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:

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

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

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

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

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

§ 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

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

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

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

где $\alpha(\tau)$—функция времени, зависящая от свойств тела. Значение $\bar{x}$ в момент времени t может, конечно, зависеть от значений силы f лишь в предшествующие (а не последующие) моменты времени; выражение (123,2) удовлетворяет этому требованию. О величине $\bar{x}(t)$ говорят как об *отклике* системы на внешнее возмущение.

Всякое зависящее от времени возмущение может быть сведено путем фурье-разложения к совокупности монохроматических компонент, зависящих от времени как $e^{-i\omega t}$. Подставив в (123,2) f и $\bar{x}$ в виде $f_\omega e^{-i\omega t}$ и $\bar{x}_\omega e^{-i\omega t}$, получим связь между фурье-компонентами силы и отклика в виде

$$\bar{x}_\omega = \alpha(\omega) f_\omega, \tag{123,3}$$

где функция $\alpha(\omega)$ определяется как

$$\alpha(\omega) = \int_0^\infty \alpha(t) e^{i\omega t} dt. \tag{123,4}$$

Задание этой функции полностью определяет поведение тела под влиянием данного возмущения. Мы будем называть $\alpha(\omega)$ *обобщенной восприимчивостью*[1]). Эта величина играет основную роль в излагаемой теории, поскольку через нее выражаются, как мы увидим, флуктуации величины x[2]).

Функция $\alpha(\omega)$, вообще говоря, комплексна. Обозначим ее вещественную и мнимую части посредством α' и α'':

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega). \tag{123,5}$$

Из определения (123,4) сразу видно, что

$$\alpha(-\omega) = \alpha^*(\omega). \tag{123,6}$$

Отделяя здесь вещественную и мнимую части, находим

$$\alpha'(-\omega) = \alpha'(\omega), \quad \alpha''(-\omega) = -\alpha''(\omega), \tag{123,7}$$

т. е. $\alpha'(\omega)$—четная, а $\alpha''(\omega)$—нечетная функция частоты. При $\omega = 0$ функция $\alpha''(\omega)$ меняет знак, проходя через нуль (или в некоторых случаях через бесконечность).

---

[1]) В качестве примера укажем, что f может представлять собой электрическое поле, а x—электрический дипольный момент, приобретаемый телом в этом поле. При этом α является электрической поляризуемостью тела.

[2]) Определенная указанным образом величина $\alpha(\omega)$ представляется более удобной, чем иногда используемый *обобщенный импеданс* $Z(\omega) = -1/i\omega\alpha(\omega)$, представляющий собой коэффициент в соотношении $f_\omega = Z(\omega)(\dot{\bar{x}})_\omega$.

Следует подчеркнуть, что свойство (123,6) выражает собой просто тот факт, что отклик $\bar{x}$ должен быть вещественным при всякой вещественной силе f. Если функция $f(t)$ чисто монохроматическая и задается вещественным выражением

$$f(t) = \operatorname{Re} f_0 e^{-i\omega t} = \frac{1}{2}\left[f_0 e^{-i\omega t} + f_0^* e^{i\omega t}\right], \qquad (123,8)$$

то путем применения оператора α к каждому из двух членов получим

$$\bar{x} = \frac{1}{2}\left[\alpha(\omega) f_0 e^{-i\omega t} + \alpha(-\omega) f_0^* e^{i\omega t}\right]; \qquad (123,9)$$

условие вещественности этого выражения совпадает с (123,6).

В пределе $\omega \to \infty$ функция $\alpha(\omega)$ стремится к конечному вещественному пределу α_∞. Для определенности будем считать ниже, что этот предел равен нулю; отличное от нуля α_∞ требует лишь очевидных незначительных изменений в некоторых из получаемых ниже формул.

Изменение состояния тела под влиянием «силы» f сопровождается поглощением (диссипацией) энергии; источником этой энергии служит внешнее воздействие, а после поглощения телом она превращается в нем в тепло. Эта диссипация тоже может быть выражена через величину α. Для этого воспользуемся равенством

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

согласно которому производная по времени от средней энергии тела равна среднему значению частной производной по времени от гамильтониана тела (см. § 11). Поскольку в гамильтониане явно зависит от времени лишь возмущение $\hat{V}$, то имеем

$$\frac{dE}{dt} = -\bar{x}\frac{df}{dt}. \qquad (123,10)$$

Это соотношение играет важную роль в применениях излагаемой теории. Если нам известно выражение для изменения энергии в том или ином конкретном процессе, то, сравнивая его с (123,10), можно установить, какая величина играет роль «силы» f по отношению к интересующей нас переменной x.

Подставив $\bar{x}$ и f из (123,8—9) в (123,10) и усреднив по времени, мы получим среднюю величину энергии, диссипируемой (в единицу времени) в системе под влиянием монохроматического возмущения; обозначим эту величину посредством Q. Члены, содержащие $\exp(\pm 2i\omega t)$, обращаются при усреднении в нуль, и мы находим [1])

$$Q=\frac{i\omega}{4}(\alpha^*-\alpha)\,|f_0|^2=\frac{\omega}{2}\alpha''(\omega)\,|f_0|^2. \qquad (123,11)$$

Отсюда видно, что мнимая часть восприимчивости определяет диссипацию энергии. Поскольку всякий реальный процесс всегда сопровождается некоторой диссипацией ($Q>0$), то мы приходим к важному выводу о том, что для всех положительных значений переменной ω функция α'' отлична от нуля и положительна.

Оказывается возможным получить некоторые весьма общие соотношения для функции $\alpha(\omega)$ путем использования математического аппарата теории функций комплексного переменного. Будем рассматривать ω как комплексную переменную ($\omega=\omega'+i\omega''$) и исследуем свойства функции $\alpha(\omega)$ в верхней полуплоскости этой переменной. Из определения (123,4) и из факта конечности $\alpha(t)$ при всех положительных t следует, что $\alpha(\omega)$ есть однозначная функция во всей верхней полуплоскости и нигде не обращается в ней в бесконечность, т. е. не имеет особых точек. Действительно, при $\omega''>0$ в подынтегральном выражении в (123,4) имеется экспоненциально убывающий множитель $\exp(-t\omega'')$, а поскольку и функция $\alpha(t)$ конечна во всей области интегрирования, то интеграл сходится. Функция $\alpha(\omega)$ не имеет особенностей и на самой вещественной оси ($\omega''=0$), за исключением, возможно, лишь начала координат [2]). Полезно обратить внимание на то, что вывод об отсутствии особых точек у функции $\alpha(\omega)$ в верхней полуплоскости является с физической точки зрения следствием принципа причинности. Последний проявляется в том, что интегрирование в (123,2) производится лишь по времени, предшествующему данному моменту t, в результате чего в формуле (123,4) область интегрирования и распространяется от 0 до ∞ (а не от $-\infty$ до $+\infty$).

Из определения (123,4) очевидно, далее, что

$$\alpha(-\omega^*)=\alpha^*(\omega). \qquad (123,12)$$

Это есть обобщение соотношения (123,6), относящегося к вещественным значениям ω. В частности, для чисто мнимых зна-

[1]) Если речь идет не о чисто монохроматической функции $f(t)$, а о возмущении, действующем в течение ограниченного промежутка времени ($f\to 0$ при $|t|\to\infty$), то полная диссипация энергии за все время выражается через фурье-компоненты возмущения интегралом

$$\int_{-\infty}^{\infty}Q\,dt=-\int_{-\infty}^{\infty}i\omega\alpha(\omega)\,|f_\omega|^2\frac{d\omega}{2\pi}=\int_0^{\infty}2\omega\alpha''(\omega)\,|f_\omega|^2\frac{d\omega}{2\pi}.$$

[2]) В нижней же полуплоскости определение (123,4) неприменимо, так как интеграл расходится. Поэтому функция $\alpha(\omega)$ в нижней полуплоскости может быть определена лишь как аналитическое продолжение выражения (123,4) из верхней полуплоскости. В этой области функция $\alpha(\omega)$ имеет, вообще говоря, особые точки.

чений ω имеем: $\alpha(i\omega'') = \alpha^*(i\omega'')$, т. е. на мнимой оси функция $\alpha(\omega)$ вещественна.

Докажем следующую теорему: функция $\alpha(\omega)$ не принимает вещественных значений ни в какой конечной точке верхней полуплоскости, за исключением лишь точек мнимой оси; на последней же $\alpha(\omega)$ монотонно убывает от некоторого положительного значения $\alpha_0 > 0$ при $\omega = i0$ до нуля при $\omega = i\infty$. Отсюда же, в частности, будет следовать, что функция $\alpha(\omega)$ не имеет нулей в верхней полуплоскости.

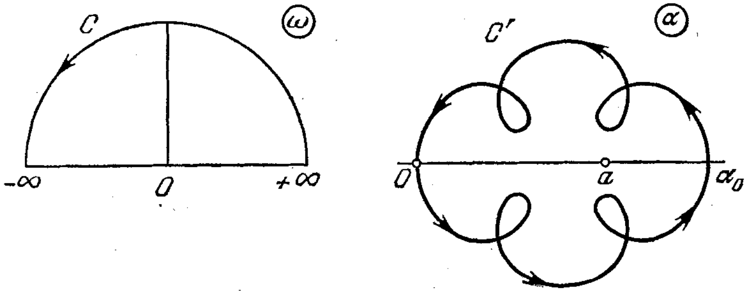

Рис. 53.

Для доказательства[1]) воспользуемся известной теоремой теории функций комплексного переменного, согласно которой интеграл

$$\frac{1}{2\pi i}\int \frac{d\alpha(\omega)}{d\omega}\frac{d\omega}{\alpha(\omega)-a}, \qquad (123,13)$$

взятый по замкнутому контуру C, равен разности между числом нулей и числом полюсов функции $\alpha(\omega)-a$ в области, ограниченной контуром. Пусть a — вещественное число, а в качестве C выберем контур, состоящий из вещественной оси и бесконечно удаленной полуокружности в верхней полуплоскости (рис. 53). Предположим сначала, что α_0 конечно. Поскольку в верхней полуплоскости функция $\alpha(\omega)$, а потому $\alpha(\omega)-a$, не имеет полюсов, то указанный интеграл дает просто число нулей разности $\alpha - a$, т. е. число точек, в которых $\alpha(\omega)$ принимает вещественное значение a.

Для вычисления интеграла пишем его в виде

$$\frac{1}{2\pi i}\int\limits_{C'} \frac{d\alpha}{\alpha - a},$$

причем интегрирование производится по контуру C' в плоскости комплексной переменной α, являющемуся отображением контура C из плоскости ω. Вся бесконечно удаленная полуокружность отображается в точку $\alpha = 0$, а начало координат ($\omega = 0$) — в дру-

[1]) Излагаемое ниже доказательство принадлежит *Н. Н. Мейману*.

гую, тоже вещественную точку α_0. Правая же и левая вещественные полуоси ω отображаются в плоскости α в некоторые весьма сложные (вообще говоря, самопересекающиеся) кривые, лежащие соответственно целиком в верхней и нижней полуплоскостях. Существенно, что эти кривые нигде (кроме точек $\alpha=0$ и $\alpha=\alpha_0$) не пересекают ось абсцисс, так как α не принимает вещественных значений ни при каком (кроме $\omega=0$) конечном вещественном значении ω. Ввиду этого свойства контура C' полное изменение аргумента комплексного числа $\alpha-a$ при обходе вдоль него равно 2π (если число a лежит между 0 и α_0, как изображено на рис. 53) или нулю (если a лежит вне этого интервала) вне зависимости от числа самопересечений контура. Отсюда следует, что выражение (123,13) равно единице при $0<a<\alpha_0$ и нулю при всяком другом значении a.

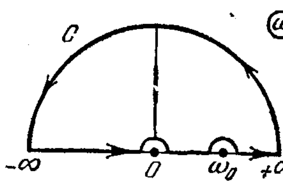

Рис. 54.

Таким образом, мы приходим к выводу, что функция $\alpha(\omega)$ в верхней полуплоскости ω принимает всего по одному разу всякое вещественное значение a, лежащее в указанном интервале (и ни разу—значения, лежащие вне этого интервала). Отсюда прежде всего можно заключить, что на мнимой оси, где функция $\alpha(\omega)$ вещественна, она не может иметь ни максимума, ни минимума: в противном случае она принимала бы некоторые значения по крайней мере дважды. Следовательно, на мнимой оси функция $\alpha(\omega)$ меняется монотонно, пробегая здесь и только здесь по одному разу все вещественные значения от α_0 до нуля.

Если $\alpha_0=\infty$ (т. е. $\alpha(\omega)$ имеет полюс в точке $\omega=0$), то изложенное доказательство меняется лишь в том отношении, что при движении (в плоскости ω) вдоль вещественной оси надо обойти начало координат сверху по бесконечно малой полуокружности. Изменение контура C' на рис. 53 можно представлять себе при этом как результат отодвигания α_0 на бесконечность. Функция $\alpha(\omega)$ на мнимой оси в этом случае монотонно убывает от $+\infty$ до 0.

Далее выведем формулу, связывающую мнимую и вещественную части функции $\alpha(\omega)$ друг с другом. Для этого выберем какое-либо положительное вещественное значение $\omega=\omega_0$ и проинтегрируем выражение $\alpha/(\omega-\omega_0)$ по контуру, изображенному на рис. 54. Этот контур идет вдоль всей вещественной оси, огибая сверху точку $\omega=\omega_0>0$ (а также точку $\omega=0$, если последняя является полюсом функции $\alpha(\omega)$). Контур замыкается бесконечно удаленной полуокружностью. На бесконечности $\alpha\to 0$, и потому функция $\alpha/(\omega-\omega_0)$ стремится к нулю быстрее, чем $1/\omega$. Поэтому интеграл

$$\int\limits_C \frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0}\,d\omega$$

сходится; поскольку же $\alpha(\omega)$ не имеет особых точек в верхней полуплоскости, а точка $\omega=\omega_0$ исключена из области интегрирования, то функция $\alpha/(\omega-\omega_0)$ аналитична во всей области внутри контура C, и написанный интеграл равен нулю.

Интеграл по бесконечно удаленной полуокружности обращается в нуль сам по себе. Точку же ω_0 обойдем по бесконечно малой полуокружности (радиуса $\rho\to 0$). Обход происходит по часовой стрелке и дает в интеграле вклад, равный $-i\pi\alpha(\omega_0)$. Если α_0 конечно, то обход начала координат излишен и интегрирование вдоль всей вещественной оси дает, таким образом,

$$\lim_{\rho\to 0}\left\{\int_{-\infty}^{\omega_0-\rho}\frac{\alpha}{\omega-\omega_0}d\omega+\int_{\omega_0+\rho}^{\infty}\frac{\alpha}{\omega-\omega_0}d\omega\right\}-i\pi\alpha(\omega_0)=0.$$

Первый член есть интеграл от $-\infty$ до $+\infty$, понимаемый в смысле главного значения. Отмечая это обстоятельство, как принято, перечеркнутым знаком интеграла, имеем

$$i\pi\alpha(\omega_0)=\fint_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha}{\omega-\omega_0}d\omega. \tag{123,14}$$

Переменная интегрирования ω пробегает здесь лишь вещественные значения. Переобозначим ее буквой ξ, а посредством ω обозначим заданное вещественное значение ω_0; напишем также функцию $\alpha(\omega)$ вещественного переменного ω в виде $\alpha=\alpha'+i\alpha''$. Отделяя в (123,14) вещественную и мнимую части, найдем окончательно следующие две формулы:

$$\alpha'(\omega)=\frac{1}{\pi}\fint_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\xi)}{\xi-\omega}d\xi, \tag{123,15}$$

$$\alpha''(\omega)=-\frac{1}{\pi}\fint_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha'(\xi)}{\xi-\omega}d\xi. \tag{123,16}$$

Эти соотношения (которые называют *дисперсионными*) были впервые получены *Крамерсом* и *Кронигом* (*H. A. Kramers*, *R. L. Kronig*, 1927). Подчеркнем, что единственным существенным свойством функции $\alpha(\omega)$, использованным при выводе этих формул, является отсутствие особых точек в верхней полуплоскости[1]). Поэтому можно сказать, что формулы Крамерса—Кронига (как и указанное

---

[1]) Что касается свойства $\alpha\to 0$ при $\omega\to\infty$, то оно не является существенным: если бы предел α_∞ был отличен от 0, то надо было бы просто рассматривать разность $\alpha-\alpha_\infty$ вместо α с соответствующим очевидным видоизменением формул (123,15—16). См. также задачу к § 126.

свойство функции $\alpha(\omega)$)являются прямым следствием принципа причинности.

Воспользовавшись нечетностью функции $\alpha''(\xi)$, можно переписать (123,15) в виде

$$\alpha'(\omega) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\alpha''(\xi)}{\xi-\omega}d\xi + \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\alpha''(\xi)}{\xi+\omega}d\xi$$

или

$$\alpha'(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\xi\alpha''(\xi)}{\xi^2-\omega^2}d\xi. \tag{123,17}$$

Если функция $\alpha(\omega)$ имеет полюс в точке $\omega = 0$, вблизи которой $\alpha = iA/\omega$, то обход этого полюса по полуокружности дает в интеграле дополнительный вещественный член $-A/\omega_0$, который должен быть прибавлен к левой стороне равенства(123,14). Соответственно такой же член появится и в формуле (123,16):

$$\alpha''(\omega) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha'(\xi)}{\xi-\omega}d\xi + \frac{A}{\omega}. \tag{123,18}$$

Формулы же (123,15) или (123,17) остаются без изменений.

Выведем ещё формулу, выражающую значения $\alpha(\omega)$ на верхней мнимой полуоси через значения $\alpha''(\omega)$ на вещественной оси. Для этого рассмотрим интеграл

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

взятый по контуру, состоящему из вещественной оси и бесконечно удаленной полуокружности в верхней полуплоскости (ω_0 — вещественное число). Этот интеграл выражается через вычет подынтегрального выражения относительно полюса $\omega = i\omega_0$. С другой стороны, интеграл по бесконечно удаленной полуокружности исчезает, так что получаем

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

В левой стороне равенства вещественная часть интеграла обращается в нуль в силу нечетности интегрируемой функции. Заменив также обозначения ω_0 и ω на ω и ξ, получим окончательно:

$$\alpha(i\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\xi\alpha''(\xi)}{\omega^2+\xi^2}d\xi. \tag{123,19}$$

Если проинтегрировать это соотношение с обеих сторон по $d\omega$, то получается

$$\int_0^\infty \alpha(i\omega)\,d\omega = \int_0^\infty \alpha''(\omega)\,d\omega. \tag{123,20}$$

§ 124. Флуктуационно-диссипационная теорема

Приступим теперь к вычислениям, имеющим целью связать флуктуации величины x с введенной в предыдущем параграфе обобщенной восприимчивостью.

Пусть тело, к которому относится величина x, находится в некотором определенном (n-м) стационарном состоянии. Среднее значение (122,8) вычисляется как соответствующий диагональный матричный элемент оператора

$$\frac{1}{2}(\hat{x}_\omega\hat{x}_{\omega'}+\hat{x}_{\omega'}\hat{x}_\omega)_{nn} = \frac{1}{2}\sum_m [(x_\omega)_{nm}(x_{\omega'})_{mn}+(x_{\omega'})_{nm}(x_\omega)_{mn}], \tag{124,1}$$

где суммирование распространяется по всему спектру уровней энергии (ввиду комплексности оператора $\hat{x}_\omega$ два члена в квадратных скобках не совпадают друг с другом).

Зависимость оператора $\hat{x}(t)$ от времени означает, что вычисление его матричных элементов должно производиться с помощью зависящих от времени волновых функций. Поэтому имеем

$$(x_\omega)_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} x_{nm}e^{i(\omega_{nm}+\omega)t}\,dt = 2\pi x_{nm}\delta(\omega_{nm}+\omega), \tag{124,2}$$

где x_{nm} — обычный, не зависящий от времени матричный элемент оператора $\hat{x}$, выраженного через координаты частиц тела, а $\omega_{nm}=(E_n-E_m)/\hbar$ — частота перехода между состояниями n и m. Таким образом,

$$\frac{1}{2}(\hat{x}_\omega\hat{x}_{\omega'}+\hat{x}_{\omega'}\hat{x}_\omega)_{nn} =$$
$$= 2\pi^2\sum_m |x_{nm}|^2[\delta(\omega_{nm}+\omega)\,\delta(\omega_{mn}+\omega')+\delta(\omega_{nm}+\omega')\,\delta(\omega_{mn}+\omega)]$$

(здесь учтено, что $x_{nm}=x^*_{mn}$ ввиду вещественности x). Произведения δ-функций в квадратных скобках можно, очевидно, переписать в виде

$$\delta(\omega_{nm}+\omega)\,\delta(\omega+\omega')+\delta(\omega_{mn}+\omega)\,\delta(\omega+\omega').$$