Формула (36,20) определяет обобщенный коэффициент переноса, связывающий фурье-компоненты обобщенной «силы» F и вызываемые ею изменения величины B.

Естественно назвать $I(\omega)$ обобщенным потоком, отвечающим «силе» $F(\omega)$. Средний поток $\langle I(\omega)\rangle$ оказывается связанным с «силой» $F(\omega)$ соотношением, которое является обобщением хорошо известных из электродинамики эмпирических соотношений — закона Ома, диэлектрической и магнитной восприимчивости и т. п.

В § 39 мы убедимся в полной тождественности этих выражений.

Формула (36,21) допускает непосредственное обобщение на случай векторных сил или нескольких сил, действующих на систему. Можно при этом сразу написать вместо (36,21) равенство

$$\langle I_k(\omega)\rangle = \gamma_{ik}(\omega) F_i(\omega),$$

где i, k пробегает соответствующий ряд значений (например, x, y, z или $k = 1, 2, 3, \ldots$). Тензор γ_{ik} называется тензором коэффициентов переноса

$$\gamma_{ik}(\omega) = -\frac{1}{kT}\int_0^\infty e^{-i\omega u}\langle A_i(0)\dot{B}_k(u)\rangle\,du.$$

§ 37. Реакция системы на внешнее динамическое возмущение. Квантовый расчет

Рассмотрим теперь реакцию системы на внешнее динамическое возмущение с помощью квантового уравнения для матрицы плотности (2,3).

Пусть некоторая квантовомеханическая система, описываемая матрицей плотности $\hat{\rho}$, находится в термостате и подвергается действию произвольного внешнего поля $U(t)$, зависящего от времени. Мы будем считать внешнее поле достаточно слабым, чтобы его можно было считать малым возмущением. Кроме того, будем считать, что приложенное поле удовлетворяет требованию

$$U(t) \to 0 \quad \text{при} \quad t \to -\infty. \tag{37,1}$$

Напишем прежде всего уравнение для статистического оператора в отсутствие внешнего поля:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho}\hat{H}] = 0. \tag{37,2}$$

Уравнение для статистического оператора при наложении внешнего поля $U(t)$ будет иметь вид

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} + [\hat{\rho},\ \hat{H} + U(t)] = 0. \tag{37,3}$$

От уравнения (37,3) удобно перейти к интегральному уравнению. Для этого будем считать член $[\hat{\rho}, U]$ известной величиной. Тогда формально (37,3) будет представлять линейное неоднородное уравнение первого порядка относительно функции $\hat{\rho}$.

Если дополнить это уравнение начальным условием:

$$\hat{\rho}(t \to -\infty) \to \hat{\rho}_0, \tag{37,4}$$

то решение можно сразу написать в виде

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} e^{-\frac{iH(t-x)}{\hbar}} [\hat{\rho}(x), U(x)] e^{\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} dx. \tag{37,5}$$

Непосредственной постановкой можно убедиться, что (37,5) удовлетворяет уравнению (37,3) и начальному условию (37,4).

Интегральное уравнение (37,5) содержит малое возмущение и может решаться итерациями (последовательными приближениями).

Полагая

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}' + \hat{\rho}'' + \ldots, \tag{37,6}$$

имеем

$$\hat{\rho}'(t) = \frac{i}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} e^{-\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} [\hat{\rho}_0, U(x)] e^{\frac{iH\cdot(t-x)}{\hbar}} dx =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int\limits_{0}^{\infty} e^{-\frac{iHt'}{\hbar}} [\hat{\rho}_0, U(t-t')] e^{\frac{iHt'}{\hbar}} dt', \tag{37,7}$$

где было положено $t' = t - x$.

Последующие поправки $\hat{\rho}''$, $\hat{\rho}'''$, ... могут быть получены аналогичным образом.

Формула (37,7) дает ответ на поставленную задачу в первом приближении. Она представляет квантовое обобщение классической формулы (36,6). Изменение среднего значения любой величины, описываемой оператором $\hat{B}$, согласно (1,8) имеет вид

$$\langle \Delta \hat{B} \rangle = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}, \hat{B}) - \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_0, \hat{B}) =$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int\limits_{0}^{\infty} e^{-i/\hbar Ht'} \mathrm{Sp}[\hat{\rho}_0, U(t-t')] e^{i/\hbar Ht'} dt'. \tag{37,8}$$

Формула (37,8) представляет общее выражение для отклика системы на малое динамическое возмущение. Она является приближенной в том смысле, что учитывается лишь возмущение первого порядка малости.

Однако в остальном она применима к совершенно произвольным системам при любом взаимодействии между образующими ее частицами.

В отличие от кинетического уравнения, формула (37,8) дает амплитуду вероятности, т. е. содержит как диагональные, так и недиагональные матричные элементы матрицы плотности.

§ 38. Реакция системы на термическое возмущение

Более сложным является вопрос о реакции системы на термическое возмущение, которое не имеет характера внешнего поля, действующего на систему. Поскольку действие термического возмущения нельзя представить в виде дополнительного члена в функции Гамильтона отдельной частицы, предыдущие расчеты к этому случаю неприменимы. Оказывается, однако, что при известных ограничениях для термических возмущений можно получить закон линейной реакции типа (36,6).

Рассмотрим некоторую макроскопическую систему, находящуюся в неравновесном состоянии. Будем характеризовать состояние этой системы совокупностью макроскопических параметров x_i. Значение этих параметров будем отсчитывать от их равновесных значений, приняв последние за нуль.

В неравновесной системе значения параметров x_i будут изменяться во времени, так что $\dot{x}_i \neq 0$. Мы ограничимся такими неравновесными системами, которые находятся в состояниях, достаточно близких к равновесным. Это значит, что параметры x_i можно считать малыми величинами.

Введем в рассмотрение шкалу времен

$$\tau_{\text{micro}} \ll \tau \ll \tau_{\text{macro}}.$$

Здесь τ_{micro} — времена микроскопического масштаба, характеризующие изменение состояния микроскопических частей системы, τ_{macro} — времена макроскопического масштаба, за которые в системе устанавливается состояние полного статистического равновесия.

В основу дальнейшего будет положена гипотеза о существовании в системе локального статистического равновесия, которое устанавливается за промежуточное время порядка τ.

Система, находящаяся в состоянии локального статистического равновесия, описывается функцией распределения ρ^{loc}, имеющий вид локального распределения Гиббса:

$$\rho^{\text{loc}} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(p,\, q) + \Lambda_i x_i}{kT}}\, d\Gamma, \qquad (38,1)$$