

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
ПО ВЫСШЕМУ ОБРАЗОВАНИЮ
ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

А.Н. Валл, В.А. Наумов, А.Э. Растегин

ФИЗИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

ЛЕКЦИИ

Учебное пособие

ЧАСТЬ I

Иркутск
2001

УДК 53(075)

Валл А.Н., Наумов В.А., Растегин А.Э.

Физическая кинетика. Учебное пособие. ИГУ, Иркутск, 2001

Учебное пособие представляет собою конспективное изложение лекций по курсу "Физическая кинетика" для студентов физического факультета в объеме 34 лекционных часа. Материал лекций охватывает основные методы описания случайных процессов, анализ основных кинетических уравнений и их применение к слабо взаимодействующим системам в непрерывном спектре. В тексте пособия опущены промежуточные выкладки, что определяет место этого пособия - как промежуточное между учебником и задачником.

Рецензент
проф. Г.Л.Коткин

Печатается по решению редакционно-издательского совета ИГУ

©Иркутский государственный
университет, 2001

Оглавление

I	Основные кинетические уравнения	4
0.1	Общее введение	5
0.2	Случайные блуждания	5
0.3	Стохастические процессы	10
0.4	Уравнение Смолуховского	13
0.5	Гауссовский стационарный марковский процесс	14
0.6	Уравнение Фоккера–Планка	16
0.7	Броуновское движение	18
0.7.1	Введение	18
0.7.2	Уравнение Ланжевена	18
0.8	Уравнение Больцмана	22
0.9	H -теорема Больцмана	25
0.10	Основное кинетическое уравнение Паули	26
0.11	Лэнгмюровские колебания плазмы	29
0.12	Электронная плазма в металле. Проводимость	33
0.13	Теплопроводность электронного газа в металле	37
II	Элементы теории переноса	41
0.14	Введение	42
0.15	Сечения ядерных процессов и их связь с макроскопическими характеристиками нейтронных потоков	43
0.16	Уравнение баланса числа частиц в односкоростной модели	45
0.17	Плотность тока	46
0.18	Односторонние токи. Граничные условия на границе среда–вакуум	49
0.19	Точечный источник в среде с поглощением и рассеянием	50
0.20	Перенос в среде без поглощения и источников	51
0.21	Среда с поглощением при наличии источника без рассеяния	53

I

Основные кинетические уравнения

0.1 Общее введение

Предмет физической кинетики в общем смысле — это описание микроскопических процессов в статистически нестационарной среде. В частном случае такая среда может рассматриваться как некоторая случайная (стохастическая) сила, и тогда задача кинетики заключается в описании эволюции физической системы под действием этой силы. Характерный пример такой ситуации — броуновское движение. Как правило, среда обладает собственными специфическими элементарными возбуждениями, которые отвечают коллективным степеням свободы. В этом случае целью физической кинетики является описание динамики элементарных возбуждений (квази-частиц). Примерами коллективных возбуждений могут служить фононы и экситоны в твердых телах, лэнгмюровские колебания плазмы, флюксоны в распределенных джозефсоновских контактах. Стандартная схема исследования кинетических проблем включает в себя этап получения кинетических уравнений на те или иные величины, такие как функции распределения, пропагаторы, совместные плотности вероятностей, вероятности перехода и т.д. При выводе кинетических уравнений в них привносятся и закладываются определенная информация о динамике микропроцессов, а также ряд предположений общего характера. Например, гипотеза динамического хаоса при выводе уравнения Больцмана, требование согласования высших порядков с низшими для совместной плотности вероятности n -го порядка при выводе уравнения Смолуховского. В любом случае задачи физической кинетики всегда предполагают два этапа: во-первых, получение кинетического уравнения для данного физического процесса, и, во-вторых, решение (в том или ином смысле) этого уравнения.

0.2 Случайные блуждания

Изучение стохастических методов проще всего начать с проблемы случайных блужданий в трехмерном пространстве, впервые рассмотренной А.А. Марковым. Решение этой задачи не требует составления и решения кинетических уравнений, — оно основано на простых вероятностных законах для независимых случайных процессов. Эта простая модель играет важную роль в теории стохастических процессов и будет часто использоваться в дальнейшем. Рассмотрим цепочку случайных перемещений \mathbf{r}_j

($j = 1, 2, \dots, N$) из точки $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ в точку $\mathbf{r} = \mathbf{R}$, где

$$\mathbf{R} = \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j.$$

Относительно перемещений предполагается, что они совершаются независимо друг от друга и что вероятность того, что вектор перемещения на j -том шаге лежит в окрестности $d\mathbf{r}_j$ вектора \mathbf{r}_j , равна

$$dw_j = \tau_j(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j. \quad (1)$$

Результирующее перемещение \mathbf{R} после N шагов есть сумма независимых случайных величин \mathbf{r}_j с *a priori* заданными распределениями $\tau_j(\mathbf{r}_j)$. Задача заключается в том, чтобы найти функцию распределения $W(\mathbf{R}, N)$ случайной величины \mathbf{R} . Проблема нахождения функции распределения для суммы независимых случайных величин выходит далеко за рамки проблемы случайных блужданий в трехмерном пространстве. В более общей постановке задача была рассмотрена Марковым. Далее, все вычисления будут проведены для трехмерного пространства, но результат легко обобщить на случай произвольного n -мерного пространства.

В силу предположения о независимости перемещений вероятность перемещения по данной конкретной цепочке $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ есть произведение вероятностей dw_j :

$$\prod_{j=1}^N \tau_j(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j. \quad (2)$$

Чтобы найти вероятность попадания после N перемещений в окрестность $d\mathbf{R}$ точки с радиусом-вектором \mathbf{R} , нужно просуммировать (2) по всем цепочкам, удовлетворяющим условию

$$R^{(k)} - \frac{1}{2} dR^{(k)} \leq \sum_{j=1}^N r_j^{(k)} \leq R^{(k)} + \frac{1}{2} dR^{(k)} \quad (3)$$

(здесь индекс k нумерует декартовы координаты векторов, $k = 1, 2, 3$), поэтому

$$W(\mathbf{R}, N) d\mathbf{R} = \int_{\Omega} \prod_{j=1}^N \tau_j(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j, \quad (4)$$

где область интегрирования Ω представляет из себя слой в 3 N -мерном пространстве и задается уравнением (3). Для выполнения интегрирования по области (3) в уравнении (4) удобно ввести вспомогательную функцию

такую, что

$$\Delta(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{r}_j \text{ удовлетворяют (3),} \\ 0, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Это позволяет перейти в (4) от интегрирования по области Ω к интегрированию по всему 3 N -мерному пространству:

$$W(\mathbf{R}, N) d\mathbf{R} = \int_{\text{все про-}} \Delta(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \prod_{j=1}^N \tau_j(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j. \quad (5)$$

Используя разрывный интеграл Дирихле

$$\delta(\gamma, \alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin \alpha \rho}{\rho} \exp(i\gamma \rho) d\rho = \begin{cases} 1, & |\gamma| < \alpha, \\ 0, & |\gamma| > \alpha, \end{cases} \quad (6)$$

нетрудно найти явный вид функции $\Delta(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$:

$$\Delta(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{k=1}^3 \delta(\gamma_k, \alpha_k), \quad (7)$$

где

$$\gamma_k = \sum_{j=1}^N r_j^{(k)} - R^{(k)}, \quad \alpha_k = \frac{1}{2} dR^{(k)}.$$

Подставляя (7) в (5), после несложных преобразований легко получить окончательный результат Маркова:

$$W(\mathbf{R}, N) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A_N(\boldsymbol{\rho}) \exp(-i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{R}) d\boldsymbol{\rho} \quad (8)$$

$$A_N(\boldsymbol{\rho}) = \prod_{j=1}^N \int \tau_j(\mathbf{r}_j) \exp(i\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j.$$

Отметим, что при выводе этих соотношений размерность случайной величины (в данном случае перемещений \mathbf{r}_j в 3-х мерном пространстве) конструктивно определила лишь размерность элементов объема $d\mathbf{r}_j$ и $d\boldsymbol{\rho}$, а также определила $d = 3$ в степени множителя $(2\pi)^{-d}$ в формуле (8).

В дальнейшем будет играть важную роль частный случай, когда распределение $\tau_j(\mathbf{r}_j)$ является гауссовским:

$$\tau_j(\mathbf{r}) = \left(\frac{2\pi l_j^2}{3} \right)^{-3/2} \exp \left[-\frac{3\mathbf{r}^2}{2 l_j^2} \right], \quad (9)$$

где l_j^2 — средний квадрат величины перемещения на j -том шаге. В этом случае

$$\begin{aligned}
 A_N(\boldsymbol{\rho}) &= \exp \left[-\frac{N}{6} l^2 \rho^2 \right], \\
 W(\mathbf{R}, N) &= \left(\frac{2\pi N l^2}{3} \right)^{-3/2} \exp \left[-\frac{3\mathbf{R}^2}{2 \langle l^2 \rangle} \right], \\
 \langle l^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N l_j^2.
 \end{aligned} \tag{10}$$

Если ввести число шагов в единицу времени n , то можно перейти от числа шагов N к непрерывному времени t , полагая $N = nt$. Переходя к произвольной системе координат с помощью соотношения

$$\mathbf{y} - \mathbf{x} = \mathbf{R},$$

нетрудно получить вероятность перехода за время t из точки \mathbf{x} в точку \mathbf{y} :

$$W(\mathbf{y} | \mathbf{x}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2}{4Dt} \right], \tag{11}$$

где

$$D = \frac{1}{6} n \langle l^2 \rangle.$$

Величина D называется коэффициентом диффузии.

Вопросы:

1. Для гауссовского распределения (9) получить результат (10).

2. Найти дифференциальное уравнение первого порядка по времени и второго по пространственным переменным, которому удовлетворяет полученное распределение (11).

3. Показать, что для распределения

$$\tau_j(x) = q\delta(x+a) + p\delta(x-a), \quad q+p=1,$$

распределение $W(R, N)$ имеет вид

$$W(R, N) = \sum_k P_k \delta(R - ka).$$

Проинтерпретировать полученные вероятности P_k .

4. Показать, что для распределения

$$\tau_j(x) = q\delta(x) + p\delta(x-a), \quad q+p=1,$$

распределение $W(R, N)$ имеет вид

$$W(R, N) = \sum_k P_k \delta(R - ka), \quad P_k = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k (1-p)^{N-k}$$

Дать наглядное объяснение этому результату.

5. Получить важный предел *биномиального распределения* P_k (см. предыдущее упр.). Пусть N и pN велики. Используя формулу Стирлинга, показать, что функция

$$P_k = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k (1-p)^{N-k}$$

имеет максимум вблизи $k = pN$ и в окрестности максимума описывается выражением (*распределением Гаусса*)

$$* \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp[-\xi^2/(2\sigma^2)],$$

где $\xi = k - pN$, $\sigma = \sqrt{Np(1-p)}$.

6. Рассмотреть второй предельный случай, когда $N \rightarrow \infty$ и $p \rightarrow 0$ таким образом, что произведение $Np = b$ остается постоянным. Показать, что в указанном пределе получается *распределение Пуассона*

$$P_k = \frac{b^k \exp(-b)}{k!}.$$

0.3 Стохастические процессы

При описании случайной величины Y в том случае, когда она зависит от времени t , недостаточно знания функции распределения $W(y, t)$ и вычисленных с ее помощью моментов $\langle Y^n \rangle$. Действительно, теперь имеется не одна случайная величина Y , а целая "случайная траектория" $Y(t)$, которая даже на конечном временном интервале представляет собой континуум случайных величин. Грубо поведение такой стохастической величины описывается n -точечными корреляционными функциями

$$F(t_1, \dots, t_n) = \langle Y(t_1) \cdots Y(t_n) \rangle. \quad (12)$$

Фигурирующая в правой части соотношения операция усреднения производится с помощью совместной плотности вероятности n -ого порядка

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1),$$

определенной так, что величина

$$dW_n = W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_1 dy_2 \cdots dy_n \quad (13)$$

дает совместную вероятность того, что значение случайной величины $Y(t_1)$ лежит в окрестности dy_1 точки y_1 , значение случайной величины $Y(t_2)$ лежит в окрестности dy_2 точки y_2, \dots , значение случайной величины $Y(t_n)$ лежит в окрестности dy_n точки y_n . Для корреляционной функции справедливо представление

$$F(t_1, \dots, t_n) = \int y_1 y_2 \cdots y_n W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_1 dy_2 \cdots dy_n. \quad (14)$$

Такой подход дает грубо-масштабное описание процесса. Полное описание подразумевает переход от функций W_n к соответствующему функционалу. Совместная плотность вероятности W_n удовлетворяет двум необходимым условиям:

1. условие положительной определенности

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) \geq 0;$$

2. условие согласования высших порядков с низшими

$$\int W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) dy_k = W_{n-1}(y_n, t_n | \dots | y_{k+1}, t_{k+1} | y_{k-1}, t_{k-1} | \dots | y_1, t_1);$$

в соответствии с ним интегрирование по любой переменной y_j понижает порядок на единицу и автоматически снимает зависимость от соответствующей переменной t_j ;

3. условие нормировки

$$\int W_1(y, t) dy = 1.$$

Чтобы получить для совместных плотностей вероятностей какие-либо определяющие соотношения, необходимо как-то конкретизировать характер рассматриваемых процессов. Одними из наиболее важных и часто используемых случайных процессов являются марковские процессы. Разумеется, всякое предположение о свойствах реальных физических процессов является идеализацией и выполняется лишь приближенно; искусство исследователя состоит в том, чтобы найти для физической задачи такое представление, в котором основные величины с хорошей точностью удовлетворяют свойствам того вероятностного процесса, который используется в качестве математической модели. Оказывается, при надлежащем выборе переменных состояния многие физические процессы являются приближенно марковскими. Совместные плотности вероятности марковского процесса удовлетворяют соотношению

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_1, t_1) = \omega(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}) W_{n-1}(y_{n-1}, t_{n-1} | \dots | y_1, t_1), \quad (15)$$

$$t_n > t_{n-1} > \dots > t_1.$$

Это важное предположение о факторизации по переменной y_n . Оно позволяет выразить все W_n при $n \geq 3$ через функции W_1 и W_2 .

Смысл величины $\omega(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$ становится ясным из следующих соотношений:

$$W_2(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \omega(y_2, t_2 | y_1, t_1) W_1(y_1, t_1), \quad (16)$$

$$W_1(y_2, t_2) = \int \omega(y_2, t_2 | y_1, t_1) W_1(y_1, t_1) dy_1.$$

Отсюда видно, что $\omega(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ является ядром оператора, описывающего эволюцию функции распределения $W_1(y_1, t_1)$ от момента времени $t = t_1$ до момента $t = t_2$. Далее, если положить $W_1(y_1, t_1) = \delta(y_1 - y_0)$, то легко увидеть, что величина

$$d\omega = \omega(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2$$

есть вероятность обнаружить в момент времени $t = t_2$ значение случайной величины Y в окрестности dy_2 точки y_2 при условии, что в момент времени $t = t_1$ случайная величина Y с достоверностью равнялась y_1 . Следовательно, о функции $\omega(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ можно говорить как о плотности вероятности перехода от значения y_1 до значения y_2 за время $\tau = t_2 - t_1$.

Условие согласования 2 и соотношения (16) приводят (см. вопрос 3) к условию нормировки для плотности вероятности перехода

$$\int \omega(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2 = 1.$$

Здесь существенно, что интегрирование проводится именно по значению в конечном состоянии y_2 .

Таким образом, марковский процесс однозначно определяется заданием вероятности перехода $\omega(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ во всей области изменения переменных и заданием распределения $W(y, t)$ в начальный момент времени $t = t_0$. Далее согласно (16) однозначно восстанавливаются W_1 и W_2 во всей области, а затем по уравнению (15) W_n для всех $n \geq 3$.

В дальнейшем важную роль будут играть процессы, для которых плотность вероятности перехода $\omega(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ зависит только от разности времен $(t_2 - t_1) > 0$. Такие процессы называются стационарными. В этом случае плотность вероятности перехода есть функция трех переменных и ее стандартное обозначение

$$\omega(y_2 | y_1, t_2 - t_1) \equiv \omega(y_2, t_2 | y_1, t_1).$$

Вопросы:

1. Пусть одномерная случайная величина $Y(t)$ описывается плотностью вероятности перехода

$$\omega(y|x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp \left[-\frac{(y-x)^2}{4Dt} \right].$$

Найти плотность вероятности перехода $\omega^*(r|\rho, t)$ для новой случайной величины

$$R(t) = |Y(t)|.$$

2. Пусть трехмерная случайная величина $\mathbf{Y}(t)$ описывается плотностью вероятности перехода (11). Найти плотность вероятности перехода $\omega^*(r|\rho, t)$ для новой случайной величины

$$R(t) = |\mathbf{Y}(t)|.$$

3. Интегрируя первое из равенств (16) по y_2 и используя условие согласования высших порядков с низшими, получить условие нормировки для плотности вероятности перехода.

4. Проверить, что плотность вероятности перехода (11) удовлетворяет условию нормировки.

0.4 Уравнение Смолуховского

Соотношение (15) вместе с условием согласования высших порядков с низшими приводят нелинейному интегральному соотношению для плотности вероятности перехода $\omega(y_2, t_2|y_1, t_1)$:

$$\omega(y_3, t_3|y_1, t_1) = \int \omega(y_3, t_3|y_2, t_2) \omega(y_2, t_2|y_1, t_1) dy_2. \quad (17)$$

Уравнение (17) называется уравнением Смолуховского (в математической литературе более употребителен термин "уравнение Чепмена–Колмогорова"). Это соотношение носит общий характер и утверждает, что переход $y_1 \rightarrow y_3$ через промежуточное состояние y_2 , то есть

$$y_1 \rightarrow y_3 \equiv \sum_{y_2} y_1 \rightarrow y_2 \rightarrow y_3,$$

где суммирование проводится по всей области допустимых значений y_2 . Не трудно убедиться, что плотность вероятности перехода $W(\mathbf{y}, N_2|\mathbf{x}, N_1)$ из \mathbf{x} в \mathbf{y} за число шагов $N = N_2 - N_1$ при трехмерных случайных блужданиях, полученная ранее в §2, удовлетворяет уравнению (17) при произвольных распределениях $\tau_j(\mathbf{r}_j)$.

Для стационарных процессов уравнение (17) принимает вид

$$\omega(z|x, t + \tau) = \int \omega(z|y, t) \omega(y|x, \tau) dy.$$

Вопросы:

1. Показать, что вероятность перехода пуассоновского процесса

$$\omega(m|n, t) = \begin{cases} \exp(-\lambda t) (\lambda t)^{m-n} / (m-n)!, & \text{если } m \geq n, \\ 0, & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

удовлетворяет уравнению Смолуховского

$$\omega(l|n, t + \tau) = \sum_m \omega(l|m, t) \omega(m|n, \tau).$$

2. Показать, что плотность вероятности перехода

$$\omega(\mathbf{y}|\mathbf{x}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x})^2}{4Dt} \right]$$

удовлетворяет уравнению Смолуховского.

3. Показать, что плотность вероятности перехода $\omega^*(r|\rho, t)$, полученная в вопросе 1 предыдущего параграфа, удовлетворяет уравнению

$$\omega(r|\rho, t + \tau) = \int_0^\infty \omega(r|\varrho, t) \omega(\varrho|\rho, \tau) d\varrho.$$

Обратите внимание на область интегрирования.

4. То же самое для $\omega^*(r|\rho, t)$ из вопроса 2 предыдущего параграфа.

5. Пусть одномерная случайная величина $Y(t)$, значение которой может быть любым вещественным числом, описывается плотностью вероятности перехода

$$\omega(y|x, t) = \frac{1}{\pi} \frac{vt}{v^2 t^2 + (y-x)^2} = \gamma_{[vt]}(y-x),$$

где $\gamma_{[a]}(\xi)$ — плотность Коши, v — величина с размерностью скорости. Показать, что эта плотность вероятности перехода удовлетворяет уравнению Смолуховского.

6. Показать, что плотность вероятности перехода

$$\omega(y|x, t) = [2\pi(D/\gamma)(1 - e^{-2\gamma t})]^{-1/2} \left[-\frac{(y - e^{-\gamma t}x)^2}{2(D/\gamma)(1 - e^{-2\gamma t})} \right],$$

описывающая одномерную случайную величину $Y(t)$, удовлетворяет уравнению Смолуховского.

7. Чему равен предел

$$\lim_{t \rightarrow 0} \omega(y|x, t)$$

для рассмотренных в вопросах 1-6 функций?

0.5 Гауссовский стационарный марковский процесс

Существует ряд феноменологических моделей для W_n , позволяющих свести описание случайного процесса $Y(t)$ к заданию нескольких феноменологических параметров. Важным примером является модель гауссовского стационарного марковского процесса. Пусть

$$W_n(y_n, t_n | \dots | y_2, t_2 | y_1, t_1) \equiv W(y_n, \dots, y_2, y_1) = C_n \exp \left[-\frac{1}{2} (y \Lambda^{(n)} y) \right], \quad (18)$$

где $y = (y_1, \dots, y_n)$ — n -мерный вектор, $\Lambda^{(n)}$ — $n \times n$ матрица, в показателе экспоненты стоит матричный элемент

$$(y \Lambda^{(n)} y) = \sum_{j,k=1}^n y_j \Lambda_{jk}^{(n)} y_k,$$

константа C_n обеспечивает выполнение условия

$$\int W(y) dy_1 dy_2 \dots dy_n = 1. \quad (19)$$

Распределение (18) обладает одним замечательным свойством, позволяющим найти явную зависимость двухточечной корреляционной функции от времени. Требование стационарности процесса и его принадлежности к классу марковских процессов сильно ограничивает произвол в выборе матрицы $\Lambda^{(n)}$. В частности, нетрудно получить соотношение

$$F^{(n)} \cdot \Lambda^{(n)} = I^{(n)}, \quad (20)$$

где $I^{(n)}$ — единичная $n \times n$ матрица, а элементы матрицы $F^{(n)}$ есть корреляционные функции

$$F_{jk}^{(n)} = \langle y_j y_k \rangle = \int y_j y_k W(y) dy_1 dy_2 \cdots dy_n. \quad (21)$$

Потребуем, чтобы процесс был марковским. Должно выполняться условие

$$W_3(y_3, t_3 | y_2, t_2 | y_1, t_1) = \omega(y_3, t_3 | y_2, t_2) W_2(y_2, t_2 | y_1, t_1). \quad (22)$$

Отсюда следует, что отношение W_3/W_2 не зависит от y_1 . С учетом (18) это отношение равно

$$\frac{W_3}{W_2} = \frac{C_3}{C_2} \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[-y_j \Lambda_{jk}^{(3)} y_k + y_j \Lambda_{jk}^{(2)} y_k \right] \right\}.$$

Чтобы левая часть этого равенства не зависела от y_1 , необходимо, по крайней мере, $\Lambda_{13} = 0$ (можно показать, что $\Lambda_{jk}^{(n)}$ не зависит от n), так что в матрице $\Lambda^{(3)}$ всегда

$$\Lambda_{13}^{(3)} = \Lambda_{31}^{(3)} = 0.$$

Поэтому (20) при $n = 3$ имеет вид

$$\begin{aligned} F_{11}\Lambda_{11} + F_{12}\Lambda_{21} + F_{13}\Lambda_{31} &= 1, \\ F_{21}\Lambda_{11} + F_{22}\Lambda_{21} &= 0, \\ F_{31}\Lambda_{11} + F_{32}\Lambda_{21} &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Вследствие стационарности процесса

$$F_{jk} = F(0)F(t_j - t_k) \quad (24)$$

и не зависит от n . Последние два соотношения приводят к функциональному уравнению

$$F(0)F(t_3 - t_1) = F(t_3 - t_2)F(t_2 - t_1), \quad t_3 > t_2 > t_1. \quad (25)$$

Его решение есть (см. вопрос 1)

$$F(t) = F(0) \exp(-\gamma t). \quad (26)$$

Окончательный результат для корреляционной функции

$$\langle y(t_2) y(t_1) \rangle = F(0) \exp(-\gamma|t_2 - t_1|), \quad t_2 > t_1. \quad (27)$$

Этот результат известен как теорема Дуба (G. Doob, 1944), изложенный здесь метод доказательства принадлежит М. Кацу.

Вопросы:

1. Считая функцию $F(t)$ гладкой, решить функциональное уравнение

$$F(0) F(t + \tau) = F(t) F(\tau)$$

следующим методом. Дважды дифференцируя это уравнение по t и полагая затем $\tau = 0$, получить дифференциальное уравнение

$$F''(t) = -\gamma F'(t)$$

и решить его.

0.6 Уравнение Фоккера–Планка

Уравнение Смолуховского основано на довольно общих свойствах марковских процессов, что не позволяет использовать его в качестве конструктивного метода нахождения вероятностей перехода. Необходима дальнейшая детализация процессов. С этой целью рассмотрим стационарные марковские процессы, для которых справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int (y - z) \omega(y|z, t) dy &= A(z), \\ \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int (y - z)^2 \omega(y|z, t) dy &= B(z), \\ \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int (y - z)^n \omega(y|z, t) dy &= 0 \quad \text{при всех } n \geq 3. \end{aligned} \quad (28)$$

Относительно величин $A(z)$ и $B(z)$ предполагается, что они конечны и заданы как феноменологические параметры модели. Определяющим для сужения класса процессов является последнее требование, благодаря которому возникающее дифференциальное уравнение на плотность вероятности перехода имеет порядок не выше, чем 2. Для получения уравнения напомним очевидное равенство:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int dy R(y) \omega(y|x, t) &= \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int dy R(y) \omega(y|x, t + \Delta t) - \int dy R(y) \omega(y|x, t) \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь $R(y)$ — произвольная аналитическая функция, исчезающая на границах изменения одномерной случайной величины Y . Эта функция будет играть вспомогательную роль при вычислении поверхностных интегралов. Первое слагаемое в правой части (29) преобразуется с учетом уравнения Смолуховского:

$$\begin{aligned} \int dy R(y) \omega(y|x, t + \Delta t) &= \int dz \int dy R(y) \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t) = \\ &= \int dz \int dy \left\{ R(z) + \frac{\partial R}{\partial z} (y - z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} (y - z)^2 + \dots \right\} \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t) = \\ &= \int dz R(z) \left\{ \omega(z|x, t) - \frac{\partial}{\partial z} [A(z, \Delta t) \omega(z|x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [B(z, \Delta t) \omega(z|x, t)] + \dots \right\}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} A(z, \Delta t) &= \int dy (y - z) \omega(y|z, \Delta t), \\ B(z, \Delta t) &= \int dy (y - z)^2 \omega(y|z, \Delta t). \end{aligned}$$

Переходя в (29) к пределу $\Delta t \rightarrow 0$, с учетом соотношений (28) и произвольности функции $R(y)$ получаем дифференциальное уравнение Фоккера–Планка

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = -\frac{\partial}{\partial y} [A(y) \omega(y|x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [B(y) \omega(y|x, t)], \quad (30)$$

где неоднородные коэффициенты $A(y)$ и $B(y)$ определены в (28). Решения этого уравнения должны удовлетворять условиям:

$$\int \omega(y|x, t) dy = 1, \quad \lim_{t \rightarrow 0} \omega(y|x, t) = \delta(y - x). \quad (31)$$

В отличие от исходного нелинейного уравнения Смолуховского полученное уравнение является, на первый взгляд, линейным уравнением с неоднородными феноменологическими коэффициентами. Однако, ”отклик” нелинейности заключен в необходимости согласования полученного решения $\omega(y|x, t)$ с условиями (28), так как само уравнение (30) не гарантирует их автоматического выполнения. Коэффициенты $A(z)$ и $B(z)$, по смыслу их определения в (28), характеризуют флуктуацию случайной величины $Y(t)$ относительно ее значения в детерминированном состоянии. Вычисление этих флуктуаций требует привлечения соответствующих динамических принципов или уравнений. Например, при описании броуновского движения такую роль выполняет уравнение Ланжевена (см. ниже).

В заключение отметим, что если случайная величина $Y(t)$ представляет собой d -мерный вектор с компонентами $Y_\alpha(t)$, $\alpha = 1, 2, \dots, d$, то приведенные выше одномерные интегралы нужно заменить на d -мерные, а скалярные коэффициенты $A(z)$ и $B(z)$ на вектор $A_\alpha(z)$ и тензор $B_{\alpha\beta}(z)$ в соответствии с модифицированным условием (28):

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int dy_1 \cdots dy_d (y_\alpha - z_\alpha) \omega(y|z, t) = A_\alpha(z),$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \int dy_1 \cdots dy_d (y_\alpha - z_\alpha) (y_\beta - z_\beta) \omega(y|z, t) = B_{\alpha\beta}(z).$$

0.7 Броуновское движение

0.7.1 Введение

Броуновским движением называют непрекращающееся хаотическое движение маленьких, но макроскопических (коллоидных) частиц, погруженных в жидкость, состоящую из достаточно легких молекул. Это движение не связано с какими-либо внешними воздействиями, а его оживленность повышается с ростом температуры и с уменьшением размера частиц и вязкости жидкости.

Броуновское движение и родственные ему явления интересны не только сами по себе. Они имеют большое значение в химии, радиофизике, теории фазовых переходов и даже в некоторых задачах звездной динамики. Основы современной теории броуновского движения были заложены в работах Эйнштейна, Смолуховского и Ланжевена.

0.7.2 Уравнение Ланжевена

Будем пренебрегать столкновениями броуновских частиц друг с другом, т.е. взвесь предполагается достаточно разреженной. Это предположение позволяет свести задачу к анализу одночастичного уравнения движения. Согласно Ланжевону, суммарную силу $\mathbf{F}(t)$, действующую на частицу со стороны среды, можно разделить на две части:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(t) &= \mathbf{F}^S(t) + \mathbf{F}^L(t), \\ \mathbf{F}^S(t) &= \langle \mathbf{F}(t) \rangle, \\ \mathbf{F}^L(t) &= \mathbf{F}(t) - \langle \mathbf{F}(t) \rangle. \end{aligned} \tag{32}$$

Сила $\mathbf{F}^S(t)$ характеризует действие среды, находящейся в равновесном состоянии. Она определяет гидродинамическое трение и при малых числах

Рейнольдса описывается законом Стокса

$$\mathbf{F}^S(t) = -m\gamma\mathbf{V}(t), \quad (33)$$

где $\mathbf{V}(t)$ — скорость частицы, m — ее масса.

Сила $\mathbf{F}^L(t) = m\mathbf{L}(t)$ является стохастической величиной и связана с флуктуациями среды относительно ее равновесного состояния. Величина $\mathbf{L}(t)$ называется ланжевеновским источником. С учетом вышесказанного уравнение движения частицы принимает вид

$$\dot{V}_j = -\gamma V_j(t) + L_j(t), \quad j = 1, 2, 3, \quad (34)$$

где $\langle L_j(t) \rangle = 0$. Это уравнение называется уравнением Ланжевена. Его формальное решение есть:

$$V_i(t) = V_i(0)e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{\gamma(\tau-t)} L_i(\tau). \quad (35)$$

Отсюда сразу следует выражение для флуктуации и ее скорости:

$$\langle V_j(t) - V_j(0) \rangle = V_j(0) (e^{-\gamma t} - 1), \quad (36)$$

$$A_j(\mathbf{v}(0)) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle V_j(t) - V_j(0) \rangle = -\gamma V_j(0).$$

Для вычисления квадратичной флуктуации требуется знание двухвременной корреляционной функции $\langle L_j(\tau_2) L_k(\tau_1) \rangle$. Следуя Ланжевону, предположим, что

$$\langle L_j(\tau_2) L_k(\tau_1) \rangle = \delta_{jk} \phi(\tau_2 - \tau_1). \quad (37)$$

Отсюда следует, что $\phi(t)$ есть четная функция по t . Разложим ее в интеграл Фурье:

$$\phi(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \Phi(\omega). \quad (38)$$

$\Phi(\omega)$ — спектральная плотность источника Ланжевена. Поскольку $\phi(t)$ — четная функция, то

$$\Phi(-\omega) = \Phi^*(\omega),$$

где звездочкой обозначено комплексное сопряжение. Теперь нетрудно получить выражения для средних через $\Phi(t)$ и $\Phi(\omega)$ соответственно:

$$\begin{aligned} \langle V_j(t) V_k(t) \rangle &= V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \delta_{jk} e^{-2\gamma t} \int_0^t d\tau \int_0^t dT e^{\gamma(\tau+T)} \phi(T - \tau), \quad (39) \\ \langle V_j(t) V_k(t) \rangle &= V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \\ &+ \delta_{jk} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} [1 - 2e^{-\gamma t} \cos \omega t + e^{-2\gamma t}] \frac{\Phi(\omega) d\omega}{\omega^2 + \gamma^2}. \end{aligned}$$

Из последнего соотношения видно, что при временах $t \gg 1/(2\gamma)$ броуновская частица теряет "механическую память" и среднее значение квадрата ее скорости, независимо от начальных условий, стремится к постоянной величине

$$\langle \mathbf{V}^2(t) \rangle = \frac{3}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Phi(\omega) d\omega}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad \text{при } t \gg 1/(2\gamma). \quad (40)$$

Для дальнейшего необходимо задать более детальные свойства ланжевенковского источника. Разумно предположить, что столкновения молекул с броуновской частицей, значительно разделенные во времени, являются статистически независимыми. Это означает, что функция $\phi(t)$ отлична от нуля лишь в области $|t| < \tau_c$, где τ_c — длительность столкновения. Простейшей моделью такого рода является δ -функция Дирака (мгновенные столкновения):

$$\phi(t) = 2D \delta(t). \quad (41)$$

В этом случае из (39) получаем

$$\langle V_j(t) V_k(t) \rangle = V_j(0) V_k(0) e^{-2\gamma t} + \delta_{jk} \frac{D}{\gamma} [1 - e^{-2\gamma t}]. \quad (42)$$

В этой простой модели хорошо видно, что при $|t| \ll 1/(2\gamma)$ эволюция определяется начальными условиями, а при $|t| \gg 1/(2\gamma)$ — параметрами среды. Далее, с учетом (36) легко получить соотношение

$$\langle (V_j(t) - V_j(0)) (V_k(t) - V_k(0)) \rangle = V_j(0) V_k(0) [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \delta_{jk} \frac{D}{\gamma} [1 - e^{-2\gamma t}]. \quad (43)$$

Отсюда для скорости флуктуаций имеем

$$B_{jk} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle (V_j(t) - V_j(0)) (V_k(t) - V_k(0)) \rangle = \delta_{jk} 2D. \quad (44)$$

Зная величины A_j и B_{jk} , можно записать уравнение Фоккера–Планка для плотности вероятности перехода $\omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t)$ стохастической величины $\mathbf{V}(t)$ — скорости броуновской частицы:

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t) = \gamma \frac{\partial}{\partial v_j} [v_j \omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t)] + D \frac{\partial}{\partial v_k} \frac{\partial}{\partial v_k} \omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t). \quad (45)$$

Решение должно удовлетворять условиям

$$\lim_{t \rightarrow 0} \omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad \int \omega(\mathbf{v}|\mathbf{u}, t) d\mathbf{v} = 1.$$

Интегрирование (39) по времени дает

$$X_j(t) - X_j(0) = V_j(0) \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t d\tau \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma\tau}) L_j(t - \tau), \quad (46)$$

где $\mathbf{X}(t)$ — радиус-вектор броуновской частицы. Отсюда после усреднения получаем

$$\langle X_j(t) - X_j(0) \rangle = V_j(0) \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}).$$

Для квадратичных флуктуаций нетрудно вывести соотношение

$$\begin{aligned} \langle (X_j(t) - X_j(0)) (X_k(t) - X_k(0)) \rangle &= V_j(0) V_k(0) \frac{1}{\gamma^2} [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \quad (47) \\ &+ \delta_{jk} \frac{1}{\gamma^2} \int_0^t d\tau \int_0^t dT (1 - e^{-\gamma\tau}) (1 - e^{-\gamma T}) \phi(T - \tau). \end{aligned}$$

Наконец, в модели (41) получим

$$\begin{aligned} \langle (X_j(t) - X_j(0)) (X_k(t) - X_k(0)) \rangle &= V_j(0) V_k(0) \frac{1}{\gamma^2} [1 - e^{-\gamma t}]^2 + \quad (48) \\ &+ \delta_{jk} \frac{2D}{\gamma^2} \left\{ t - \frac{2}{\gamma} [e^{-\gamma t} - 1] - \frac{1}{2\gamma} [e^{-2\gamma t} - 1] \right\}. \end{aligned}$$

Отсюда легко найти результат Эйнштейна (1907)

$$\langle \Delta \mathbf{X}^2(t) \rangle = \begin{cases} \mathbf{V}^2(0) t^2, & \text{если } \gamma t \ll 1, \\ 6D\gamma^{-2}t, & \text{если } \gamma t \gg 1. \end{cases}$$

Общепринятая интерпретация этого утверждения состоит в том, что марковский характер эволюции стохастической величины $\mathbf{X}(t)$ наступает при времени $\gamma t \gg 1$.

Вопросы:

1. Пусть положение броуновской частицы описывается одномерным уравнением Фоккера–Планка

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \omega(y|x, t)$$

с соответствующими граничными условиями. Получить отсюда результат Эйнштейна для среднеквадратичного отклонения

$$\langle (X(t) - X(0)) \rangle = \langle \Delta X^2(t) \rangle = 2Dt.$$

0.8 Уравнение Больцмана

Рассмотрим систему одинаковых частиц с конечным радиусом взаимодействия R_0 между ними и длиной свободного пробега $l \gg R_0$. Пусть

$$dN = F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v}$$

есть число частиц в элементе фазового объема $d\mathbf{x} d\mathbf{v}$ в окрестности точки (\mathbf{x}, \mathbf{v}) . Величина $F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ называется одночастичной функцией распределения. Она является важной, хотя и неполной, характеристикой эволюции системы. Полное описание требует введения n -частичной функции распределения и приводит к бесконечной системе уравнений — уравнениям ББГКИ (Боголюбова, Борна, Грина, Кирквуда, Ивона). Предположим далее, что зависимость одночастичной функции распределения от переменных факторизуется, то есть

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = n(\mathbf{x}) f(\mathbf{v}, t). \quad (49)$$

Наконец, будем считать, что характерный масштаб изменений функции $n(\mathbf{x})$ много больше l , так что $n(\mathbf{x}) \simeq \text{const}$. В рамках перечисленных выше допущений можно получить замкнутое уравнение для $f(\mathbf{v}, t)$ — кинетическое уравнение Больцмана.

Согласно теореме Лиувилля функция распределения не меняется вдоль фазовой траектории, если в системе отсутствуют столкновения. При наличии столкновений гидродинамическая производная отлична от нуля и определяется интегралом столкновений $I(\mathbf{v}, t)$:

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \dot{\mathbf{v}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right\} [n f(\mathbf{v}, t)] = I(\mathbf{v}, t). \quad (50)$$

Таким образом, величина

$$I(\mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v} \Delta t$$

есть изменение за время Δt числа частиц в объеме $d\mathbf{x}$, имеющих скорость в окрестности $d\mathbf{v}$ вектора \mathbf{v} . В рассматриваемом случае механизм изменения числа частиц определяется природой двухчастичного взаимодействия с конечным радиусом, для которого

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}'_1,$$

откуда можно получить соотношения

$$\mathbf{v}' = \frac{1}{2} (\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 - u\boldsymbol{\epsilon}), \quad \mathbf{v}'_1 = \frac{1}{2} (\mathbf{v} + \mathbf{v}_1 + u\boldsymbol{\epsilon}), \quad (51)$$

где

$$u = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}| = |\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'|$$

и введен единичный вектор

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'}{u}.$$

Здесь \mathbf{v} и \mathbf{v}_1 — начальные скорости, а \mathbf{v}' и \mathbf{v}'_1 — скорости частиц в конечном состоянии. Формулы следуют из законов сохранения.

Далее, если принять, что V — объем системы, N — полное число частиц, то плотность числа частиц $n = N/V$ и условие нормировки будет иметь вид

$$\int f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = 1. \quad (52)$$

Выразим интеграл столкновений через функцию распределения. Имеем

$$I(\mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v} \Delta t = \Delta N^{(+)} - \Delta N^{(-)},$$

где $\Delta N^{(+)}$ — число столкновений в объеме $d\mathbf{x}$ за время Δt с рождением частиц, имеющих скорость \mathbf{v} , $\Delta N^{(-)}$ — число столкновений в объеме $d\mathbf{v}$ за время Δt тех частиц, которые до столкновения имели скорость \mathbf{v} . Из качественных соображений можно написать:

$$\Delta N^{(-)} = [n f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v} d\mathbf{x}] \left(\frac{b db d\varphi u \Delta t n}{n d\mathbf{x}} \right) [n f(\mathbf{v}_1, t) d\mathbf{v}_1 d\mathbf{x}]. \quad (53)$$

В правой части (53) первый сомножитель — это число частиц в объеме $d\mathbf{x}$, имеющих скорость в окрестности $d\mathbf{v}$ вектора \mathbf{v} . Второй сомножитель — отношение числа частиц в элементе цилиндра с осью вдоль относительного импульса к числу частиц в объеме $d\mathbf{x}$ — дает вероятность двухчастичного процесса $\mathbf{v}\mathbf{v}_1 \rightarrow \mathbf{v}'\mathbf{v}'_1$ за время Δt . Выражение для $\Delta N^{(-)}$ получается из (53) заменой $\mathbf{v} \leftrightarrow \mathbf{v}'$, $\mathbf{v}_1 \leftrightarrow \mathbf{v}'_1$. При такой замене второй сомножитель не меняется. Теперь нетрудно получить уравнение Больцмана

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \dot{\mathbf{v}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right\} f(\mathbf{v}, t) = n \int (f' f'_1 - f f_1) d\sigma d\mathbf{v}_1, \quad (54)$$

где введены обозначения

$$d\sigma = b db d\varphi |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|,$$

b — прицельный параметр, φ — азимутальный угол,

$$f' \equiv f(\mathbf{v}', t), \quad f'_1 \equiv f(\mathbf{v}'_1, t), \quad f \equiv f(\mathbf{v}, t), \quad f_1 \equiv f(\mathbf{v}_1, t).$$

Здесь скорости \mathbf{v}' и \mathbf{v}'_1 выражены через \mathbf{v} и \mathbf{v}_1 в соответствии с законами сохранения (51).

Симметричная форма уравнения Больцмана получается при переходе к дифференциальному сечению в соответствии с представлением в виде

$$d\sigma = w(\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \rightarrow \mathbf{v}'_1 \mathbf{v}'_2) d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2. \quad (55)$$

Это соотношение основано на том, что дифференциальное сечение содержит в качестве сомножителей функции Дирака, которые выражают законы сохранения и "снимают" соответствующее число интегралов. С учетом этого, в случае отсутствия внешних сил, перепишем (54) в симметричной форме

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = n \int (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) w(\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \rightarrow \mathbf{v}'_1 \mathbf{v}'_2) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2. \quad (56)$$

Вопросы:

1. Используя замену независимых переменных

$$\tau = t, \quad \xi_j = x_j - v_j t \quad (j = 1, 2, 3),$$

найти общее решение уравнения

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right\} F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = 0.$$

2. В начальный момент времени $t = 0$ газ занимает полупространство $x < 0$; плотность и температура постоянны и равны n_0 и T соответственно. Пренебрегая столкновениями, определить плотность числа частиц $n(\mathbf{x}, t)$ при $t > 0$.

3. Внутри шара радиуса R с постоянной плотностью n_0 распределены частицы массой m при температуре T . В момент $t = 0$ оболочка шара исчезает, и начинается свободный разлет частиц. В пренебрежении столкновениями найти плотность частиц $n(\mathbf{x}, t)$ в последующие моменты времени.

4. Используя уравнение Больцмана, показать, что в отсутствие внешнего поля распределение частиц бесстолкновительного газа по скоростям неизменно во времени. Объяснить, почему любой другой результат был бы неприемлем.

5. Определить, какие из нижеследующих уравнений обратимы (т.е. для каких из них справедливо утверждение "если $y(t)$ — решение, то $y(-t)$ — также решение"):

$$(A) \quad y'(t) = \int_0^a y(x) dx; \quad (B) \quad y'(t) = \int_0^a xy(x) dx;$$

$$(C) \ y'(t) = \int_0^t y(x) dx; \quad (D) \ y'(t) = \int_0^a y(x-t) dx.$$

6. Показать, что уравнение Больцмана необратимо, т.е. что если $F(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ — решение, то $F(\mathbf{x}, -\mathbf{v}, -t)$ не обязано быть таковым.

0.9 H -теорема Больцмана

Уравнение Больцмана в симметричной форме позволяет легко получить важное неравенство

$$\frac{dH}{dt} \leq 0, \quad \text{где } H(t) = \int f(\mathbf{v}, t) \ln[f(\mathbf{v}, t)] d\mathbf{v}, \quad (57)$$

которое известно как H -теорема Больцмана. Функционал $H(t)$ пропорционален энтропии замкнутой неравновесной системы, состояние которой задано одночастичной функцией распределения $f(\mathbf{v}, t)$. Теорема Больцмана показывает, что эволюция системы к равновесному состоянию происходит с возрастанием энтропии. Для доказательства продифференцируем (57) по времени и воспользуемся уравнением (56). Тогда

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{4} \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 d\mathbf{v}'_1 d\mathbf{v}'_2 w(\mathbf{v}_1 \mathbf{v}_2 \rightarrow \mathbf{v}'_1 \mathbf{v}'_2) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \ln \left(\frac{f_1 f_2}{f'_1 f'_2} \right). \quad (58)$$

Из этого соотношения в силу неравенства (см. вопрос 1)

$$(x - y) \ln(y/x) \leq 0, \quad \text{если } x, y \geq 0,$$

немедленно следует, что

$$\frac{dH}{dt} \leq 0. \quad (59)$$

Вопросы:

1. Покажите, что

$$(x - y) \ln(y/x) \leq 0, \quad \text{если } x, y \geq 0.$$

Равновесное распределение в замкнутой однородной системе

Важное с физической точки зрения решение уравнения (56) получается, когда

$$\partial f / \partial t = 0.$$

Тогда из равенства нулю интеграла столкновений следует функциональное уравнение для функции распределения:

$$(f'_1 f'_2 - f_1 f_2) = 0, \quad (60)$$

что эквивалентно равенству

$$\ln f(\mathbf{v}_1) + \ln f(\mathbf{v}_2) = \ln f(\mathbf{v}'_1) + \ln f(\mathbf{v}'_2). \quad (61)$$

Таким образом, $\ln f(\mathbf{v})$ представляет собой некоторую аддитивную величину, сохраняющуюся в упругих процессах. В силу законов сохранения эта величина есть просто линейная комбинация импульса и кинетической энергии частицы, то есть

$$\ln f(\mathbf{v}) = \alpha + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{v} + \gamma \mathbf{v}^2, \quad (62)$$

где α, β_j, γ — некоторые константы, на которые наложено условие нормировки (52). Их всегда можно переопределить так, что функция распределения примет вид

$$f(\mathbf{v}) = A \exp[-a(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2]. \quad (63)$$

Это и есть общий вид равновесного распределения, которое следует из уравнения Больцмана. Тот факт, что оно совпало с распределением Максвелла, подтверждает разумность предположений, заложенных в уравнение Больцмана.

0.10 Основное кинетическое уравнение Паули

Пусть $\omega(y|x, t)$ — плотность вероятности перехода от значения x к значению y за время t для некоторой случайной величины. В соответствие со свойствами плотности вероятности перехода можно написать

$$\omega(y|x, \Delta t) = [1 - a \Delta t] \delta(y - x) + V(y|x) \Delta t + O[(\Delta t)^2], \quad (64)$$

$$a = \int V(y|x) dy + O(\Delta t).$$

Первое слагаемое в (64) в квадратных скобках перед $\delta(y - x)$ связано с вероятностью остаться случайной величине неизменной за время Δt . Величина $V(y|x)$ носит название скорости перехода для процесса $x \rightarrow y$. Задание этой характеристики сводит проблему нахождения $\omega(y|x, t)$ к решению линейного интегро-дифференциального уравнения. Действительно, из уравнения Смолуховского следует, что

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left\{ \int \omega(y|z, \Delta t) \omega(z|x, t) dz - \omega(y|x, t) \right\}. \quad (65)$$

Подставляя сюда (64), получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(y|x, t) = \int [V(y|z) \omega(z|x, t) - V(z|y) \omega(y|x, t)] dz. \quad (66)$$

Это и есть основное кинетическое уравнение Паули, иногда называемое "master equation". На решение налагается стандартное условие нормировки.

Рассмотрим две простые модели, приводящие к точным решениям этого уравнения. Первая модель – это одномерные случайные блуждания с гауссовским распределением, полученная ранее,

$$\omega(y|x, t) = (4\pi Dt)^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{(y-x)^2}{4Dt}}.$$

Из определения скорости перехода имеем:

$$\begin{aligned} V(y|x) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi t} \int_{-\infty}^{+\infty} [e^{-k^2 Dt} - 1 + at] e^{ik(y-x)} dk = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} (a - k^2 D) e^{ik(y-x)} dk = \\ &= (a + D \frac{\partial^2}{\partial y^2}) \delta(y-x). \end{aligned} \quad (67)$$

Подставляя это выражение в правую часть уравнения Паули, получим:

$$\frac{\partial \omega(y|x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \omega(y|x, t).$$

Прямой подстановкой можно убедиться, что это уравнение удовлетворяется. Можно, также, вычислить скорость квадратичной флуктуации:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (y-x)^2 V(y|x) dy = 2D.$$

Это известный результат (следствие уравнения Фоккера-Планка).

Если область значений случайной величины является дискретным множеством, то она описывается вероятностью перехода $\omega(m|n, t)$, для которой соотношение (64) принимает вид

$$\begin{aligned} \omega(m|n, \Delta t) &= [1 - a \Delta t] \delta_{mn} + V(m|n) \Delta t + O[(\Delta t)^2], \\ a &= \sum_m V(m|n) + O(\Delta t), \quad V(n|n) = 0. \end{aligned} \quad (68)$$

Основное кинетическое уравнение записывается в форме

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(m|n, t) = \sum_l [V(m|l) \omega(l|n, t) - V(l|m) \omega(m|n, t)] ; \quad (69)$$

условие нормировки:

$$\sum_m \omega(m|n, t) = 1 .$$

В качестве второй модели рассмотрим случайный процесс $N(t)$, описывающий эволюцию числа частиц в "размножающейся системе", в которой $\omega(m|n, t) = 0$ при $m < n$. Предполагается, что накопление частиц в системе происходит только через процесс $n \rightarrow n + 1$, так что новая частица в системе либо не рождается, либо рождается только одна. В соответствии с этим положим

$$V(m|n) = \lambda \delta_{m, n+1}, \quad \lambda = \text{const} . \quad (70)$$

Тогда из (69) получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(m|0, t) = \lambda \omega(m-1|0, t) - \lambda \omega(m|0, t), \quad m = 0, 1, 2, \dots . \quad (71)$$

Так как $\omega(-1|0, t) = 0$, то

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega(0|0, t) = -\lambda \omega(0|0, t),$$

что вместе с условием $\omega(m|n, 0) = \delta_{mn}$ дает

$$\omega(0|0, t) = \exp(-\lambda t) . \quad (72)$$

Пусть $\omega(m|0, t) \equiv W(m, t)$. Это – вероятность обнаружить в системе в момент времени t ровно m частиц при условии, что при $t = 0$ число частиц в системе равнялось нулю. С учетом (71) и (72) имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(m, t) &= \lambda W(m-1, t) - \lambda W(m, t), \\ W(0, t) &= \exp(-\lambda t), \quad W(m, 0) = \delta_{m0}. \end{aligned} \quad (73)$$

Для производящей функции

$$G(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} W(n, t) z^n \quad (74)$$

(73) приводит к уравнениям

$$\frac{\partial}{\partial t} G(z, t) = \lambda (z-1) G(z, t), \quad G(z, 0) = 1 . \quad (75)$$

Отсюда

$$G(z, t) = \exp[-(1 - z) \lambda t], \quad (76)$$

что сразу же дает

$$W(m, t) = \frac{(\lambda t)^m}{m!} e^{-\lambda t}. \quad (77)$$

Выражение (76) и определение (74) позволяют вычислить все моменты. В частности, для первых двух моментов:

$$\langle N(t) \rangle = \lambda t, \quad \langle N^2(t) \rangle = \lambda t(1 + \lambda t). \quad (78)$$

Напомним, что в основе полученного решения лежит определенная модель скорости перехода $V(m|n)$ и кинетическое уравнение Паули.

0.11 Лэнгмюровские колебания плазмы

Существует широкая область физических явлений, в которых эволюция многочастичной системы определяется не динамикой парных столкновений, а дальнедействующими силами (напр., кулоновскими). В результате действия этих сил возникают коллективные возбуждения — квазичастицы. В таких явлениях для функции распределения определяющей оказывается левая часть кинетического уравнения Больцмана, а интегралом столкновений можно пренебречь. Важный пример такого рода — лэнгмюровские колебания плазмы — рассмотрен ниже. Система представляет из себя газ электронов и тяжелых ионов с равным нулю общим зарядом. Равновесное состояние такой системы характеризуется равенством в единице объема числа электронов и числа ионов, так что в "среднем" напряженность электрического поля равна нулю. Пусть одночастичная функция распределения электронов удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + m^{-1} \mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (79)$$

где \mathbf{p} — импульс электрона, \mathbf{F} — внешняя сила, действующая на него, т.е.

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}.$$

В соответствии со сказанным выше, в уравнении (79) отсутствует интеграл столкновений. Условие нормировки возьмем в виде:

$$\int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{p} = N, \quad (80)$$

тогда плотность электронов равна

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p},$$

плотность тока равна

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}.$$

Будем считать ионы тяжелыми и в рассматриваемом интервале времени неподвижными. В равновесном состоянии

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t),$$

где равновесная функция удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + m^{-1} \mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = 0. \quad (81)$$

Что происходит с системой, когда в некоторой ее части возникает отклонение от равновесного распределения? Пусть

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t), \quad |\delta f / f_0| \ll 1. \quad (82)$$

Избыток электронов над равновесным генерирует электрическое поле и кинетическое уравнение принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + m^{-1} \mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + e \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = 0, \quad (83)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = 4\pi e \int \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}.$$

В теории плазмы это уравнение называется уравнением Власова. Подставляя сюда $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ в виде (82) и линеаризуя (83) с учетом малости возмущений, получаем уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + m^{-1} \mathbf{p} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + e \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = 0, \quad (84)$$

Теперь разложим δf и \mathbf{E} по плоским волнам:

$$\begin{Bmatrix} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \end{Bmatrix} = \int \begin{Bmatrix} \delta f(\mathbf{k}, \omega | \mathbf{p}) \\ \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \end{Bmatrix} \exp[i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i \omega t] d\mathbf{p}. \quad (85)$$

Подставляя эти выражения в (84) и полагая, что $f_0 = f_0(\mathbf{p})$ соответствует однородному стационарному распределению, находим

$$\delta f(\mathbf{k}, \omega | \mathbf{p}) = -i e \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} \frac{1}{\omega - m^{-1} \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}}. \quad (86)$$

С другой стороны, из уравнения Максвелла получаем

$$i \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = 4\pi e \int \delta f(\mathbf{k}, \omega | \mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (87)$$

Если подставить сюда $\delta f(\mathbf{k}, \omega | \mathbf{p})$ из (86), то получается однородное уравнение относительно $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$. Заметим, что, поскольку рассматриваемая система не имеет выделенного направления, напряженность $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ может быть направлена только вдоль вектора \mathbf{k} , то есть

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mathbf{k}}{k} E(\mathbf{k}, \omega). \quad (88)$$

С учетом этого из (87) следует уравнение

$$E(\mathbf{k}, \omega) \left\{ 1 + \frac{4\pi e^2}{k} \int \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \frac{d\mathbf{p}}{\omega - m^{-1} p_x k} \right\} = 0. \quad (89)$$

Здесь в пространстве переменной интегрирования \mathbf{p} орт \mathbf{e}_x направлен вдоль волнового вектора \mathbf{k} , то есть

$$\mathbf{e}_x = \mathbf{k}/k.$$

Нетривиальное решение уравнения (89) существует только в классе обобщенных функций и имеет вид

$$E(\mathbf{k}, \omega) = \delta(\omega - \Omega(k)) \left[-i \frac{4\pi e^2}{k} \rho(\mathbf{k}) \right], \quad (90)$$

где $\rho(\mathbf{k})$ — произвольная функция волнового вектора \mathbf{k} , а $\Omega(k)$ удовлетворяет дисперсионному соотношению:

$$1 = -\frac{4\pi e^2}{k} \int \frac{\partial f_0}{\partial p_x} \frac{d\mathbf{p}}{\Omega(k) - m^{-1} p_x k}. \quad (91)$$

Частота $\Omega(k)$, удовлетворяющая этому уравнению, описывает лэнгмюровские колебания плазмы. Полученное решение (90) позволяет исследовать эволюцию избыточной плотности и ее влияние на электроны плазмы. Для избыточной электронной плотности имеем

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p} = \int \rho(\mathbf{k}) \exp[i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i \Omega(k) t] d\mathbf{k}. \quad (92)$$

Таким образом, $\rho(\mathbf{k})$ в (90) есть Фурье-образ от начальной флуктуации $\rho(\mathbf{x}, 0)$. Дальнейшая эволюция определяется дисперсионным соотношением (91). Если

$$\Omega(k) \propto k^2,$$

то расплывание флуктуации аналогично расплыванию волнового пакета в нерелятивистской квантовой механике.

Рассмотрим решения дисперсионного уравнения (91). Характерные масштабы величин определяются равновесной функцией распределения. Пусть

$$\int f_0(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = n \quad (93)$$

— равновесная плотность электронов,

$$\frac{1}{n} \int \frac{p^2}{2m} f_0(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle \quad (94)$$

— средняя кинетическая энергия электрона в плазме. Предположим, функция $f_0(\mathbf{p})$ такова, что интеграл в (91) эффективно обрезается на радиусе меньшем, чем радиус сходимости ряда Тейлора:

$$\frac{\Omega}{\Omega - m^{-1}kp_x} = 1 + \frac{kp_x}{m\Omega} + \left(\frac{kp_x}{m\Omega}\right)^2 + \left(\frac{kp_x}{m\Omega}\right)^3 + \dots \quad (95)$$

Удерживая в разложении первые четыре члена, получим

$$1 = \frac{\omega_0^2}{\Omega^2} \left[1 + \frac{1}{\Omega^2} k \langle v^2 \rangle \right], \quad \omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}. \quad (96)$$

Отсюда, с точностью до членов $O(k^4)$,

$$\Omega(k) = \omega_0^2 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2\omega_0}. \quad (97)$$

Это и есть искомый спектр. Величина ω_0 называется плазменной частотой. Таким образом, в бесстолкновительной плазме случайно возникшая флуктуация равновесной плотности электронов порождает колебания в виде плоских волн, спектр которых квадратичен по волновому вектору и определяется плазменной частотой и температурой равновесной плазмы. Полученные колебания не затухают. Однако более строгое рассмотрение сингулярного интеграла в (91) показывает, что на самом деле возникшие колебания плазмы будут затухать. Впервые такой анализ проделал Ландау, и данное явление называется затуханием Ландау. Физическая причина затухания — передача энергии электрону от волны, что приводит к его ускорению или замедлению.

Формально эффект затухания возникает при доопределении интеграла в (91). Подынтегральная функция имеет полюс в точке

$$v_x = \Omega(k)/k,$$

когда скорость электрона равна фазовой скорости волны. Поэтому интеграл расходится и нуждается в доопределении. По Ландау в подынтегральной функции нужно сделать замену

$$\omega \rightarrow \omega + i\varepsilon.$$

Выбор знака диктуется принципом причинности и приводит к тому, что $\delta f = 0$ при $t < 0$. Если теперь повторить вычисления, которые привели к (96), то в результате получается

$$\Omega(k) = \omega_0^2 + \frac{k^2 \langle v^2 \rangle}{2\omega_0} - i\gamma(k), \quad \gamma(k) > 0, \quad (98)$$

то есть в спектре появляется мнимая добавка. Теперь легко увидеть, что

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 0 \\ \mathbf{0} \end{array} \right\} \text{ при } t \rightarrow +\infty. \quad (99)$$

0.12 Электронная плазма в металле. Проводимость

В бесстолкновительной "горячей" плазме, состоящей из электронов и ионов, основным механизмом формирования одночастичной функции распределения является рождение квазичастиц и их дальнейшая эволюция. Здесь будет рассмотрен пример, когда парные столкновения начинают играть существенную роль. Наиболее простая система такого рода — электроны в металле при наличии примесей, нарушающих трансляционную инвариантность. Рассеяния на этих примесях приводят к ненулевому интегралу столкновений. Таким образом, пространственная зависимость одночастичной функции распределения $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ "диктуется" уравнением Шредингера в периодическом поле кристаллической решетки, а импульсная зависимость и эволюция определяются кинетическим уравнением.

Запишем интеграл столкновения через вероятность рассеяния (перехода) $\omega(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$. Это важная характеристика, определяемая динамикой взаимодействия рассматриваемых частиц (в данном случае электронов) со средой. Определим ее таким образом, чтобы величина $\omega(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') d\mathbf{p}'$ представляла собою вероятность перехода за единицу времени частицы из состояния с импульсом \mathbf{p} в одно из состояний, лежащих в окрестности $d\mathbf{p}'$ импульса \mathbf{p}' . В этом случае для интеграла столкновений имеем:

$$\begin{aligned} \text{"уход"} &= \int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \omega(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') d\mathbf{p}', \\ \text{"приход"} &= \int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}', t) \omega(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (100)$$

Тогда уравнение Больцмана принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \\ = \int [f(\mathbf{x}, \mathbf{p}', t) w(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) - f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')] d\mathbf{p}'. \end{aligned} \quad (101)$$

Нужно отметить, что это уравнение носит самый общий характер и справедливо ровно настолько, насколько правомочно введение одночастичной функции распределения для частиц, находящихся в среде, с которой они активно взаимодействуют. Вид функции $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ определяется природой этого взаимодействия. Так, если роль среды играют сами частицы и взаимодействие между ними носит чисто упругий характер, то сама вероятность $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ зависит от функции распределения и в результате получаем интеграл столкновений Больцмана. Если среда представляет собой тяжелые частицы или неподвижные центры, то $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ сводится к дифференциальному сечению упругого рассеяния на этих центрах. В квантово-механических процессах рассеяния на потенциале $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ определяется квадратом модуля матричного элемента от матрицы рассеяния. В последних двух случаях $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ не зависит от функции распределения и пропорциональна δ -функции Дирака, поддерживающей закон сохранения энергии. Кроме того, скорость перехода $w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')$ удовлетворяет условию

$$w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') = w(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}),$$

известному как принцип детального равновесия. Отметим, что если правую часть уравнения (101) рассматривать как интегральный оператор, действующий на функцию распределения $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$, то он в точности совпадает с соответствующим оператором в кинетическом уравнении Паули, действующим на вероятность перехода. Ядро оператора в обоих случаях одно и тоже и определяется скоростью перехода.

Теперь вернемся к нашей задаче. Будем считать электроны свободными с энергией равной

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

где m — эффективная масса, примеси неподвижные, рассеяние электронов на примесях чисто упругим, так что энергия электрона при рассеянии сохраняется, то есть $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$ и относительные скорости $|\mathbf{v}| = |\mathbf{v}'|$. Тогда можно написать

$$w(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}') d\mathbf{p}' = n_0 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')} v d\Omega', \quad (102)$$

$$w(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}) d\mathbf{p}' = n_0 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} v' d\Omega',$$

где n_0 — концентрация примесей. Эти соотношения понимаются в том смысле, что интеграл от произвольной функции с левой частью (102) сводится к интегралу по телесному углу. Величина

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}')}$$

называется дифференциальным сечением и зависит от $\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = p^2 \cos \theta'$, где θ' — угол рассеяния. При получении (102) считалось, что в процессе рассеяния электрона на примеси последняя не меняет своего состояния. Таким образом, в сумме по состояниям мишени присутствует только одно слагаемое. Предполагалось также, что относительная скорость "частица-мишень" равна скорости частицы (это приближение оправдано тем, что масса электрона мала по сравнению с массой примеси). Величина

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right) d\Omega' = \sigma, \quad (103)$$

есть сечение упругого рассеяния. В общем случае оно зависит от $|\mathbf{p}| = p$, то есть $\sigma = \sigma(p)$. С учетом вышеизложенного уравнение (101) примет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \\ = -n_0 v f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + n_0 v \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}', t) d\Omega'. \end{aligned} \quad (104)$$

В дальнейшем важную роль играет равенство

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}') d\Omega' = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}) \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} \cos \theta' d\Omega', \quad (105)$$

где \mathbf{n} — произвольный постоянный вектор. Так как $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$, справедливо представление

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} \cos \theta + \mathbf{p}'_{\perp}, \quad (106)$$

где $\mathbf{p}'_{\perp} \perp \mathbf{p}$ и

$$p'_{\perp} = |\mathbf{p}'_{\perp}| = p \sin \theta'.$$

Ввиду ортогональности \mathbf{p} и \mathbf{p}'_{\perp}

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}'_{\perp} = n_{\perp} (p \sin \theta') \cos \varphi,$$

где

$$\mathbf{n}_\perp = \mathbf{n} \left(1 - \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})}{np} \right),$$

φ — угол между \mathbf{p}'_\perp и \mathbf{n}_\perp . Из очевидного равенства

$$\int_0^{2\pi} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}'_\perp) d\varphi = 0$$

и того факта, что дифференциальное сечение зависит только от угла θ , нетрудно получить

$$\int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}'_\perp) d\Omega' = 0. \quad (107)$$

Отсюда сразу следует (104).

При $\mathbf{F} = \mathbf{0}$ уравнение (104) имеет равновесное решение

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_0(p), \quad (108)$$

где f_0 — произвольная функция. При этом левая и правая части уравнения (104) обращаются в нуль независимо. В случае малого отклонения от равновесия, вызываемого слабым внешним полем $\mathbf{F} \neq \mathbf{0}$,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_0(p) + \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \quad (109)$$

и линеаризованное уравнение имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_0(p) = I, \quad (110)$$

$$I = -n_0 v \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + n_0 v \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right)_{(\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p})} \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}', t) d\Omega'.$$

При заданной функции $f_0(p)$ и силе \mathbf{F} это уравнение представляет собой неоднородное интегро-дифференциальное уравнение. В некоторых простых случаях его решение можно найти в аналитическом виде. Пусть $\mathbf{F} = e \mathbf{E}$, где \mathbf{E} — напряженность постоянного внешнего электрического поля. Тогда естественно предполагать, что δf есть однородная в пространстве функция, не зависящая от времени. В этом случае уравнение (110) примет вид

$$e \mathbf{E} \cdot \frac{\mathbf{p}}{p} \frac{\partial f_0}{\partial p} = I. \quad (111)$$

Будем искать решение в виде

$$\delta f(\mathbf{p}) = -\tau e \mathbf{E} \cdot \frac{\mathbf{p}}{p} \frac{\partial f_0}{\partial p}. \quad (112)$$

где $\tau = \text{const}$. Подставляя (112) в уравнение(111) и учитывая равенство (105), получим

$$\frac{1}{\tau} = n_0 v \sigma_{tr}, \quad \text{где} \quad \sigma_{tr} = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega'} \right) (1 - \cos \theta') d\Omega'. \quad (113)$$

Величина σ_{tr} называется транспортным сечением и, как видно из (112), в ней подавлен вклад от дифференциального сечения в области малых углов рассеяния. Величину τ называют временем релаксации. Вычислим плотность электрического тока. Пусть единичный вектор $\mathbf{k} = \mathbf{E}/E$, тогда

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{j} = \frac{e}{m} \int (\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}) \delta f(\mathbf{p}) d\mathbf{p},$$

или

$$\mathbf{j} = \Sigma_e \mathbf{E}, \quad (114)$$

где

$$\Sigma_e = \frac{e^2 \tau}{m} n, \quad n = \int f_0(p) d\mathbf{p}.$$

Величина Σ_e носит название проводимости. Соотношение (114) выражает закон Ома. Задача просто обобщается на случай, когда напряженность поля \mathbf{E} зависит от времени. Разлагая в интеграл Фурье \mathbf{E} и δf получим, что проводимость зависит от частоты электрического поля

$$\Sigma_e = \frac{e^2 \tau n}{m(1 - i\omega\tau)}.$$

Если ввести диэлектрическую проницаемость

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi \Sigma_e}{\omega} i,$$

то можно получить все электрические характеристики среды как функцию единого параметра τ .

0.13 Теплопроводность электронного газа в металле

В этом параграфе мы продолжим рассмотрение электронной плазмы в металле при наличии примесей. Однако, в отличие от предыдущего, будем предполагать, что электрическое поле отсутствует, но в направлении

вектора \mathbf{n} (произвольный единичный вектор) существует градиент температуры, поддерживаемый извне. Будем считать также, что на каждом бесконечно малом интервале оси вдоль вектора \mathbf{n} существует своя локальная температура и соответствующее ей равновесное распределение Ферми-Дирака по одночастичному спектру электронов $\epsilon = p^2/2m$, т.е. равновесное распределение f_0 имеет вид:

$$\begin{aligned} f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \langle h(\epsilon) \rangle, \\ \langle h(\epsilon) \rangle &= \frac{1}{\exp \frac{\epsilon - \mu}{T(x)} + 1}, \end{aligned} \quad (115)$$

$$\int f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p} = n - \text{равновесная плотность электронов.}$$

Здесь, в соответствии с выше сказанным, температура есть функция переменной x , т.е. $T = T(x)$, причем, система координат выбрана так, что ось x направлена вдоль вектора \mathbf{n} , таким образом $x = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})$. Учтено также, что электрон может находиться в двух состояниях.

Ниже мы покажем, что существование градиента температур, а также наличие примесей приводит к появлению ненулевого тока электронов вдоль вектора \mathbf{n} и ненулевой плотности потока тепла q_x :

$$\begin{aligned} q_x \equiv (\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}) &= \int (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) \cdot (\epsilon - \mu) \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\mathbf{p}, \\ \text{где } f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) &= f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \\ \mathbf{p} &= m\mathbf{v} \end{aligned} \quad (116)$$

Введем коэффициент теплопроводности "K" через соотношение:

$$q_x = -K \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (117)$$

Нашей задачей является вычисление этого коэффициента. Для этого необходимо решить уравнение Больцмана и найти δf .

Поскольку внешнее поле отсутствует и нас интересует стационарное распределение, то в левой части уравнения Больцмана останется только одно слагаемое, так что уравнение относительно δf в приближении её малости имеет вид:

$$\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{x}} = I, \quad (118)$$

где интеграл столкновения I приведен в предыдущем параграфе.

Далее, в силу того, что распределение $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ зависит от своих аргументов \mathbf{r} и \mathbf{p} через единственный фактор

$$Z = \frac{\epsilon - \mu}{T(x)}, \quad \epsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (119)$$

нетрудно установить следующие простые соотношения:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f_0 &= \frac{1}{T} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial z}, \\ \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) f_0 &= \frac{1}{T} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) \cdot \frac{\partial f_0}{\partial z} \cdot \left(-\frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial x}. \end{aligned} \quad (120)$$

Отсюда получаем, что

$$\mathbf{n} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{x}} = \gamma \cdot \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f_0, \quad \gamma = \left(-\frac{\epsilon - \mu}{T} \right) \cdot \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (121)$$

Это равенство позволяет записать уравнение Больцмана (118) в виде

$$e\tilde{E} \cdot \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) f_0 = I, \quad (122)$$

где $\tilde{E} = \frac{\gamma}{e}$. Таким образом, задача свелась к предыдущей с той разницей, что эффективное электрическое поле \tilde{E} зависит от $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) = x$. Однако, поскольку в интегральном уравнении (122) для $\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ координата x входит как параметр, то решение уравнения (122) получается из найденного ранее путем замены в нем $E \rightarrow \tilde{E}$. Тогда получим:

$$\begin{aligned} \delta f &= \frac{\tau}{T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) \cdot (\epsilon - \mu) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon}, \\ q_x &= \frac{\tau}{T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \int (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})^2 \cdot (\epsilon - \mu)^2 \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} d\mathbf{p}, \\ \tau^{-1} &= n_0 v \sigma_{tr}, \end{aligned} \quad (123)$$

где n_0 и σ_{tr} , определенные в предыдущем параграфе плотность примесей и транспортное сечение, соответственно.

Вычисление плотности теплового потока q_x приводит к интегралу типа:

$$f(\mu) = \int F(\epsilon) \langle h(\epsilon) \rangle d\epsilon. \quad (124)$$

Такие интегралы возникают в практических расчетах статфизики и для них широко используется метод приближения, в котором в качестве первого шага "гладкое" распределение $\langle h(\epsilon) \rangle$ заменяется на "ступеньку",

обрезанную $\epsilon = \mu$. Конкретно, пусть

$$f_0 = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon, \quad (125)$$

тогда

$$f(\mu) - f_0 = T \int_0^{\infty} \frac{F(\mu + Tx)}{e^x + 1} dx - T \int_0^{\frac{\mu}{T}} \frac{F(\mu - Tx)}{e^x + 1} dx. \quad (126)$$

До сих пор это точное соотношение. Приближение связано с разложением под интегралом

$$F(\mu \pm Tx) \simeq F(\mu) + F'(\mu) \cdot T \cdot x \quad (127)$$

и заменой во втором интеграле верхнего предела интегрирования на ∞ . В этом приближении получим

$$f(\mu) = \int_0^{\mu} F(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} T^2 \cdot F'(\mu). \quad (128)$$

Здесь использовано соотношение:

$$\int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}. \quad (129)$$

Соотношение (128) позволяет выполнить интегрирование в (123), после чего для плотности потока тепла получим:

$$q_x = \tau \cdot \frac{\pi^2 \cdot n \cdot T}{3m} \cdot \frac{dT}{dx}. \quad (130)$$

В этом выражении мы перешли от химического потенциала $\mu = \mu(T)$ к приближенному его значению, т.е. сделали замену

$$2m\mu(T) \simeq 2m\mu(0) = (2\pi\hbar)^2 \cdot \left(\frac{3n}{4\pi}\right)^{2/3},$$

где n – плотность электронов.

Окончательный результат можно представить в виде

$$\begin{aligned} q_x &= -K \cdot \frac{dT}{dx}, \\ K &= \frac{\pi^2 T}{3e^2} \cdot \Sigma_e, \end{aligned} \quad (131)$$

где Σ_e – электронная проводимость. В таком виде он известен как закон Видемана-Франца.

II

Элементы теории переноса

0.14 Введение

Теория переноса изучает прохождение сквозь среду потока активно взаимодействующих с ней частиц. В качестве таких частиц мы будем рассматривать нейтроны, поскольку эта задача возникает естественным образом в теории ядерных реакторов и, следовательно, имеет большое практическое значение. Основные идеи и методы расчета были заложены в 40–50 годы при изучении процессов переноса в веществе, состоящем из смеси природного урана (активное вещество) и графита (замедлитель). Было обнаружено, что нейтроны, кинетическая энергия которых порядка $\frac{1}{40}eV$ (тепловые нейтроны) имеют большое сечение захвата ядрами некоторых изотопов урана с последующим делением их на осколки и два "быстрых" нейтрона (энергия $\sim 10^6 eV$). Эти нейтроны в упругих столкновениях с легкими ядрами замедлителя теряют свою энергию и после определенного числа столкновений (~ 110 столкновений на ядре углерода) становятся тепловыми. Таким образом, при определенном соотношении плотностей и взаимном расположении активного вещества и замедлителя возникает лавинообразный процесс рождения нейтронов — цепная реакция — с сопутствующим ему энерговыделением. При рассмотрении этой задачи, необходимо учитывать все каналы реакции нейтронов с ядрами вещества. Это сложная кинетическая проблема, и большие трудности возникают уже на стадии написания соответствующих кинетических уравнений. Мы рассмотрим максимально упрощенную модель процесса, в которой механизм возникновения тепловых нейтронов в системе подменяется введением некоторого феноменологического фактора ("источник" тепловых нейтронов). Относительно взаимодействия тепловых нейтронов с ядрами поглотителя предполагается, что доминирующую роль играют процессы упругого рассеяния и радиационного захвата. Кроме этого, считается что отношение энергии нейтронов к числу нуклонов в ядре есть величина малая, так что при упругом рассеянии меняется только направление скорости нейтронов. Модель построенная на перечисленных предположениях называется односкоростной моделью переноса нейтронов.

0.15 Сечения ядерных процессов и их связь с макроскопическими характеристиками нейтронных потоков

Пусть $n(\mathbf{x}, t)$ — пространственная плотность нейтронов, $N(\mathbf{x}, t)$ — пространственная плотность ядер, N_a — поверхностная плотность ядер, σ_a — эффективное сечение радиационного захвата, σ_s — эффективное сечение упругого рассеяния,

$$\Sigma_i = N \sigma_i, \quad i = a, s,$$

— макроскопическое сечение соответствующего процесса. Введем также функцию

$$\phi(\mathbf{x}, t) = v n(\mathbf{x}, t),$$

которую называют потоком нейтронов.

Представим плоскую моноядерную пластину с площадью S , на которую под прямым углом падает пучок нейтронов с плотностью тока j_0 . Пусть j_1 — плотность тока нейтронов, прошедших через пластину без изменения своих состояний (не рассеялись, не поглотились), тогда величина

$$a = \frac{j_0 - j_1}{j_0} \quad (132)$$

есть вероятность столкновения одного нейтрона при прохождении моноядерной пластины. С другой стороны, на площади S размещено $N_a S$ ядер, каждое из которых представляет собой для налетающего нейтрона эффективное сечение σ . Поэтому площадь $\sigma N_a S$ — та часть от общей площади, при пересечении которой нейтрон изменяет свое состояние. Вероятность столкновения равна отношению соответствующих площадей, то есть

$$a = \frac{\sigma N_a S}{S} = \sigma N_a. \quad (133)$$

Приравнявая (132) и (133), получаем связь макроскопических характеристик пучка с микроскопическим сечением:

$$\frac{j_0 - j_1}{j_0} = \sigma N_a. \quad (134)$$

Перейдем от абстрактной моноядерной пластины к реальному образцу конечной толщины. Пусть $j(x)$ — плотность тока нейтронов, прошедших пластину толщиной " x " и не испытавших столкновения. Тогда величина

$$a(\Delta x) = \frac{j(x) - j(x + \Delta x)}{j(x)} \quad (135)$$

есть вероятность столкновения нейтрона при прохождении пластины толщиной Δx . С другой стороны, по аналогии с (134) имеем

$$a(\Delta x) = \frac{j(x) - j(x + \Delta x)}{j(x)} = \sigma N \Delta x. \quad (136)$$

Здесь величина $N \Delta x$ эквивалентна поверхностной плотности ядер ($\Delta x \sim$ диаметра ядра). Полагая, что пространственная плотность ядер постоянна во всем пространстве, из соотношения (136) получаем

$$j(x) = j_0 \exp(-\Sigma x), \quad \Sigma = \Sigma_a + \Sigma_s. \quad (137)$$

Таким образом, $\exp(-\Sigma x)$ — вероятность прохождения нейтроном пути длиной " x " без столкновений, $[1 - \exp(-\Sigma x)]$ — вероятность столкновения нейтрона на пути длиной " x ". Если в прохождении участвует n нейтронов, то величина

$$n[1 - \exp(-\Sigma x)]$$

есть число столкновений на пути длиной x .

В элементарном объеме $d\mathbf{x}$ содержится $n d\mathbf{x}$ нейтронов. За время Δt нейтрон, обладающий скоростью v , проходит путь $v \Delta t$. Поэтому из этих $n d\mathbf{x}$ нейтронов ровно

$$n d\mathbf{x} [1 - \exp(-\Sigma_s v \Delta t)]$$

испытывают упругие столкновения в течение времени Δt , ровно

$$n d\mathbf{x} [1 - \exp(-\Sigma_a v \Delta t)]$$

нейтронов поглотятся за время Δt . Если элементарный объем $d\mathbf{x}$ поместить в идеально отражающую замкнутую поверхность, то за время Δt нейтрон, не выходя за пределы объема, пройдет тот же путь $v \Delta t$, так что записанные выше соотношения дают количества соответствующих столкновений в элементарном объеме $d\mathbf{x}$, окруженном идеально отражающими стенками. Аккуратно рассуждая, можно показать, что величина

$$n d\mathbf{x} [1 - \exp(-\Sigma_s v \Delta t)]$$

дает число нейтронов, испытавших упругие столкновения в объеме $d\mathbf{x}$ в течение времени Δt , величина

$$n d\mathbf{x} [1 - \exp(-\Sigma_a v \Delta t)]$$

есть число нейтронов, поглощенных в объеме $d\mathbf{x}$ за время Δt . Считая интервал времени малым ($\Delta t \ll \Sigma v$), мы находим, что число упругих столкновений в единице объема в единицу времени равно $\Sigma_s \phi$, число нейтронов,

поглощенных в единице объема в единицу времени, равно $\Sigma_a \phi$. Наконец, из соотношения (137) имеем

$$\sigma = \frac{1}{lN} \ln(j_0/j_l), \quad (138)$$

где l — толщина однородной пластины, N — пространственная плотность ядер, j_0 — плотность тока нейтронов перед пластиной, j_l — плотность тока после прохождения пластины, σ — полное сечение взаимодействия нейтрона с ядром. В левой части (138) стоит микроскопическое сечение, в правой части — экспериментально наблюдаемые макроскопические величины.

0.16 Уравнение баланса числа частиц в односкоростной модели

Уравнение баланса выражает тот простой факт, что в рассматриваемой системе тепловые нейтроны могут рождаться, поглощаться и рассеиваться, и ничего другого с ними не происходит. Пусть V — произвольный конечный объем. Тогда

$$\Delta N = \int [n(\mathbf{x}, t + \Delta t) - n(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x} \quad (139)$$

есть изменение числа нейтронов в этом объеме за малое время Δt . Оно складывается из "прибыли" и "убыли", причем уменьшение числа нейтронов происходит как за счет поглощения нейтронов в объеме V , так и за счет "утечки" нейтронов через границу ∂V объема V . Число нейтронов, поглощенных в объеме V за время Δt , равно

$$\Delta t \int [\Sigma_a n(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x}.$$

Число нейтронов, покинувших объем V через поверхность ∂V за время Δt , равно

$$\Delta t \int_{\partial V} [\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)] dS,$$

где \mathbf{n} — внешняя нормаль к поверхности ∂V . Прибыль — число нейтронов, рожденных в объеме V за время Δt , — равно

$$\Delta t \int q(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}.$$

Переходя к пределу $\Delta t \rightarrow 0$ и учитывая произвольность объема V , получим уравнение баланса в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = -\Sigma_a \phi + q. \quad (140)$$

Чтобы это соотношение превратить в уравнение для плотности $n(\mathbf{x}, t)$ числа нейтронов, нужно получить ее связь с плотностью тока. Такая связь получается в рамках определенных физических предположений. Кроме того, необходимо прояснить смысл источника $q(\mathbf{x}, t)$, поскольку воспроизводство нейтронов генерируется самими тепловыми нейтронами.

0.17 Плотность тока

Пусть ΔS — произвольная бесконечно малая площадка, проходящая через точку наблюдения P с радиусом-вектором \mathbf{x} . Пусть \mathbf{y} — радиус-вектор другой точки P' , окруженной элементарным объемом $d\mathbf{y}$. Рассмотрим все те нейтроны, которые вышли из объема $d\mathbf{y}$ и, не испытав по пути ни одного столкновения, достигли площадки ΔS . Эти нейтроны можно разделить на два класса — нейтроны, которые были рождены в объеме $d\mathbf{y}$ источником, и нейтроны, которые попали в объем $d\mathbf{y}$ извне и испытали в этом объеме последнее (перед пересечением ΔS) упругое столкновение. Вычислим сперва вклад источника в плотность тока. Пусть $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{y} - \mathbf{x})$ — вектор, направленный из P в P' , θ — угол между единичной нормалью \mathbf{n} к площадке ΔS и вектором $\boldsymbol{\rho}$, так что

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\rho} = \rho \cos \theta.$$

Число нейтронов, рожденных в объеме $d\mathbf{y}$ за время Δt , равно $q(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} \Delta t$. Если рождение нейтронов в источнике изотропно, то доля нейтронов, имеющих потенциальную возможность пересечь площадку ΔS , определяется отношением площадей

$$\frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi \rho^2}.$$

Из этих нейтронов лишь $\exp(-\Sigma \rho)$ дойдут до площадки без столкновений. Поэтому число нейтронов, рожденных источником в объеме $d\mathbf{n}$ и пересекающих площадку ΔS в интервале времени $(t, t + \Delta t)$, равно

$$\Delta N_q = \frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi \rho^2} \exp(-\Sigma \rho) q(\mathbf{y}, t - \rho/v) d\mathbf{y} \Delta t. \quad (141)$$

Число нейтронов, которые попали в объем $d\mathbf{y}$ извне и испытали в этом объеме последнее (перед пересечением ΔS) упругое столкновение, определяется плотностью числа столкновений и тем же фактором подавления $\exp(-\Sigma\rho)$:

$$\Delta N_s = \frac{\Delta S \cos \theta}{4\pi\rho^2} \exp(-\Sigma\rho) \Sigma_s \phi(\mathbf{y}, t - \rho/v) d\mathbf{y} \Delta t. \quad (142)$$

Учитывая соотношения

$$d\mathbf{y} = d\boldsymbol{\rho}, \quad \nabla(1/\rho) = -\boldsymbol{\rho}/\rho^3,$$

для плотности тока получаем $\mathbf{j} = \mathbf{j}_s + \mathbf{j}_q$, где

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \left[\nabla \frac{1}{\rho} \right] \Sigma_s \phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}, \quad (143)$$

$$\mathbf{j}_q(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \left[\nabla \frac{1}{\rho} \right] q(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}. \quad (144)$$

Перечислим еще раз использованные предположения. Во-первых, моноэнергетичность нейтронов при переносе (односкоростное приближение). Далее, ядра поглотителя распределены в пространстве с постоянной плотностью N . Наконец, изотропность источника и изотропность при упругом рассеянии. Сделаем еще одно предположение: на временном интервале $\sim 1/(\Sigma v)$ плотность нейтронов и плотность источника меняются слабо, то есть пренебрежем в выражении для плотности тока временной задержкой. Тогда

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_q(\mathbf{x}, t) = q(\mathbf{x}, t) - \frac{\Sigma}{4\pi} \int q(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}, \quad (145)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_s(\mathbf{x}, t) = \Sigma_s \cdot \phi(\mathbf{x}, t) - \frac{\Sigma}{4\pi} \int \Sigma_s \phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}. \quad (146)$$

При получении этих равенств использовалось соотношение

$$\nabla^2(1/\rho) = -4\pi \delta(\boldsymbol{\rho}).$$

С учетом полученных выражений уравнение баланса (140) запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}_s(\mathbf{x}, t) = Q(\mathbf{x}, t) - \Sigma_a \phi(\mathbf{x}, t), \quad (147)$$

где

$$Q(\mathbf{x}, t) = \frac{\Sigma}{4\pi} \int q(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t) \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}.$$

Таким образом, в плотности тока можно не учитывать вклада прямых нейтронов из источника, если при этом заменить $q(\mathbf{x}, t)$ на $Q(\mathbf{x}, t)$. Такую замену можно интерпретировать как эффективную экранировку источника. При достаточно "гладком" источнике $q(\mathbf{x}, t)$, когда

$$\frac{1}{3\Sigma^2} \nabla^2 q \ll q,$$

экранировка отсутствует:

$$Q(\mathbf{x}, t) \simeq q(\mathbf{x}, t) \frac{\Sigma}{4\pi} \int \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) d\rho = q(\mathbf{x}, t). \quad (148)$$

Примером существенного влияния экранировки служит точечный источник:

$$q(\mathbf{x}, t) = q_0 \delta(\mathbf{x}), \quad Q(\mathbf{x}, t) = q_0 \frac{\Sigma}{4\pi} |\mathbf{x}|^{-2} \exp(-\Sigma|\mathbf{x}|). \quad (149)$$

Отсюда следует важное соотношение

$$\int q(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \int Q(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}. \quad (150)$$

Таким образом, источник нейтронов q и "экранированный" источник Q рожают в единицу времени во всем пространстве одинаковое количество нейтронов.

Рассмотрим теперь ток $\mathbf{j}_s(\mathbf{x}, t)$. Разложим поток $\phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t)$ в (147) в ряд по степеням $\boldsymbol{\rho}$:

$$\phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\rho} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}, t) + \dots \quad (151)$$

Если $\phi(\mathbf{x}, t)$ — достаточно гладкая функция, то, пренебрегая высшими производными, получим закон Фика

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Sigma_s}{3\Sigma^2} \nabla \phi(\mathbf{x}, t). \quad (152)$$

В рамках этих приближений уравнение баланса (147) становится дифференциальным уравнением второго порядка:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{x}, t) - L \nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) = -\Sigma_a \phi(\mathbf{x}, t) + Q(\mathbf{x}, t), \quad (153)$$

где

$$L = \frac{\Sigma_s}{3\Sigma^2}, \quad \phi = v n.$$

При $Q = q$ оно известно как диффузионное уравнение в односкоростном приближении. Его анализ для системы, состоящей из активного вещества, замедлителя и нейтронов, был впервые проделан Ферми (1947).

0.18 Односторонние токи. Граничные условия на границе среда–вакуум

Частицы, пересекающие площадку ΔS в положительном направлении вектора \mathbf{n} , назовем *выходящими* из площадки ΔS , а соответствующую плотность тока обозначим через $j^{(+)}$. Частицы, пересекающие площадку ΔS в отрицательном направлении вектора \mathbf{n} , назовем *входящими* в площадку ΔS , а соответствующую плотность тока обозначим через $j^{(-)}$. Таким образом, имеем

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = j^{(+)}(\mathbf{x}, t) - j^{(-)}(\mathbf{x}, t). \quad (154)$$

Величины $j^{(\pm)}(\mathbf{x}, t)$ принято называть односторонними токами. Они обычно удобны при постановке граничных условий. Если вещество, в котором переносятся нейтроны, граничит с вакуумом, причем поверхность границы является прозрачной для нейтронов, то естественным требованием является равенство нулю тока $j^{(-)}$ на границе раздела. Пренебрегая временной задержкой, из (145) получаем

$$j_s^{(-)}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int_{\rho_3 > 0} \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho^3} \Sigma_s \phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t - \rho/v) \exp(-\Sigma\rho) d\boldsymbol{\rho}. \quad (155)$$

Интегрирование ведется по области

$$0 \leq \frac{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho} \leq 1.$$

В сферической системе координат с полярной осью вдоль вектора \mathbf{n} разложение потока по степеням ρ имеет вид

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\rho}, t) &= \phi(\mathbf{x}, t) + \rho \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} \phi(\mathbf{x}, t) + \\ &+ \rho \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} \phi(\mathbf{x}, t) + \rho \cos \theta \frac{\partial}{\partial x_3} \phi(\mathbf{x}, t) + \dots, \quad (156) \\ d\boldsymbol{\rho} &= \rho^2 d\rho \sin \theta d\theta d\varphi. \end{aligned}$$

После интегрирования по азимутальному углу φ второе и третье слагаемые в (156) исчезают и в результате, с точностью до высших производных,

$$j_s^{(\pm)}(\mathbf{x}, t) = \frac{\Sigma_s}{\Sigma} \left\{ \frac{1}{4} \phi(\mathbf{x}, t) \mp \frac{1}{6\Sigma} (\mathbf{n} \cdot \nabla) \phi(\mathbf{x}, t) \right\}. \quad (157)$$

Отсюда следует закон Фика (152).

0.19 Точечный источник в среде с поглощением и рассеянием

Пусть в точке $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ находится точечный источник нейтронов, испускающий в единицу времени q_0 нейтронов:

$$q(\mathbf{x}, t) = q_0 \delta(\mathbf{x}).$$

В среде с поглощением можно ожидать существования стационарного режима, при котором число нейтронов, поглощенных во всем пространстве в единицу времени, равно q_0 , то есть

$$\int \Sigma_a \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = q_0. \quad (158)$$

В данном случае уравнение диффузии имеет вид

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{x}, t) - \chi^2 \phi(\mathbf{x}, t) = -q_0 \frac{\Sigma}{4\pi L} |\mathbf{x}|^{-2} \exp(-\Sigma|\mathbf{x}|), \quad (159)$$

где $\chi^2 = \Sigma_a/L$. Домножая (159) на L и интегрируя по всему пространству, получим

$$\lim_{R \rightarrow \infty} L \int_{S_R} (\nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} = \int \Sigma_a \phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} - q_0 = 0. \quad (160)$$

Таким образом, стационарный режим возможен, если существует решение уравнения (159), которое исчезает на бесконечности достаточно быстро для того, чтобы поверхностный интеграл в левой части (160) в пределе обращался в нуль. Искомое решение выражается через соответствующую функцию Грина

$$G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}) = - \frac{\exp[-\chi |\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}|]}{4\pi |\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}|}, \quad (161)$$

удовлетворяющую уравнению

$$[\nabla_{\mathbf{x}}^2 - \chi^2] G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}) = \delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}).$$

Решением уравнения (159) будет свертка фундаментального решения (161) с правой частью (159):

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{\Sigma q_0}{(4\pi)^2 L} \int \rho^{-2} \exp(-\Sigma\rho) \frac{\exp[-\chi |\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}|]}{|\mathbf{x} - \boldsymbol{\rho}|} d\boldsymbol{\rho}. \quad (162)$$

Нетрудно увидеть, что это решение удовлетворяет условию (158). Решение можно упростить, если воспользоваться хорошо известным Фурье-преобразованием:

$$\frac{1}{4\pi} \int \frac{\exp(-\chi\xi)}{\xi} \exp(i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \frac{1}{k^2 + \chi^2}, \quad (163)$$

$$\frac{\exp(-\chi\xi)}{\xi} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{\exp(-i\mathbf{k}\cdot\xi)}{k^2 + \chi^2} d\mathbf{k}. \quad (164)$$

Подстановка (164) в (162) позволяет провести интегрирование по ρ и одному из углов. После несложных преобразований находим, что

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{\Sigma q_0}{4\pi L} \frac{\exp(-\chi|\mathbf{x}|)}{|\mathbf{x}|} g(\mathbf{x}), \quad (165)$$

где

$$g(\mathbf{x}) = \int_{\Sigma-\chi}^{+\infty} \frac{[1 - \exp(-t|\mathbf{x}|)]}{t(t+2\chi)} dt.$$

В случае слабого поглощения, когда $\Sigma - \chi > 0$, легко вычисляется асимптотика функции $g(\mathbf{x})$ при больших $|\mathbf{x}|$:

$$g(\mathbf{x}) \Big|_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty, \Sigma - \chi > 0} \rightarrow \int_{\Sigma-\chi}^{+\infty} \frac{1}{t(t+2\chi)} dt = \frac{1}{2\chi} \ln \left[\frac{\Sigma + \chi}{\Sigma - \chi} \right]. \quad (166)$$

В области малых $|\mathbf{x}|$ функция $g(\mathbf{x})$ имеет универсальное поведение независимо от знака $(\Sigma - \chi)$:

$$g(\mathbf{x}) = |\mathbf{x}| \{g_0 - \ln[|\mathbf{x}|(\Sigma + \chi)]\} + O(|\mathbf{x}|^2), \quad (167)$$

$$g_0 = \int_1^{\infty} \frac{[1 - \exp(-y)]}{y^2} dy.$$

Для получения этого результата необходимо в выражении для $g(\mathbf{x})$ разбить интервал интегрирования $(\Sigma - \chi, +\infty)$ на две области $(\Sigma - \chi, |\mathbf{x}|^{-1})$ и $(|\mathbf{x}|^{-1}, +\infty)$, в каждой из которых легко найти асимптотическое поведение интеграла при малых $|\mathbf{x}|$.

0.20 Перенос в среде без поглощения и источников

В этом случае уравнение для потока $\phi(\mathbf{x}, t)$ имеет простой вид, совпадающий с уравнением теплопроводности:

$$\frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 n(\mathbf{x}, t), \quad (168)$$

где $D = vL = v/(3\Sigma_s)$. Решение задачи Коши для (168) хорошо известно:

$$n(\mathbf{x}, t) = \int \omega(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t) n(\mathbf{y}, 0) d\mathbf{y}, \quad (169)$$

где

$$\omega(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^2}{4Dt} \right].$$

Функция $\omega(\mathbf{x} | \mathbf{y}, t)$ является ядром оператора эволюции и допускает наглядную интерпретацию на языке случайных блужданий. Ранее было показано, что она определяет вероятность перехода за время t из точки \mathbf{y} в точку \mathbf{x} для гауссовского распределения случайных перемещений. В простейшем случае точечного начального распределения —

$$n(\mathbf{y}, 0) = N \delta(\mathbf{y}) \quad (170)$$

— плотность нейтронов равна

$$n(\mathbf{x}, t) = N (4\pi Dt)^{-3/2} \exp \left[-\frac{\mathbf{x}^2}{4Dt} \right]. \quad (171)$$

Сосредоточенные в начальный момент времени в точке $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ нейтроны со временем диффундируют в остальное пространство и, таким образом, можно говорить о распространении фронта диффузии. Найдем закон его движения из требования, чтобы на фронте односторонний входящий ток был равен нулю:

$$j^{(-)}(|\mathbf{x}| = R(t), t) = 0, \quad (172)$$

Подставляя решение (171) в выражение для тока $j^{(-)}$, получим

$$j^{(-)}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4} \left\{ 1 - \frac{|\mathbf{x}|}{vt} \right\} \phi(\mathbf{x}, t), \quad (173)$$

откуда

$$R(t) = vt. \quad (174)$$

Таким образом, диффузионный фронт — сфера с радиусом $R(t)$, линейно растущим во времени.

Вопросы:

1. Вычислить $n(\mathbf{x}, t)$ и $j^{(-)}(\mathbf{x}, t)$ для начального распределения

$$n(\mathbf{y}, 0) = n_0 \Theta(a - |\mathbf{y}|),$$

где $\Theta(\xi)$ — ступенчатая функция Хевисайда.

0.21 Среда с поглощением при наличии источника без рассеяния

Уравнение диффузии в этом случае вырождается в обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка по времени

$$\frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\Sigma_a v n(\mathbf{x}, t) + Q(\mathbf{x}, t). \quad (175)$$

Его решение находится элементарно:

$$n(\mathbf{x}, t) = n(\mathbf{x}, 0) \exp[-\Sigma_a v t] + \exp[-\Sigma_a v t] \int_0^t Q(\mathbf{x}, \tau) \exp[-\Sigma_a v \tau] d\tau. \quad (176)$$

Здесь предполагается, что при $t < 0$ источников в среде не было. Дальнейшая конкретизация связана с выбором определенной модели источника $Q(\mathbf{x}, t)$.

Содержание ЧАСТИ II лекций посвящено точным моделям теории переноса в приложении к задачам физики космических лучей.

Библиография

- [1] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П., – Физическая кинетика, ”Наука”, Москва, 1979.
- [2] Квасников И.А., – Термодинамика и статистическая физика (Теория неравновесных систем), Изд-во МГУ, Москва, 1987.
- [3] Балеску Р., – Равновесная и неравновесная статистическая механика, ”Мир”, Москва, 1978.
- [4] Чандрасекар Р., – Стохастические проблемы в физике и астрономии, ИЛ, Москва, 1958.
- [5] Смелов В.В., - Лекции по теории переноса нейтронов, ”Атомиздат”, Москва, 1978.
- [6] Белиничер В.И., – Физическая кинетика, Изд-во НГУ, Новосибирск, 1996.
- [7] Коткин Г.Л., – Лекции по статистической физике, Изд-во НГУ, Новосибирск, 1996.