

Физическая Кинетика

Билеты к экзамену

ФОПФ 62Х

Эти билеты составлены студентами и могут содержать смысловые ошибки – будьте осторожны.

Примечание для составителей: используйте окружение

\raref{номер билета}{формулировка билета},

чтобы автоматически добавит билет в оглавление, выделить ему новую страницу, оформить все билеты одинаковым шрифтом.

Содержание

1	2
2	4
3	6
4	7
5	8
6	11
7	12
8	15
9	18
10	20
11	21
12	24
13	26
14	28
15	30
16	31
17	34
18	36
19	40
20	42
21	45
22	47
23	51
24	54
25	59
26	62
27	64
28	66
29	68
30	69
31	74
32	75
33	80
34	84
35	88

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:

$$\begin{aligned} f(q, t) &= \sum_i \delta(q - q_i(t)) \\ \int f(q, t) dp dr &= N \\ n(r) &= \int f(q, t) dp \\ \vec{j}(r, t) &= \int \vec{\nabla}(q, t) f(q, t) dp \end{aligned}$$

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

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

$$\begin{aligned} J &= \sum_i \frac{\partial q_i(t)}{\partial t} \delta(q - q_i(t)) \\ \frac{\partial}{\partial t} f(q, t) + \operatorname{div} J &= 0 \end{aligned}$$

Объясни
появ-
ление
J

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.

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

Дубль

Преобразуем получившееся выражение с учетом конкретной формы функции распределения:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v(q, t) f(q, t) \\ F(q, t) f(q, t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} v(q, t) \sum_i \delta(q - q_i(t)) \\ F(q, t) \sum_i \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i v(q, t) \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i F(q, t) \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \sum_i v(q_i(t), t) \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i F(q_i(t), t) \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i \frac{\partial r_i}{\partial t} \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i \frac{\partial p_i}{\partial t} \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Из этого получим уравнение Больцмана:

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

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

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

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

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

Аналогично классическому газу найдем

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

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

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

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

Отличие заключается в множителе $(2\pi\hbar)^d$

Объясни
степень с

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 $\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial \vec{r}} \frac{\partial B}{\partial \vec{p}} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}} \frac{\partial B}{\partial \vec{r}}$ - 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:

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

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

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 $Q = (\{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}, \{\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\})$. Обозначим $R = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}$, $P = \{\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N\}$. Их функция распределения в фазовом пространстве:

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

Получим уравнение непрерывности для этой системы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int f^{(N)}(Q, t) d\Gamma &= \int \frac{\partial Q(t)}{\partial t} \frac{d}{dQ(t)} \delta(Q - Q(t)) d\Gamma = - \int \frac{\partial Q(t)}{\partial t} \frac{d}{dQ} \delta(Q - Q(t)) d\Gamma = - \int \operatorname{div}(J) d\Gamma \\ J &= \frac{\partial Q(t)}{\partial t} \delta(Q - Q(t)) \end{aligned}$$

Тогда в качестве уравнения непрерывности получим:

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

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 упростив 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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q, t) + \left\{ f^{(N)}(Q, t), H(Q, t) \right\} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} f^{(N)}(Q, t) &= -i \hat{L} f^{(N)}(Q, t) \end{aligned}$$

Если гамильтониан не зависит от времени, то получим

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

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:

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

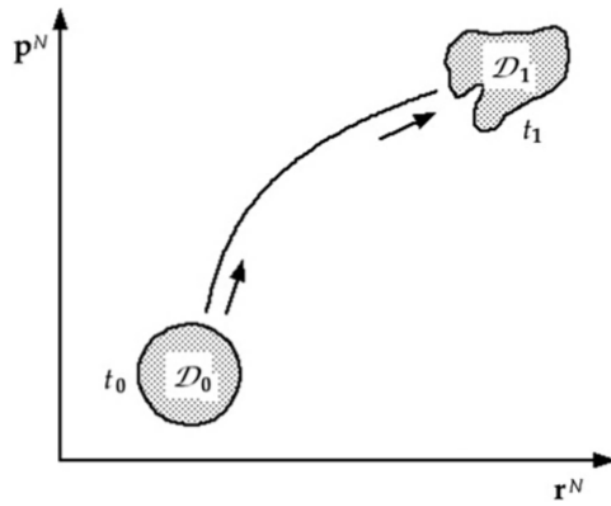


Рис. 1: Сохранение объема фазового пространства.

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:

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

Рассмотрим частный случай, когда сила, действующая на частицу, равна сумме потенциальной силы $\mathbf{X}_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{r}_i}$ 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:

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

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 $n = 1$.

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

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

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

Что такое n ?

стиль формулы

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

Этот билет существенно (полностью) опирается на предыдущий.

Сделаем приближение слабых корреляций:

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

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

Получим бесстолкновительное уравнение Власова:

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

$$\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t) d\mathbf{r}' d\mathbf{p}'$$

где $\bar{\mathbf{F}}(\mathbf{r}, t)$ 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 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$. Таким образом, применение этого приближения подразумевает упрощение - 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 теоретическое 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: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$, 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: $\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div } \vec{Q} = 0$, где \vec{Q} - плотность потока энергии.

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

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

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 .

Нужно
ли заме-
нять тут
тау на
Гамма

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:

$$\begin{aligned} dS(\vec{r}, t) &= \frac{dE(\vec{r}, t)}{T(\vec{r}, t)} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r}, t)} dn(\vec{r}, t) \\ \frac{dS(\vec{r}, t)}{dt} &= \frac{1}{T(\vec{r})} \frac{dE(\vec{r}, t)}{dt} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r})} \frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} \\ \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{T(\vec{r})} \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r})} \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \end{aligned}$$

Для закона сохранения числа частиц выражение точное:

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

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

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

Вывод закона сохранения числа частиц:

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

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

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

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

Вывод закона сохранения энергии:

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \sum_i v(p_i(t)) \left(\frac{\partial}{\partial t} p_i(t) \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i) \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{r}_i(t) \right) \frac{\partial}{\partial t} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \\ &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) - \text{div } \vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\sum_i \varepsilon(\vec{p}_i) \vec{v}_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) \right) = \\ &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) - \text{div } \vec{J}_E \end{aligned}$$

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

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

Возвращаясь к основному уравнению термодинамики:

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

переносим температуру в левую часть и подставляя в уравнение законы сохранения:

$$\begin{cases} \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_E + \vec{E}_e \vec{j}_e \\ \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\operatorname{div}_e \vec{j}_e \end{cases}$$

шрифт в формуле очень маленький

Получаем выражение для потока тепла:

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(\vec{r}, t) - \mu(\vec{r}, t) \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \stackrel{\text{ЗС}}{=} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e \right) + \left(\vec{E}_e - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \right) \vec{j}_e = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q + \varepsilon \vec{j}_e \end{aligned}$$

Получаем 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.

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:

$$\begin{aligned}\vec{J}_Q &= \vec{J}_e - \mu \vec{J} = \vec{J}_e - \frac{\mu}{e} \vec{J} = \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(p) \vec{v}(p) f(\vec{r}, \vec{p}, t) - \mu \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \vec{v}(p) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} (\varepsilon(p) - \mu) \vec{v}(p) f(\vec{r}, \vec{p}, t)\end{aligned}$$

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

Это и есть аналог уравнения непрерывности.

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

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

Преобразуем получившееся выражение с учетом конкретной формы функции распределения:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} v(q, t) f(q, t) \\ F(q, t) f(q, t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} v(q, t) \sum_i \delta(q - q_i(t)) \\ F(q, t) \sum_i \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i v(q, t) \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i F(q, t) \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \sum_i v(q_i(t), t) \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i F(q_i(t), t) \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_i \frac{\partial r_i}{\partial t} \delta(q - q_i(t)) \\ \sum_i \frac{\partial p_i}{\partial t} \delta(q - q_i(t)) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Из этого получим уравнение Больцмана:

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

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

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

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.

Расстави
в инте-
гралах
3 в
степенях
диффе-
ренциа-
лов.

Что та-
кое J?

Дубль
формуль
без изме-
нений

Свойства интеграла столкновений

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

Из закона сохранения массы: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \vec{j} = 0$, 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: $\frac{\partial E}{\partial t} + \text{div } \vec{Q} = 0$, 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

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

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

Воспользовавшись принципом ослабления корреляций

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

можем получить интеграл столкновений в привычном нам виде

$$I(f) = \int w' (f' f'_1 - f f_1) d\Gamma_1 d\Gamma'_1,$$

где w' - вероятность при столкновении перехода $\Gamma' + \Gamma'_1 \rightarrow \Gamma + \Gamma_1$

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

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 $d\Gamma$

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

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

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

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

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

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

Уравнение баланса энергии

Вывод закона сохранения энергии:

$$\begin{aligned}
 \Delta E(\vec{r}, t) &= \sum_i \varepsilon(p_i(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\vec{p}) f((\vec{r}, \vec{p}, t)) \\
 \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \sum_i v(p_i(t)) \left(\frac{\partial}{\partial t} p_i(t) \right) \delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i) \left(\frac{\partial}{\partial t} r_i(t) \right) \frac{\partial}{\partial t} \delta(r - r_i(t)) = \\
 &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div} \vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\sum_i \varepsilon(\vec{p}_i) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) \right) = \\
 &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \operatorname{div} \vec{j}_E \\
 \vec{j}_E &= \sum_i \varepsilon(\vec{p}_i) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\vec{p}) \vec{v}(\vec{p}) f((\vec{r}, \vec{p}, t)) \\
 \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_E &= F_{ext} \vec{j}
 \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned} dS(\vec{r}, t) &= \frac{dE(\vec{r}, t)}{T(\vec{r}, t)} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r}, t)} dn(\vec{r}, t) \\ \frac{dS(\vec{r}, t)}{dt} &= \frac{1}{T(\vec{r})} \frac{dE(\vec{r}, t)}{dt} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r})} \frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} \\ \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{1}{T(\vec{r})} \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{T(\vec{r})} \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \end{aligned}$$

Для закона сохранения числа частиц выражение точное:

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

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

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

Вывод закона сохранения числа частиц:

$$\begin{aligned} n(\vec{r}, t) &= \sum_i \delta(r - r_i(t)) \\ \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} &= - \sum_i \frac{dr_i(t)}{dt} \frac{\partial}{\partial r} \delta(r - r_i(t)) = - \sum_i \vec{v}_i(t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \delta(r - r_i(t)) = - \text{div } \vec{J} \\ \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div } \vec{J} &= 0 \\ \vec{J} &= \sum_i \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} f((\vec{r}, \vec{p}, t)) \vec{v}(\vec{p}) \end{aligned}$$

Вывод закона сохранения энергии:

$$\begin{aligned} \Delta E(\vec{r}, t) &= \sum_i \varepsilon(p_i(t)) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(t)) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \varepsilon(\vec{p}) f((\vec{r}, \vec{p}, t)) \\ \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \sum_i v(p_i(t)) \left(\frac{\partial}{\partial t} p_i(t) \right) \delta(r - r_i(t)) - \sum_i \varepsilon(p_i) \left(\frac{\partial}{\partial t} r_i(t) \right) \frac{\partial}{\partial t} \delta(r - r_i(t)) = \\ &= \sum_i v(p_i(t)) F_i \delta(r - r_i(t)) - \text{div } \vec{J}_E - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\sum_i \varepsilon(\vec{p}_i) \vec{v}_i(t) \delta(r - r_i(t)) \right) = \end{aligned}$$

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

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

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

Возвращаясь к основному уравнению термодинамики:

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

переносим температуру в левую часть и подставляя в уравнение законы сохранения:

$$\begin{cases} \frac{\partial E(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_E + \vec{E}_e \vec{j}_e \\ \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\operatorname{div} \vec{j}_e}{e} \end{cases}$$

Маленький шрифт в формуле

Получаем выражение для потока тепла:

$$T(\vec{r}, t) \frac{\partial S(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} E(\vec{r}, t) - \mu(\vec{r}, t) \frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} \stackrel{3C}{=} \\ = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e \right) + \left(\vec{E}_e - \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \right) \vec{j}_e = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q + \varepsilon \vec{j}_e$$

Получаем следующие важные соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{j}_Q &= \varepsilon \vec{j}_e \\ \vec{j}_Q &= \vec{j}_E - \frac{\mu(\vec{r}, t)}{e} \vec{j}_e \\ \varepsilon &= E_{ext} - \frac{\nabla \mu}{e} \end{aligned}$$

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):

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

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, \dots, Y_n , то есть $S = S(Y_1, Y_2, \dots, Y_n)$, 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 $\partial \rho / \partial t + \text{div } \mathbf{j} = 0, \partial \epsilon / \partial t + \text{div } \mathbf{q} = 0$, где \mathbf{q} - поток полной энергии.

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

В результате мы имеем, что сопряженные потоки

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

сопряженные силы

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

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:

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

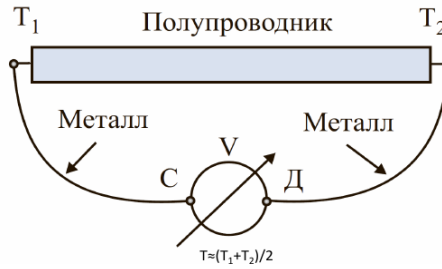
$$\vec{J}_Q = \Pi \vec{J}_e - \tilde{\kappa} \nabla T$$

где

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

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

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



Тогда мы имеем:

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

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

Посчитаем разность потенциалов:

$$V_{CD} = \int_C^D \alpha \nabla T dr$$

Далее,

$$E_F(C) = E_F(D)$$

$$\int_C^D \alpha \nabla T dr = \alpha_M \left(T_1 - \frac{T_1 + T_2}{2} \right) + \alpha_P (T_2 - T_1) + \alpha_M \left(\frac{T_1 + T_2}{2} - T_2 \right) = (\alpha_P - \alpha_M)(T_2 - T_1)$$

Оценим значения коэффициента α .

В металле:

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

В полупроводнике:

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

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

Тогда:

$$\int_C^D \alpha \nabla T dr = \alpha_{\Pi}(T_2 - T_1)$$

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

Эффект Пельтье - это термоэлектрический эффект, при котором выделяется или поглощается тепло при протекании тока через контакт разнородных материалов.

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

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

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

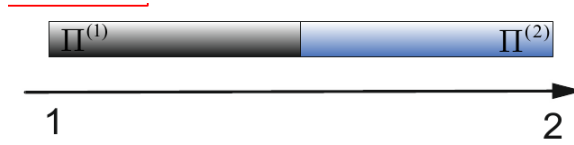


Рис. 2: Стрелочка указывает поток электронов

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

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

Из соотношений Онсагера мы получаем связь:

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

Далее, для тепла можно записать:

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

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

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

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:

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

В полупроводнике:

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

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

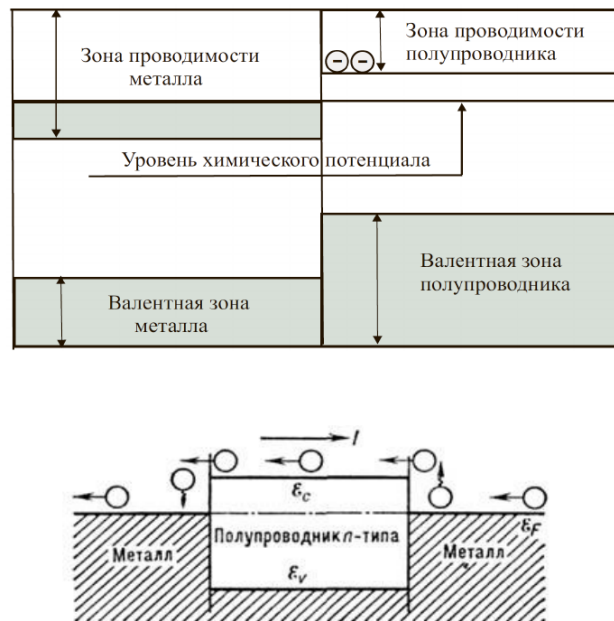


Рис. 3: Электронам приходится преодолевать разницу энергий на границе металл-полупроводник, поэтому выделяется/поглощается тепло

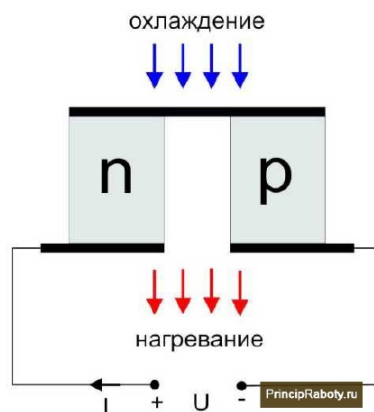


Рис. 4: Принцип работы элемента Пельтье

11. Случайные процессы. Марковский случайный процесс. Пропагатор. Уравнение Чемпена-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, \dots, 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, \dots, 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, \dots, x_{n-2} :

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

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 ($t - t'$).

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

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

Теорема Чемпена-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 Чемпена-Колмогорова из презентации (непрерывный случай):

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

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

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

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

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

Уравнение Чемпена-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):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} T(x, t | x', t') &= \int dx_2 \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ t_2 \rightarrow t}} \frac{1}{\Delta t} (T(x, t + \Delta t | x_2, t_2) - T(x, t | x_2, t_2)) T(x_2, t_2 | x', t') = \\ &= \int dx_2 \lim_{\Delta t \rightarrow +0} \frac{1}{\Delta t} (T(x, t + \Delta t | x_2, t) - \delta(x - x_2)) T(x_2, t | x', t') = -\hat{L} T(x, t | x', t')\end{aligned}$$

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

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

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

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

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

тогда

$$T_t(x | x') = \exp(-\hat{L}(x)t) \delta(x - x')$$

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 Чемпена-Колмогорова для детерминистического процесса. Дифференциальное уравнение Чемпена-Колмогорова для марковских процессов с «разрывными» траекториями.

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:

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

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

Формально он является «случайным процессом».

Уравнение Чемпена-Колмогорова

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

Найдем оператор Лиувилля:

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

Воспользуемся свойством пропагатора:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t|z, t') = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (T(x, t + \Delta t|z, t) - \delta(x - z))$$

Заменим некоторые переменные в уравнении Чемпена-Колмогорова и $T(x_2, t_2|x_1, t_1)$ на $\varphi(z)$.

$$T(x, t|x', t') = \int T(x, t|z, t') \varphi(z) dz$$

Наконец подставим в 5

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

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:

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

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

$$W(x|x', t) dt$$

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

$$\Gamma(x', t) = \int dx W(x|x', t) \quad (4)$$

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

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

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

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

Подставим в 6:

$$\begin{aligned} \hat{L}(x, t) \cdot \varphi(x) &= - \int dz \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (T(x, t + \Delta t | z, t) - \delta(x - z)) \varphi(z) = \\ &= - \int dz \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} ((1 - \Gamma(z, t) \Delta t) \delta(x - z - g(z) \Delta t) + W(x | z) \Delta t - \delta(x - z)) \varphi(z) = \end{aligned}$$

Интеграл разбивается на 3 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 Чемпена-Колмогорова. Получить кинетическое уравнение со столкновительным членом, используя уравнение Чемпена-Колмогорова. При каких условиях столкновительный член становится локальным в координатном пространстве?

Вывести уравнение Лиувилля, используя уравнение Чемпена-Колмогорова.

Найдем оператор Лиувилля:

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

Воспользуемся свойством пропагатора:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, t|z, t') = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (T(x, t + \Delta t|z, t) - \delta(x - z))$$

Вспомним уравнение Чемпена-Колмогорова:

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

Заменим некоторые переменные и $T(x_2, t_2|x_1, t_1)$ на $\varphi(z)$.

$$T(x, t|x', t') = \int T(x, t|z, t') \varphi(z) dz$$

Наконец подставим в 5

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

Или в операторном виде:

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

Подставим определение 1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Откуда сразу следует

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

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

Уравнение Чепмена-Колмогорова из презентации (непрерывный случай):

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

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

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

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

это и называется уравнением Чепмана-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, t_2 . Для произвольного числа состояний:

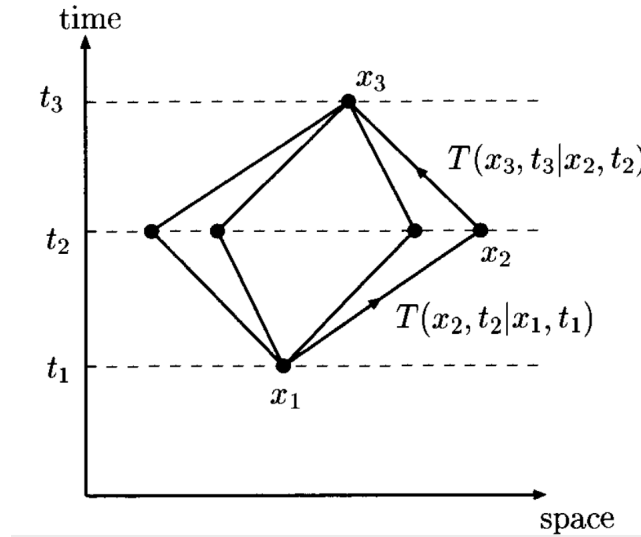


Рис. 5: Функциональный интеграл

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

А теперь выражение функционального интеграла через оператор Лиувилля:

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

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

$$T(x_2, t_2 | x_1, t_1) \approx A(x_2, t_2, dt) \exp(-L[x_2, t_2] dt) \rightarrow \delta(x_2 - x_1), dt = t_2 - t_1 \rightarrow 0$$

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

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

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

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

15. Дискретные марковские случайные процессы. Однородные Марковские цепи. Обратимая марковская цепь, условие детального баланса. Дискретная форма ур. Чемпена-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:

$$p(x_1, \dots, x_n) = p_n(x_n | x_{n-1}) p_{n-1}(x_{n-1} | x_{n-2}) \dots p_2(x_2 | x_1) p_1(x_1)$$

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

$$p_{12}(x_1, x_2) = p_2(x_2 | x_1) p_1(x_1)$$

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

$$p_3(x_3) = \sum_{x_2} p_3(x_3 | x_2) p_2(x_2) dx_2 = \sum_{x_1} \sum_{x_2} p_3(x_3 | x_2) p_2(x_2 | x_1) p_1(x_1) dx_1 dx_2$$

Для однородной цепи получим:

$$p_3(x_3) = \sum_{x_1} \sum_{x_2} p(x_3 | x_2) p(x_2 | x_1) p(x_1) dx_1 dx_2$$

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

Теорема 1. Если для однородной цепи Маркова $\forall x', x''$ выполнено $p(x'' | x') > 0$, 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

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

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 таких цепях стационарного распределения нет. Это можно заметить, посмотрев на уравнение детального баланса.

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

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:

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

Примем во внимание то, что при рассеянии электрон переходит из состояния \mathbf{p} в состояние \mathbf{p}' , то есть состояние \mathbf{p}' должно быть свободным. Следовательно правая часть кинетического уравнения перепишется в следующем виде:

$$\sum_{\mathbf{p}'} [\omega_{\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)(1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t)) - \omega_{\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t)(1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t))]$$

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

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

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

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

Для нахождения ω осталось вычислить матричный элемент потенциала. Перепишем его в представление Фурье (базис плоских волн):

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

Тогда его вид сведется к следующему:

$$|\langle \mathbf{p}' | U | \mathbf{p} \rangle|^2 = V^{-2} |u(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \left| \sum_{j=1}^{N_{imp}} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}_j} \right|^2,$$

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:

$$\begin{aligned} \overline{\left| \sum_{j=1}^{N_{imp}} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}_j} \right|^2} &= \overline{\sum_{j=1}^{N_{imp}} |e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')\mathbf{r}_j}|^2 + \sum_{k \neq j} e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)} =} \\ &= N_{imp} + \sum_{k \neq j} \delta_{\mathbf{p} - \mathbf{p}', 0} = N_{imp} + N_{imp}(N_{imp} - 1) \delta_{\mathbf{p} - \mathbf{p}', 0} \end{aligned}$$

Подставляя в усреднение матричного элемента получаем следующее соотношение:

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

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= \sum_{\mathbf{p}'} \omega_{\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}} (f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)) = \\ &= \sum_{\mathbf{p}'} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_{imp}}{V^2} |u(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'})(f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)) \end{aligned}$$

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

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

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

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

Или, используя борновское приближение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 n_{imp} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \sigma(\theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'})(f(\mathbf{r}, \mathbf{p}', t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)) \\ \sigma(\theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |u(\mathbf{p} - \mathbf{p}')|^2, \quad m = m_e \end{aligned}$$

2. Транспортное сечение рассеяния, транспортное время рассеяния

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

$$\begin{aligned} f &= f^{(0)} + f^{(1)} \\ f^{(1)} &= -\tau e\mathbf{E}\mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon} \end{aligned}$$

Будем также считать электрическое поле постоянный, то есть функция распределения будет зависеть только от импульса. Тогда в борновском приближении уравнение переписывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} e\mathbf{E} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= e\mathbf{E}\mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \varepsilon} = \tau e\mathbf{E} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 n_{imp} \int \frac{d^3 p'}{(2\pi\hbar)^3} \sigma(\theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'}) \left(\mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \mathbf{v}' \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} \right) \\ &\stackrel{g(\varepsilon)\text{--плотность состояний}}{=} \tau e\mathbf{E} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 n_{imp} \int \frac{d\Omega}{4\pi} d\varepsilon' g(\varepsilon') \sigma(\theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}'}) \times \\ &\times \left(\mathbf{v} \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} - \mathbf{v}' \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} \right) = \tau e\mathbf{E} \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 n_{imp} g(\varepsilon) \frac{\partial f^{(0)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sigma(\theta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}) (\mathbf{v} - \mathbf{v}') \end{aligned}$$

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

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

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 отличие от времени релаксации, эта величина учитывает влияние обратных столкновений (т.н. приход).

Помимо этого мы получаем выражение для проводимости (обратное сопротивление):

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

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

$$- \oint p d\mathbf{f}, \quad (8)$$

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):

$$- \oint p d\mathbf{f} = - \int \nabla p dV. \quad (9)$$

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

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p. \quad (10)$$

Теперь распишем ускорение:

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

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

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

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:

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

Так как уравнение Эйлера в тензорных обозначениях имеет вид:

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

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

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

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

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

Вытащим из уравнения вот такой тензор:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k, \quad (17)$$

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

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:

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

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

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

остается справедливым.

Добавим поправку в тензор потока импульса:

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

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. Но это не точно. Еще версия - что гидродинамика применяется, если какие-то тела/частицы движутся в потоке частиц с много меньшим радиусом, и движутся медленно.

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 рассмотрим 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

$$- \oint p d\mathbf{f}, \quad (22)$$

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):

$$- \oint p d\mathbf{f} = - \int \nabla p dV. \quad (23)$$

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

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p. \quad (24)$$

Теперь распишем ускорение:

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

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

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

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:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_i = \rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial t} v_i. \quad (27)$$

Так как уравнение Эйлера в тензорных обозначениях имеет вид:

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

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

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

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

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

Вытащим из уравнения вот такой тензор:

$$\Pi_{ik} = p\delta_{ik} + \rho v_i v_k, \quad (31)$$

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

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:

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

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

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

остается справедливым.

Добавим поправку в тензор потока импульса:

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

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 Ω скорость \mathbf{v} равна векторному произведению $[\Omega, \mathbf{r}]$. Из производных от скорости по координатам в данном случае можно составить следующие линейные комбинации, которые будут обращаться в ноль:

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i}. \quad (36)$$

Поэтому тензор вязких напряжений должен содержать именно эти суммы производных.

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

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

Слагаемые сгруппированы так, что при свертке тензора (при $i = k$) слагаемое в скобках 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

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

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):

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

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

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

В случае несжимаемой жидкости $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$.

Покажем положительность первой вязкости.

Полная кинетическая энергия несжимаемой жидкости равна:

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

Производная этой энергии по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\rho v^2}{2} = \rho v_i \frac{\partial v_i}{\partial t}. \quad (42)$$

Из уравнения Навье-Стокса подставляем:

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

то есть получаем:

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

где обозначено

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

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

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

Интегрируем по объему, преобразуя один из интегралов в поверхностный:

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

Далее по каким-то не очень очевидным соображениям поверхностный интеграл обнуляется, и остается:

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

Так как в несжимаемой жидкости тензор вязких напряжений имеет вид

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

то имеем

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

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. Но это не точно. Еще версия - что гидродинамика применяется, если какие-то тела/частицы движутся в потоке частиц с много меньшим радиусом, и движутся медленно.

19. Вывести уравнения Навье-Стокса из кинетического уравнения Больцмана. Учесть рассеяние на замороженном 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 напомним кинетическое уравнение:

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

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

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

Домножим теперь кинетическое уравнение на A и проинтегрируем по Γ :

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

Обозначив

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

заметив, что

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

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

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

Рассмотрим теперь это уравнение для плотности импульса, то есть положим

$$A = p_i. \quad (57)$$

Имеем:

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

Немного свернем индексы:

$$\frac{\partial}{\partial t} n \langle p_i \rangle + \nabla_k \int p_i v_k f d\Gamma = n F_i + \int p_i I_{st} d\Gamma. \quad (59)$$

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

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

обнаруживаем, что:

$$\Pi_{ik} = \nabla_k \int p_i v_k f d\Gamma. \quad (61)$$

В итоге получаем уравнение Навье-Стокса:

$$\frac{\partial}{\partial t} n \langle p_i \rangle + \nabla_k \Pi_{ik} = n F_i + \int p_i I_{st} d\Gamma. \quad (62)$$

Так как плотность электрического тока

$$j_i = e \int v_i f d\Gamma, \quad (63)$$

то

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

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

$$I_1 \approx -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (65)$$

либо столкновения на неподвижных примесях, не сохраняющие импульс

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

Вклад первого оказывается нулевым, для второго имеем:

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

То есть:

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

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:

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

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

Уравнения Чепмена-Колмогорова:

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

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

$T(x', t' | x, t)$ - 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:

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

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

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

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) $\Phi_{t-t'}^{\xi^{fix}(t)}(x')$, и затем усредним $\delta(x - \Phi_{t-t'}^{\xi^{fix}(t)}(x'))$ 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 $t' \rightarrow t$, $t \rightarrow t + \delta t$, 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:

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

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

$$\begin{aligned} F_1(x) \delta t = \langle \delta x(t) \rangle &= g(x(t)) \delta t + \int_t^{t+\delta t} \langle \xi(t') \rangle dt' = \left| \mathbb{E}(\xi) = 0, \quad \xi - \text{случайная сила, шум} \right| = \\ &= g(x) \delta t \rightarrow F_1(x) = g(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_2(x) \delta t = \langle [\delta x(t)]^2 \rangle &\approx \left\langle \left[g(x(t)) \delta t + \int_t^{t+\delta t} \xi(t') dt' \right]^2 \right\rangle = \int_t^{t+\delta t} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle dt_1 dt_2 + O((\delta t)^2) = \\ &= \left| \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = D \delta(t_1 - t_2) \right| = D \delta t \rightarrow F_2(x) = \frac{1}{\delta t} \int_t^{t+\delta t} \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle dt_1 dt_2 = D \end{aligned}$$

Теперь конкретизируем общий вид уравнения Фоккера-Планка 74.

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial r} \\ x = q &= (r, p) \\ g(x) &= \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial r} \right) = (v(p), F(r)) \\ \frac{dx}{dt} = g(x(t)) &\rightarrow \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} r \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v(p) \\ -\gamma p - \nabla U \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \xi_p(t) \end{pmatrix} = g(r, p) \\ T(x, t | x_0, t_0) &= \langle f(r, p, t) \rangle_\xi \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

$D = 2mT\gamma$ 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 $F(r) = -\gamma p - \nabla U + \xi_p(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(r, p, t) + \frac{\partial}{\partial r} [v(p) f(r, p, t)] + \frac{\partial}{\partial p} [(-\gamma p - \nabla U + \xi_p(t)) f(r, p, t)] &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} f(r, p, t) = \hat{\Omega} f &= - \left[\frac{\partial}{\partial r} [v(p) f(r, p, t)] + \frac{\partial}{\partial p} [(-\gamma p - \nabla U + \xi_p(t)) f(r, p, t)] \right] \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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).

$$\begin{aligned} \langle f(r, p, t + dt) \rangle_\xi &= \left\langle \left[1 + \int_t^{t+dt} \hat{\Omega}(t_1) dt_1 + \int_t^{t+dt} \hat{\Omega}(t_1) dt_1 \int_t^{t_1} \hat{\Omega}(t_2) dt_2 + \dots \right] \right\rangle_\xi f(r, p, t) = \\ &= \left[1 + \int_t^{t+dt} \langle \hat{\Omega}(t_1) \rangle dt_1 + \int_t^{t+dt} \int_t^{t_1} \langle \hat{\Omega}(t_1) \hat{\Omega}(t_2) \rangle dt_1 dt_2 + \dots \right] f(r, p, t) \end{aligned}$$

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 $f(r, p, t) \rightarrow \langle f(r, p, t) \rangle_\xi$, которое заключается в закруглении по временам на порядок корреляционного времени случайной силы. Переноса f влево и деля на dt получаем:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$D = 2mT\gamma$ 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:

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

Физически нужно его понимать на примере частицы в потенциале с трением, в которую случайным образом ударяется множество разных частиц. В пределе большого трения γ (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:

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

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

$$\langle R(t)R(t') \rangle = \Gamma S(t-t') \quad (77)$$

имеет резкий пик в $t = t'$. Для простоты мы будем полагать, что $S(t-t') = \delta(t-t')$. Из общих соображений ($\langle mv^2 \rangle = k_B T$) для уравнения (75) можно понять, что $\Gamma = 2\gamma m k_B T$. Понять, что можно пренебречь \dot{v} можно из следующих соображений. Обозначим за $F(t) = R(t) - \frac{\partial V(x)}{\partial x}$. Если эта сила имеет характерную частоту ω : $F(t) \sim F_\omega \cos \omega t = \text{Re}\{F_\omega e^{i\omega t}\}$, то уравнение на $v = \text{Re}\{v_\omega e^{i\omega t}\}$ выглядит следующим образом

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

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

$$n(x, t) = \int_p f(x, p, t) \quad (79)$$

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

$$\frac{\partial f(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (v f(x, p, t)) + \text{total derivatives by } p \quad (80)$$

Поэтому, используя уравнения (76), получаем:

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

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

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

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

$$\langle \rho \rangle = 0 \quad \langle \rho(\tau) \rho(\tau') \rangle = 2\gamma m k_B T \delta(t - t')|_{t=2\gamma m \tau, t'=2\gamma m \tau'} = 2k_B T \delta(\tau - \tau') \quad (83)$$

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

$$n(x, \tau + \Delta\tau) = n(x, \tau) + \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \hat{\Omega}(\tau_1) n(x, \tau_1) \quad (84)$$

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:

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

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):

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

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, по там:

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

Далее мы будем следить за слагаемыми порядка $O(\Delta\tau)$. В этом приближении получаем:

$$\left\langle \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \hat{\Omega} n(x, \tau) \right\rangle_{\rho(\tau)} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial V(x)}{\partial x} \langle n(x, \tau) \rangle \right) \Delta\tau + O(\Delta\tau^2) \quad (88)$$

В слагаемом с двумя интегрированиями в ряде (86) мы имеем слагаемые типа $\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} \langle n(x, \tau) \rangle$, двойное интегрирование по которому дает $O(\Delta\tau^2)$. Есть так же перекрёстные слагаемые, в которые ρ входит линейно, соответственно, после усреднения дает ноль (ну это так лектор думает, по крайней мере на слайдах, на самом деле эта штука усредняется вместе с $n(x, \tau)$, но можно полагать, что это $O(\Delta\tau^2)$). Есть ещё слагаемое в котором усредняется $\rho(\tau_1)\rho(\tau_2)$ (опять таки,

умноженное на $n(x, \tau)$ и, опять, усреднение можно “отщепить”, полагая, что взаимодействие $\rho\rho$ с n порядка $O(\Delta\tau^2)$. И поэтому получаем:

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

$$= k_B T \Delta\tau \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle n(x, \tau) \rangle \quad (89)$$

Теперь переносим в ряде (86) “единичку” (которая умножается на $\langle n(x, \tau) \rangle$), делим на $\Delta\tau$ и устремляя $\Delta\tau \rightarrow 0$, 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:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \langle n(x, \tau) \rangle = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{\langle n(x, \tau + \Delta\tau) \rangle - \langle n(x, \tau) \rangle}{\Delta\tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \langle n(x, \tau) \rangle \right) + k_B T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle n(x, \tau) \rangle \quad (90)$$

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

$$\frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\gamma m} \frac{\partial V}{\partial x} \langle n(x, t) \rangle + \frac{k_B T}{\gamma m} \frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial x} \right] = D \frac{\partial}{\partial x} \left[\beta \frac{\partial V}{\partial x} \langle n(x, t) \rangle + \frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial x} \right] \quad (91)$$

Здесь введены стандартные коэффициент диффузии $D = \frac{k_B T}{\gamma m}$ и обратная температура $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Тут есть некоторые расхождения с лектором в коэффициентах, а скорее в обозначениях, просто то, что он обозначает D у меня соответствует Γ , как видно из соотношения (77). Я же за D обозначил коэффициент диффузии.

Соотношения Эйнштейна

Из уравнения Смолуховского получаем:

$$\frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x} \quad (92)$$

$$J = -D \left[\beta \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \right] \langle n(x, t) \rangle \quad (93)$$

Когда потенциал не зависит от x : $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$, это уравнение станет уравнением диффузии:

$$\frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \langle n(x, t) \rangle}{\partial x^2} \quad (94)$$

И из этого заключаем, что ранее полученный коэффициент D и есть коэффициент диффузии:

$$D = \frac{k_B T}{\gamma m} \quad (95)$$

Заметим также, что равновесная концентрация $n = n_0 \exp(-\beta V)$ решает уравнение Смолуховского:

$$\beta \frac{\partial V}{\partial x} n(x, t) + \frac{\partial n}{\partial x} \equiv 0 \quad (96)$$

В основном расхождения от лектора были из-за того, что он считал, что $\langle R(t) R(t') \rangle = D \delta(t - t')$ и потом из условия, что это уравнение должно решаться равновесной функцией распределения он получил, что $D = 2\gamma m k_B T$, что и выражает соотношение Эйнштейна. Разница со стандартным выражением, для коэффициента диффузии $D = \frac{k_B T}{\gamma}$ происходит из того, что мы сказали $\ddot{x} = -\gamma \dot{x} + \dots$. То есть наш коэффициент трения в себе содержит массу частицы. По сути, в моем

выводе, я вывел соотношение Эйнштейна, когда сказал, что $\langle mv^2 \rangle = k_B T$ и из этого получил $\langle R(t)R(t') \rangle = 2\gamma m k_B T \delta(t - t')$. Лектор это не использовал и получил в самом конце подстановкой равновесной функции в уравнение Смолуховского. Действительно, если просто положить:

$$\langle R(t)R(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t') \quad (97)$$

и ничего не предполагать про Γ , то для функций ρ мы получим:

$$\langle \rho(\tau)\rho(\tau') \rangle = \frac{\Gamma}{\gamma m} \delta(\tau - \tau') \quad (98)$$

Тогда уравнение (89) перепишется

$$\left\langle \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} d\tau_1 \hat{\Omega}(\tau_1) \int_{\tau}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{\Omega}(\tau_2) n(x, \tau) \right\rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle n(x, t) \rangle \quad (99)$$

Ну и тогда уравнение Смолуховского будет:

$$\frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\gamma m} \frac{\partial V}{\partial x} \langle n(x, t) \rangle + \frac{\Gamma}{2(\gamma m)^2} \frac{\partial \langle n(x, t) \rangle}{\partial x} \right] \quad (100)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\gamma m} \frac{\partial V}{\partial x} \exp\left\{-\frac{V}{k_B T}\right\} - \frac{\Gamma}{2(\gamma m)^2 k_B T} \frac{\partial V}{\partial x} \exp\left\{-\frac{V}{k_B T}\right\} \right] = 0 \quad (101)$$

и получаем $\Gamma = 2\gamma m k_B T$, что лектор называет соотношением Эйнштейна (что, безусловно, справедливо, но очень нетипичная запись этого соотношения).

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.

Пусть $\xi(t) := \xi(\omega, t)$ – стохастический процесс, $t \in [0, T]$ – время, $\omega \in \Omega$ – исход. Пусть $P(x, t)$ – плотность вероятности: $P(x, t) = \frac{\partial F(x, t)}{\partial x}$, $F(x, t) = \mathbb{P}(\xi(\omega, t) \leq x)$ – функция распределения. Можно ввести совместную функцию распределения:

$$F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = \mathbb{P}(\xi(\omega, t_i) \leq x_i, i \in \overline{1, n}) \quad (102)$$

и соответственно совместные плотности вероятности:

$$P(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = \frac{\partial^n F(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n)}{\partial x_1 \dots \partial x_n} \quad (103)$$

Ну и тогда мы можем вместе условные вероятности:

$$P(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{P(x_1, x_2; t_1, t_2)}{P(x_1, t_1)} \quad (104)$$

Ну и более высокого порядка:

$$P(x_{k+1}, \dots, x_n; t_{k+1}, \dots, t_n | x_1, \dots, x_k; t_1, \dots, t_k) = \frac{P(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n)}{P(x_1, \dots, x_k; t_1, \dots, t_k)} \quad (105)$$

Стохастический процесс $\xi(t)$ называется *марковским*, если

$$P(x_n, t_n | x_1, \dots, x_{n-1}; t_1, \dots, t_{n-1}) = P(x_n, t_n | x_{n-1}; t_{n-1}), \quad t_1 < t_2 < \dots < t_n \quad (106)$$

Такой процесс полностью определяется $P(x, t)$ и $P(x_2, t_2 | x_1, t_1)$, не сложно восстановить всю иерархию из этих двух. Из определения условной плотности вероятности, имеем

$$P(x_1, x_2; t_1, t_2) = P(x_2, t_2 | x_1, t_1) P(x_1, t_1) \quad (107)$$

Очевидно, что

$$P(x_2, t_2) = \int dx_1 P(x_1, x_2; t_1, t_2) = \int dx_1 P(x_2, t_2 | x_1, t_1) P(x_1, t_1) \quad (108)$$

Рассмотрим

$$P(x_1, x_2, x_3; t_1, t_2, t_3) = P(x_3, t_3 | x_1, x_2; t_1, t_2) P(x_1, x_2; t_1, t_2) \quad (109)$$

Для марковского процесса имеем:

$$P(x_3, t_3 | x_1, x_2; t_1, t_2) = P(x_3, t_3 | x_2, t_2) \quad (110)$$

если считать, что $t_1 < t_2 < t_3$. Тогда из того, что

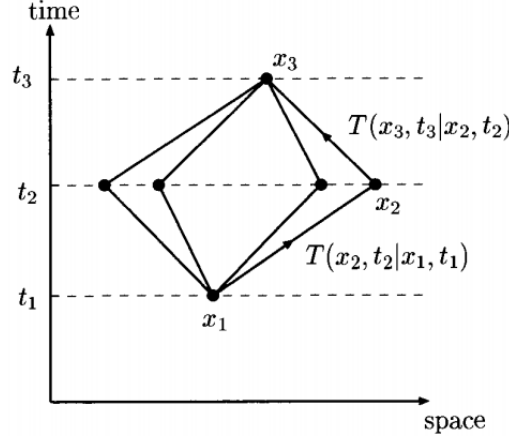
$$P(x_1, x_3; t_1, t_3) = \int dx_2 P(x_1, x_2, x_3; t_1, t_2, t_3) \quad (111)$$

получаем, что

$$P(x_1, x_3; t_1, t_3) = P(x_1, t_1) \int dx_2 P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) \quad (112)$$

Отсюда получаем *уравнение Чепмена-Колмогорова*:

$$\boxed{P(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int dx_2 P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1)} \quad (113)$$



В целом, ясно, что размерность пространства не важна (да и вообще, то, что это линейное пространство, как я понимаю)

$$P(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_1, t_1) = \int d\mathbf{x}_2 P(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_2, t_2) P(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1) \quad (114)$$

Марковский процесс называется *непрерывным*, если для любого $\varepsilon > 0$ (ФУПМ – хуйня!)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| > \varepsilon} d\mathbf{x} P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) = 0 \quad (115)$$

Ну, что, как бы логично, ага? Так вот, если же эта штука. Но мы пока не будем предполагать непрерывность, ибо название билета (*квазинепрерывный марковский процесс*). Поэтому введём

$$W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t)}{\Delta t} \quad \text{в области } \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\| > \varepsilon \quad (116)$$

Суть этой величины плотность вероятности перехода из точки \mathbf{z} в точку \mathbf{x} в момент времени t за бесконечно малый промежуток времени. Мы будем предполагать, что предел этот существует и, вообще говоря, не равен нулю (хотя не воспрещается, просто будет приводить к непрерывному марковскому случаю). Также мы будем полагать существование следующих пределов:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\|\mathbf{x}-\mathbf{z}\| > \varepsilon} d\mathbf{x} (x_i - z_i) P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = A_i(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon) \quad (117)$$

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{\|\mathbf{x}-\mathbf{z}\| > \varepsilon} d\mathbf{x} (x_i - z_i)(x_j - z_j) P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = B_{ij}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon) \quad (118)$$

Если кого-то успокоит, то эта сходимость понимается в равномерном по $\mathbf{z}, \varepsilon, t$ смысле. Наверное, уже стало понятно, но я на всякий скажу это (хотя хз, скорее напишу, да?), марковский процесс удовлетворяющий этим свойствам с $W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) \neq 0$ называется *квазинепрерывным марковским процессом*. Тогда *дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова* будем называть уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t_0)}{\partial t} = & \underbrace{- \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t_0)] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t_0)]}_{\text{отвечает за непрерывные марковские процессы}} + \\ & \underbrace{\int d\mathbf{z} W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) P(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t_0) - W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) P(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t_0)}_{\text{отвечает за "скачки" } \mathbf{z} \leftrightarrow \mathbf{x}} \quad (119) \end{aligned}$$

Remark. Вообще говоря, мы определили $W(\mathbf{x}|z, t)$ только в области $||\mathbf{x} - \mathbf{z}|| > \varepsilon$, а интеграл у нас берется по всему пространству, но эпсилон у нас произвольный, поэтому мы будем понимать интегралы в смысле главного значения. Не знаю, насколько важным является это замечание, но я решил добавить, чтобы если до вас доедутся (хотя, мы же ебать на кафедре теорсосу), вы могли что-то сказать.

Оно описывает как “непрерывные процессы”, так и процессы соответствующие “скачкам” (*jump processes*). Если процесс непрерывный $W(\mathbf{x}|z, t) = 0$, то уравнение переходит в *уравнение Фоккера-Планка*

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, t_0)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, t_0)] + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [B_{ij}(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t|\mathbf{y}, t_0)] \quad (120)$$

К слову, на лекциях было по другому. Во-первых, в презенташках вообще не было понятия “дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова” и тем более не было в нём столкновительного члена. Было общее кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{g}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)) = \int d\mathbf{z} (W(\mathbf{x}|\mathbf{z}) p(\mathbf{z}, t) - W(\mathbf{z}|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)) \quad (121)$$

Вот, и столкновительным членом в этом уравнении называли интеграл с правой стороны. Ну далее, мы просто делаем замену:

$$W(\mathbf{x}|\mathbf{z}, t) = \Omega(\mathbf{z}, \mathbf{y}, t) \quad \mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{z} \quad (122)$$

и меняя переменную интегрирования получим:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{g}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)) = \int d\mathbf{y} (-\Omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) + \Omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x}, t)) \quad (123)$$

Ну, тут сразу видно, что он тут, возможно, ошибся, во втором слагаемом должно быть $\Omega(\mathbf{x}, -\mathbf{y}, t)$. Возможно, это не ошибка, а он воспользовался какой-то симметрией, но не очевидно, вообще, не очевидно, из-за того, что утверждается, что это очень общее уравнение применимое очень много где. Ну, а далее берётся эта функция $\Omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) = F(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ и раскладывается в ряд Тейлора до второго порядка:

$$\Omega(\mathbf{x} - \mathbf{y}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) = \Omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x}, t) - y_i \frac{\partial}{\partial y_i} (\Omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x}, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} (\Omega(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) p(\mathbf{x}, t)) \quad (124)$$

и как можно заметить, тут собираются функции $A_i(\mathbf{x}, t)$ и $B_{ij}(\mathbf{x}, t)$ всё это подставляется и получаем уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{g}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i(\mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t)) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij}(\mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t)) \quad (125)$$

Почему я сразу так не написал, как лектор? Потому что лектор в лекциях не называет это (121) дифференциальным уравнением Чепмена-Колмогорова, а это общее кинетическое уравнение. Ничего про квазинепрерывный марковский процесс в презенташках не упомянуто. Я его спрашивал по этому поводу, он сказал, что на лекциях это обсуждалось и что ошибки в формулировке билета нет. Поэтому пришлось достать материал из сети про дифференциальное уравнение Чепмена-Колмогорова. Там кстати есть и вывод этого уравнения, но не знаю, насколько нужны доказательства, если, во-первых, в билете не сказано про вывод дифференциального уравнения Чепмена-Колмогорова, а во-вторых, если экзамен будет в формате блиц-опрос, то скорее всего даже не спросят, максимум само уравнение попросят написать.

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).

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:

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

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

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

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 :

$$G_{AB}^K(t, t') = -i\langle\{A(t), B(t')\}_+\rangle = -iSp(\rho\{A(t), B(t')\}_+), \quad (126)$$

$$G_{AB}^r(t, t') = -i\theta(t - t')\langle[A(t), B(t')]_-\rangle = -i\theta(t - t')Sp(\rho[A(t), B(t')]_-) = \langle\langle A(t)|B(t')\rangle\rangle \text{ (обозначение),} \quad (127)$$

$$G_{AB}^a(t, t') = i\theta(t' - t)\langle[A(t), B(t')]_-\rangle = i\theta(t' - t)Sp(\rho[A(t), B(t')]_-). \quad (128)$$

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 $\beta = \frac{1}{T}$, $Z = Sp(e^{-\beta H})$. 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: $\hat{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$, $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$;

5. Для любого оператора A и произвольного полного ортонормированного базиса $\{|n\rangle\}$: $A = \sum_{n,m} |n\rangle\langle m|A_{nm}$, $A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$, $Sp(A) = \sum_n \langle n|A|n\rangle$.

Сначала докажем соотношение а). Согласно (127) рассмотрим след

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

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

$$\begin{aligned} & \sum_{n,k,m,l} \langle n | e^{-\beta H} e^{iHt} | k \rangle \langle k | A | m \rangle \langle m | e^{-iHt} e^{iHt'} | l \rangle \langle l | B e^{-iHt'} | n \rangle = \\ & = \sum_{n,k,m,l} e^{-\beta E_n} e^{iE_n t} \delta_{nk} A_{km} e^{-iE_m t} e^{iE_m t'} \delta_{ml} \langle l | B | n \rangle e^{-iE_n t'} \delta_{mn} = \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{iE_n t} A_{nm} e^{-iE_m t} e^{iE_m t'} B_{mn} e^{-iE_n t'}. \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} & Z^{-1} \sum_{n,m} \left(e^{-\beta E_n} e^{iE_n t} A_{nm} e^{-iE_m t} e^{iE_m t'} B_{mn} e^{-iE_n t'} - e^{-\beta E_m} e^{iE_m t'} B_{mn} e^{-iE_n t'} e^{iE_n t} A_{nm} e^{-iE_m t} \right) = \\ & = Z^{-1} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} e^{i(E_n - E_m)(t - t')} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right). \end{aligned}$$

Тогда для запаздывающей двухвременной функции Грина мы имеем выражение

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

Теперь надо найти преобразование Фурье от этой корреляционной функции:

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

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

$$\begin{aligned} G_{AB}^r(\omega) &= -iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n - E_m)\tau + i\omega\tau - \delta\tau} \theta(\tau) \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} d\tau = \\ &= -iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} e^{i(E_n - E_m)\tau + i\omega\tau - \delta\tau} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) d\tau = \\ &= \frac{-iZ^{-1}}{i(E_n - E_m) + i\omega - \delta} e^{i(E_n - E_m)\tau + i\omega\tau - \delta\tau} \Big|_0^{+\infty} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) = \\ &= \frac{iZ^{-1}}{i(E_n - E_m) + i\omega - \delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega + i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right), \end{aligned} \tag{129}$$

где предполагается 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 $\int G_{AB}^r(\omega) e^{-i\omega(t - t')} \frac{d\omega}{2\pi}$, то в случае $t - t' < 0$, контур нужно замыкать в верхней полуплоскости, которая не содержит полюсов функции $G_{AB}^r(\omega)$, 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 $\omega + i\delta$, $\delta \rightarrow +0$ (или просто $\omega + i0$) определяет правильное правило обхода полюсов.

Выражение (129) можно преобразовать с помощью введения дельта-функции и нового интегрирования:

$$G_{AB}^r(\omega) = \int \frac{Z^{-1}}{\omega - x + i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) \delta(x - E_m + E_n) dx = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0} dx, \quad (130)$$

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 (129), что

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

Тогда окончательно имеем то, что требовалось:

$$G_{AB}^r(\omega) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega + i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0} dx, \quad (131)$$

$$A_{spf}(x) = Z^{-1} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(x - E_m + E_n) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{AB}^r(x). \quad (132)$$

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

$$\begin{aligned} G_{AB}^a(\omega) &= \int G_{AB}^a(t - t') e^{i\omega(t-t')} d(t - t') = \\ &= iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n - E_m)\tau + i\omega\tau} \theta(-\tau) \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} d\tau = \left/ \tau \rightarrow -\tau \right/ = \\ &= iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau} \theta(\tau) \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} d\tau = \\ &= iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} d\tau. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} G_{AB}^a(\omega) &= iZ^{-1} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau - \delta\tau} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) d\tau = \\ &= \frac{iZ^{-1}}{-i(E_n - E_m) - i\omega - \delta} e^{-i(E_n - E_m)\tau - i\omega\tau - \delta\tau} \Big|_0^{+\infty} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) = \\ &= \frac{-iZ^{-1}}{-i(E_n - E_m) - i\omega - \delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega - i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right). \end{aligned} \quad (133)$$

Так же, как и в (130) с помощью введения дельта-функции получаем соотношение б):

$$G_{AB}^a(\omega) = \int \frac{Z^{-1}}{\omega - x - i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) \delta(x - E_m + E_n) dx = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x - i0} dx, \quad (134)$$

где A_{spf} определено в (132), 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 (126). Это делается аналогично выше разобранному случаю:

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

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

$$\begin{aligned}
G_{AB}^K(\omega) &= \int G_{AB}^K(t - t') e^{i\omega(t - t')} d(t - t') = \\
&= -iZ^{-1} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_n - E_m)(t - t') + i\omega(t - t')} \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m} \right) d(t - t') = \\
&= -2\pi i \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + E_n - E_m), \tag{135}
\end{aligned}$$

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:

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

и аналогично для остальных.

Доказательство флуктуационно-диссипативной теоремы (ФДТ)

Используя полученные соотношения (131), (132), (134) и формулу Сохоцкого, получаем

$$\begin{aligned} G_{AB}^r(\omega) - G_{AB}^a(\omega) &= \int \left[\frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0} - \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x - i0} \right] dx = -2\pi i \int A_{spf}(x) \delta(\omega - x) dx = -2\pi i A_{spf}(\omega) = \\ &= 2i \text{Im} G_{AB}^r(\omega). \end{aligned} \quad (136)$$

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

$$\begin{aligned} (G_{AB}^r(\omega) - G_{AB}^a(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) &= 2i \text{Im} G_{AB}^r(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \\ &= \int (132), \delta(\omega - y) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \delta(\omega - y) \coth\left(\frac{\hbar y}{2T}\right), \hbar = 1 \int = \\ &= -2\pi i Z^{-1} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega - E_m + E_n) \coth\left(\frac{-E_n + E_m}{2T}\right) = \\ &= -2\pi i Z^{-1} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega - E_m + E_n) \frac{e^{\beta(E_m - E_n)} + 1}{e^{\beta(E_m - E_n)} - 1} = \\ &= -2\pi i Z^{-1} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega - E_m + E_n) \frac{e^{\beta(-E_n)} + e^{\beta(-E_m)}}{e^{\beta(-E_n)} - e^{\beta(-E_m)}} = \\ &= -2\pi i Z^{-1} \left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m} \right) A_{nm} B_{mn} \delta(\omega - E_m + E_n) = G_{AB}^K(\omega) \end{aligned}$$

Итак, мы получили требуемое утверждение:

$$G_{AB}^K(\omega) = (G_{AB}^r(\omega) - G_{AB}^a(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = 2i \text{Im} G_{AB}^r(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right). \quad (137)$$

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 (сделаем вид что помним это все). 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). Главное не перепутать.

Представление взаимодействия – это промежуточный случай, когда все меняется. Ну и зачем тогда эта хуйня? Отвечаю: в этом представлении удобно работать с взаимодействием (справедливо).

Табличка из вики: (https://en.wikipedia.org/wiki/Interaction_picture – лектор рекомендует, я по сути тут перевожу)

Evolution of:	Picture		
	Heisenberg	Interaction	Schrödinger
Ket state	constant	$ \psi_I(t)\rangle = e^{iH_0, st/\hbar} \psi_S(t)\rangle$	$ \psi_S(t)\rangle = e^{-iHst/\hbar} \psi_S(0)\rangle$
Observable	$A_H(t) = e^{iHst/\hbar} A_S e^{-iHst/\hbar}$	$A_I(t) = e^{iH_0, st/\hbar} A_S e^{-iH_0, st/\hbar}$	constant
Density matrix	constant	$\rho_I(t) = e^{iH_0, st/\hbar} \rho_S(t) e^{-iH_0, st/\hbar}$	$\rho_S(t) = e^{-iHst/\hbar} \rho_S(0) e^{iHst/\hbar}$

Что такое $H_{0,S}$?

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

$H_{0,S}$ – няшная легко решаемая часть, например не зависящая от времени (нам же с ней работать в этом представлении, зачем стрелять себе в колено)

$H_{1,S}$ – все остальное говно, которое идет нахуу.

Понятно, что хорошо когда $H_{1,S}$ мелкое возмущение, а $H_{0,S}$ – система, которую мы уже умеем решать. Спойлер – 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):

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &= e^{i\hat{H}_0, st/\hbar} |\psi_S(t)\rangle \\ \hat{A}_I(t) &= e^{i\hat{H}_0, st/\hbar} \hat{A}_S(t) e^{-i\hat{H}_0, st/\hbar} \\ \hat{V}_I(t) &= e^{i\hat{H}_0, st/\hbar} \hat{V}_S(t) e^{-i\hat{H}_0, st/\hbar} \\ \hat{\rho}_I(t) &= e^{i\hat{H}_0, st/\hbar} \hat{\rho}_S(t) e^{-i\hat{H}_0, st/\hbar} \end{aligned}$$

Про переходы между Гейзенбергом и Шредингером можно из таблички сообразить. (допишу для овощей потом мб)

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

$$\langle A_I(t) \rangle = \langle \psi_I(t) | A_I(t) | \psi_I(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | e^{-iH_0, st} e^{iH_0, st} A_S e^{-iH_0, st} e^{iH_0, st} | \psi_S(t) \rangle = \langle A_S(t) \rangle$$

$$\text{и } \langle A_I(t) \rangle = \text{Tr}(\rho_I(t) A_I(t)).$$

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

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) = [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)]$$

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

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_I(t) &= [\hat{V}_I(t), \hat{\rho}_I(t)] \\ \hat{\rho}_I(t) &\approx \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(t_0)] dt' \\ \hat{\rho}_I(t) &\approx \hat{\rho}_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_I(0)] dt' = \hat{\rho}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_0] dt' \\ \hat{\rho}_0 &= Z^{-1} e^{-\hat{H}_0/T}, \text{ при } t_0 \rightarrow -\infty \end{aligned}$$

Тогда:

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

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 $t_0 = -\infty$.

$$\begin{aligned} \text{tr} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t [\hat{V}_I(t'), \hat{\rho}_0 \hat{x}_I(t)] dt' \right) &= \text{tr} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t (\hat{V}_I(t') \hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0 \hat{V}_I(t')) \hat{x}_I(t) dt' \right) = \\ &= \text{tr} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t (\hat{x}_I(t) \hat{V}_I(t') \hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0 \hat{V}_I(t') \hat{x}_I(t)) dt' \right) = \text{tr} \left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{\rho}_0 [\hat{x}_I(t), \hat{V}_I(t')]_- dt' \right) = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \left\langle [\hat{x}_I(t), \hat{V}_I(t')]_- \right\rangle dt' \end{aligned}$$

Подведем итоги. В линейном приближении по возмущению:

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_t &= \text{tr}(\hat{\rho}_I(t) \hat{x}_I(t)) \approx \langle \hat{x} \rangle_{V=0} + \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t \left\langle \langle \hat{x}_I(t) | \hat{V}_I(t') \rangle \right\rangle dt' \\ \left\langle \langle \hat{x}_I(t) | \hat{V}_I(t') \rangle \right\rangle &= -i\theta(t-t') \left\langle [\hat{x}_I(t), \hat{V}_I(t')]_- \right\rangle_{\rho_0} \end{aligned}$$

Таким образом, **поправка к среднему**:

$$\begin{aligned} \delta \hat{x}(t) &= \hat{x}_I(t) - \langle \hat{x} \rangle_{\rho_0, V=0} \\ \langle \delta \hat{x} \rangle_t &\approx \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^t \left\langle \langle \delta \hat{x}(t) | \hat{V}_I(t') \rangle \right\rangle dt' \end{aligned}$$

(Это уже функция Грина? в любом случае, в лекциях ничего больше нет)

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

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

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

Если матрица плотности равновесная: $-\alpha(t, t') = \langle \langle \hat{x}_I(t) | \hat{x}_I(t') \rangle \rangle = -\alpha(t-t')$

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

Тогда:

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

Напишем эти соотношения в фурье-пространстве

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_t &\approx \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^t \alpha(t-t') f(t') dt' \\ \delta \hat{x} &= \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} \\ \langle \delta \hat{x} \rangle_t &\approx \int_{-\infty}^t \alpha(t-t') f(t') dt' = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(t-t') f(t') dt' \end{aligned}$$

Подведем итоги:

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

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 $F(t)$.

Рассмотрим диссипацию энергии

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

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

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle_t &\approx \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^t \alpha(t-t') f(t') dt' \\ \langle \delta \hat{x} \rangle_\omega &= \alpha(\omega) f(\omega) \\ q(t) = \frac{\partial E}{\partial t} &= \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \hat{V} \right\rangle = -\langle \hat{x} \frac{\partial}{\partial t} f(t) \rangle = -\langle \dot{\hat{x}} \rangle_t f(t)\end{aligned}$$

где $f(t)$ в представлении Шредингера

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} q(t) dt &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta q(t) dt = -\int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta \hat{x} \rangle_t \dot{f}(t) dt = -\int \langle \delta \hat{x} \rangle_{-\omega} \dot{f}(\omega) \frac{d\omega}{2\pi} = \\ &= -\int \alpha(-\omega) f(-\omega) (-i\omega) f(\omega) \frac{d\omega}{2\pi} = -i \int \omega \alpha(\omega) |f(\omega)|^2 \frac{d\omega}{2\pi} = \\ &= 2 \int_0^{\infty} \omega |f(\omega)|^2 \text{Im} \alpha(\omega) \frac{d\omega}{2\pi}\end{aligned}$$

Диссипация энергии:

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

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

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

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:

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

Спектральная плотность случайных сил:

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

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:

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

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

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

$$\alpha(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \propto \theta(t), \quad \alpha(\omega) = \int_0^{\infty} \alpha(t) e^{i\omega t} dt$$

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, $\omega_0 \in \mathbb{R}$

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

Также рассмотрим

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

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

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

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

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:

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

Спектральная плотность случайных сил:

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

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:

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

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

В классическом пределе:

$$\langle \delta x^2 \rangle = \int (\delta x^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 4T \int_0^\infty \frac{\operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega=0) = \frac{T}{m\Omega^2}$$

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:

$$\begin{aligned} G_{AB}^K(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \text{tr}(\rho_{\text{Gibbs}} \{A(t), B(t')\}_+) = -\frac{i}{\hbar} \langle \{A(t), B(t')\}_+ \rangle \\ G_{AB}^R(t, t') &= -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \text{tr}(\rho_{\text{Gibbs}} [A(t), B(t')]_-) = -\theta(t - t') \frac{i}{\hbar} \langle [A(t), B(t')]_- \rangle = \langle \langle A(t) | B(t') \rangle \rangle \end{aligned}$$

Флуктуационно-диссипативная теорема:

$$G_{AB}^K(\omega) = 2i \text{Im}(G_{AB}^R(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$$

Применим ее:

$$\begin{aligned} G_{xx}^K(t - t') &= -i \text{tr}(\rho_{\text{Gibbs}} \{\delta\hat{x}(t), \delta\hat{x}(t')\}_+) = -i \langle \{\delta\hat{x}(t), \delta\hat{x}(t')\}_+ \rangle \\ G_{xx}^R(t - t') &= -i\theta(t - t') \text{tr}(\rho_{\text{Gibbs}} [\hat{x}(t), \hat{x}(t')]_-) = -\theta(t - t') i \langle [\delta\hat{x}(t), \delta\hat{x}(t')]_- \rangle = -\hbar\alpha(t - t') \end{aligned}$$

$$\langle \{\delta x(t), \delta x(t')\}_+ \rangle = 2\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = 4\hbar \int_0^{\infty} \text{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\langle (\delta x)^2(t) \rangle = 2\hbar \int_0^{\infty} \text{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

В квазиклассическом пределе:

$$\langle \delta x^2(t) \rangle = 2\hbar \int_0^{\infty} \text{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} = \int_0^{\infty} (\delta x^2)_{\omega} \frac{d\omega}{2\pi}$$

Из соотношений Краменса Кронига (предыдущий билет), получаем:

$$\langle \delta x^2(t) \rangle = 4T \int_0^{\infty} \frac{\text{Im}(\alpha(\omega))}{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega = 0)$$

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.

$$\langle \delta x(t) \rangle = \int \alpha(t - t') f(t') dt'$$

$$\langle \delta x(t) \rangle^2 = \int \alpha(t - t') \alpha(t - t'') \overline{f(t') f(t'')} dt' dt''$$

$$\overline{f(t') f(t'')} = \int (f^2)_{\omega} e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\langle \delta x(t) \rangle^2 = \int \alpha(\omega_1) \alpha(\omega_2) (f^2)_{\omega} e^{-i\omega_1(t-t')} e^{-i\omega_2(t-t'')} e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{d\omega}{2\pi} dt' dt'' =$$

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

При этом должна выполняться ФДТ:

$$\langle \delta x^2(t) \rangle = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} &= \int |\alpha(\omega)|^2 (f^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} \\ (f^2)_\omega &= \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2} \Rightarrow \frac{2T \operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega |\alpha(\omega)|^2} \end{aligned}$$

Выводы:

$$\begin{aligned} \langle \delta x^2(t) \rangle &= \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} \\ (f^2)_\omega &= \frac{\hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2} \\ \overline{f(t') f(t'')} &= \int (f^2)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi} \end{aligned}$$

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:

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

Линеаризуем уравнение:

$$\begin{aligned} \dot{p} + \gamma \dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}(U(x) - f(t)x) &= 0 \\ m\delta\ddot{x} + \gamma\delta\dot{x} + \delta x \frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x}) &= f(t) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} (f^2)_\omega &= \frac{2T \operatorname{Im}(\alpha(\omega))}{\omega |\alpha(\omega)|^2} = 2T\gamma \\ \overline{f(t)f(t')} &= \int e^{-i\omega t} (f^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 2T\gamma\delta(t-t') \end{aligned}$$

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:

$$Q = J\varepsilon$$

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

$$J = \langle \dot{\hat{x}} \rangle_t$$

$$\varepsilon = -\dot{f}(t)$$

$$\varepsilon_\omega = i\omega f_\omega = Z_\omega J_\omega$$

$$J_\omega = \frac{i\omega}{Z_\omega} f_\omega$$

$$\langle \dot{\hat{x}} \rangle_\omega = \alpha_\omega f_\omega \Rightarrow \alpha_\omega = \frac{i\omega}{Z_\omega}$$

Из ФДТ:

$$\langle \delta x^2 \rangle = \int (\delta x^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$\operatorname{Im} \alpha_\omega = \operatorname{Im} \frac{i\omega}{Z_\omega} = \frac{\omega}{|Z_\omega|^2} R_{\omega\omega}$$

$$\overline{\langle \delta x^2 \rangle} = \int (\delta x^2)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$(\delta J^2)_\omega = \hbar \operatorname{Im}(\alpha(\omega)) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)$$

В классическом пределе:

$$(\delta J^2)_\omega = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow \frac{2TR_\omega}{|Z_\omega|^2} \rightarrow \frac{2T}{R}$$

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 должны 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 прочесть 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:

$$|\psi\rangle = |\psi(t)\rangle, \quad i\partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle.$$

Операторы же от времени не зависят. Это уравнение имеет тривиальное решение:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle.$$

Тогда для эволюции среднего получаю:

$$\langle O \rangle(t) = \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{iHt} O e^{-iHt} | \psi(0) \rangle.$$

Представление Гейзенберга: Пусть теперь состояния не зависят времени и 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: Рассмотрим теперь систему с гамильтонианом

$$H = H_0 + V.$$

Какое бы из двух представлений, описанных выше, я не выбрал, заранее знаю, что получу

$$\langle O \rangle(t) = \langle \psi(0) | e^{i(H_0+V)t} O e^{-i(H_0+V)t} | \psi(0) \rangle.$$

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

$$\langle O \rangle(t) = \langle \psi(0) | e^{iHt} O e^{-iHt} | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | e^{iHt} e^{-iH_0t} (e^{iH_0t} O e^{-iH_0t}) e^{iH_0t} e^{-iHt} | \psi(0) \rangle.$$

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:

$$|\psi(t)\rangle = e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi(0)\rangle, \quad O(t) = e^{iH_0t}Oe^{-iH_0t}.$$

Эволюция операторов происходит за счет части H_0 гамильтониана. Исследуя зависимость состояний от времени. Для этого продифференцирую $|\psi(t)\rangle$ по времени:

$$\partial_t |\psi(t)\rangle = ie^{iH_0t}(H_0 - H)e^{-iHt}|\psi(0)\rangle = -ie^{iH_0t}Ve^{-iH_0t}(e^{iH_0t}e^{-iHt}|\psi(0)\rangle) = -iV(t)|\psi(t)\rangle.$$

Таким образом, эволюция состояний описывается уравнением типа Шредингера, где вместо гамильтониана стоит его часть V . Осталось научиться решать данное уравнение. Для этого, определим оператор эволюции как

$$U(t) = e^{iH_0t}e^{-iHt}, \quad |\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle.$$

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:

$$\partial_t U(t) = ie^{iH_0t}(H_0 - H)e^{-iHt} = -i(e^{iH_0t}Ve^{-iH_0t})e^{iH_0t}e^{-iHt} = -iV(t)U(t).$$

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:

$$U(t) = 1 - i \int_0^t dt_1 V(t_1) + (-i)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V(t_1)V(t_2) + \dots$$

В общем виде же

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n V(t_1)V(t_2) \dots V(t_n).$$

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:

$$T[V(t_1)V(t_2)] = \theta(t_1 - t_2)V(t_1)V(t_2) + \theta(t_2 - t_1)V(t_2)V(t_1).$$

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:

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n T[V(t_1)V(t_2) \dots V(t_n)].$$

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 можно 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:

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \dots \int_0^t dt_n T[V(t_1)V(t_2)\dots V(t_n)].$$

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. Рассмотрим 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:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(t) &= \left[(\partial_t S(t, t_0)) \rho(t_0) S^\dagger(t, t_0) + S(t, t_0) \rho(t_0) (\partial_t S(t, t_0))^\dagger \right] = \\ &= [-iV(t)\hat{\rho}(t) + i\rho(t)V(t)] = i[\rho(t), V(t)]. \end{aligned}$$

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,

$$\rho_I(t) \approx \rho_0 + \frac{1}{i} \int_{-\infty}^t dt' [V_I(t'), \rho_0], \quad \rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0}, \quad \beta = \frac{1}{T},$$

можно двумя способами, продемонстрирую каждый из них.

Первый способ: Действуем, исходя из определения, и раскладываем экспоненты:

$$\begin{aligned}\rho(t) &= S(t, -\infty)\rho_0 S(-\infty, t) = T \exp \left(-i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) \rho_0 T \exp \left(i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) \approx \\ &\approx \left(1 - i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) \rho_0 \left(1 + i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) \approx \rho_0 - i \int_{-\infty}^t dt_1 [V(t_1), \rho_0].\end{aligned}$$

Второй способ: Проинтегрируем дифференциальное уравнение от $-\infty$ до t :

$$\rho(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t dt_1 [\rho(t_1), V(t_1)].$$

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 :

$$\rho(t) = \rho_0 + i \int_{-\infty}^t dt_1 [\rho_0, V(t_1)].$$

Таким образом, получился один и тот же результат двумя разными способами (sick!).

Формула Кубо. Теперь найду выражение для эволюции среднего для произвольного оператора:

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= \text{Tr} [\rho(t)x(t)] = \text{Tr} [S(t, -\infty)\rho_0 S(-\infty, t)x(t)] \approx \text{Tr} \left[\left(1 - i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) \rho_0 \left(1 + i \int_{-\infty}^t dt_1 V(t_1) \right) x(t) \right] \\ &\approx \text{Tr} (\rho_0 x(t)) + i \text{Tr} \left\{ \int_{-\infty}^t dt_1 [\rho_0 V(t_1)x(t) - V(t_1)\rho_0 x(t)] \right\} = \langle x \rangle_{\rho_0}(t) - i \int_{-\infty}^t dt_1 \langle [x(t), V(t_1)] \rangle_{\rho_0} = \\ &= \langle x \rangle_{\rho_0}(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \langle \langle x(t) | V(t_1) \rangle \rangle, \quad \langle \langle x(t) | V(t_1) \rangle \rangle = -i\theta(t - t_1) \langle [x(t), V(t_1)] \rangle_{\rho_0}.\end{aligned}$$

Чтобы осознать результат, потребуется приложить определенное умственное усилие. Получилась почти формулу 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

$$\delta x(t) = i\theta(t - t_1) \int dt_1 f(t_1) \langle [x(t), y(t_1)] \rangle_{\rho_0}.$$

Сравнивая это выражение с определением обобщенной восприимчивости, прихожу к формуле Кубо:

$$\chi_{xy}(t, t_1) = i\theta(t - t_1) \left\langle [x(t), y(t_1)] \right\rangle_{\rho_0}.$$

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**

31. Формула Кубо для проводимости. Оператор обращения времени в квантовой механике. Доказать соотношение Онзагера для тензора проводимости.

32. Теория открытых систем. Редуцированная матрица плотности. Операторы Крауса. Уравнение Линдблада. Уравнение Линблада для наблюдаемых. Привести пример ур. Линдблада для спина-1/2 или двухуровневой системы.

Операторы Крауса и весь стафф 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 напомним 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 бра- и кет-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 *незначущей* 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 $\rho^\dagger = \rho$, $\text{tr}\{\rho\} = 1$, $\rho \geq 0$. Эти три свойства станут новым определением состояния квантовой системы. Классический пример смешанного состояния — $\frac{I}{\text{tr} I}$ ¹. Проверить состояние на чистоту можно так: $\text{tr}(\rho^2) = 1 \Leftrightarrow \rho$ — 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: $\bar{A} = \langle\psi| A |\psi\rangle = \text{tr}\{|\psi\rangle\langle\psi| A\}$, 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. $\bar{A} = \text{tr}\{\rho A\}$.

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: рассматриваются 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:

$$H = \underbrace{H_s}_{\text{гамильтониан системы}} + \underbrace{H_r}_{\text{гамильтониан резервуара}} + \underbrace{H_{sr}}_{\text{гамильтониан взаимодействия}}.$$

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:

$$i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle \mapsto i\hbar\partial_t\rho = [H, \rho]^2,$$

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 ещё 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:

$$\overline{A_s \otimes I_r} = \text{tr}\{(A_s \otimes I_r)\rho\} = \text{tr}\left\{(A_s \otimes I_r) \sum_{km, \alpha\beta} \rho_{km, \alpha\beta} |k\rangle |\alpha\rangle \langle m| \langle \beta|\right\},$$

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:

$$\rho_s = \text{tr}_r \rho,$$

tr_r называется **частичным следом** по системе r , т.е. по резервуару. Как уже было показано:

$$\text{tr}_r \rho = \sum_{\alpha} \left(I_s \otimes \langle \alpha| \right) \rho \left(I_s \otimes |\alpha\rangle \right),$$

иногда пишут $\text{tr}_r \rho = \sum_{\alpha} \langle \alpha| \rho |\alpha\rangle$, опуская единичный оператор. Отсюда следует:

$$\text{tr}\{\text{tr}_r(\rho)A\} = \overline{A} \Rightarrow \text{tr}\{\text{tr}_r \rho\} = \text{tr}\{\rho\}.$$

Т.е. частичный след сохраняет след. Нетрудно видеть, что он также сохраняет положительную определенность и эрмитовость. Значит частичный след от состояния — состояние! Более того:

$$\text{tr}_r(A_s \otimes B_r) = \text{tr}\{B_r\}A_s \quad \forall A_s, B_r.$$

Т.е. частичный след разделяет составную систему на подсистемы... Проблема в запутанных состояниях, у них $\rho \neq \text{tr}_r(\rho) \otimes \text{tr}_s(\rho)$, 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: $\mathcal{U}(t) = \exp\{\int -i\hbar^{-1}H d\tau\}$. Тогда по определению матрица плотности системы:

$$\begin{aligned} \rho_s(t) &= \text{tr}_r \left(\mathcal{U}(t)\rho_s(0)\rho_r(0)\mathcal{U}^\dagger(t) \right) = \\ &= \text{tr}_r \left(\mathcal{U}(t) |in\rangle \rho_s(0) \langle in| \mathcal{U}^\dagger(t) \right) \end{aligned}$$

²это даже дебил докажет

Выберем некоторый базис в системе r и напишем частичный след:

$$\rho_s(t) = \sum_k \langle k | \mathcal{U}(t) | in \rangle \rho_s(0) \langle in | \mathcal{U}(t) | k \rangle = \sum_k M_k \rho_s M_k^\dagger \quad (138)$$

Операторы

$$M_k(t) = \left(I_s \otimes \langle k | \right) \mathcal{U} \left(I_r \otimes | in \rangle \right)$$

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 докажете):

$$\sum_k M_k^\dagger M_k = I_s.$$

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:

$$\begin{aligned} M_0(t) &= I_s + \left(L_0 - \frac{iH}{\hbar} \right) \Delta t \\ M_k(t) &= L_k \sqrt{\Delta t} \quad \text{при} \quad k \neq 0 \end{aligned}$$

Здесь H и L_0 два эрмитовых оператора. Подставим эти операторы в уравнение эволюции (138), 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 обрезаем 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

$$\text{tr}\{\partial_t \rho_s(t)\} \equiv 0.$$

Т.е. нормировка состояний сохраняется. Необходимо, конечно, воспользоваться тем, что $\text{tr}\{[A, B]\} = 0$ и свойством цикличности следа: $\text{tr}\{AB\} = \text{tr}\{BA\}$.

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:

$$\partial_t \rho_s(t) = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho_s(t)] + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \left([L_k \rho_s(t), L_k^\dagger] + [L_k, \rho_s(t) L_k^\dagger] \right)$$

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 обрубам, 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 изменятся не должны, поэтому

$$p_k = \text{tr}\{\rho(t) F_k\} = \langle f_k | \rho(t) | f_k \rangle$$

здесь F_k - элемент наблюдаемой, характеризующий статистику измерений. Например. $|x\rangle\langle x|$ и т.п..

$$\text{const} = p_k =: \text{tr}\{F_k \rho(t)\} = \text{tr}\left\{F_k \sum_j M_j \rho M_j^\dagger\right\} = \text{tr}\left\{\sum_j M_j^\dagger F_k M_j \rho\right\} = \text{tr}\{F^H(t) \rho_0\}.$$

Мы воспользовались цикличностью следа, и увидели, что в представлении Гейзенберга эволюция наблюдаемых описывается сопряженными операторами Крауса. Значит (см. определение) операторы L тоже будут сопряженными. Итого:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_A^S &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_A^S] + L_k \hat{\rho}_A^S L_k^\dagger - \frac{1}{2} \{L_k^\dagger L_k, \hat{\rho}_A^S\} \\ \frac{d}{dt} \hat{F}_A^H(t) &= \frac{\partial}{\partial t} \hat{F}_A^H(t) - \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{F}_A^H(t)] + L_k^\dagger \hat{F}_A^H(t) L_k - \frac{1}{2} \{L_k L_k^\dagger, \hat{F}_A^H(t)\} \end{aligned}$$

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 L , 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:

$$\begin{aligned} \frac{\gamma}{2}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z)(\rho)(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) - \frac{3\gamma}{4}\{I, \hat{\rho}\} &= -2\gamma\langle \mathbf{S}(t) \rangle \cdot \vec{\sigma} \\ \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{S}(t) \rangle &= -\langle \mathbf{S}(t) \rangle \times \vec{\Omega} - \gamma\langle \mathbf{S}(t) \rangle \end{aligned}$$

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 статфизе. Называется потеря когерентности, знаменитый пример — кот Шрёдингера... похуй

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 двухуровневого 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: $\rho = \sum_{ij} \rho_{ij} |i\rangle\langle j|$.

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)] = i\omega_{10}\rho_{01} |0^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| - i\omega_{10}\rho_{10} |1^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}| \quad \omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\Gamma}{\hbar}\rho_{11}(t) & (i\omega_{01} - \frac{\Gamma}{2\hbar})\rho_{01}(t) \\ -(i\omega_{01} + \frac{\Gamma}{2\hbar})\rho_{10}(t) & -\frac{\Gamma}{\hbar}\rho_{11}(t) \end{pmatrix}$$

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 Н-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 по-прежнему подставим её в уравнение Л.:

$$\frac{\partial}{\partial t}P_i = L_{ki}P_kL_{ki}^* - \frac{1}{2}(L_{ki}^*L_{ki}P_i + P_iL_{ki}^*L_{ki}) = W_{ik}P_k - W_{ki}P_i$$

$$W_{ik} = |L_{ki}|^2$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_k (W_{ik}P_k - W_{ki}P_i)$$

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.**

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

какая то хуйня проверьте кто шарит...

Н-теорема

Рассмотрим уравнение Паули, отбросив член со скобкой пуассона (он дает нулевой вклад в прирост энтропии, как мы показывали еще на стат физе, что из уравнения фон-ноймана, 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:

$$\frac{dP_i}{dt} = - \sum_j \Gamma_{ij}P_j$$

$$\Gamma_{ij} = \begin{cases} -W_{ij} & \text{if } i \neq j \\ \sum_k W_{kj} & \text{if } i = j \end{cases}$$

теорема обыкновенно доказывается для двух случаев — симметричного и общего.

Симметричный случай

Введем функцию, равную неравновесной энтропии (с минусом)

$$H(t) = - \sum_i P_i(t) \ln P_i(t)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{dt} &= \sum_i \frac{dP_i}{dt} (1 + \ln P_i) = \sum_i \frac{dP_i}{dt} \ln P_i \\
&= - \sum_{i,j} \Gamma_{ij} P_j \ln P_i \\
&= \sum_{i,j} \Gamma_{ij} P_j (\ln P_j - \ln P_i)
\end{aligned}$$

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. $\sum_j \Gamma_{ij} = \sum_i \Gamma_{ij} = 0$.

Заебались, да? Я тоже, вот вам юмореска: Джек был пилотом-асом. Настолько классным, что когда начался японо-американский военный конфликт, его сразу же направили в бой без подготовки на базе. Прибыв на авианосец, Джек тут же отправился в бой и сразу уничтожил 6 японских самолетов. Он поднялся выше, на высоту 7 километров и еще 10 японских самолетов прекратили свое существование. И тут Джек заметил, что горячего осталось совсем немного. Он спикировал вниз и идеально приземлился на палубе авианосца. Выскочив из самолета, он отдал салют капитану: — Ну, и как вы оцениваете мой первый боевой вылет? На что капитан ответил: — Осень холосо, но ты сделал один васный осибка. . .

Теперь воспользуемся симметрией Γ , поменяем индексы местами (получив такое же выражение, противоположное по знаку...) вычтем его и получим новое выражение

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Gamma_{ij} (P_i - P_j) (\ln P_i - \ln P_j),$$

ясно, что член с $i = j$ вклада не дает, а все $\Gamma_{ij} = -W_{ij} \leq 0$. Используем неравенство

$$(x - y)(\ln x - \ln y) \geq 0 \quad \forall x, y \in [0, 1]$$

и получим $\frac{dH}{dt} \leq 0$, т.е. $\frac{dS}{dt} = -\frac{dH}{dt} \geq 0$. Энтропия растет. \square

Обратите внимание, что именно столкновительный член кин. уравнения обеспечивает рост энтропии.

Общий случай Н-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:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} P_i &= W_{ik} P_k - W_{ki} P_i, \\
\bar{W}_{ij} &\equiv W_{ij} P_j^{\text{eq}} = W_{ji} P_i^{\text{eq}} \equiv \bar{W}_{ji},
\end{aligned}$$

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} **всем похуй что это очень часто ноль, доказательства на теорфизе — пиздец.**

$$= \sum_{i \neq j} \left(W_{ij} P_j^{\text{eq}} \frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}} \right) \left(\ln \left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}} \right) - \ln \left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}} \right) \right)$$

вспоминаем, что мы не зря опереждали новую «почти симметричную» функцию \bar{W} , подставляем по определению:

$$= \sum_{i \neq j} \left(\bar{W}_{ij} \frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}} \right) \left(\ln \left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}} \right) - \ln \left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}} \right) \right) =$$

теперь меняем местами индексы, пользуемся симметрией \bar{W} и получаем

$$= - \sum_{i \neq j} \left(\bar{W}_{ij} \frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}} \right) \left(\ln \left(\frac{P_i(t)}{P_i^{\text{eq}}} \right) - \ln \left(\frac{P_j(t)}{P_j^{\text{eq}}} \right) \right)$$

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! \square

Далее на лекции полезные примеры использования уравнения Паули, посмотрите pdf 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 Н-теорема доказывается для симметричной матрицы Γ , а в этом случае она несимметричная. Рассмотрим задачу подробнее:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \gamma_0 \left(\hat{\sigma}^- \hat{\rho} \hat{\sigma}^+ - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^-, \hat{\rho} \} \right) + \gamma_1 \left(\hat{\sigma}^+ \hat{\rho} \hat{\sigma}^- - \frac{1}{2} \{ \hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+, \hat{\rho} \} \right)$$

Вспомним уравнения Паули:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] + L\hat{\rho}L^\dagger - \frac{1}{2} \{L^\dagger L, \hat{\rho}\}$$

$$\hat{\rho}_{ik} = \delta_{ik} P_i$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i = L_{ik} P_k L_{ik}^* - \frac{1}{2} (L_{ki}^* L_{ki} P_i + P_i L_{ki}^* L_{ki}) = W_{ik} P_k - W_{ki} P_i$$

$$W_{ik} = |L_{ik}|^2$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P_i = W_{ik} P_k - W_{ki} P_i$$

Для нашего случая:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} P_0 \\ P_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_0 P_1 - \gamma_1 P_0 \\ -\gamma_0 P_1 + \gamma_1 P_0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_0 P_1^{eq} - \gamma_1 P_0^{eq} = 0$$

$$P_0^{eq} = \frac{\gamma_0}{\gamma_0 + \gamma_1}, P_1^{eq} = \frac{\gamma_1}{\gamma_0 + \gamma_1}$$

$$\begin{pmatrix} P_0(t) \\ P_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_0^{eq} \\ P_1^{eq} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (P_0(t=0) - P_0^{eq}) e^{-t(\gamma_0 + \gamma_1)} \\ (P_1^{eq} - P_1(t=0)) e^{-t(\gamma_0 + \gamma_1)} \end{pmatrix}$$

Энтропия:

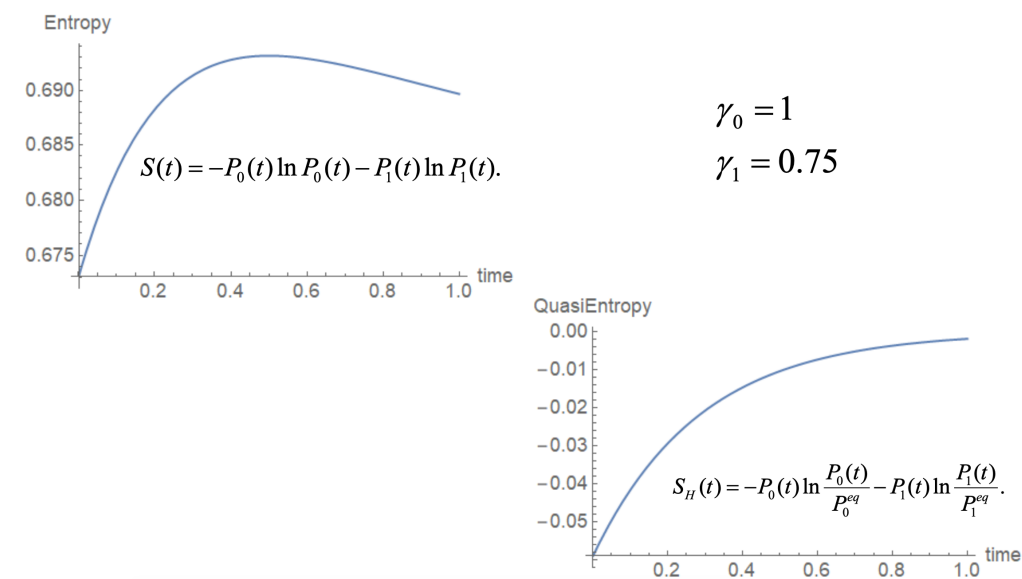
$$S(t) = -P_0(t) \ln P_0(t) - P_1(t) \ln P_1(t)$$

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

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \text{St}f,$$

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 \mathbf{E} и \mathbf{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 $\mathbf{v} \nabla f$ 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

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \end{aligned}$$

К этим уравнениям добавляется система усредненных (\mathbf{E} и \mathbf{B}) уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \text{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{div} \mathbf{B} = 0, \\ \text{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \text{div} \mathbf{E} = 4\pi \rho, \end{aligned}$$

где ρ и \mathbf{j} - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения формулами

$$\begin{aligned} \rho &= e \int (z f_i - f_e) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int (z f_i - f_e) \mathbf{v} d\Gamma_p, \end{aligned}$$

где $\Gamma_p = \frac{2d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}$. Вышеуказанные уравнения называются уравнениями Власова. Данная система определяет как функции распределения f_i и f_e , так и поля \mathbf{B} и \mathbf{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:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

В изотропной плазме функция распределения зависит только от абсолютной величины импульса. Поэтому $\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \partial f_0 / \partial \mathbf{p} \uparrow \mathbf{p} = m\mathbf{v}$ и $[\mathbf{v}\mathbf{B}] = 0$. Остаётся:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e\mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

В предположении, что электрическое поле содержит одну гармонику, то есть:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega} \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\} \\ \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \delta f_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\} \end{aligned}$$

получается уравнение в $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})\delta f_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = ie(\mathbf{v}\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Оно решается введением регуляризации с полюсом в нижней полуплоскости (обусловлено физическим смыслом: $\delta f_{\mathbf{k}, \omega}$ - запаздывающий отклик на внешнее воздействие $\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}$, поэтому эта функция должна быть аналитична в верхней полуплоскости):

$$\delta f_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{ie(\mathbf{v}\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega})}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Поляризация электронной компоненты $\mathbf{P}_{\mathbf{k}, \omega}$ проще всего посчитать из соотношения: $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Rightarrow \mathbf{j}_{\mathbf{k}, \omega} = -i\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k}, \omega}$.

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 $\rho(f_{i0}, f_{e0}) = 0$, $\mathbf{j}(f_{i0}, f_{e0}) = 0$) возмущения полем в плазме плотность зарядов и плотность тока равны:

$$\rho = -e \int \delta f d^3p, \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f d^3p$$

Получается:

$$\begin{aligned} \omega \mathbf{P}_{\mathbf{k}, \omega} &= e^2 \int \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial f_0 / \partial \varepsilon}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p \\ P_\alpha &= \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p \equiv \chi_{\alpha\beta} E_\beta, \end{aligned}$$

где $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ - восприимчивость. Диэлектрическая проницаемость записывается в виде:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

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.

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \Gamma_\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{\Omega_p}{4\pi} \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

Интеграл был подробно взят в [3, стр 138]. В результате получается:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\beta} &= \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) \\ \varepsilon_l &= 1 - \frac{4\pi e^2}{l^2} \int \left(1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Gamma_\varepsilon \\ \varepsilon_t &= 1 + \frac{2\pi e^2}{l^2} \int \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Gamma_\varepsilon \end{aligned}$$

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 $\text{Im}W = \frac{\pi s}{2}$ при $s < 1 \iff v > \frac{\omega}{k}$. Мнимая часть - затухание Ландау.

Спектр продольных волн в плазме.

Пусть электрическое поле $\mathbf{E}_l(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_l \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\}$ продольное, то есть $\mathbf{E}_l \uparrow \uparrow \mathbf{k}$. Тогда $\text{rot}\mathbf{E}_l = i[\mathbf{k}, \mathbf{E}_l] = 0$, что влечёт $\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{B} = 0 \implies \text{rot}\mathbf{B} = 0 \implies \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{D} = 0$. Но с другой стороны $\mathbf{D} = \varepsilon_l \mathbf{E}_l = 0$, что даст нетривиальные решения только тогда, когда

$$\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) = 0$$

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: $\omega \gg vk \iff s \gg 1$ (область высоких частот), $\omega \ll vk \iff s \ll 1$ (область низких частот).

$$\begin{aligned} \text{Re}\varepsilon_l(\omega \gg vk) &= 1 + \frac{4\pi e^2}{\omega^2} \int_0^{+\infty} \left(\frac{1}{3s^2} + \frac{1}{5s^4} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \nu(\varepsilon) d\varepsilon = 1 + \frac{4\pi e^2}{3\omega^2} \int_0^{+\infty} v^2 \left(1 + \frac{3}{5} \frac{k^2 v^2}{\omega^2} \right) \nu(\varepsilon) d\varepsilon \approx \\ &\approx 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right); \quad \Omega^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} \\ \text{Im}\varepsilon_l(\omega \gg vk) &= -\pi \frac{4\pi e^2}{k^2} \int_{v > \frac{\omega}{k}} \frac{\omega}{2vk} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_\varepsilon = \omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{f_0}{2\pi \hbar^3} \frac{m\omega^2}{2k^2} \\ \varepsilon_l(\omega \ll vk) &\approx 1 - \frac{4\pi e^2}{k^2} \int d\Gamma_\varepsilon \left(1 + \frac{i\pi s}{2} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \\ &= 1 + \frac{\Omega^2}{k^2} \left\langle \frac{1}{v^2} \right\rangle + i\omega \frac{\Omega^2}{k^2} \frac{m^3}{nk} \frac{f_0(\varepsilon)}{2\pi \hbar^3} \end{aligned}$$

Спектр будет находится следующим образом:

$$\varepsilon_l(\omega, \mathbf{k}) = 0 \implies 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{\omega^2} \right) = 0 \implies \omega \approx \sqrt{\Omega^2 + k^2 \langle v^2 \rangle} \approx \Omega + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2}$$

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

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{p}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = Stf,$$

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 \mathbf{E} и \mathbf{B} в данном процессе:

$$\nu \ll \omega$$

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 $\mathbf{v}\nabla f$ 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

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_e}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{r}} - e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_e}{\partial \mathbf{p}} &= 0 \\ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} + ze \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}} &= 0\end{aligned}$$

К этим уравнениям добавляется система усредненных (\mathbf{E} и \mathbf{B}) уравнений Максвелла

$$\begin{aligned}\text{rot} \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{div} \mathbf{B} = 0, \\ \text{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \text{div} \mathbf{E} = 4\pi \rho,\end{aligned}$$

где ρ и \mathbf{j} - средние плотность зарядов и плотность тока, выражающиеся через функции распределения формулами

$$\begin{aligned}\rho &= e \int (zf_i - f_e) d\Gamma_p \\ \mathbf{j} &= e \int (zf_i - f_e) \mathbf{v} d\Gamma_p,\end{aligned}$$

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 \mathbf{B} и \mathbf{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:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{B}] \right) \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

В изотропной плазме функция распределения зависит только от абсолютной величины импульса. Поэтому $\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = \partial f_0 / \partial \mathbf{p} \uparrow \mathbf{p} = m\mathbf{v}$ и $[\mathbf{v} \mathbf{B}] = 0$. Остаётся:

$$\frac{\partial \delta f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta f}{\partial \mathbf{r}} = e \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}$$

В предположении, что электрическое поле содержит одну гармонику, то есть:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega} \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\} \\ \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= \delta f_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\}\end{aligned}$$

получается уравнение в $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$:

$$(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta f_{\mathbf{k}, \omega}(\mathbf{p}) = ie(\mathbf{v} \mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Оно решается введением регуляризации с полюсом в нижней полуплоскости (обусловлено физическим смыслом: $\delta f_{\mathbf{k}, \omega}$ - запаздывающий отклик на внешнее воздействие $\mathbf{E}_{\mathbf{k}, \omega}$, поэтому эта функция должна быть аналитична в верхней полуплоскости):

$$\delta f_{\mathbf{k},\omega} = \frac{ie(\mathbf{v}\mathbf{E}_{\mathbf{k},\omega})}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$$

Поляризация электронной компоненты $\mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$ проще всего посчитать из соотношения: $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \Rightarrow \mathbf{j}_{\mathbf{k},\omega} = -i\omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega}$.

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 $\rho(f_{i0}, f_{e0}) = 0$, $\mathbf{j}(f_{i0}, f_{e0}) = 0$) возмущения полем в плазме плотность зарядов и плотность тока равны:

$$\rho = -e \int \delta f d^3p, \quad \mathbf{j} = -e \int \mathbf{v} \delta f d^3p$$

Получается:

$$\begin{aligned} \omega \mathbf{P}_{\mathbf{k},\omega} &= e^2 \int \mathbf{v}(\mathbf{v}\mathbf{E}_{\mathbf{k},\omega}) \frac{\partial f_0 / \partial \varepsilon}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p \\ P_\alpha &= \frac{e^2}{\omega} E_\beta \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p \equiv \chi_{\alpha\beta} E_\beta, \end{aligned}$$

где $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega)$ - восприимчивость. Диэлектрическая проницаемость записывается в виде:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\Gamma_p$$

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.

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{4\pi e^2}{\omega} \int \Gamma_\varepsilon \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \int \frac{\Omega_p}{4\pi} \frac{v_\alpha v_\beta}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\delta} d\Gamma_p$$

Интеграл был подробно взят в [3, стр 138]. В результате получается:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha\beta} &= \varepsilon_l \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} + \varepsilon_t \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{k_\alpha k_\beta}{k^2} \right) \\ \varepsilon_l &= 1 - \frac{4\pi e^2}{l^2} \int \left(1 - \frac{s}{2} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Gamma_\varepsilon \\ \varepsilon_t &= 1 + \frac{2\pi e^2}{l^2} \int \left(1 + \frac{1-s^2}{2s} \ln \frac{s+1}{s-1+i\delta} \right) \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \Gamma_\varepsilon \end{aligned}$$

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 $\text{Im}W = \frac{\pi s}{2}$ при $s < 1 \iff v > \frac{\omega}{k}$. Мнимая часть - затухание Ландау.

Спектр поперечных волн в плазме.

Поперечные колебания электрического поля $\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) \sim \mathbf{E}_t \exp\{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t)\}$ подразумевают равенство $\mathbf{k}\mathbf{E}_t = 0$. Но $\mathbf{D}_t = \varepsilon_t \mathbf{E}_t \Rightarrow \mathbf{k}\mathbf{D}_t = 0$. Согласно уравнениям Максвелла для фурье-компонент электрического и магнитного полей мы найдём:

$$\begin{cases} \text{rot} \mathbf{E}_t = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \text{div} \mathbf{B} = 0 \\ \text{rot} \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{D}_t}{\partial t}, \text{div} \mathbf{D}_t = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{k} \times \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} \mathbf{B}, \mathbf{k}\mathbf{B} = 0 \\ \mathbf{k} \times \mathbf{B} = -\frac{\omega}{c} \mathbf{D}_t, \mathbf{k}\mathbf{D}_t = 0 \end{cases}$$

Исключая магнитное поле из этих уравнений, получим:

$$\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_t] = \mathbf{k}(\mathbf{k} \mathbf{E}_t) - k^2 \mathbf{E}_t = \frac{\omega}{c} [\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = -\frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{D}_t = -\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_t \mathbf{E}_t$$

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:

$$\omega^2 = \Omega^2 + c^2 k^2$$

Результат для низкочастотного случая ($\omega \ll vk$) (подробности в [3, стр 142]):

$$\omega = -i \frac{2}{\pi} \frac{c^2 k^3}{\Omega^2 \langle v^{-1} \rangle}$$