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

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

§ 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

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

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

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

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

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

Сравнивая после этого с (122,8), получим следующую формулу:

$$(x^2)_\omega = \pi \sum_m |x_{nm}|^2 [\delta(\omega + \omega_{nm}) + \delta(\omega + \omega_{mn})]. \qquad (124{,}3)$$

В связи с формой записи этого выражения сделаем следующее замечание. Хотя уровни энергии макроскопического тела, строго говоря, дискретны, но они расположены так густо, что фактически образуют непрерывный спектр. Формулу (124,3) можно написать без δ-функций, если усреднить ее по малым (но содержащим все же много уровней) интервалам частот. Если $\Gamma(E)$ — число уровней энергии, меньших E, то

$$(x^2)_\omega = \pi\hbar |x_{nm}|^2 \left[\frac{d\Gamma}{dE_m} + \frac{d\Gamma}{dE'_m}\right], \qquad (124{,}4)$$

где $E_m = E_n + \hbar\omega$, $E'_m = E_n - \hbar\omega$.

Предположим теперь, что на тело действует периодическое (с частотой ω) возмущение, описывающееся оператором

$$\hat{V} = -f\hat{x} = -\frac{1}{2}(f_0 e^{-i\omega t} + f_0^* e^{i\omega t})\,\hat{x}. \qquad (124{,}5)$$

Под влиянием возмущения система совершает переходы, причем вероятность перехода $n \to m$ (в единицу времени) дается формулой

$$w_{mn} = \frac{\pi |f_0|^2}{2\hbar^2} |x_{mn}|^2 \{\delta(\omega + \omega_{mn}) + \delta(\omega + \omega_{nm})\}. \qquad (124{,}6)$$

(см. III, § 42). Два члена в этой формуле возникают соответственно из двух членов в (124,5). При каждом переходе система поглощает (или отдает) квант $\hbar\omega$. Сумма

$$Q = \sum_m w_{mn} \hbar\omega_{mn}$$

дает среднюю энергию, поглощаемую телом (в единицу времени); источником этой энергии является внешнее возмущение, а поглощаясь телом, она диссипируется в нем. Подставив (124,6), получим

$$Q = \frac{\pi}{2\hbar} |f_0|^2 \sum_m |x_{nm}|^2 \{\delta(\omega + \omega_{mn}) + \delta(\omega + \omega_{nm})\}\, \omega_{mn}$$

или, учитывая, что δ-функции отличны от нуля лишь при равном нулю аргументе,

$$Q = \frac{\pi}{2\hbar} \omega |f_0|^2 \sum_m |x_{nm}|^2 \{\delta(\omega + \omega_{nm}) - \delta(\omega + \omega_{mn})\}. \qquad (124{,}7)$$

Сравнивая (124,7) с (123,11), находим

$$\alpha''(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_m |x_{nm}|^2 \{\delta(\omega + \omega_{nm}) - \delta(\omega + \omega_{mn})\}. \qquad (124{,}8)$$

Вычисленные таким образом величины $(x^2)_\omega$ и α'' связаны между собой простым соотношением. Оно выявляется, однако, лишь после того, как эти величины будут выражены через температуру тела. Для этого производим усреднение с помощью распределения Гиббса (ср. примечание на стр. 392). Для $(x^2)_\omega$ имеем

$$(x^2)_\omega = \pi \sum_{n,m} \rho_n |x_{nm}|^2 \{\delta(\omega+\omega_{nm}) + \delta(\omega+\omega_{mn})\},$$

где для краткости обозначено

$$\rho_n = \exp\left(\frac{F-E_n}{T}\right),$$

E_n—уровни энергии тела, F—его свободная энергия. Поскольку суммирование производится теперь по обоим индексам m и n, то можно менять их пбозначение. Раскрыв фигурные скобки и заменив во втором члене m и n друг на друга, получим

$$(x^2)_\omega = \pi \sum_{m,n} (\rho_n + \rho_m) |x_{nm}|^2 \delta(\omega+\omega_{nm}) =$$
$$= \pi \sum_{m,n} \rho_n \left(1 + e^{\hbar\omega_{nm}/T}\right) |x_{nm}|^2 \delta(\omega+\omega_{nm})$$

или, ввиду наличия в суммируемом выражении δ-функции,

$$(x^2)_\omega = \pi \left(1 + e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{m,n} \rho_n |x_{nm}|^2 \delta(\omega+\omega_{nm}).$$

Совершенно аналогичным путем получим

$$\alpha'' = \frac{\pi}{\hbar}\left(1 - e^{-\hbar\omega/T}\right) \sum_{m,n} \rho_n |x_{nm}|^2 \delta(\omega+\omega_{nm}).$$

Сравнивая друг с другом эти два выражения, найдем

$$(x^2)_\omega = \hbar\alpha'' \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2T} = 2\hbar\alpha'' \left\{\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\hbar\omega/T}-1}\right\}. \qquad (124,9)$$

Полный же средний квадрат флуктуирующей величины дается интегралом

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{\pi} \int_0^\infty \alpha''(\omega) \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2T}\, d\omega. \qquad (124,10)$$

Эти важные формулы составляют содержание *флуктуационно-диссипационной теоремы* (коротко ФДТ), установленной *Калленом* и *Вельтоном* (*H. B. Callen, T. A. Welton*, 1951). Они связывают флуктуации физических величин с диссипативными свойствами системы при внешнем воздействии на нее. Обратим внимание на то, что множитель в фигурных скобках в (124,9) представляет собой среднюю энергию (в единицах $\hbar\omega$) осциллятора при температуре T; член $1/2$ отвечает нулевым колебаниям.

Подобно тому, как это было сделано в конце § 118, полученные результаты можно представить в другом виде, рассматривая формальным образом самопроизвольные флуктуации величины x как результат воздействия некоторых фиктивных случайных сил. При этом удобно записывать формулы, вводя фурье-компоненты x_ω и f_ω так, как если бы x было классической величиной. Связь между ними записывается в виде

$$x_\omega = \alpha(\omega) f_\omega, \tag{124,11}$$

подобном (123,3), после чего для средних квадратичных флуктуаций пишем

$$\langle x_\omega x_{\omega'} \rangle = \alpha(\omega)\,\alpha(\omega')\,\langle f_\omega f_{\omega'} \rangle,$$

или, переходя к спектральным плотностям флуктуаций, согласно определению (122,4):

$$(x^2)_\omega = \alpha(\omega)\,\alpha(-\omega)\,(f^2)_\omega = |\alpha(\omega)|^2\,(f^2)_\omega.$$

Для спектральной плотности среднего квадрата случайной силы имеем, следовательно, из (124,9)

$$(f^2)_\omega = \frac{\hbar\alpha''(\omega)}{|\alpha(\omega)|^2}\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega}{2T}\,. \tag{124,12}$$

Такая трактовка может представить определенные преимущества в конкретных применениях теории.

Вывод ФДТ основан на рассмотрении внешнего воздействия (124,5) как малого возмущения; с малостью воздействия связана также и линейность отклика системы — линейность связи между $\bar{x}$ и силой f. Подчеркнем, однако, что это обстоятельство отнюдь не приводит к появлению каких-либо физических ограничений на допустимые значения средней флуктуации самой величины x. Малость воздействия всегда может быть обеспечена сколь угодной малостью вспомогательной величины f, не фигурирующей в окончательной формулировке ФДТ. Таким образом, для рассматриваемой категории физических величин x свойства их флуктуаций (в термодинамически равновесной системе) полностью определяются свойствами отклика системы на сколь угодно слабое внешнее воздействие.

При температурах $T \gg \hbar\omega$ имеем $\mathrm{cth}(\hbar\omega/2T) \approx 2T/\hbar\omega$, и формула (124,9) принимает вид

$$(x^2)_\omega = \frac{2T}{\omega}\,\alpha''(\omega). \tag{124,13}$$

Из нее выпадает квантовая постоянная в соответствии с тем, что в этих условиях флуктуации классичны.

Если неравенство $T \gg \hbar\omega$ справедливо при всех существенных частотах (частоты, для которых $\alpha''(\omega)$ существенно отлично от нуля), то к классическому пределу можно перейти и в интегральной формуле (124,10):

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2T}{\pi} \int_0^\infty \frac{\alpha''(\omega)}{\omega} d\omega.$$

Но согласно (123,17) этот интеграл выражается через статическое значение $\alpha'(0) = \alpha(0)$, так что[1]).

$$\langle x^2 \rangle = T\alpha(0). \tag{124,14}$$

Остановимся, наконец, на связи изложенных результатов с теорией квазистационарных флуктуаций (§ 118).

Прежде всего заметим, что если величина x такова, что ее флуктуации малы в подразумевавшемся в § 110 смысле (т. е. допустимо разложение энтропии (110,3)), то средний квадрат $\langle x^2 \rangle = 1/\beta$. Сравнение с (124,14) показывает, что для такой величины

$$\alpha(0) = \frac{1}{\beta T}. \tag{124,15}$$

Пусть далее x относится к категории величин, флуктуации которых квазистационарны. Предположим, что тело подвергается воздействию статической силы f. Это приводит к смещению состояния равновесия, в котором $\bar{x}$ уже отлично от нуля и равно $\bar{x} = \alpha(0) f = f/\beta T$. Макроскопическое уравнение, описывающее релаксацию далекой от равновесия системы, будет тогда иметь вид

$$\dot{x} = -\lambda\left(x - \frac{f}{\beta T}\right), \tag{124,16}$$

отличающийся от уравнения $\dot{x} = -\lambda x$ (118,5) тем, что скорость $\dot{x}$ обращается в нуль не при $x = 0$, а при $x = f/\beta T$.

Уравнение (124,16) можно считать применимым и в случае, когда тело подвержено воздействию зависящего от времени возмущения,

---

[1]) Это выражение можно получить также и прямо из распределения Гиббса в классической статистике. Пусть $x = x(q, p)$ — некоторая классическая величина. Вводя в энергию систему член $-xf$ (с постоянным f), для среднего значения $\bar{x}$ будем иметь

$$\bar{x} = \int x(q, p) \exp\left\{\frac{F - E(q, p) + x(q, p) f}{T}\right\} dq\, dp.$$

По определению $\alpha(0) = d\bar{x}/df$ при $f \to 0$; дифференцируя написанное выражение, находим

$$\alpha(0) = \frac{1}{T} \int x^2 \exp\left(\frac{F - E}{T}\right) dq\, dp = \frac{1}{T} \langle x^2 \rangle$$

(свободная энергия F тоже зависит от f, но член с производной $\partial F/\partial f$ выпадает после того, как будет положено $f = 0$, т. е. $\bar{x} = 0$).

если только период изменения силы $f(t)$ велик по сравнению со временем установления неполного равновесия (отвечающего каждому заданному значению x). Если $f(t)$ — периодическая (с частотой ω) функция времени, то с той же частотой будет меняться и макроскопическое значение $x(t)$. Подставив в уравнение (124,16) $f(t)$ и $x(t)$ в виде (123,8—9) и отделив в нем члены, содержащие $\exp(-i\omega t)$ и $\exp i\omega t$, получим

$$-i\omega\alpha(\omega) f_0 = -\lambda\alpha(\omega) f_0 + \frac{\lambda}{\beta T} f_0,$$

откуда

$$\alpha(\omega) = \frac{\lambda}{\beta T(\lambda - i\omega)}. \qquad (124,17)$$

Согласно ФДТ (124,9) находим теперь

$$(x^2)_\omega = \frac{2\lambda}{\beta(\lambda^2+\omega^2)} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}. \qquad (124,18)$$

Этот результат обобщает формулу (122,9), относящуюся к флуктуациям классической величины. Выражение (124,18) отличается от (122,9) множителем

$$\frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}, \qquad (124,19)$$

обращающимся в единицу в классическом пределе, когда $\hbar\omega \ll T$.

Уравнение (124,16) можно рассматривать и в другом аспекте: не как макроскопическое уравнение движения далекой от равновесия системы (находящейся под внешним воздействием), а как уравнение для флуктуаций величины $x(t)$ в равновесной замкнутой системе, происходящих под влиянием случайной силы f. В такой интерпретации оно отвечает уравнению (118,9), так что оба определения случайной силы отличаются лишь множителем: $y = \lambda f/T\beta$. Для спектральной плотности $(y^2)_\omega$ найдем, подставив (124,17) в (124,12):

$$(y^2)_\omega = \frac{2\lambda}{\beta} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T}, \qquad (124,20)$$

что отличается от прежнего выражения (122,10) тем же множителем (124,19).

§ 125. Флуктуационно-диссипационная теорема для нескольких величин

ФДТ легко может быть обобщена на случай, когда рассматриваются одновременно несколько флуктуирующих величин x_i.

Обобщенные восприимчивости определяются в таком случае по отклику системы на возмущение вида

$$\hat{V} = -\hat{x}_i f_i(t) \qquad (125,1)$$