ГЛАВА IX

ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЕ ФЛУКТУАЦИИ

§ 86. Динамический формфактор жидкости

Рассмотренная в V § 116 корреляционная функция флуктуаций плотности является частным случаем более общей функции, связывающей флуктуации плотности не только в различных точках пространства, но и в различные моменты времени. В классической теории эта функция определяется как среднее значение

$$\bar{n}\sigma(t;\ \mathbf{r}_1,\ \mathbf{r}_2)=\langle\delta n(t_1,\ \mathbf{r}_1)\,\delta n(t_2,\ \mathbf{r}_2)\rangle, \tag{86,1}$$

где $t=t_1-t_2$; из определения σ вынесен множитель $\bar{n}=N/V$ — средняя плотность числа частиц. Для однородной и изотропной среды (жидкость, газ) функция (86,1) зависит от $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ только через расстояние $r=|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$ между двумя точками, что и будет предполагаться ниже.

В квантовой теории аналогичная функция определяется с помощью симметризованного произведения зависящих от времени (гейзенберговских) операторов плотности как

$$\bar{n}\tilde{\sigma}(t,\ r)=\frac{1}{2}\langle\delta\hat{n}(t_1,\ \mathbf{r}_1)\,\delta\hat{n}(t_2,\ \mathbf{r}_2)+\delta\hat{n}(t_2,\ \mathbf{r}_2)\,\delta\hat{n}(t_1,\ \mathbf{r}_1)\rangle \tag{86,2}$$

(в соответствии с общим способом определения согласно V (118,4)). Некоторые преимущества, однако, имеет в данном случае несимметричное определение

$$\bar{n}\sigma(t,\ r)=\langle\delta\hat{n}(t_1,\ \mathbf{r}_1)\,\delta\hat{n}(t_2,\ \mathbf{r}_2)\rangle, \tag{86,3}$$

для которого сохраним обозначение $\sigma(t,\ r)$[1]). В противоположность функции $\tilde{\sigma}(t,\ r)$ функция $\sigma(t,\ r)$ не является четной по переменной t; очевидно, что

$$\tilde{\sigma}(t,\ r)=\frac{1}{2}[\sigma(t,\ r)+\sigma(-t,\ r)]. \tag{86,4}$$

---

[1]) Именно эта функция является непосредственно наблюдаемой величиной, например, при неупругом рассеянии нейтронов в жидкости — см. задачу.

Фурье-образ функции $\sigma(t, r)$ по времени и координатам

$$\sigma(\omega, \mathbf{k}) \equiv \sigma(\omega, k) = \int \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega t - \mathbf{kr})} \sigma(t, r)\, dt\, d^3x \qquad (86,5)$$

называют *динамическим формфактором* среды. Ввиду изотропии функции $\sigma(t, r)$ он зависит только от абсолютной величины волнового вектора. Из (86,4) следует, что фурье-образ функции $\tilde{\sigma}(t, r)$

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2}[\sigma(\omega, k) + \sigma(-\omega, k)]. \qquad (86,6)$$

Чисто пространственная корреляция флуктуаций плотности жидкости определяется функцией (86,1) при $t=0$: $\sigma(r) = \sigma(t=0, r) = \tilde{\sigma}(t=0, r)$. Эта функция связана с введенной в V § 116 (и использованной в § 83) функцией $\nu(r)$ согласно $\sigma(r) = \nu(r) + \delta(\mathbf{r})$; их фурье-образы: $\sigma(k) = \nu(k) + 1$. Функцию $\sigma(k)$ или $\nu(k)$ называют *статическим формфактором* жидкости. Функции $\sigma(\omega, k)$ и $\sigma(k)$ связаны друг с другом интегральным соотношением

$$\sigma(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k)\, e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}\Big|_{t=0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\omega, k) \frac{d\omega}{2\pi}. \qquad (86,7)$$

Шредингеровский (не зависящий от времени) оператор плотности дается суммой

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \qquad (86,8)$$

взятой по всем частицам среды; координаты частиц $\mathbf{r}_a$ играют роль параметров (ср. (24,4)). Нам понадобятся ниже компоненты фурье-разложения этого оператора по координатам

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = \int \hat{n}(\mathbf{r})\, e^{-i\mathbf{kr}} d^3x = \sum_a e^{-i\mathbf{kr}_a}. \qquad (86,9)$$

Переход к зависящему от времени (гейзенберговскому) оператору происходит по общему правилу

$$\hat{n}(t, \mathbf{r}) = \exp(i\hat{H}t/\hbar)\, \hat{n}(\mathbf{r}) \exp(-i\hat{H}t/\hbar), \qquad (86,10)$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан системы. Этот оператор может быть представлен выражениями (86,8—9) с заменой в них $\mathbf{r}_a$ на $\hat{\mathbf{r}}_a(t)$ — гейзенберговские операторы координат частиц.

Согласно основным принципам статистики, усреднение $\langle \ldots \rangle$ можно понимать по-разному, в зависимости от того, через какие термодинамические переменные должен быть выражен результат.

Так, если функция σ определяется при заданных полной энергии и числе частиц системы, то усреднение производится по определенному (m-му) стационарному состоянию, т. е. взятием соответствующего диагонального матричного элемента. Для однородной системы (жидкость) зависимость матричных элементов оператора $\delta\hat{n}(t, \mathbf{r})$ от времени и координат дается формулой

$$\langle m|\delta\hat{n}(t, \mathbf{r})|l\rangle = \langle m|\delta\hat{n}(0)|l\rangle \exp[i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml}\mathbf{r})], \quad (86,11)$$

вполне аналогичной (8,4) (в правой части стоит матричный элемент шредингеровского оператора $\delta\hat{n}(\mathbf{r})$, взятого в точке $\mathbf{r}=0$). С учетом этой формулы пишем

$$\overline{n\sigma}(t, r) = \sum_l \langle m|\delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1)|l\rangle\langle l|\delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2)|m\rangle =$$
$$= \sum_l |\langle m|\delta\hat{n}(0)|l\rangle|^2 \exp[i(\omega_{ml}t - \mathbf{k}_{ml}\mathbf{r})].$$

Фурье-образ этой функции

$$\overline{n\sigma}(\omega, k) = (2\pi)^4 \sum_l |\langle m|\delta\hat{n}(0)|l\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm})\,\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}). \quad (86,12)$$

Суммирование в этих формулах производится по всем состояниям системы с заданным (N_m) числом частиц (поскольку оператор $\delta\hat{n}$ не меняет этого числа).

Если же мы хотим выразить формфактор через температуру и химический потенциал жидкости, то выражение (86,12) должно еще быть усреднено по распределению Гиббса:

$$\overline{n\sigma}(\omega, k) =$$
$$= (2\pi)^4 \sum_{l,m} \exp\left(\frac{\Omega - E_m - \mu N_m}{T}\right) |\langle m|\delta\hat{n}(0)|l\rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{lm})\,\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{lm}) \quad (86,13)$$

(причем во всех членах суммы $N_l = N_m$). Выписав такую же формулу для $\sigma(-\omega, -\mathbf{k}) \equiv \sigma(-\omega, k)$, взаимно переобозначив в ней индексы суммирования l и m и заменив в экспоненциальном множителе $E_l = E_m + \hbar\omega_{lm} = E_m + \hbar\omega$ (последнее равенство — следствие наличия δ-функции), получим

$$\sigma(-\omega, k) = \sigma(\omega, k)\, e^{-\hbar\omega/T} \quad (86,14)$$

и затем, согласно (86,6),

$$\tilde{\sigma}(\omega, k) = \frac{1}{2}(1 + e^{-\hbar\omega/T})\,\sigma(\omega, k). \quad (86,15)$$

Отметим, что из (86,13) (или (86,12)) следует, что функция $\sigma(\omega, k) \geqslant 0$ при всех значениях ее аргументов. Из соотношения

же (86,14) следует, что при нулевой температуре

$$\sigma(\omega, k) = 0 \quad \text{при} \quad \omega < 0, \ T = 0. \tag{86,16}$$

В макроскопическом пределе ($N, V \to \infty$ при заданном отношении N/V) «частокол» δ-функций в (86,13) размазывается в непрерывную функцию, но δ-функционные пики в $\sigma(\omega, k)$ остаются при значениях $\omega = \omega(k)$, отвечающих незатухающим элементарным возбуждениям (как это следует из рассуждений, подобных изложенным в § 8). Такие пики возникают, однако, лишь для возбуждений без изменения числа частиц[1]).

Покажем, каким образом формфактор жидкости может быть связан с величинами, фигурирующими в общей формулировке флуктуационно-диссипационной теоремы (*D. Pines, Ph. Noziéres*, 1958).

Пусть на каждую частицу жидкости действует некоторое внешнее поле, сообщающее частице потенциальную энергию $U(t, \mathbf{r})$. Тогда оператор возмущения, действующий на жидкость в целом, будет

$$\hat{V}(t) = \int \hat{n}(t, \mathbf{r}) U(t, \mathbf{r}) d^3x. \tag{86,17}$$

Подвергнув все входящие сюда величины фурье-разложению по времени, представим отклик системы (т. е. среднее значение вызванного возмущением изменения плотности) выражением вида

$$\delta\bar{n}(\omega, \mathbf{r}_1) = -\int \alpha(\omega; |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) U(\omega, \mathbf{r}_2) d^3x_2, \tag{86,18}$$

где функция $\alpha(\omega, r)$ играет роль обобщенной восприимчивости. Фурье-компонента по времени от корреляционной функции $\tilde{\sigma}(t, r)$ есть, в обозначениях флуктуационно-диссипационной теоремы:

$$\overline{n\tilde{\sigma}}(\omega, r) = (\delta n(\mathbf{r}_1)\, \delta n(\mathbf{r}_2))_\omega, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Согласно этой теореме, эта функция выражается через обобщенную восприимчивость формулой

$$\overline{n\tilde{\sigma}}(\omega, r) = \hbar \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2T} \operatorname{Im} \alpha(\omega, r). \tag{86,19}$$

Такой же формулой выражается фурье-компонента по координатам $\tilde{\sigma}(\omega, k)$ через $\alpha(\omega, k)$, после чего, согласно (86,15),

---

[1]) Так, в ферми-жидкости $\sigma(\omega, k)$ имеет δ-функционную особенность при $\omega = ku_0$ (u_0 — скорость нулевого звука), но не имеет таких особенностей, отвечающих фермионной ветви спектра — см. § 91.

находим для динамического формфактора

$$\bar{n}\sigma(\omega, k) = \frac{2\hbar}{1-e^{-\hbar\omega/T}} \operatorname{Im}\alpha(\omega, k). \tag{86,20}$$

Важность этих формул связана прежде всего с тем, что ими устанавливается связь динамического формфактора с функцией с известными общими аналитическими свойствами (по переменной ω); для функции $\alpha(\omega, k)$ эти свойства описаны в V § 123. Они позволяют также применить к вычислению формфактора общую формулу (ср. (75,11)), согласно которой

$$\alpha(\omega, k) = \\ = \frac{i}{\hbar}\int\int_0^\infty e^{i(\omega t - \mathbf{kr})} \langle \hat{n}(t, \mathbf{r})\, \hat{n}(0, 0) - \hat{n}(0, 0)\, \hat{n}(t, \mathbf{r})\rangle\, dt\, d^3x. \tag{86,21}$$

Выразив операторы плотности через ψ-операторы ($n = \hat{\Psi}^+\hat{\Psi}$), можно привести это выражение к виду двухчастичной функции Грина, для вычисления которой применима диаграммная техника.

Задача

Выразить через динамический формфактор вероятность неупругого рассеяния медленных нейтронов в жидкости, состоящей из одинаковых атомов (*G. Placzek*, 1952).

Решение. Согласно методу псевдопотенциала (см. III § 151), рассеяние медленных нейтронов может быть описано как результат взаимодействия с потенциальной энергией

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{M} a\hat{n}(\mathbf{r}), \tag{1}$$

где $\hat{n}(\mathbf{r})$ — оператор плотности (86,8); M — приведенная масса атома и нейтрона; a — длина рассеяния медленного нейтрона на отдельном атоме (т. е. взятое с обратным знаком предельное значение амплитуды рассеяния). Вероятность перехода из некоторого начального (i) состояния системы жидкость + нейтрон в конечное (f) состояние в некотором интервале dv_f есть

$$dw_{fi} = \left| \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} U_{fi}(t)\, dt \right|^2 dv_f \tag{2}$$

(см. III (40,5)); для недиагональных матричных элементов U_{fi} в (1) можно писать $\delta\hat{n}$ вместо $\hat{n}$. Волновую функцию начального состояния нейтрона (с импульсом $\mathbf{p}$ и энергией ε) нормируем на одну частицу в объеме V, а волновую функцию конечного состояния (импульс $\mathbf{p}'$ и энергия ε') нормируем на δ-функцию от $\mathbf{p}/2\pi$. Тогда $dv_f = d^3p'/(2\pi\hbar)^3$, а матричный элемент возмущения

$$U_{fi}(t) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{M\sqrt{V}} \int \delta n_{fi}(t, \mathbf{r})\, e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}\, d^3x,$$

где $\hbar\mathbf{k}=\mathbf{p}-\mathbf{p}'$, $\hbar\omega=\varepsilon-\varepsilon'$, а $\delta n_{fi}(t, \mathbf{r})$ — матричный элемент по отношению к волновым функциям жидкости. Подставив это выражение в dw_{fi}, просуммируем вероятность перехода по всем возможным конечным состояниям жидкости. При этом квадрат модуля интеграла записываем в виде двойного интеграла (по $dt\,dt'\,d^3x\,d^3x'$) и замечаем, что

$$\sum_f \delta n_{fi}(t, \mathbf{r})\,\delta n_{fi}(t', \mathbf{r}')^* = \sum_f \delta n_{if}(t', \mathbf{r}')\,\delta n_{fi}(t, \mathbf{r}) =$$
$$= \langle i \,|\, \delta\hat{n}(t', \mathbf{r}')\,\delta\hat{n}(t, \mathbf{r}) \,|\, i\rangle = \overline{n}\sigma(t'-t, \mathbf{r}'-\mathbf{r})$$

(причем σ выражено в функции от полной энергии жидкости в состоянии i). Интегрирование по $d(t'-t)\,d^3(x'-x)$ дает $\sigma(\omega, k)$, а еще одно интегрирование (скажем, по $dt\,d^3x$) дает просто объем V и полный интервал времени t. Опустив множитель t, получим в результате вероятность рассеяния в единицу времени

$$w = \frac{4\pi^2\hbar^2}{M^2}\,\overline{n}a^2\sigma(\omega, k)\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{3}$$

Это выражение остается, конечно, справедливым и после усреднения по распределению Гиббса, т. е. при формфакторе, выраженном через температуру.

Отметим, что свойство формфактора (86,16) в применении к рассеянию нейтронов выражает собой тот факт, что при $T=0$ жидкость может только приобретать, но не отдавать энергию. Соотношение же (86,14) выражает собой принцип детального равновесия, так как процессы рассеяния с передачей энергии и импульса $(\omega, \mathbf{k})$ и $(-\omega, -\mathbf{k})$ являются взаимно обратными.

§ 87. Правила сумм для формфактора

Динамический формфактор удовлетворяет определенным интегральным (по частотам ω) соотношениям — *правилам сумм*.

Вывод одного из них основан на правиле коммутации между операторами $\hat{n}_{\mathbf{k}}(t)$ и $\dot{\hat{n}}_{\mathbf{k}}(t)$. Коммутатор гейзенберговских операторов, взятых в одинаковый момент времени, совпадает с коммутатором шредингеровских операторов $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ и $\dot{\hat{n}}_{\mathbf{k}}$. Оператор $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ определяется выражением (86,9) и требуемый коммутатор дается формулой

$$\dot{\hat{n}}_{\mathbf{k}}\hat{n}^+_{\mathbf{k}} - \hat{n}^+_{\mathbf{k}}\dot{\hat{n}}_{\mathbf{k}} = -\frac{i\hbar}{m}k^2N, \tag{87,1}$$

где m — масса частицы жидкости[1]).

Исходим из выражения компоненты фурье-разложения функции $\sigma(t, r)$ только по координатам

$$\overline{n}\sigma(t, k) = \int e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}\langle\delta\hat{n}(t_1, \mathbf{r}_1)\,\delta\hat{n}(t_2, \mathbf{r}_2)\rangle\, d^3(x_1-x_2).$$

---

[1]) Вычисление этого коммутатора совпадает с вычислением, произведенным в III § 149 в связи с выводом правила сумм (149,5); вместо числа электронов Z теперь фигурирует полное число частиц жидкости N.