получим $\frac{dH}{dt} \le 0$, т.е. $\frac{dS}{dt} = -\frac{dH}{dt} \ge 0$. Энтропия растет. $\square$

Обратите внимание, что именно столкновительный член кинетического уравнения обеспечивает рост энтропии.

Общий случай H-теоремы

Теперь член Γ_{ij} не полагается симметричным, однако хоть какое-то допущение сделать необходимо — **в самом общем случае доказать теорему нельзя**. В качестве предположения возьмем условие детального баланса:

$$\frac{\partial}{\partial t}P_i = W_{ik}P_k - W_{ki}P_i,$$
$$\bar{W}_{ij} \equiv W_{ij}P_j^{\text{eq}} = W_{ji}P_i^{\text{eq}} \equiv \bar{W}_{ji},$$

P_i^{eq} — равновесное распределение вероятностей, удовлетворяющее $\frac{\partial}{\partial t}P_i^{\text{eq}} = 0$. Обратите внимание, что условие детального баланса тоже весьма жесткое требование, и оно позволит нам «симметризовать» уравнения подобно тому, как мы это сделали в предыдущем случае. Самое смешное, что в общем случае даже с предположением детального баланса не получается доказать возрастание энтропии, а только generalized entropy. Введем функцию:

$$\tilde{S}(t) = -\sum_i P_i(t)\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) = -H(t)$$

Берем производную:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d}{dt}\sum_i P_i(t)\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) = \sum_i\left(\frac{d}{dt}P_i(t)\right)\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \sum_i P_i(t)\left(\frac{d}{dt}\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right)\frac{P_i^{\text{eq}}}{P_i(t)} =$$

опять-таки, упрощаем и выкидываем член, являющийся производной суммы вероятностей

$$= \sum_i\left(\frac{d}{dt}P_i(t)\right)\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - 1\right) = \sum_i\left(\frac{d}{dt}P_i(t)\right)\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right)$$

Подставим $\frac{d}{dt}P_i$ из уравнения Паули и так же как в предыдущем пункте добавляем умный ноль: $\sum_j \Gamma_{ij} = 0$ при фиксированном i.

$$\frac{dH}{dt} = -\sum_{ij}(\Gamma_{ij}P_j(t))\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) = -\sum_{ij}(\Gamma_{ij}P_j(t))\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right)$$

члены с $i = j$ вклада не дают, т.к. второй множитель обращается в ноль в каждом слагаемом, так что

$$\frac{dH}{dt} = -\sum_{i\neq j}(\Gamma_{ij}P_j(t))\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right) = \sum_{i\neq j}(W_{ij}P_j(t))\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right)$$

сейчас мы домножим и разделим на P_j^{eq}

$$= \sum_{i\neq j}\left(W_{ij}P_j^{\text{eq}}\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right)$$

вспоминаем, что мы не зря определяли новую «почти симметричную» функцию $\bar{W}$, подставляем по определению:

$$= \sum_{i\neq j}\left(\overline{W_{ij}}\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right) =$$

теперь меняем местами индексы, пользуемся симметрией $\bar{W}$ и получаем

$$= -\sum_{i\neq j}\left(\overline{W_{ij}}\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right)\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right)$$

Заметили, что мы делаем практически то же самое, что и в предыдущем пункте, только формулы теперь громоздкие, предположения все еще не верные, а математическая строгость давно забыта? Кайфуйте.
Возьмем полусумму красных уравнений, и получим

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\bar{W}_{ij}\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}} - \frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\left(\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) - \ln\left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}}\right)\right)$$

Бинго, опять пользуемся этим неравенством (ну, не факт что оно здесь работает, кому не похуй?..) и получаем

$$\tilde{S}(t) = -\sum_i P_i(t)\ln\left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}}\right) = -H(t)$$

возрастает. Смотрите, это даже не энтропия! □

Далее на лекции полезные примеры использования уравнения Паули, посмотрите пдф лекции 13, слайды 51-58.

Привести пример физической системы, описываемой уравнениями Паули, где энтропия будет немонотонно зависеть от времени (возрастать и убывать)

Здесь имеется ввиду пример с лекции про двухуровневую систему, где квазиэнтропия растет, а энтропия растет и падает. Тут смысл в том, что H-теорема доказывается для симметричной матрицы Γ, а в этом случае она несимметричная. Рассмотрим задачу подробнее:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \gamma_0\left(\hat{\sigma}^-\hat{\rho}\hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2}\left\{\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^-, \hat{\rho}\right\}\right) + \gamma_1\left(\hat{\sigma}^+\hat{\rho}\hat{\sigma}^- - \frac{1}{2}\left\{\hat{\sigma}^-\hat{\sigma}^+, \hat{\rho}\right\}\right)$$

Вспомним уравнения Паули:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}] + \mathrm{L}\hat{\rho}\mathrm{L}^{+} - \frac{1}{2}\left\{\mathrm{L}^{+}\mathrm{L}, \hat{\rho}\right\}$$

$$\hat{\rho}_{ik} = \delta_{ik} P_i$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i = L_{ik} P_k L_{ik}^{*} - \frac{1}{2}\left(L_{ki}^{*} L_{ki} P_i + P_i L_{ki}^{*} L_{ki}\right) = W_{ik} P_k - W_{ki} P_i$$

$$W_{ik} = |L_{ik}|^2$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i = W_{ik} P_k - W_{ki} P_i$$

Для нашего случая:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} P_0 \\ P_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_0 P_1 - \gamma_1 P_0 \\ -\gamma_0 P_1 + \gamma_1 P_0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_0 P_1^{eq} - \gamma_1 P_0^{eq} = 0$$

$$P_0^{eq} = \frac{\gamma_0}{\gamma_0 + \gamma_1}, P_1^{eq} = \frac{\gamma_1}{\gamma_0 + \gamma_1}$$

$$\begin{pmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_0^{eq} \\ P_1^{eq} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left(P_0(t=0) - P_0^{eq}\right) \mathrm{e}^{-t(\gamma_0 + \gamma_1)} \\ \left(P_0^{eq} - P_0(t=0)\right) \mathrm{e}^{-t(\gamma_0 + \gamma_1)} \end{pmatrix}$$

Энтропия:

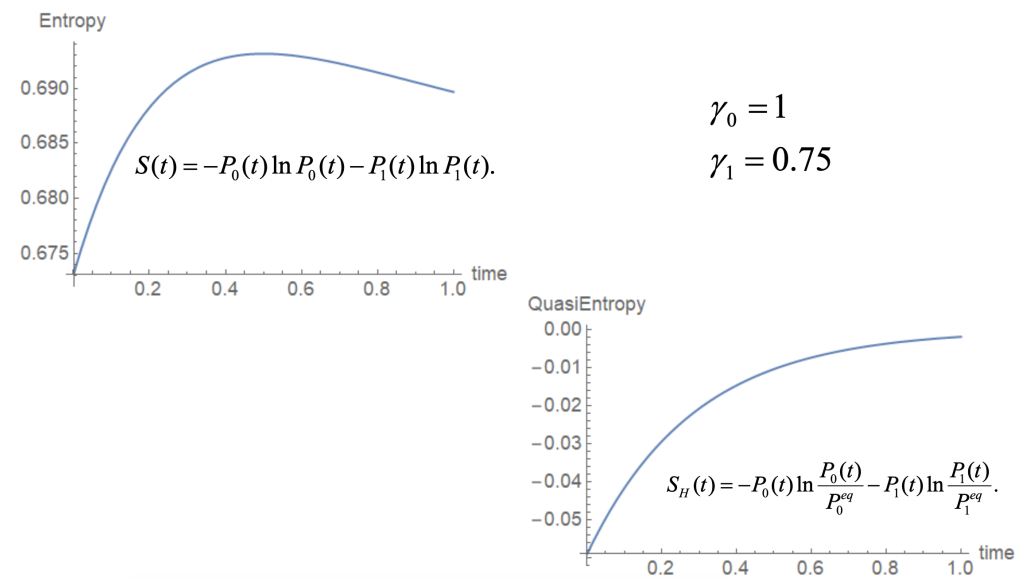
$$S(t) = -P_0(t) \ln P_0(t) - P_1(t) \ln P_1(t)$$

Функция, которая удовлетворяет Н-теореме:

$$S_H(t) = -P_0(t) \ln \frac{P_0(t)}{P_0^{eq}} - P_1(t) \ln \frac{P_1(t)}{P_1^{eq}}$$

$$\Gamma_{ij} = \begin{pmatrix} -\gamma_1 & \gamma_0 \\ \gamma_1 & -\gamma_0 \end{pmatrix}$$

Если $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ji}$, то S и S_H совпадают с точностью до константы. А вот что бывает, когда не совпадают:



34. Уравнения Власова. Бесстолкновительная плазма. Тензор диэлектрической проницаемости плазмы. Спектр продольных волн в плазме.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10т. Т. X. / Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. - 2-е издание., испр. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. - 536 с. - ISBN 5-9221-0125-0 (Т. X).

2. Максимов Л.А., Полищук И. Я. М17 Лекции по физической кинетике: Учебное пособие. - М.: МФТИ, 2007. - 184 с.ISBN 5-7417-0170-1

3. Бурмистров С. Н. Задачи по физической кинетике: Учебное пособие / С. Н. Бурмистров - Долгопрудный: Издательский Дом "Интеллект 2016. - 192 с.

Решение:

Плазма - полностью ионизированный газ. Условие применимости метода кинетического уравнения к плазме требует её достаточной разреженности. Условие слабой неидеальности плазмы записывается в виде:

$$T \gg e^2/\bar{r} \sim e^2 N^{1/3},$$

где T - температура плазмы, N - полное число частиц в единице объёма, а $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ - среднее расстояние между ними. Данное условие выражает собой малость средней энергии взаимодействия двух ионов по сравнению с их средней кинетической энергией.

Далее плазма считается классической: температура плазмы должна быть высока по сравнению с температурой вырождения её электронной компоненты:

$$T \gg \hbar^2 N^{2/3}/m,$$

где m - масса электрона

Кинетическое уравнение для каждого сорта частиц в плазме (электронов и ионов) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{p}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \mathsf{St} f,$$

где f - функция распределения данных частиц по координатам и импульсам, St - их интеграл столкновений (с частицами всех сортов).

Бесстолкновительная плазма.

Точные условия возможности пренебрежения столкновениями зависят от конкретной задачи. Однако необходимое условие состоит в требовании малости эффективной частоты столкновений ν (величина, обратная среднему времени свободного пробега частицы) по сравнению с частотой ω изменения макроскопических полей $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B}$ в данном процесса:

$$\nu \ll \omega$$

В силу этого условия интеграл столкновений в кинетическом уравнении оказывается малым по сравнению с производной $\partial f/\partial t$. Столкновениями можно пренебречь также и в случае, если средняя длина пробега частиц $l \sim \bar{v}/\nu$ велика по сравнению с расстоянием L, на котором меняется поле ("длина волны"поля). Если обозначить $1/L \sim k$, то условие запишется в виде

$$\nu \ll k\bar{v}$$

При этом интеграл столкновений окажется малым по сравнению с членом $\boldsymbol{v}\nabla f$ в левой части кинетического уравнения

Уравнения Власова.

После пренебрежения интегралом столкновений кинетические уравнения для функций распределения электронов (f_e) и ионов (f_i) принимает вид

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f_e}{\partial \boldsymbol{r}} - e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{v}\boldsymbol{B}]\right)\frac{\partial f_e}{\partial \boldsymbol{p}} = 0$$
$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{r}} + ze\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{v}\boldsymbol{B}]\right)\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{p}} = 0$$

К этим уравнениям добавляется система усредненных ($\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B}$) уравнений Максвелла

$$\mathsf{rot}\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \quad \mathsf{div}\boldsymbol{B} = 0,$$
$$\mathsf{rot}\boldsymbol{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}, \quad \mathsf{div}\boldsymbol{E} = 4\pi\rho,$$

где ρ и $\boldsymbol{j}$ - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения формулами

$$\rho = e\int (zf_i - f_e)d\Gamma_p$$
$$\boldsymbol{j} = e\int (zf_i - f_e)\boldsymbol{v}d\Gamma_p,$$

где $\Gamma_p = \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$. Вышеуказанные уравнения называются уравнениями Власова. Данная система определяет как функции распределения f_i и f_e, так и поля $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{E}$, называемые согласованными

Тензор диэлектрической проницаемости.

Будем предполагать, что в диэлектрической поляризации плазмы участвуют только электроны (то есть функция распределения f_i полагается равновесной f_{i0}). Для слабого поля функция распределения электронов ищется в виде $f = f_0 + \delta f$, где f_0 - невозмущённая полем стационарная изотропная и пространственно-однородная функция распределения, а δf - её изменение под влиянием поля. Тогда, пренебрегая вторыми порядками малости, получается:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial \delta f}{\partial \boldsymbol{r}} = e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{v}\boldsymbol{B}]\right)\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{p}}$$

В изотропной плазме функция распределения зависит только от абсолютной величины импульса. Поэтому $\boldsymbol{v}\frac{\partial f_)}{\partial \varepsilon} = \partial f_0/\partial \boldsymbol{p} \uparrow\uparrow \boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ и $[\boldsymbol{v}\boldsymbol{B}] = 0$. Остаётся:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial \delta f}{\partial \boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{E}\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{p}}$$

В предположении, что электрическое поле содержит одну гармонику, то есть:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega}\exp\{(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - i\omega t)\}$$
$$\delta f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) = \delta f_{\boldsymbol{k},\omega}(\boldsymbol{p})\exp\{(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - i\omega t)\}$$

получается уравнение в $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$:

$$(\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v})\delta f_{\boldsymbol{k},\omega}(\boldsymbol{p}) = ie(\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega})\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Оно решается введением регуляризации с полюсом в нижней полуплоскости (обусловлено физическим смыслом: $\delta f_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}}$ - запаздывающий отклик на внешнее воздействие $\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega}$, поэтому эта функция должна быть аналитична в верхней полуплоскости):

$$\delta f_{\boldsymbol{k},\omega} = \frac{ie(\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega})}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Поляризация электронной компоненты $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega}$ проще всего посчитать из соотношения: $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\partial \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \Longrightarrow \boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k},\omega} = -i\omega \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega}$.

В невозмущённой плазме плотность зарядов электронов компенсируется в каждой точке зарядом ионов, а плотность тока равна нулю то вследствие изотропии плазмы. В результате (подставив $f_i = f_{i0}$, $f_e = f_0 + \delta f$ и приняв во внимание, что $\rho(f_{i0}, f_{e0}) = 0, \boldsymbol{j}(f_{i0}, f_{e0}) = 0$) возмущения полем в плазме плотность зарядов и плотность тока равны:

$$\rho = -e\int \delta f d^3p, \quad \boldsymbol{j} = -e\int \boldsymbol{v}\delta f d^3 p$$

Получается:

$$\omega \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega} = e^2 \int \boldsymbol{v}(\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega})\frac{\partial f_0/\partial\varepsilon}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega}E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} d\Gamma_p \equiv \chi_{\alpha\beta}E_\beta,$$

где $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)$ - восприимчивость. Диэлектрическая проницаемость записывается в виде:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega}\int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon} d\Gamma_p$$

Разделим интеграл на интегрирование по углам и по энергиям: $\Gamma_p = \Gamma_\varepsilon \frac{\Omega_p}{4\pi}$, $\Gamma_\varepsilon = \nu(\varepsilon)d\varepsilon$, где $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний.

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega}\int \Gamma_\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\int \frac{\Omega_p}{4\pi}\frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

Интеграл был подробно взят в [3, стр 138]. В результате получается:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}\right)$$

$$\varepsilon_l = 1 - \frac{4\pi e^2}{l^2}\int\left(1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}\right)\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\Gamma_\varepsilon$$

$$\varepsilon_t = 1 + \frac{2\pi e^2}{l^2}\int\left(1 + \frac{1-s^2}{2s}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}\right)\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\Gamma_\varepsilon$$

где ε_l - продольная компонента диэлектрической проницаемости, ε_t - поперечная компонента диэлектрической проницаемости, $s = \frac{\omega}{vk}$.

Отметим, что функция $W(s) = 1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}$ является действительной при $s > 1$ и имеет мнимую часть $\mathrm{Im}W = \frac{\pi s}{2}$ при $s < 1 \Longleftrightarrow v > \frac{\omega}{k}$. Мнимая часть - затухание Ландау.

Спектр продольных волн в плазме.

Пусть электрическое поле $\boldsymbol{E}_l(\boldsymbol{r},t) \sim \boldsymbol{E}_l \exp\{(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - i\omega t)\}$ продольное, то есть $\boldsymbol{E}_l \uparrow\uparrow \boldsymbol{k}$. Тогда $\mathrm{rot}\boldsymbol{E}_l = i[\boldsymbol{k},\boldsymbol{E}_l] = 0$, что влечёт $\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -i\omega\boldsymbol{B} = 0 \Longrightarrow \mathrm{rot}B = 0 \Longrightarrow \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} = -i\omega\boldsymbol{D} = 0$. Но с другой стороны $\boldsymbol{D} = \varepsilon_l\boldsymbol{E}_l = 0$, что даст нетривиальные решения только тогда, когда

$$\varepsilon_l(\omega,\boldsymbol{k}) = 0$$

Введем некоторые обозначения: $n = \int d\Gamma_\varepsilon f_0(\varepsilon)$ - плотность электронов; $\langle g\rangle = \frac{\int d\Gamma_\varepsilon g f_0(\varepsilon)}{\int d\Gamma_\varepsilon f_0(\varepsilon)}$. С учётом того, что для спектра $\varepsilon = \frac{mv^2}{2}$ плотность состояний $\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon^{\frac{1}{2}}$, имеем соотношение:

$$\int \varepsilon^r \frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}d\Gamma_\varepsilon = -\left(r + \frac{1}{2}\right)\int \varepsilon^{r-1}f_0(\varepsilon)d\Gamma_\varepsilon$$

Будем рассматривать два приближения: $\omega \gg vk \Longleftrightarrow s \gg 1$ (область высоких частот), $\omega \ll vk \Longleftrightarrow s \ll 1$ (область низких частот).

$$\mathrm{Re}\varepsilon_l(\omega \gg vk) = 1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int\limits_0^{+\infty} \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{3\omega^2} \int\limits_0^{+\infty} v^2 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v^2}{\omega^2} \right) \nu(\varepsilon) d\varepsilon \approx$$

$$\approx 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \left\langle v^2 \right\rangle}{\omega^2} \right); \;\; \Omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

$$\mathrm{Im}\varepsilon_l(\omega \gg vk) = -\pi \frac{4\pi e^2}{k^2} \int\limits_{v > \frac{\omega}{k}} \frac{\omega}{2vk} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_\varepsilon = \omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{f_0}{2\pi \hbar^3} \frac{m\omega^2}{2k^2}$$

$$\varepsilon_l(\omega \ll vk) \approx 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_\varepsilon \left(1 + \frac{i\pi s}{2} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} =$$

$$= 1 + \frac{\Omega^2}{k^2} \left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle + i\omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{f_0(\varepsilon)}{2\pi \hbar^3}$$

Спектр будет находится следующим образом:

$$\varepsilon_l(\omega, \boldsymbol{k}) = 0 \Longrightarrow 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \left\langle v^2 \right\rangle}{\omega^2} \right) = 0 \Longrightarrow \omega \approx \sqrt{\Omega^2 + k^2 \left\langle v^2 \right\rangle} \approx \Omega + \frac{k^2 \left\langle v^2 \right\rangle}{2}$$

35. Уравнения Власова. Бесстолкновительная плазма. Тензор диэлектрической проницаемости плазмы. Спектр поперечных волн в плазме.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10т. Т. X. / Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. - 2-е издание., испр. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. - 536 с. - ISBN 5-9221-0125-0 (Т. X).

2. Максимов Л.А., Полищук И. Я. М17 Лекции по физической кинетике: Учебное пособие. - М.: МФТИ, 2007. - 184 с.ISBN 5-7417-0170-1

3. Бурмистров С. Н. Задачи по физической кинетике: Учебное пособие / С. Н. Бурмистров - Долгопрудный: Издательский Дом "Интеллект 2016. - 192 с.

Решение:

Плазма - полностью ионизированный газ. Условие применимости метода кинетического уравнения к плазме требует её достаточной разреженности. Условие слабой неидеальности плазмы записывается в виде:

$$T \gg e^2/\bar{r} \sim e^2 N^{1/3},$$

где T - температура плазмы, N - полное число частиц в единице объёма, а $\bar{r} \sim N^{-1/3}$ - среднее расстояние между ними. Данное условие выражает собой малость средней энергии взаимодействия двух ионов по сравнению с их средней кинетической энергией.

Далее плазма считается классической: температура плазмы должна быть высока по сравнению с температурой вырождения её электронной компоненты:

$$T \gg \hbar^2 N^{2/3}/m,$$

где m - масса электрона

Кинетическое уравнение для каждого сорта частиц в плазме (электронов и ионов) имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{p}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \mathsf{St} f,$$

где f - функция распределения данных частиц по координатам и импульсам, St - их интеграл столкновений (с частицами всех сортов).

Бесстолкновительная плазма.

Точные условия возможности пренебрежения столкновениями зависят от конкретной задачи. Однако необходимое условие состоит в требовании малости эффективной частоты столкновений ν (величина, обратная среднему времени свободного пробега частицы) по сравнению с частотой ω изменения макроскопических полей $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B}$ в данном процесса:

$$\nu \ll \omega$$

В силу этого условия интеграл столкновений в кинетическом уравнении оказывается малым по сравнению с производной $\partial f/\partial t$. Столкновениями можно пренебречь также и в случае, если средняя длина пробега частиц $l \sim \bar{v}/\nu$ велика по сравнению с расстоянием L, на котором меняется поле ("длина волны"поля). Если обозначить $1/L \sim k$, то условие запишется в виде

$$\nu \ll k\bar{v}$$

При этом интеграл столкновений окажется малым по сравнению с членом $\boldsymbol{v}\nabla f$ в левой части кинетического уравнения

Уравнения Власова.

После пренебрежения интегралом столкновений кинетические уравнения для функций распределения электронов (f_e) и ионов (f_i) принимает вид

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f_e}{\partial \boldsymbol{r}} - e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{vB}]\right)\frac{\partial f_e}{\partial \boldsymbol{p}} = 0$$
$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{r}} + ze\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{vB}]\right)\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{p}} = 0$$

К этим уравнениям добавляется система усредненных ($\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B}$) уравнений Максвелла

$$\mathrm{rot}\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \quad \mathrm{div}\boldsymbol{B} = 0,$$
$$\mathrm{rot}\boldsymbol{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}, \quad \mathrm{div}\boldsymbol{E} = 4\pi\rho,$$

где ρ и $\boldsymbol{j}$ - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения формулами

$$\rho = e\int (zf_i - f_e)d\Gamma_p$$
$$\boldsymbol{j} = e\int (zf_i - f_e)\boldsymbol{v}d\Gamma_p,$$

где $\Gamma_p = \frac{2d^3p}{(2\pi\hbar)^3}$. Вышеуказанные уравнения называются уравнениями Власова. Данная система определяет как функции распределения f_i и f_e, так и поля $\boldsymbol{B}$ и $\boldsymbol{E}$, называемые согласованными

Тензор диэлектрической проницаемости.

Будем предполагать, что в диэлектрической поляризации плазмы участвуют только электроны (то есть функция распределения f_i полагается равновесной f_{i0}). Для слабого поля функция распределения электронов ищется в виде $f = f_0 + \delta f$, где f_0 - невозмущённая полем стационарная изотропная и пространственно-однородная функция распределения, а δf - её изменение под влиянием поля. Тогда, пренебрегая вторыми порядками малости, получается:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial \delta f}{\partial \boldsymbol{r}} = e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}[\boldsymbol{vB}]\right)\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{p}}$$

В изотропной плазме функция распределения зависит только от абсолютной величины импульса. Поэтому $\boldsymbol{v}\frac{\partial f_)}{\partial \varepsilon} = \partial f_0/\partial \boldsymbol{p} \uparrow\uparrow \boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ и $[\boldsymbol{vB}] = 0$. Остаётся:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \boldsymbol{v}\frac{\partial \delta f}{\partial \boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{E}\frac{\partial f_0}{\partial \boldsymbol{p}}$$

В предположении, что электрическое поле содержит одну гармонику, то есть:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega}\exp\{(i\boldsymbol{kr} - i\omega t)\}$$
$$\delta f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) = \delta f_{\boldsymbol{k},\omega}(\boldsymbol{p})\exp\{(i\boldsymbol{kr} - i\omega t)\}$$

получается уравнение в $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$:

$$(\omega - \boldsymbol{kv})\delta f_{\boldsymbol{k},\omega}(\boldsymbol{p}) = ie(\boldsymbol{vE}_{\boldsymbol{k},\omega})\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Оно решается введением регуляризации с полюсом в нижней полуплоскости (обусловлено физическим смыслом: $\delta f_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\omega}}$ - запаздывающий отклик на внешнее воздействие $\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega}$, поэтому эта функция должна быть аналитична в верхней полуплоскости):

$$\delta f_{\boldsymbol{k},\omega} = \frac{ie(\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega})}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Поляризация электронной компоненты $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega}$ проще всего посчитать из соотношения: $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\partial \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} \Longrightarrow \boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k},\omega} = -i\omega \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega}$.

В невозмущённой плазме плотность зарядов электронов компенсируется в каждой точке зарядом ионов, а плотность тока равна нулю то вследствие изотропии плазмы. В результате (подставив $f_i = f_{i0}$, $f_e = f_0 + \delta f$ и приняв во внимание, что $\rho(f_{i0}, f_{e0}) = 0, \boldsymbol{j}(f_{i0}, f_{e0}) = 0$) возмущения полем в плазме плотность зарядов и плотность тока равны:

$$\rho = -e\int \delta f d^3p, \quad \boldsymbol{j} = -e\int \boldsymbol{v}\delta f d^3p$$

Получается:

$$\omega \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{k},\omega} = e^2 \int \boldsymbol{v}(\boldsymbol{v}\boldsymbol{E}_{\boldsymbol{k},\omega})\frac{\partial f_0/\partial\varepsilon}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}d\Gamma_p$$

$$P_\alpha = \frac{e^2}{\omega}E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}d\Gamma_p \equiv \chi_{\alpha\beta}E_\beta,$$

где $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega)$ - восприимчивость. Диэлектрическая проницаемость записывается в виде:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega}\int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}d\Gamma_p$$

Разделим интеграл на интегрирование по углам и по энергиям: $\Gamma_p = \Gamma_\varepsilon \frac{\Omega_p}{4\pi}$, $\Gamma_\varepsilon = \nu(\varepsilon)d\varepsilon$, где $\nu(\varepsilon)$ - плотность состояний.

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega}\int \Gamma_\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\int \frac{\Omega_p}{4\pi}\frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \boldsymbol{k}\boldsymbol{v} + i\delta}d\Gamma_p$$

Интеграл был подробно взят в [3, стр 138]. В результате получается:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2}\right)$$

$$\varepsilon_l = 1 - \frac{4\pi e^2}{l^2}\int\left(1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}\right)\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\Gamma_\varepsilon$$

$$\varepsilon_t = 1 + \frac{2\pi e^2}{l^2}\int\left(1 + \frac{1-s^2}{2s}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}\right)\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\Gamma_\varepsilon$$

где ε_l - продольная компонента диэлектрической проницаемости, ε_t - поперечная компонента диэлектрической проницаемости, $s = \frac{\omega}{vk}$.

Отметим, что функция $W(s) = 1 - \frac{s}{2}\ln\frac{s+1}{s-1+i\delta}$ является действительной при $s > 1$ и имеет мнимую часть $\mathrm{Im}W = \frac{\pi s}{2}$ при $s < 1 \Longleftrightarrow v > \frac{\omega}{k}$. Мнимая часть - затухание Ландау.

Спектр поперечных волн в плазме.

Поперечные колебания электрического поля $\boldsymbol{E}_t(\boldsymbol{r},\boldsymbol{t}) \sim \boldsymbol{E}_t \exp\{(i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r} - i\omega t)\}$ подразумевают равенство $\boldsymbol{k}\boldsymbol{E}_t = 0$. Но $\boldsymbol{D}_t = \varepsilon_t \boldsymbol{E}_t \Longrightarrow \boldsymbol{k}\boldsymbol{D}_t = 0$. Согласно уравнениям Максвелла для фурье-компонент электрического и магнитного полей мы найдём:

$$\begin{cases}\mathrm{rot}\boldsymbol{E}_t = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \mathrm{div}\boldsymbol{B} = 0\\ \mathrm{rot}\boldsymbol{B} = \frac{\partial \boldsymbol{D}_t}{\partial t}, \mathrm{div}\boldsymbol{D}_t = 0\end{cases} \Longrightarrow \begin{cases}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_t = \frac{\omega}{c}\boldsymbol{B}, \boldsymbol{k}\boldsymbol{B} = 0\\ \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{B} = -\frac{\omega}{c}\boldsymbol{D}_t, \boldsymbol{k}\boldsymbol{D}_t = 0\end{cases}$$

Исключая магнитное поле из этих уравнений, получим:

$$\boldsymbol{k}\times[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_t]=\boldsymbol{k}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{E}_t)-k^2\boldsymbol{E}_t=\frac{\omega}{c}[\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{B}]=-\frac{\omega^2}{c^2}\boldsymbol{D}_t=-\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_t\boldsymbol{E}_t$$

Для существования нетривиального решения необходимо выполнение соотношения:

$$k^2=\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_t(\omega,k)$$

Для случая $\omega\gg vk$ в силу $v\ll c$ можно положить $\varepsilon_t(\omega,k)\approx\varepsilon_t(\omega,0)=1-\frac{\Omega^2}{\omega^2}$. Это даёт:

$$\omega^2=\Omega^2+c^2k^2$$

Результат для низкочастотного случая ($\omega\ll vk$) (подробности в [3, стр 142]):

$$\omega=-i\frac{2}{\pi}\frac{c^2k^3}{\Omega^2\left\langle v^{-1}\right\rangle}$$

36add. Уравнение Больцмана для Ферми-жидкости (обсуждение только формы особенности уравнения). Пределы применимости уравнения Больцмана

Предположения теории:

1. Системе со взаимодействием отвечают квазичастичные состояния, характеризующиеся импульсом $\boldsymbol{p}$;

2. Состояние системы полностью описывается функцией распределения $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$, $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \frac{d^3pd^3r}{(2\pi\hbar)^3}$ - число квазичастиц в элементе фазового пространства $d\Gamma = d^3rd^3p$;

3. Заряд квазичастицы равен e ($e < 0$ - заряд электрона).

Следствия:

1. Так как состояние системы полностью описывается с помощью функции $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$, то полная энергия системы — функционал от $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$;

2. Пусть возникла малая вариация функции распределения $\delta f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$, то есть произошло увеличение числа квазичастиц в точке $\boldsymbol{r}$ с импульсом $\boldsymbol{p}$ в системе, которая имеет распределение $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ (это может быть и неравновесная функция распределения). Тогда изменение энергии системы:
$$\delta E_{\text{tot}} = \int \frac{d^3pd^3r}{(2\pi\hbar)^3} \underbrace{\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p};f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t))}_{=\delta E_{\text{tot}}/\delta f} \delta f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t),$$
где $\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ — энергия квазичастицы, $\boldsymbol{v}_p = \frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{p}}$ — скорость квазичастицы.

3. Плотность тока (поток массы):
$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\frac{\partial\varepsilon}{\partial\boldsymbol{p}}$$

4. $E_{\text{tot}} \neq \int \frac{d^3pd^3r}{(2\pi\hbar)^3}\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},f)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$

5. Если имеется $\delta f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$, то из-за взаимодействия квазичастиц энергия квазичастицы $\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ меняется
$$\delta\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p};f) = \int \frac{d^3p'd^3r'}{(2\pi\hbar)^3} f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{p}';f)\delta f(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{r}'),$$
где $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{p}';f)$ - квазичастичное взаимодействие, предсавляющее собой изменение энергии частицы с импульсом и координатой $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{r}$ соответственно, при добавлении частицы с параметрами $\boldsymbol{p}'$ и $\boldsymbol{r}'$

Равновесная функция распределения: $f^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_p(f^{(0)})-\mu}{T}\right)+1}$.

Пределы применимости

Используя классические (по координате и импульсу) уравнения, мы тем самым предполагаем движение квазичастиц квазиклассическим; это же предположение лежит по существу уже в основе самого описания жидкости функцией распределения, зависящей одновременно от координат и импульсов квазичастиц. Условие квазиклассичности состоит в малости де-бройлевской длины волны квазичастиц $\hbar/p_F$ по сравнению с характерной длиной L, на которой существенно меняется функция f. Введя вместо L «волновой вектор», неоднородности $k \sim 1/L$, запишем это условие в виде $\hbar k \ll p_F$. Частота изменения ω функции распределения, устанавливающаяся при заданном k, порядка величины $\omega \sim v_F k$ и автоматически удовлетворяет условию $\hbar\omega \ll \varepsilon_F$. Соотношение же между $\hbar\omega$ и T ($T \ll \varepsilon_F$) может быть любым.

Уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v}_p \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}} + \dot{\boldsymbol{p}} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = I_{\text{st}}[f]$$

Линеарезованное уравнение Больцмана:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \boldsymbol{v}_p \nabla_r \left(\delta f - \frac{\partial f}{\partial E_0} \delta E \right) = I_{\text{st}} \sim \frac{\delta f}{\tau}$$