ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

Том XXIII, № 12 РАДИОФИЗИКА 1980

УДК 536

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ

Г. Н. Бочков, Ю. Е. Кузовлев

На основе нелинейных флуктуационно-диссипационных соотношений рассмотрена взаимосвязь между феноменологическими уравнениями релаксации, видом неравновесных функций распределения и статистикой процессов переноса (в частности, переноса заряда в сильном электрическом поле).

1. В работе [1] получены точные соотношения между неравновесными функциями распределения и диссипативными кинетическими характеристиками произвольной нелинейной системы. Эти флуктуационно-диссипационные соотношения (ФДС) становятся особенно информативными, если хотя бы качественно известен (или предполагается на основании микроскопических моделей) характер статистики процессов переноса. Тогда по типу статистики можно определить вид диссипативной нелинейности, найти количественные соотношения между той и другой, вычислить функции распределения, спектральные плотности флуктуаций (и высшие кумулянты флуктуаций) в существенно неравновесной области [1, 2].

Однако формулы [1] ввиду их общности недостаточно наглядны, и поэтому имеет смысл проиллюстрировать некоторые из них на примере. Это сделано ниже. Попутно рассмотрены дополнительные общие соотношения, полезные в конкретных задачах.

2. Пусть на некоторую систему действует внешняя сила f, вызывающая поток $\dot{Q} = I$ сопряженной с f физической величины Q и приводящая систему в стационарное неравновесное состояние. В этом состоянии для функции распределения произвольных переменных ψ_α найдена формула (см. Приложение 2 в [1])

$$W_f(\mu\psi) = W_0(\psi)\left\langle \exp\left\{-\beta\int_0^\infty f I(t)\,dt\right\}\right\rangle^\psi, \tag{1}$$

где $\mu_\alpha = \pm 1$ в зависимости от временно́й четности ψ_α, β — обратная температура термостата, $W_0(\psi)$ — равновесное распределение, $\langle\ldots\rangle^\psi$ — условное среднее при данных $\psi(0) = \psi$ и силе f, «включенной» в момент $t = 0$, сила f считается четной.

Пусть ψ_α — переменные интересующей «динамической» подсистемы. Остальную часть системы объединим с термостатом. Если $\varepsilon = \varepsilon(\psi)$ — энергия подсистемы, то

$$W_0(\psi) = \rho(\psi)\,e^{-\beta\varepsilon(\psi)}, \tag{2}$$

где $\rho(\psi)$ — весовой множитель, связанный с конфигурационной энтропией. Запишем уравнение баланса энергии в виде

$$\dot{\varepsilon} = fI - N, \tag{3}$$

где N — мощность, отдаваемая подсистемой термостату. Из (1)—(3) имеем точную формулу

$$W_f(\mu\psi) \sim \rho(\psi) \left\langle \exp\left\{ -\beta \int_0^\infty N(t)\,dt \right\} \right\rangle^\psi , \tag{4}$$

в которой неизвестен только нормировочный множитель.

Случайные процессы $fI(t)$ и $N(t)$ совершенно различны по своим свойствам. Соотношение (4) позволяет использовать для определения неравновесного распределения стохастическую модель взаимодействия подсистемы с термостатом.

3. Как показано в [1], W_f определяется работой силы в процессе установления стационарного состояния. Если пренебречь флуктуациями этой работы, то приближенно [1]

$$W_f(\mu\psi) \sim W_0(\psi) \exp\left\{ -\beta f \int_0^\infty (\langle I(t)\rangle^\psi - \overline{I})\,dt \right\} \tag{5}$$

и аналогично

$$W_f(\mu\psi) \sim \rho(\psi) \exp\left\{ -\beta \int_0^\infty (\langle N(t)\rangle^\psi - \overline{N})\,dt \right\} , \tag{6}$$

где $\overline{I}$, $\overline{N}$ — средние в стационарном состоянии. Вполне ясно, что эти формулы должны быть с хорошей точностью пригодны для больших подсистем и экстенсивных переменных. Тогда неравновесное распределение можно вычислить, если известны феноменологические уравнения движения подсистемы, не прибегая вообще к стохастической модели. В этом случае «феноменология» содержит большую статистическую информацию.

Положение меняется, если подсистема мала, например состоит из одной (типичной, пробной) частицы. Так будет, если рассматривать перенос заряда в отсутствие значительного взаимодействия носителей (электронов). Здесь флуктуации мощности $fI(t)$ или $N(t)$ дают в (1), (4) вклад, сравнимый со средним (или даже больший). Поэтому необходимо привлечь стохастическую модель системы.

В первую очередь естественно рассмотреть класс марковских моделей в предположении, что (все или некоторые) переменные ψ_α являются медленными в сравнении со случайным процессом $N(t)$. Тогда вычисление среднего в (4) можно провести в два этапа: сначала произвести условное усреднение по быстрым флуктуациям $N(t)$ при заданной траектории $\psi(t)\,(0 \leqslant t < \infty)$, а затем перейти к усреднению по медленным флуктуациям $\psi(t)$.

Введем функцию

$$D_f(u;\ \psi) = \frac{1}{\tau} \ln \left\langle \exp\left\{ \int_0^\tau uN(t)\,dt \right\} \right\rangle^\psi , \tag{7}$$

где интервал времени τ мал во временном масштабе переменных ψ_α, но велик по сравнению со временем корреляции $N(t)$. Здесь фигурирует среднее при условии, что фиксировано значение $\psi(t) = \psi$ в какой-то один момент внутри интервала τ. Тогда после первого этапа усреднения из (4) получим

$$W_f(\mu\psi) \sim \rho(\psi) \left\langle \exp\left\{ \int_0^\infty D_f(-\beta;\ \psi(t))\,dt \right\} \right\rangle_f^\psi . \tag{8}$$

4. Обозначим через $L_f = L_f\left(\psi;\ \dfrac{\partial}{\partial \psi}\right)$ марковский кинетический оператор подсистемы. Конечность среднего в (4), (8) при бесконечных

пределах интеграла означает, что среди собственных значений оператора $L_f + D_f(-\beta;\ \psi)$ обязательно имеется нулевое, а все остальные собственные значения имеют отрицательную действительную часть. Кроме того, можно показать с помощью формул [1] (см. Приложение 4 в [1]), что отвечающая нулевому значению собственная функция совпадает с $\rho(\psi)$:

$$\{L_f + D_f(-\beta;\ \psi)\}\,\rho(\psi) = 0. \tag{9}$$

Эти обстоятельства приводят к существенным ограничениям на структуру оператора L_f, даже если функция D_f известна лишь качественно. Если записать $L_f = L_0 + L'_f$, $D_f = D_0 + D'_f$, где L_0, D_0 отвечают равновесным флуктуациям (при $f = 0$), то из (9) имеем два соотношения

$$(L_0 + D_0)\,\rho = 0, \qquad (L'_f + D'_f)\,\rho = 0. \tag{10}$$

Функция D_f (7) не полностью описывает свойства взаимодействия с термостатом, так как не позволяет, например, вычислить средние вида

$$\langle \psi(t_1)\, N(t_2)\, \psi(t_3)\rangle. \tag{11}$$

Заметим, что при замене в (11) N на динамическую функцию $F(\psi)$ переменных ψ среднее можно представить в форме $(t_1 \geqslant t_2 \geqslant t_3)$

$$\langle \psi(t_1) F(\psi(t_2))\, \psi(t_3)\rangle = \int d\psi \exp(-t_1 L_f)\,\psi \exp[(t_1 - t_2) L_f] \times$$
$$\times F(\psi) \exp[(t_2 - t_3) L_f]\, \psi\, W_f(\psi).$$

Также можно записать и среднее (11)

$$\langle \psi(t_1)\, N(t_2)\, \psi(t_3)\rangle = \int d\psi \exp(t_1 L_f)\, \psi \exp[(t_1 - t_2) L_f] \times$$
$$\times \hat{N}_f \exp[(t_2 - t_3) L_f]\, \psi\, W_f(\psi)$$

и аналогичные более сложные средние; однако, поскольку N и ψ связаны не динамически, а статистически, оператор мощности $\hat{N}_f$ является функцией не только ψ, но и $\dfrac{\partial}{\partial\psi}$: $\hat{N}_f = \hat{N}_f\left(\psi;\ \dfrac{\partial}{\partial\psi}\right)$. Выделим его равновесную часть: $\hat{N}_f = \hat{N}_0 + \hat{N}'_f$.

Теперь с помощью этого оператора нетрудно, в принципе, написать марковский вариант общей формулы временной симметрии (для вероятностного или характеристического функционала произвольных переменных) [1, 2]:

$$\left\{L_f\left(\psi;\ \frac{\partial}{\partial\psi}\right) - \beta \hat{N}_f\left(\psi;\ \frac{\partial}{\partial\psi}\right)\right\}\rho(\psi) = \rho(\psi)\, L_f^{+}\left(\mu\psi;\ \mu\frac{\partial}{\partial\psi}\right). \tag{12}$$

Подчеркнем, что это равенство — операторное и поэтому более информативное, чем (9). Крест здесь означает сопряжение. Из (9), (12) видно, что $D_f(-\beta;\ \psi) = \hat{N}_f 1$.

Соотношения ФДС (9), (10), (12) позволяют найти неравновесный кинетический оператор L_f (и, следовательно, получить полное описание неравновесных флуктуаций), если имеется конкретная информация о равновесном операторе L_0, об операторе $\hat{N}_f$ и (или) о феноменологических уравнениях

$$\langle \dot{\psi}_\alpha \rangle^{\psi} = K_\alpha(\psi;\ f) \equiv L_f^{+}\, \psi_\alpha. \tag{13}$$

Предположим, что статистические характеристики взаимодействия с термостатом определяются текущим состоянием системы ψ и явно не зависят от f. Тогда $D'_f = 0$, $N'_f = 0$ и, следовательно,

$$L'_f \rho(\psi) = 0, \qquad L'_f \rho(\psi) = \rho(\psi) \widetilde{L}'^{+}_f; \tag{14}$$

$$(L_0 - \beta \hat{N}_0) \rho(\psi) = \rho(\psi) \widetilde{L}_0^{+} \qquad (\hat{N}_f = \hat{N}_0), \tag{15}$$

где тильда обозначает замену ψ на $\mu\psi$. Второе из равенств (14) и равенство (15) — операторные. Формулы (14) позволяют связать кинетические и флуктуационные параметры системы совершенно так же, как условие детального баланса $L_0 W_0 = W_0 L_0^{+}$ в равновесном случае. Рассмотрим пример.

5. Известно, что рассеяние свободных электронов является квазиупругим, например, в слабоионизованных газах [3] и при некоторых условиях в полупроводниках [4, 6]. При наложении достаточно сильного электрического поля E процесс переноса характеризуется «двойной статистикой»: на быстрые флуктуации импульса по направлению накладываются флуктуации энергии, медленные и большие (порядка средней энергии, растущей с E).

Здесь набор ψ_α включает лишь одну переменную — энергию электрона ε. Случайный процесс $N(t)$ представляет последовательность коротких импульсов в моменты столкновений электрона (массы m) с атомами (массой $M \gg m$). При каждом столкновении в «термостат» передается энергия $\leqslant \frac{2m}{M}\varepsilon = \delta\varepsilon$, средняя частота столкновений (изменений направления движения)

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{l}\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}, \tag{16}$$

где l — длина свободного пробега. Характерная частота флуктуаций энергии $\varepsilon(t)$ много меньше и равна $\delta\nu(\varepsilon)$.

Принимая статистику столкновений пуассоновской, имеем

$$\left\langle \exp\left\{ u \int_0^t N(t')dt' \right\} \right\rangle \approx \exp\left\{ t\nu(\varepsilon)\left(e^{u\delta\varepsilon} - 1\right)\right\} \tag{17}$$

(в пренебрежении вкладом столкновений с увеличением ε). При $\delta\nu(\varepsilon)t \gg 1$ флуктуации энергии совершенно изменят вид характеристического функционала (17). Действительно, например, для пуассоновского процесса $N(t)$ со случайной частотой $\lambda(t)$ и данным шагом q имеем

$$\begin{aligned} t^{-1} \ln \left\langle \exp\left\{ u \int_0^t N(t')dt' \right\} \right\rangle &= \langle\lambda\rangle (e^{uq} - 1) + \\ &+ \frac{1}{2}(e^{uq} - 1)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \langle \lambda(t), \lambda(0) \rangle dt + \ldots \end{aligned} \tag{18}$$

Если $\langle \lambda, \lambda \rangle \sim \langle \lambda \rangle^2$ и $\langle \lambda \rangle \tau \gg 1$, где τ — время корреляции $\varepsilon(t)$, то второй и высшие кумулянты полностью определяются вторым (и следующими) членами в (18) и много больше, чем при пуассоновской статистике. В нашей задаче, очевидно, $\langle \lambda \rangle \tau \sim \delta^{-1} \gg 1$, и мы имеем именно такой случай. Поэтому непосредственно вычислить правую часть (4) не удается.

Однако общие формулы (10), (12), (14) позволяют решить задачу в марковской модели и найти L_f по феноменологическому уравнению движения. Вычисления функции $D_f = D_0$ при этом вообще не требуется, если известен равновесный оператор L_0. Поскольку при столкновениях энергия электрона меняется слабо, $\varepsilon(t)$ можно рассматривать как марковский диффузионный (непрерывный) процесс. Тогда L_f — оператор Фоккера — Планка (здесь $f = eE$, e — заряд электрона). Для простоты будем считать, что $\rho(\varepsilon) = 1$.

Полагая (без ограничения общности)

$$L_0 = \frac{d}{d\varepsilon}\,\varepsilon\,\gamma(\varepsilon)\left(T\frac{d}{d\varepsilon} + 1\right), \qquad L'_f = \frac{d}{d\varepsilon}A_f(\varepsilon) + \frac{d}{d\varepsilon}B_f(\varepsilon)\frac{d}{d\varepsilon}, \tag{19}$$

получим из (10), (14)

$$\frac{d}{d\varepsilon}A_f(\varepsilon) = -A_f(\varepsilon)\frac{d}{d\varepsilon}, \qquad A_f(\varepsilon) \equiv 0. \tag{20}$$

Из (13), (19), (20) получаем следующее уравнение баланса энергии:

$$\langle\dot{\varepsilon}\rangle^{\varepsilon} = \frac{d}{d\varepsilon}B_f(\varepsilon) + K(\varepsilon;\,0), \qquad K(\varepsilon;\,0) = L_0^{+}\,\varepsilon. \tag{21}$$

С другой стороны, из простых физических соображений это феноменологическое уравнение можно записать в виде

$$\langle\dot{\varepsilon}\rangle^{\varepsilon} = f\langle v\rangle^{\varepsilon} + K(\varepsilon;\,0) = \frac{f^2}{2m\nu(\varepsilon)} + K(\varepsilon;\,0), \tag{22}$$

где первый член описывает взаимодействие с полем, второй — с термостатом, $\langle v\rangle^{\varepsilon}$ — среднее значение скорости по направлению поля, f/m — ускорение, $\nu^{-1}(\varepsilon)$ — среднее время равноускоренного движения (по существу, (22) служит здесь определением $\nu(\varepsilon)$). Из (19) — (22) находим оператор L_f и неравновесное распределение энергии W_f (из уравнения $L_f W_f = 0$):

$$L_f = \frac{d}{d\varepsilon}\left\{\varepsilon\gamma(\varepsilon) + [T\varepsilon\gamma(\varepsilon) + B_f(\varepsilon)]\frac{d}{d\varepsilon}\right\}; \tag{23}$$

$$B_f(\varepsilon) = \int\limits_0^{\varepsilon}\frac{f^2}{2m\nu(\varepsilon')}\,d\varepsilon'; \tag{24}$$

$$W_f(\varepsilon) \sim e^{-\varepsilon/T}\exp\left\{\frac{1}{T}\int\limits_0^{\varepsilon}\frac{B_f(\varepsilon')}{T\varepsilon'\gamma(\varepsilon') + B_f(\varepsilon')}\,d\varepsilon'\right\}. \tag{25}$$

Таким образом, остается только конкретизировать кинетические параметры $\nu(\varepsilon)$, $\gamma(\varepsilon)$ как функции состояния. В специальном случае, при переносе электронов в слабоионизованном газе, можно использовать формулу (16) с не зависящей от ε длиной свободного пробега l, а для $\gamma(\varepsilon)$ написать выражение $\gamma(\varepsilon) = \delta\,\nu(\varepsilon)$, где $\delta \approx \dfrac{2m}{M} \ll 1$ (это феноменологическое определение δ). Тогда

$$B_f(\varepsilon) = lf^2\sqrt{\frac{\varepsilon}{2m}},$$

а формула (25) принимает вид распределения Давыдова [5]:

$$W_f \sim e^{-\varepsilon/T}\left(1+\frac{\varepsilon}{Tz}\right)^z, \qquad z=\frac{l^2 f^2}{2\delta T^2}. \tag{26}$$

6. В других ситуациях сечение рассеяния электронов, а значит, и l, будут зависеть от ε. Иным может быть и соотношение между ν и γ. Соответственно неравновесное распределение (25) отличается от (26). В любом случае, однако, полученные общие формулы (9), (10), (12), (14), (15) дают возможность установления связи между кинетическими параметрами и флуктуационными характеристиками нелинейной системы в существенно неравновесном состоянии. При этом общие точные ФДС сочетаются с конкретной (всегда, разумеется, приближенной в том или ином смысле) моделью системы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е. — ЖЭТФ, 1979, **76**, с. 1071.
2. Бочков Г. Н., Кузовлев Ю. Е. — Изв. вузов — Радиофизика, 1978, **21**, № 10, с. 1467.
3. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.
4. Конуэлл Э. Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях. — М.: Мир, 1970.
5. Давыдов Б. И. — ЖЭТФ, 1937, **7**, с. 1069.
6. Gantsevich S. V., Gurevich V. L., Katilius R. Theory of fluctuations in nonequilibrium electron gas.— Rivista del Nuovo. Cimento, 1979, v. 2, № 5.

Горьковский государственный университет

Поступила в редакцию
16 мая 1980 г.

DEFINITION OF NONEQUILIBRIUM DISTRIBUTION FUNCTIONS ON THE BASES OF NONLINEAR FLUCTUATION-DISSIPATION RELATIONS

G. N. Bochkov, Yu. E. Kuzovlev

Based on nonlinear fluctuation dissipation relations an interaction is considered between phenomenological relaxation equations, the form of nonequilibrium distribution functions and statistics of transfer processes (in particular, transfer of a charge in a strong electric field).