

Неравновесные флуктуации

В.В. Белый*

ИЗМИРАН, Троицк, Московская обл., 142190

sbelyi@izmiran.rssi.ru; sbelyi@ulb.ac.be

Аннотация

Представлена обобщенная флуктуационно-диссипационная теорема для систем с медленно меняющимися параметрами. Используя метод моментов и многомасштабную технику, показано, что не только диссипация, но также дисперсионные вклады определяют спектральные функции флуктуаций в таких системах. Общий формализм иллюстрируется на примере электрического колебательного контура и обсуждается влияние дисперсионных вкладов на добротность системы.

Илье Романовичу Пригожину посвящается

Для меня большая честь участвовать в сборнике, посвященном профессору Пригожину. У меня была привилегия четверть века близко знать Илью Романовича и его семью. Это был удивительный человек. С легкой руки Виктора Антоновича Садовниченко Пригожина называют Ньютоном XX века. Это был выдающийся философ, математик, химик, физик и биолог. Он прекрасно разбирался в проблемах истории, археологии и искусства. Хотелось бы отметить еще одно качество, нехарактерное для западных ученых такого уровня: у него было большое сердце, открытое для всех. И не только его ученики были ему многим обязаны. Он был уверен, что человек должен сеять добро, что ради этого он пришел на землю, и что ради этого он совершает свои научные открытия.

Флуктуации окружают нас повсюду и играют важную роль в Природе и технике. Есть разные ипостаси флуктуаций. Одной из них была посвящена лекция профессора Пригожина в Стокгольме 26 лет назад при вручении ему Нобелевской премии [1]. Надо сказать, что он обладал редким лекторским талантом. Его лекции содержали мало формул, они походили скорее на философские эссе. У меня нет возможности пересказывать здесь его лекцию. Отмечу лишь самое основное: флуктуации играют определяющую роль при образовании диссипативной структуры в окрестности точки бифуркации, когда система стоит перед выбором ветви решения.

Другим аспектом флуктуаций является дистанционная диагностика среды (Fig1). Флуктуации параметров среды меняют индекс рефракции. За счет этого, падающее на среду излучение рассеивается под разными углами. Спектры рассеянного излучения содержат сателлиты, соответствующие спектру флуктуации среды. Сдвиг, ширина и форма спектральных линий несут информацию о таких параметрах среды как плотность, температура и средняя скорость частиц. Такой метод дистанционного зондирования

*Also at: International Solvay Institutes for Physics and Chemistry ULB-CP 231, Bd. du Triomphe, 1050, Brussels, Belgium. При поддержке РФФИ (грант N 03-02-16345)

среды, названный Томпсоновским или некогерентным рассеянием, был развит в 60-ых годах прошлого столетия [2] и в настоящее время с успехом применяется для дистанционной диагностики как лабораторной плазмы, например в токамаках, так и в плазме ближнего космоса - ионосфере.

И, наконец, не последнюю роль флуктуации играют при измерениях, в чувствительности приборов. Как известно, любая колебательная система характеризуется двумя основными параметрами: собственной частотой и добротностью. Что такое добротность? Возьмем, например, камертон. "Ля" первой октавы соответствует частоте 440 герц. Время звучания составляет секунды. Добротность - это безразмерный параметр, определяющий число незатухших колебаний, он равен произведению частоты на время релаксации и, в случае камертона, имеет порядок тысячи. Если мы чокнемся обычными винными бокалами, то получим звук того же порядка частоты (звуковой), но более короткий. Добротность в этом случае может составлять десятки или сотни. Бывают, правда, и хрустальные бокалы с высокой добротностью. По легенде Федор Шаляпин разбивал фужеры своим голосом - действием резонанса. Это означает, что, кроме всего прочего, те бокалы обладали очень высокой добротностью. Добротность прямо связана с чувствительностью системы. Чем больше добротность, тем выше чувствительность системы. Рассмотрим электрический контур, с помощью которого моделируются многие колебательные процессы в природе (Fig2). Такой контур состоит из сопротивления R , и реактивных параметров емкости C и индуктивности L . Собственная частота определяется емкостью и индуктивностью, а добротность также и сопротивлением. В радиофизике добротность определяется обратно пропорционально ширине линии флуктуаций параметров системы.

В термодинамическом равновесии флуктуации определяются температурой системы и диссипацией. Поэтому шумы меряются в градусах Кельвина или децибелах. Первое флуктуационно-диссипационное соотношение между коэффициентом диффузии D и диссипативным коэффициентом трения γ было выведено независимо Эйнштейном и Смолуховским в начале века в их теории броуновского движения [3, 4].

$$D = \frac{\Theta}{\gamma m}, \quad (1)$$

где Θ - температура системы в энергетических единицах, m - масса броуновской частицы.

Позже, соотношение между э.д.с. \dot{E} и сопротивлением R в электрической цепи было установлено Найквистом [5] и экспериментально подтверждено Джонсоном [6].

$$\dot{E}^2 = 2R\Theta. \quad (2)$$

Соотношение Найквиста-Джонсона было расширено на широкий класс диссипативных термодинамически равновесных систем Каленом и Вельтоном [7].

$$(x^2)_\omega = \frac{2\Theta}{\omega} \text{Im } \alpha(\omega), \quad (3)$$

где $\alpha(\omega)$ - функция отклика.

В дальнейшем, теория линейного отклика и флуктуационно-диссипационная теорема для произвольных динамических систем была развита в работах Кубо [8], Мори [9] и Цванцига [10].

Практически в каждой книге и учебнике по статистической физике имеется глава, посвященная флуктуационно-диссипационной теореме. В Московском Университете этой теореме последние годы жизни посвятил Юрий Львович Климонотович [11, 12].

Одно из его утверждений состоит в том, что форма флуктуационно-диссипационной теоремы зависит от конкретной системы. В самом деле, в общем случае параметры системы могут зависеть как от времени, так и от пространства. Неоднородности в пространстве и времени на масштабах больших, флуктуационных, будут также давать вклад в флуктуации. Недавно в приложении к физике плазмы, используя приближение Ланжевена и многомасштабную технику, было показано [13], что амплитуда и ширина спектральных линий флуктуаций электростатического поля и флуктуаций плотности электронов, определяются не только мнимой частью диэлектрической проницаемости (диссипативной), но также производными от ее реальной части. В следствии неоднородности в спектрах флуктуаций появляется асимметрия по отношению к изменению знака частоты.

(Fig3). Электронный форм-фактор (сплошная линия) и спектральная функция электростатических флуктуаций (пунктирная линия) как функции частоты. $\mathbf{k} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mu \mathbf{r}} = \frac{\nu_{ei} n k_D^2}{54 \omega_L}$; $\frac{k_D}{k} = 6$

В кинетическом режиме форм-фактор более чем электростатические флуктуации чувствителен к градиентам. Именно форм-фактор измеряется при дистанционной диагностике плазмы. Такая асимметрия спектральных линий может быть использована в качестве нового метода дистанционной диагностики неоднородности в плазме.

Для обобщения флуктуационно-диссипационной теоремы для медленно изменяющихся процессов на широкий класс систем используем альтернативный ланжевенскому методу метод моментов, когда в качестве исходного используется уравнение для двухвременной корреляционной функции [14, 15, 16].

Рассмотрим произвольную функцию, чья эволюция описывается следующим уравнением:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \underline{\underline{L}}(t) \cdot \right) \underline{\underline{G}}(t, t') = 0, \quad t > t', \quad (4)$$

где $\underline{\underline{L}}(t)$ в общем случае несамосопряженный линейный оператор в Гильбертовом пространстве. Этот оператор медленно изменяется во времени. Термин "медленно" означает, что параметрическое воздействие приводит к малым изменениям на временах процесса. Считаем, что воздействие на систему является адиабатическим. $\underline{\underline{G}}(t, t')$ может быть гайзенберговским оператором, тогда $\underline{\underline{L}}(t) \cdot \underline{\underline{G}}(t, t')$ будет коммутатором с гамильтонианом. В другом случае $\underline{\underline{G}}(t, t')$ может быть операторной плотностью, в этом случае $\underline{\underline{L}}(t)$ является оператором Лиувилля. Наконец, для $\underline{\underline{G}}(t, t')$ мы можем выбрать двухвременной коррелятор $\underline{\underline{G}}(t, t') = \langle \delta f_{nm}(t) \delta f_{n_1 m_1}^*(t') \rangle$ отклонения операторной матрицы плотности в энергетическом представлении $\delta f_{nm}(t)$ от среднего значения $f_n(t)$ [15, 12]. В этом случае $\underline{\underline{L}}(t)$ учитывает самосогласованное поле и столкновения. Медленная временная зависимость в $\underline{\underline{L}}(t)$ проявляется через усредненные функции распределения и внешнее поле. Медленный масштаб гораздо больше характерного флуктуационного масштаба. Мы можем таким образом ввести малый параметр μ , который позволит нам описывать флуктуации на основе многомасштабного анализа. Очевидно, флуктуации меняются как на быстрых, так и на медленных масштабах. Решение уравнения (4) может быть выражено через функцию Грина или пропагатор $\underline{\underline{U}}(t, t')$ уравнения (4) и начальное условие:

$$\underline{\underline{G}}(t, t') = \underline{\underline{U}}(t, t') \cdot \underline{\underline{G}}(0), \quad (5)$$

В случае, когда оператор $\underline{\underline{L}}$ не зависит от времени, зависимость функции Грина от времени проявляется только через разность времен $t - t'$. Однако, когда $\underline{\underline{L}}(\mu t)$ - медленно зависящий от времени оператор, и когда мы учитываем нелокальные эффекты, временная зависимость функции Грина становится более искусной [17, 13]:

$$\underline{U}(t, t') = \underline{U}(t - t', \mu t'). \quad (6)$$

В первом приближении разложение (6) по малому параметру μ приводит нас к

$$\underline{U}(t, t') = (1 - \mu \tau \frac{\partial}{\partial \mu t}) \underline{U}(\tau, \mu t); \quad \tau = t - t'. \quad (7)$$

Теперь мы можем произвести преобразование Лапласа в (5 и 7).

$$\underline{G}^+(z) = (1 + i \frac{\partial^2}{\partial t \partial \omega}) \check{\underline{R}}(z) \cdot \underline{G}(0). \quad (8)$$

где резольвента $\check{\underline{R}}(z)$ - есть преобразование Лапласа функции Грина $\underline{U}(\tau)$:

$$\check{\underline{R}}(z) = \int_0^\infty \underline{U}(\tau) \exp(iz(\tau)) d\tau; \quad z = \omega + i0. \quad (9)$$

В (8) и в дальнейшем мы опускаем μ , имея в виду, что производная берется по медленному времени. Таким образом, в первом приближении выражение для спектральной функции флуктуаций принимает вид:

$$\underline{G}(\omega) = 2 \operatorname{Re}(1 + i \frac{\partial^2}{\partial t \partial \omega}) \check{\underline{R}}(z) \cdot \underline{G}(0). \quad (10)$$

В конечном счете, получаем в классическом приближении выражение для спектральной функции флуктуаций внутренних параметров в виде:

$$(\delta A \delta B)_\omega = \underline{A} \cdot \underline{G}(\omega) \cdot \underline{B}$$

$$= \hbar [\operatorname{Im} \alpha_{AB}(\omega) + \frac{\partial^2}{\partial t \partial \omega} \operatorname{Re} \alpha_{AB}(\omega)] \coth(\hbar \omega / 2\Theta), \quad (11)$$

где

$$\alpha_{AB}(\omega) = i\hbar \sum_{nm} \check{R}_{nnmm}(z) A_{mn} B_{nm} (f_m - f_n) \quad (12)$$

функция отклика для диагональной резольвенты [12].

При разложении функции Грина по малому параметру μ появляется дополнительный член первого порядка. Важно отметить, что здесь мнимая часть функции отклика заменяется ее действительной частью, которая не является диссипативной. Для систем с низкой добротностью (порядка 1; это могут быть широкополосные системы или процессы вблизи нулевой частоты, такие как диффузия) мнимая и действительная часть отклика являются одного порядка величины, и эта поправка пренебрежимо мала. Но в случае систем с высокой добротностью, когда действительная часть отклика много больше мнимой, появляется второй малый параметр, обратно пропорциональный добротности. Примером такой системы с высокой добротностью могут служить плазменные колебания вблизи ленгмюровской частоты [13]. В этом случае добротность системы обратно пропорциональна малому плазменному параметру. Когда этот малый параметр становится сравнимым с μ , второй член в (11) может иметь эффект, сравнимый с первым. Это будет показано на следующем примере. Во втором порядке разложения по малому параметру поправки появляются в мнимой части отклика, и они могут быть разумно отброшены. Таким образом, для решения проблемы достаточно приближения

первого порядка. Такие же производные дисперсии появляются в приближении геометрической оптики [18] и играют важную роль в определении адиабатического инварианта диспергирующих сред [19].

В качестве примера рассмотрим электрический колебательный контур, с помощью которого моделируют многие колебательные процессы в природе. Предположим, что все элементы цепи: R , L , и C имеют одну и ту же температуру, которая меняется адиабатически. Таким образом, параметры системы R , L , и C будут меняться адиабатически. Кроме того, эти параметры могут меняться чисто механически, за счет внешних сил, "руками". Именно этот случай мы будем рассматривать при оценке добротности электрического контура. Тепловое движение заряженных частиц приводит к электрическим колебаниям в цепи, которые можно рассматривать как Броуновское движение. Соответствующее ланжевеновское уравнение принимает вид:

$$\frac{dq}{dt} = J; \quad L(\mu t) \frac{dJ}{dt} + R(\mu t)J + \frac{q}{C(\mu t)} = \check{E}, \quad (13)$$

где q - электрический заряд; J - электрический ток и \check{E} - ланжевеновский источник. Его можно рассматривать, как э.д.с., эквивалентную действию теплового движения заряженных частиц в электрической цепи. Возвращаясь к моментному методу, мы можем представить двухвременной коррелятор электрического тока $G_J(t, t')$ в цепи как

$$G_J(t, t') = U(t, t')G_J(0), \quad (14)$$

где $U(t, t')$ - функция Грина системы уравнений (13), а начальное условие для локально равновесного состояния $G_J(0)$

$$G_J(0) = \frac{(L/C)^{1/2}}{2\pi\Theta} \int J^2 \exp\left(-\frac{LJ^2 + q^2/C}{2\Theta}\right) dq dJ = \frac{\Theta}{L}. \quad (15)$$

Повторяя вышеописанную процедуру, получим формулу Найквиста, обобщенную на медленные процессы:

$$(J^2)_\omega = 2 \operatorname{Re}\left(1 + \frac{d^2}{dt d\omega}\right) \check{R}(z) \frac{\Theta}{L} = \frac{2[\operatorname{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \operatorname{Im} Z(\omega)]\Theta}{\operatorname{Im}^2 Z(\omega) + [\operatorname{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \operatorname{Im} Z(\omega)]^2}, \quad (16)$$

где $Z(\omega) = R - i(L\omega - 1/C\omega)$ - комплексный импеданс.

Для сравнения приведем выражение для формулы Найквиста:

$$(J^2)_\omega = \frac{2 \operatorname{Re} Z(\omega) \Theta}{\operatorname{Im}^2 Z(\omega) + \operatorname{Re}^2 Z(\omega)}, \quad (17)$$

При выводе формулы (16) мы предполагали, что временные изменения параметров в резольвенте происходят на масштабах, много больших периода колебаний, а локальное равновесие в (15) достигается, когда R больше чем $\frac{dL}{dt}$. Второе условие может быть ослаблено введением неравновесного начального коррелятора тока $G_J^{neq}(0)$. В этом случае уравнение (16) принимает вид:

$$(J^2)_\omega = \frac{2[\operatorname{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \operatorname{Im} Z(\omega)]\tilde{\Theta}}{\operatorname{Im}^2 Z(\omega) + [\operatorname{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \operatorname{Im} Z(\omega)]^2}, \quad (18)$$

где $\tilde{\Theta} = LG_J^{neq}(0)$. Мы увидим в дальнейшем, что начальная корреляция не играет роли при расчете ширины спектральной линии и добротности электрического контура.

Используя ланжевенские уравнения (13), выражение для спектральной функции тока можно представить в виде:

$$(J^2)_\omega = \frac{(\ddot{E}^2)_\omega}{\text{Im}^2 Z(\omega) + [\text{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \text{Im} Z(\omega)]^2}. \quad (19)$$

Сравнивая (18) с (19) получаем выражение для спектральной плотности э.д.с.:

$$(\ddot{E}^2)_\omega = 2[\text{Re} Z(\omega) + \frac{d^2}{dt d\omega} \text{Im} Z(\omega)]\tilde{\Theta} = 2[R - \frac{dL}{dt} + \frac{1}{\omega^2 C^2} \frac{dC}{dt}]\tilde{\Theta}, \quad (20)$$

которое является обобщенной формулой Найквиста. Мы видим, что спектральная плотность э.д.с. для медленных процессов зависит от частоты и не является больше белым шумом.

Вернемся теперь к вопросу, с которого мы начали, а именно к добротности колебательной системы. Поскольку временные производные могут иметь разные знаки, дисперсионная поправка в (18) может как увеличивать, так и уменьшать ширину спектральной линии, а, следовательно, и добротность колебательного контура. Независимое изменение реактивных параметров L и C в контуре приводит к сдвигу собственной частоты контура. Для того чтобы скомпенсировать такой сдвиг мы должны изменять реактивные параметры следующим образом:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{C}{L} \frac{dL}{dt}, \quad (21)$$

то есть, при увеличении индуктивности необходимо одновременно уменьшать емкость, что следует из условия стабильности собственной частоты контура: $\omega_0 = (LC)^{-1/2} = \text{const.}$

В этом случае формула (18) принимает вид:

$$(J^2)_\omega = \frac{2\tilde{\Theta}[R - \frac{dL}{dt}(1 + \frac{1}{\omega^2 LC})]}{(L\omega - 1/C\omega)^2 + [R - \frac{dL}{dt}(1 + \frac{1}{\omega^2 LC})]^2}. \quad (22)$$

Вблизи резонансной частоты $\omega = \omega_0$

$$(J^2)_\omega = \frac{\tilde{\Theta}}{L} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} + \frac{\tilde{\Theta}}{L} \frac{\gamma}{(\omega + \omega_0)^2 + \gamma^2}, \quad (23)$$

где ширина линии γ задается следующим выражением

$$\gamma = \frac{1}{2L}(R - 2\frac{dL}{dt}). \quad (24)$$

Мы видим из (23, 24), что поправка остается симметричной по отношению к смене знака частоты ω , но интенсивность и ширина отличаются от стационарного значения. В случае локального равновесия интеграл по частоте остается тем же, что и в стационарном случае.

(Fig4) Спектральная функция тока как функция частоты. Сплошная и пунктирная линии соответствуют $\frac{dL}{dt} = \frac{dC}{dt} = 0$ и $\frac{dL}{dt} = -\frac{L}{C} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{5}R$ соответственно. При $\frac{dL}{dt} = -\frac{L}{C} \frac{dC}{dt} = \frac{1}{5}R$ начальная корреляция отличается от равновесной меньше чем на 1

Добротность спектральной линии принимает следующее выражение:

$$Q = \frac{\omega}{2\gamma} = (\frac{L}{C})^{1/2} \frac{1}{R - 2\frac{dL}{dt}}. \quad (25)$$

Отметим, что начальная корреляция не присутствует ни в выражении для ширины спектральной линии (24), ни в добротности (25). Эти выражения полностью определяются особенностями резольвенты. Обычно добротность колебательного контура растет с ростом индуктивности и уменьшением емкости, но с учетом нестационарных дисперсионных членов этот рост может быть радикальным. Следует отметить, что чем выше исходная добротность системы, тем сильнее эффект. Так для собственной частоты контура в 1 Кгц и начальной добротности 1000, второй член в (24) сравнивается с первым, когда реактивные параметры L и C изменяются на десятые доли за секунду. Так как наше исходное приближение является линейным, для избежания недоразумений мы полагаем, что $R > 2 \frac{dL}{dt}$. Таким образом, на конечных временах можно радикально увеличить добротность электрического контура, одновременно увеличивая индуктивность и уменьшая емкость. Подобная ситуация может происходить и в других колебательных системах. Например, при микровзрывах тонких проволочек электрические и магнитные свойства среды меняются на временах адиабатически медленных, по сравнению с оптическими временами, и этот эффект может работать в оптических резонаторах. Кроме того, нелокальное изменение дисперсионных параметров может приводить к усилению или ослаблению амплитуд диссипативных структур, к изменению времени декогерентности в квантовых компьютерах.

Заключение

Флуктуационно-диссипационное соотношение обобщено на системы с медленно меняющимися параметрами. Важным выводом этого анализа является обнаружение того факта, что флуктуации определяются не только диссипацией, но и производными от дисперсии. Неджоулевый дисперсионный вклад характеризуется новым нелокальным эффектом, создаваемым дополнительным фазовым сдвигом между силой и откликом. Этот фазовый сдвиг происходит в результате параметрического воздействия на систему. На примере электрического колебательного контура показано, что дисперсионные вклады могут сильно влиять на добротность системы. Эти результаты применимы к другим системам и важны для понимания разнообразных эффектов, наблюдаемых в различных областях физики, информатики, химии, биологии.

Список литературы

- [1] Prigogine I. Time, Structure and Fluctuations. // Science. 1978. 201, P. 777.
- [2] Dougherty J.P., Farley D.T. Proc. Roy. Soc. 1960. A259, P. 79.
- [3] Einstein A. Zur Theorie der Brownschen Bewegung. // Ann. Phys. (Leipzig) 1905, 17, P. 549.
- [4] Smoluchowski M.v. Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen. // Bull. intern. de l'Acad. Cracovie. 1906. P. 202; Ann. Phys. (Leipzig). 1906, 21, P. 756.
- [5] Nyquist H. Thermal Agitation of Electric Charge in Conductors. // Phys. Rev. 1928, 32, P. 110.
- [6] Johnson J.B. Thermal Agitation of Electricity in Conductors. // Phys. Rev. 1928, 32, P. 97.
- [7] Callen H.B. and Welton T.A. Irreversibility and Generalized Noise. // Phys. Rev. 1951, 83, P. 34.

- [8] Kubo R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. // J. Phys. Soc, Japan. 1954, 12, P. 570; Kubo R. Rep. Prog. Phys. 1966, 29, P. 235.
- [9] Mori H. Prog. Theor. Phys. 1965, 34, P. 399.
- [10] Zwanzig R. J. Chem. Phys. 1960, 33, P. 1338; Zwanzig R. in *Lectures in Theoretical Physics*, edited by W.E. Brittin, B.W. Downs, and J. Downs (Interscience Publishers, Inc. New York, 1961), Vol.III, pp.106-141.
- [11] Климонтович Ю.Л. Флуктуационно-диссипационные соотношения. Роль конечности времени корреляции. Квантовое обобщение формулы Найквиста. // УФН. 1987, 151, С. 309.
- [12] Климонтович Ю.Л. Турбулентное движение и структура хаоса: Новый подход к статистической теории открытых систем.// М.: Наука, 1990.
- [13] Belyi V.V. Fluctuation-Dissipation Relations for a Nonlocal Plasma. // Phys. Rev. Lett. 2002, 88, 255001.
- [14] Balescu R. *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*. // New York: Wiley, 1975
- [15] Gantsevich S.V., Gurevich V.L., and Katilus R. Theory of Fluctuations in Nonequilibrium Electron Gas. // Rivista del Nuovo Cimento. 1979, 2, P. 1.
- [16] Belyi V.V. Fluctuation-dissipation dispersion relation and quality factor for slow processes. // Phys. Rev. E. 2004, 69, 017104.
- [17] Belyi V.V., Kukharev Yu.A., and Wallenborn J. Pair correlation function and non-linear kinetic equation for a spatially uniform polarizable non-ideal plasma. // Phys. Rev. Lett, 76, 3554 (1996).
- [18] Kravtsov Yu.A. and Orlov Yu.I. *Geometrical Optics of Inhomogeneous Media*. // Berlin: Springer, 1990.
- [19] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Электродинамика сплошных сред*. // М.: Наука, 1976.