Введя функцию Лагранжа $L=K-U$, можно написать эти уравнения движения в форме

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i}-\frac{\partial L}{\partial Q_i}=-\frac{\partial f}{\partial \dot{Q}_i}, \qquad (121,8)$$

которая отличается от обычной формы уравнений Лагранжа стоящей в правой стороне производной от диссипативной функции.

Наличие трения приводит к уменьшению полной механической энергии $(K+U)$ движущихся тел. В соответствии с общими результатами § 120 скорость этого уменьшения определяется диссипативной функцией. Ввиду некоторого различия в обозначениях здесь и в § 120, покажем это заново. Имеем

$$\frac{d}{dt}(K+U)=\sum_{i=1}^{s}\left(\frac{\partial K}{\partial P_i}\dot{P}_i+\frac{\partial U}{\partial Q_i}\dot{Q}_i\right)=\sum_i \dot{Q}_i\left(\dot{P}_i+\frac{\partial U}{\partial Q_i}\right),$$

или, подставив (121,7) и имея в виду квадратичность диссипативной функции,

$$\frac{d}{dt}(K+U)=-\sum_i \dot{Q}_i\frac{\partial f}{\partial \dot{Q}_i}=-2f, \qquad (121,9)$$

как и должно было быть.

Укажем в заключение, что при наличии внешнего магнитного поля уравнения движения по-прежнему имеют вид (121,5), с той лишь разницей, что вместо (121,4) будет

$$\gamma_{ik}(\mathbf{H})=\gamma_{ki}(-\mathbf{H}).$$

Благодаря этому, однако, не будет существовать диссипативной функции, производные от которой определяли бы силы трения; поэтому уравнения движения не смогут быть написаны в виде (121,7).

§ 122. Спектральное разложение флуктуаций

Введем спектральное разложение флуктуирующей величины $x(t)$ по обычным формулам разложения Фурье:

$$x_\omega=\int_{-\infty}^{\infty}x(t)e^{i\omega t}\,dt, \qquad (122,1)$$

и обратно

$$x(t)=\int_{-\infty}^{\infty}x_\omega e^{-i\omega t}\frac{d\omega}{2\pi}. \qquad (122,2)$$

Следует заметить, что интеграл (122,1) фактически расходится, поскольку $x(t)$ не стремится к нулю при $|t|\to\infty$. Это обстоятельство, однако, несущественно для дальнейших формальных выводов, имеющих целью вычисление заведомо конечных средних квадратов[1]).

Подставляя (122,2) в определение корреляционной функции (118,1), получим

$$\varphi(t'-t)=\langle x(t')\,x(t)\rangle=\iint\limits_{-\infty}^{\infty}\langle x_\omega x_{\omega'}\rangle\,e^{-i(\omega t+\omega' t')}\,\frac{d\omega\,d\omega'}{(2\pi)^2}. \qquad (122,3)$$

Для того чтобы интеграл в правой стороне равенства был функцией только от разности $t-t'$, подынтегральное выражение должно содержать δ-функцию от $\omega+\omega'$, т. е. должно быть

$$\langle x_\omega x_{\omega'}\rangle=2\pi\,(x^2)_\omega\,\delta(\omega+\omega'). \qquad (122,4)$$

Это соотношение надо рассматривать как определение величины, обозначенной здесь символически посредством $(x^2)_\omega$. Хотя величины x_ω комплексны, но $(x^2)_\omega$, очевидно, вещественны. Действительно, выражение (122,4) отлично от нуля лишь при $\omega'=-\omega$ и симметрично по отношению к перестановке ω и ω'; поэтому $(x^2)_\omega=(x^2)_{-\omega}$, а перемена знака ω эквивалентна переходу к комплексно-сопряженным величинам.

Подставляя (122,4) в (122,3) и исключая δ-функцию интегрированием по $d\omega$, находим

$$\varphi(t)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}(x^2)_\omega\,e^{-i\omega t}\,\frac{d\omega}{2\pi}. \qquad (122,5)$$

В частности, $\varphi(0)$ есть средний квадрат флуктуирующей величины:

$$\langle x^2\rangle=\int\limits_{-\infty}^{\infty}(x^2)_\omega\frac{d\omega}{2\pi}=\int\limits_{0}^{\infty}2\,(x^2)_\omega\frac{d\omega}{2\pi}. \qquad (122,6)$$

Мы видим, что спектральная плотность среднего квадрата флуктуации как раз совпадает с величиной $(x^2)_\omega$ (или $2(x^2)_\omega$, если интеграл распространен только на положительные частоты). Эта же величина является, согласно (122,5), и компонентой Фурье корреляционной функции. Обратно:

$$(x^2)_\omega=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\varphi(t)\,e^{i\omega t}\,dt. \qquad (122,7)$$

В написанных формулах величина $x(t)$ предполагалась классической. В случае квантовой величины разложение (122,1—2)

[1]) В способе введения спектрального разложения флуктуаций мы следуем *С. М. Рытову*.

должно относиться к зависящему от времени оператору $\hat{x}(t)$, а определение спектральной плотности $(x^2)_\omega$ записывается (вместо (122,4)) в виде

$$\frac{1}{2}\langle \hat{x}_\omega \hat{x}_{\omega'} + \hat{x}_{\omega'} \hat{x}_\omega \rangle = 2\pi (x^2)_\omega \delta(\omega + \omega'). \qquad (122,8)$$

Для корреляционной функции квазистационарных флуктуаций одной величины в § 118 было получено выражение (118,8). Элементарное интегрирование дает следующий результат для ее спектрального разложения:

$$(x^2)_\omega = \frac{1}{\beta}\left[\frac{1}{\lambda - i\omega} + \frac{1}{\lambda + i\omega}\right] = \frac{2\lambda}{\beta(\omega^2 + \lambda^2)}. \qquad (122,9)$$

В соответствии с физическим смыслом приближения, отвечающего квазистационарным флуктуациям, это выражение применимо лишь для частот, малых по сравнению с обратным временем неполного равновесия.

В терминах введенной в конце § 118 случайной силы $y(t)$ временная зависимость флуктуирующей величины x описывается уравнением $\dot{x} = -\lambda x + y$. Умножив его на $e^{i\omega t}$ и проинтегрировав по dt в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ (причем член $\dot{x}e^{i\omega t}$ интегрируется по частям[1]), получим $(\lambda - i\omega) x_\omega = y_\omega$. Отсюда ясно, что надо положить

$$(y^2)_\omega = (\omega^2 + \lambda^2)(x^2)_\omega = \frac{2\lambda}{\beta}. \qquad (122,10)$$

Это выражение можно, конечно, получить и прямо из (118,10). Наличию δ-функции $\delta(t)$ в (118,10) отвечает в (122,10) независимо $(y^2)_\omega$ от ω.

Написанные формулы непосредственно обобщаются на флуктуации одновременно нескольких термодинамических величин $x_1, x_2, \ldots$ Соответствующие корреляционные функции $\varphi_{ik}(t)$ были определены в § 119. Компоненты их спектрального разложения определяются как

$$(x_i x_k)_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{ik}(t) e^{i\omega t} dt \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_i(t) x_k(0)\rangle e^{i\omega t} dt, \qquad (122,11)$$

а вместо (122,4) имеем

$$\langle x_{i\omega} x_{k\omega'} \rangle = 2\pi (x_i x_k)_\omega \delta(\omega + \omega') \qquad (122,12)$$

(в обозначении $(x_i x_k)_\omega$ порядок множителей существен!).

[1]) При этом члены, содержащие $x(\pm\infty)$, следует опустить; их появление связано с упомянутой выше фактической расходимостью интегралов (122,1). С формальной точки зрения эти члены все равно несущественны при вычислении среднего $\langle y_\omega y_{\omega'} \rangle$, поскольку они конечны при $\omega' = -\omega$ и могут быть опущены по сравнению с δ-функционным основным членом.

Изменение знака времени эквивалентно замене $\omega \to -\omega$ в спектральном разложении, а эта замена в свою очередь означает комплексное сопряжение величин $(x_i x_k)_\omega$. Поэтому равенство $\varphi_{ik}(t) = \varphi_{ki}(-t)$ (119,2) означает, что

$$(x_i x_k) = (x_k x_i)_{-\omega} = (x_k x_i)^*_\omega. \qquad (122,13)$$

Симметрия же флуктуаций по отношению к обращению времени, выражающаяся равенствами (119,3) или (119,4), в терминах спектрального разложения записывается как

$$(x_i x_k)_\omega = \pm (x_i x_k)_{-\omega} = \pm (x_i x_k)^*_\omega, \qquad (122,14)$$

где знаки $+$ или $-$ относятся соответственно к случаям, когда сами величины x_i и x_k ведут себя одинаково или по-разному по отношению к обращению времени; в первом случае, следовательно, величина $(x_i x_k)_\omega$ вещественна и симметрична по индексам i, k, а во втором — мнима и антисимметрична.

В § 119 была написана система уравнений (119,8), которой подчиняются корреляционные функции квазистационарных флуктуаций. Эти уравнения легко решаются с помощью спектрального разложения.

Поскольку уравнения (119,8) относятся только к временам $t > 0$, производим над ними «одностороннее» преобразование Фурье: умножаем уравнения на $e^{i\omega t}$ и интегрируем по dt в пределах от 0 до ∞. При этом член $e^{i\omega t}\dot{\varphi}_{il}(t)$ интегрируется по частям; учитывая, что $\varphi_{il}(\infty) = 0$, получим

$$-\varphi_{il}(0) - i\omega (x_i x_l)^{(+)}_\omega = -\lambda_{ik} (x_k x_l)^{(+)}_\omega,$$

где введено обозначение

$$(x_i x_l)^{(+)}_\omega = \int_0^\infty \varphi_{il}(t) e^{i\omega t} dt. \qquad (122,15)$$

Значение $\varphi_{il}(0)$ определяется «начальным условием» (119,9); поэтому

$$(\lambda_{ik} - i\omega\delta_{ik}) (x_k x_l)^{(+)}_\omega = \beta^{-1}_{il}$$

или

$$(\zeta_{ik} - i\omega\beta_{ik}) (x_k x_l)^{(+)}_\omega = \delta_{il},$$

где вместо коэффициентов λ_{ik} введены более удобные (ввиду их симметрии) кинетические коэффициенты $\zeta_{ik} = \beta_{il}\lambda_{lk}$ (см. (120,13)). Решение этой алгебраической системы уравнений

$$(x_k x_l)^{(+)}_\omega = (\zeta - i\omega\beta)^{-1}_{kl},$$

где -1 в показателе означает взятие обратной матрицы.

С другой стороны, интересующие нас компоненты спектрального разложения (122,11) выражаются через компоненты «одностороннего» разложения (122,15) равенствами

$$(x_i x_k)_\omega = (x_i x_k)_\omega^{(+)} + (x_k x_i)_\omega^{(+)*}; \qquad (122,16)$$

в этом легко убедиться, представив интеграл от $-\infty$ до $+\infty$ в виде суммы двух интегралов (от $-\infty$ до 0 и от 0 до $+\infty$), заменив в первом из них $t \to -t$ и воспользовавшись свойством симметрии (119,2). Таким образом, окончательно находим

$$(x_i x_k)_\omega = (\zeta - i\omega\beta)^{-1}_{ik} + (\zeta + i\omega\beta)^{-1}_{ki}. \qquad (122,17)$$

В силу свойств симметрии матриц ζ_{ik} и β_{ik}, величины (122,17) автоматически обладают свойствами (122,13) или (122,14)[1]).

Полученные результаты можно представить в другом виде, введя в релаксационные уравнения «случайные силы» подобно тому, как это было сделано в конце § 118 для одной флуктуирующей величины. При этом корреляционные свойства этих сил фурмулируются в особенно простом виде, если ввести их в уравнения, записанные с помощью термодинамически взаимных величин—как это сделано в (120,5) или (120,13). Так, введя случайные силы Y_i в уравнения (120,13), запишем их в виде

$$\dot{X}_i = -\zeta_{ik} x_k + Y_i; \qquad (122,18)$$

величинами Y_i можно пренебречь, когда x_i становятся больше своих средних флуктуаций. Аналогично тому, как это было сделано при выводе (122,10), получим после простого вычисления следующую формулу для спектрального разложения корреляционных функций случайных сил:

$$(Y_i Y_k)_\omega = \zeta_{ik} + \zeta_{ki}. \qquad (122,19)$$

Как и в (122,10), эти величины не зависят от частоты.

Если же ввести случайные силы y_i в уравнении (120,5):

$$\dot{x}_i = -\gamma_{ik} X_k + y_i, \qquad (122,20)$$

то для их корреляционной функции получится аналогичная формула

$$(y_i y_k)_\omega = \gamma_{ik} + \gamma_{ki}. \qquad (122,21)$$

Эта формула очевидна без новых вычислений, если снова вспомнить о взаимном характере соответствия между величинами x_i и X_i (см. примечание на стр. 367). Преимущество формул (122,19)

[1]) Матрица величин β_{ik} всегда симметрична. Но если некоторые x_i и x_k ведут себя по-разному при обращении времени, то соответствующее $\beta_{ik} = 0$. Это следует из того, что β_{ik} есть коэффициент при произведении $x_i x_k$ в квадратичной форме (111,1), определяющей изменение энтропии при отклонении от равновесия. Поскольку энтропия инвариантна относительно обращения времени, а произведение $x_i x_k$ меняет знак, то энтропия не может содержать такого члена, т. е. должно быть $\beta_{ik} = 0$.

и (122,21) состоит в том, что в них входят компоненты самих матриц ζ_{ik} и γ_{ik}, а не обратных им[1]).

В качестве примера применения полученных формул рассмотрим флуктуации одномерного осциллятора. Другими словами, рассмотрим тело, покоящееся в равновесном положении ($Q=0$), но способное совершать малые колебания по некоторой макроскопической координате Q. Благодаря флуктуациям координата Q будет в действительности испытывать отклонения от значений $Q=0$. Средний квадрат этого отклонения определяется непосредственно по коэффициенту в квазиупругой силе, действующей на тело при его отклонении.

Напишем потенциальную энергию осциллятора в виде

$$U=\frac{m\omega_0^2}{2}Q^2,$$

где m — его «масса» (т. е. коэффициент пропорциональности между обобщенным импульсом P и скоростью $\dot{Q}: P=m\dot{Q}$), а ω_0 — частота свободных колебаний (в отсутствие трения). Тогда средняя квадратичная флуктуация (ср. задачу 7, § 112) будет равна

$$\langle Q^2\rangle=\frac{T}{m\omega_0^2}. \qquad (122,22)$$

Спектральное разложение флуктуаций координаты произведем для общего случая, когда колебания осциллятора сопровождаются трением.

Уравнения движения осциллятора с трением гласят:

$$\dot{Q}=\frac{P}{m}, \qquad (122,23)$$

$$\dot{P}=-m\omega_0^2Q-\gamma\frac{P}{m}, \qquad (122,24)$$

где $-\gamma P/m=-\gamma\dot{Q}$ есть сила трения. Как было объяснено в § 121, если рассматривать Q и P как величины x_1 и x_2, то соответствующими X_1 и X_2 будут: $m\omega_0^2Q/T$ и P/mT. Уравнения (122,23—24) играют при этом роль соотношений $\dot{x}_i=-\gamma_{ik}X_k$, так что

$$\gamma_{11}=0, \quad \gamma_{12}=-\gamma_{21}=-T, \quad \gamma_{22}=\gamma T.$$

Чтобы применить эти уравнения к флуктуациям, переписываем (122,24) в виде

$$\dot{P}=-m\omega_0^2Q-\frac{\gamma}{m}P+y, \qquad (122,25)$$

[1]) Независимость выражений (122,19) и (122,21) от частоты означает (как и в случае формулы (122,10) для одной флуктуирующей величины), что сами корреляционные функции $\langle Y_i(t)Y_k(0)\rangle$ и $\langle y_i(t)y_k(0)\rangle$ содержат δ-функцию времени. Так,

$$\langle y_i(t)\,y_k(0)\rangle=(\gamma_{ik}+\gamma_{ki})\,\delta(t). \qquad (122,21\text{a})$$

введя в его правую часть случайную силу y. Уравнение же (122,23), являющееся определением импульса, следует оставить неизменным. Согласно формуле (122,21) непосредственно находим спектральную плотность флуктуаций случайной силы:

$$(y^2)_\omega = 2\gamma_{22} = 2\gamma T. \qquad (122,26)$$

Наконец, для нахождения искомого $(Q^2)_\omega$ пишем, подставив $P = m\dot{Q}$ в (122,25):

$$m\ddot{Q} + \gamma\dot{Q} + m\omega_0^2 Q = y. \qquad (122,27)$$

Умножив это уравнение на $e^{i\omega t}$ и интегрируя по времени, найдем

$$(-m\omega^2 - i\omega\gamma + m\omega_0^2)\, Q_\omega = y_\omega,$$

откуда окончательно

$$(Q^2)_\omega = \frac{2\gamma T}{m^2(\omega^2-\omega_0^2)^2 + \omega^2\gamma^2}. \qquad (122,28)$$

§ 123. Обобщенная восприимчивость

Невозможно получить общую формулу для спектрального распределения произвольных флуктуаций, аналогичную формуле (122,9) для квазистационарных флуктуаций. Однако в ряде случаев оказывается возможным связать свойства флуктуаций с величинами, характеризующими поведение тела под действием определенных внешних воздействий. При этом речь может идти о флуктуациях как классических величин, так и величин квантовой природы.

Физические величины этой категории обладают тем свойством, что для каждой из них существует такое внешнее воздействие, которое описывается появлением в гамильтониане тела возмущающего оператора вида

$$\hat{V} = -\hat{x} f(t), \qquad (123,1)$$

где $\hat{x}$ — оператор данной физической величины, а возмущающая *обобщенная сила* f есть заданная функция времени.

Квантовомеханическое среднее значение $\bar{x}$ при наличии такого возмущения отлично от нуля (в то время как в равновесном состоянии в отсутствие возмущения $\bar{x} = 0$) и может быть представлено в виде $\hat{\alpha} f$, где $\hat{\alpha}$ — линейный интегральный оператор, действие которого на функцию $f(t)$ определяется формулой вида

$$\bar{x}(t) = \hat{\alpha} f = \int_0^\infty \alpha(\tau) f(t-\tau)\, d\tau, \qquad (123,2)$$