САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ТЕРМОДИНАМИКИ

(вопросы и ответы по курсу лекций для магистрантов физического факультета)

Учебно-методическое пособие

(для студентов физического факультета)

Санкт-Петербург
1999

Авторы-составители: Куни Ф.М., Щёкин А.К.

Рецензент профессор Л.Ц. Аджемян (Санкт-Петербургский государственный университет)

Настоящее пособие содержит вспомогательный материал в виде вопросов и ответов по курсу лекций "Дополнительные главы статистической физики и термодинамики", читаемому на кафедре статистической физики СПбГУ для магистрантов физического факультета.

Пособие позволяет студентам контролировать понимание изучаемого в курсе лекций материала и может быть полезным для всех изучающих статистическую физику и термодинамику и желающих глубже понять сложные и актуальные методы и подходы в этих важных дисциплинах.

Печатается по решению методической комиссии Ученого совета Физического учебно-научного центра Санкт-Петербургского государственного университета

Лицензия ЛР №040050 от 15.08.96

Подписано в печать с оригинала-макета 1.06.99.
Печать офсетная. Ф-т 60х84/16. Усл.печ.л. 2,1.
Усл.-изд.л. 1,85. Тираж 50 экз. Заказ № 153 .

Редакция оперативной подготовки учебно-методических и научных изданий Издательства С.-Петербургского университета. 199034, С-Петербург, Университетская наб., 7/9.

Типография Издательства С.-Петербургского университета. 199034, С-Петербург, Университетская наб., 7/9.

Санкт-Петербургский государственный университет

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И ТЕРМОДИНАМИКИ

(вопросы и ответы по курсу лекций
для магистрантов физического факультета)

Часть I. ВОПРОСЫ [1)]

1. Что понимается в классической теории под динамической зависимостью физической величины от времени?

2. Почему при динамическом развитии во времени физической величины ее зависимость от текущих (в каждый момент времени) значений координат и импульсов частиц остается неизменной?

3. ** Показать справедливость правила соответствия $\frac{i}{\hbar}\left[\hat{Q},\hat{G}\right]\underset{\hbar\to 0}{\longrightarrow}\left\{\hat{Q},\hat{G}\right\}$ на примере, в котором $\hat{Q}=p^2$ и $\hat{G}=f(x)$, где p и x – импульс и координата частицы, а $f(x)$ – некоторая функция от x.

4. ** Показать, что для полной функции распределения $\hat{\rho}(t)$ справедливы $f(\hat{\rho}(t))=e^{-itL}f(\hat{\rho}(0))$ и $f(e^{-itL}\hat{\rho}(0))=e^{-itL}f(\hat{\rho}(0))$, где $f(\hat{\rho}(t))$ – произвольная функция от $\hat{\rho}(t)$ и L – классический оператор Лиувилля.

5. ** Показать, что для статистического оператора $\hat{\rho}(t)$ справедливы $f(\hat{\rho}(t))=e^{-itL}f(\hat{\rho}(0))$ и $f(e^{-itL}\hat{\rho}(0))=e^{-itL}f(\hat{\rho}(0))$, где $f(\hat{\rho}(t))$ –

1) Каждый из вопросов сформулирован замкнуто и независимо от других. В последовательности вопросов нет при этом логической связи. Звездочками и их числом отмечены относительно сложные вопросы. Используются те же обозначения, что и в [1].

произвольная операторная функция от $\hat{\rho}(t)$ и L – квантовый оператор Лиувилля.

6. *** Доказать в классической теории равенство $\frac{d}{dt}\int d\Gamma f\left(\hat{\rho}(t)\right) = 0$, где $f\left(\hat{\rho}(t)\right)$ – функция от полной функции распределения $\hat{\rho}(t)$, меняющейся со временем в замкнутой системе по уравнению Лиувилля.

7. *** Доказать в квантовой теории равенство $\frac{d}{dt}Sp\left[f\left(\hat{\rho}(t)\right)\right] = 0$, где $f\left(\hat{\rho}(t)\right)$ – операторная функция от статистического оператора $\hat{\rho}(t)$, меняющегося со временем в замкнутой системе по уравнению Неймана.

8. * Показать, что при развитии замкнутой системы по классическому уравнению Лиувилля ее средняя энергия остается неизменной.

9. * Показать, что при развитии замкнутой системы по квантовому уравнению Лиувилля ее средняя энергия остается неизменной.

10. * Доказать равенство $\left\langle \hat{Q}(t)\hat{G}^*(t')\right\rangle = \left\langle \hat{Q}(t-t')\hat{G}^*(0)\right\rangle$, выражающее инвариантность относительно сдвига времени.

11. ** Показать, что из $\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle = \left\langle \hat{Q}(\vec{r}-\vec{r}\,')\hat{G}^*(0)\right\rangle$ в координатном представлении следует $\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}}\right\rangle$ в представлении волновых векторов.

12. ** Показать, что при нормировке прямого и обратного преобразований Фурье согласно $f_{\vec{k}} = V^{-1/2}\int d\vec{r}e^{-i\vec{k}\vec{r}}f(\vec{r})$, $f(\vec{r}) = V^{-1/2}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}f_{\vec{k}}$ фурье-образ соотношения $f(\vec{r}) = \int d\vec{r}\,'\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle \varphi(\vec{r}\,')$, где $f(\vec{r})$ и $\varphi(\vec{r}\,')$ – некоторые функции от $\vec{r}$ и $\vec{r}\,'$, имеет при $\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}} \hat{G}^*_{\vec{k}'} \right\rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \left\langle \hat{Q}_{\vec{k}} \hat{G}^*_{\vec{k}} \right\rangle$ вид $f_{\vec{k}} = \left\langle \hat{Q}_{\vec{k}} \hat{G}^*_{\vec{k}} \right\rangle \varphi_{\vec{k}}$.

13. * Найти вклад в производную по времени от средних плотностей сохраняющихся величин $a(t)$, вносимый квазиравновесным распределением.

14. * В чем проявляется термодинамический предельный переход в цепочке зацепляющихся уравнений Боголюбова?

15. *** Для какой одночастичной функции распределения – видовой или родовой – справедливо кинетическое уравнение Больцмана?

16. * Каковы масштабы пространственной неоднородности газа, допускаемые кинетическим уравнением Больцмана?

17. * По истечении какого характерного времени после произвольного начального состояния газа вступает в силу кинетическое уравнение Больцмана?

18. ** Дифференциальное сечение рассеяния $I(g, \theta)$, где g – абсолютная величина относительной скорости двух частиц до их столкновения и θ – угол рассеяния, определяется равенством $I(g, \theta) d\Omega = b db d\varepsilon$, где $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varepsilon$ – элемент телесного угла, в который происходит рассеяние, и b – прицельный параметр. Интегрирование этого равенства по бесконечно большим прицельным параметрам приводит к расходящимся величинам. Почему эти вклады не проявляются в кинетическом уравнении Больцмана?

19. * Объяснить, почему в кинетическом уравнении Больцмана интеграл столкновений не влияет на изменение со временем средних плотностей числа частиц, их энергии и импульса, однако определяет изменение со временем энтропии.

20. ** Что представляют физически кинетическая и гидродинамическая стадии в эволюции газа? Каковы характерные времена установления и развития этих стадий?

21. ** Отличается ли характерное время развития гидродинамической стадии, определяющее быстроту изменения со временем параметров ее сокращенного описания, от характерного времени продолжительности гидродинамической стадии до установления на ней финального состояния равновесия?

22. *** Управляющие уравнения способны описать процесс стремления статистического распределения в замкнутой системе к финальному равновесному распределению. Они, однако, не способны предсказать значения параметров сокращенного описания в финальном равновесном распределении. Как находятся эти значения, и как связаны они с начальным распределением в системе?

23. ** Какую роль играет начальное условие ослабления корреляций в необратимости во времени управляющих уравнений?

24. * В уравнениях линейной неравновесной термодинамики матрица памяти меньше частотной матрицы на порядок по величине малого параметра неравновесной теории. Для возможности рассмотрения матрицы памяти совместно с частотной матрицей нужна тогда весьма высокая точность в нахождении частотной матрицы. Чем обеспечивается эта точность?

25. * Чем можно объяснить, что зависимость равновесных канонического и большого канонического распределений Гиббса от грандиозного количества переменных, характеризующих механическое состояние макроскопического тела, определяется полностью всего лишь температурой тела и соответственно температурой и химическим потенциалом тела?

26. * Привести соображения, показывающие положительную определенность температуры тела (абсолютной). Можно ли показать знакоопределенность химического потенциала тела?

27. Что такое массовая скорость?

28. * Имеет ли значение требование замкнутости системы в утверждении о монотонном возрастании энтропии системы со временем? Что можно сказать о поведении энтропии со временем в незамкнутой системе, способной обмениваться теплом с ее окружением?

29. ** Почему полученные в линейной неравновесной термодинамике линейные соотношения между диссипативными потоками и термодинамическими силами можно применить и к нелинейной неравновесной термодинамике?

30. ** Почему уравнения неравновесной термодинамики, полученные в предположении о замкнутости системы, справедливы и тогда, когда система, как это обычно и бывает реально, способна к обмену массой, энергией и импульсом с ее окружением?

31. * Что такое четные или нечетные по отношению к отражению времени физические величины?

32. * Что представляет собой гипотеза Онсагера и как она обосновывается в неравновесной статистической термодинамике?

33. ** Показать, что на гидродинамической стадии в газах роль радиуса корреляций r_c играет длина свободного пробега частиц газа λ .

34. Применимо ли кинетическое уравнение Больцмана для описания в газах не только кинетической, но и гидродинамической стадии?

35. * Оценить в жидкостях отношение радиуса взаимодействия частиц r_0 к среднему расстоянию между частицами $\bar{r}$. Оценить в газах отношения радиуса взаимодействия частиц r_0 к среднему расстоянию между частицами $\bar{r}$ и к длине свободного пробега частиц λ . Оценить в газах также и отношение $\bar{r}/\lambda$.

36. Что такое в газах длина свободного пробега частиц и время свободного пробега частиц? Чем отличается это время от времени продолжительности парного столкновения частиц?

37. ** Можно ли сделать утверждение о положительной определенности энтропии $\sigma = -\int' d\Gamma \hat{\rho} \ln \hat{\rho}$ в классической статистике, когда полная функция распределения $\hat{\rho}$ зависит континуально от положения в фазовом пространстве системы?

38. Что такое вязкий и тепловой потоки? (достаточно качественного ответа на вопрос).

39. Через какие микроскопические величины позволяет выразить коэффициенты вязкости и коэффициент теплопроводности динамический подход к выводу уравнений неравновесной термодинамики? (достаточно качественного ответа на вопрос).

40. Что представляет собой качественно в методе Энскога–Чепмена начальная и заключительная стадия неравновесного процесса?

41. * Что такое термодинамический предельный переход? Как выделяется в статистической физике система с определенным объемом V и числом частиц N ?

42. Что такое экстенсивные и интенсивные величины в статистической физике?

43. Чем отличается задание статистического ансамбля в квантовой теории от задания статистического ансамбля в классической теории?

44. Что представляют собой чистые и смешанные состояния в квантовой теории? Какова разница между смесью и суперпозицией чистых квантовых состояний?

45. Что представляет собой полное измерение и полный статистический ансамбль в классической и квантовой теориях?

46. Показать на примере кинетической и гидродинамической стадий в газах, что сокращение статистического описания вводится уже не только с самого начала стадии, но происходит дальше и по мере развития стадии.

47. * Как зависит от линейных размеров системы время ее полной релаксации на гидродинамической стадии к финальному состоянию статистического равновесия системы?

48. Объяснить качественно, что такое квазиравновесное состояние в статистической физике?

49. Дать вероятностно-статистическое обоснование квазиравновесного распределения в начальном условии ослабления корреляций.

50. Каковы основные принципы вывода управляющих уравнений?

51. * Сразу ли за начальным условием ослабления корреляций вступают в силу управляющие уравнения?

52. ** Почему термодинамический предельный переход в управляющих уравнениях делается до того, как уменьшается основной малый параметр неравновесной теории и устремляется на бесконечность верхний предел изменения по времени запаздывания?

53. ** В каком порядке по величине малого параметра в слабо неравновесных системах нарушается приближение локального равновесия?

54. *** Можно ли утверждать, что энтропия возрастает не только в замкнутой системе с постоянной ее энергией, но и в открытой системе с постоянной ее средней энергией?

55. *** Получить в линейной термодинамике выражение для коррелятора $\left\langle \hat{a}_{(m)} \hat{a}_{(m')} \right\rangle$, где $\hat{a}_{(m)} = \int d\vec{r} \hat{a}_{(m)\vec{r}}$ и $\hat{a}_{(m')} = \int d\vec{r}\,' \hat{a}_{(m')\vec{r}\,'}$, через термодинамические производные равновесной термодинамики.

56. *** Объяснить, почему в классической (неквантовой) теории, в которой вероятность принципиально не лежит в природе вещей, необходим все же вероятностно-статистический, а не чисто механический, подход к изучению макроскопических систем.

57. Почему в теореме о равенстве производной по времени от среднего значения величины среднему значению производной по времени от величины важно требование, чтобы величина менялась со временем динамически?

58. Почему полная функция распределения остается неизменной вдоль фазовой траектории системы?

59. *** Какое сокращение в статистическом описании состояния газа происходит от начала кинетической стадии до конца гидродинамической стадии?

60. Почему монотонное возрастание энтропии квазистационарного состояния со временем не противоречит тому, что в каждый момент времени энтропия квазистационарного состояния максимальна среди всех энтропий, возможных для системы?

61. Является ли достаточным для равновесного статистического распределения то, что оно не зависит от времени?

62. Показать, что при заданных диагональных элементах статистического оператора $\hat{\rho}$ энтропия $\sigma = -Sp\,\hat{\rho}\ln\hat{\rho}$ максимальна тогда, когда все недиагональные элементы оператора $\hat{\rho}$ равны нулю.

63. Привести примеры возникновения иерархии масштабов времен в развитии системы. Показать, в чем состоит иерархия в этих примерах и чем она вызывается физически.

64. Чем определяется интересный для практики выбор параметров сокращенного статистического описания?

65. Что такое основной малый параметр неравновесной теории и каков он на гидродинамической и кинетической стадиях неравновесного процесса?

66. ** Почему на вязкий и тепловой потоки не влияет градиент плотности числа частиц? Почему вязкий поток полностью определяется градиентом массовой скорости, а тепловой поток полностью определяется градиентом температуры?

67. * Почему вязкий поток, представляющий собой тензор второго ранга, выражается через градиенты составляющих массовой скорости с помощью всего двух скалярных параметров – коэффициентов сдвиговой и объемной вязкости?

68. * Дать физическое истолкование того, что радиус корреляций в газах определяется длиной свободного пробега частиц.

69. * Какая смысловая разница имеется в понятии о взаимодействиях и в понятии о корреляциях? В чем отличие радиуса взаимодействий от радиуса корреляций?

70. Привести примеры широко встречающихся в статистической физике сохраняющихся и несохраняющихся физических величин в замкнутой системе.

71. Плотность какого из потоков сохраняющихся величин обладает тем свойством, что сама является плотностью сохраняющейся величины? Плотность какого из потоков сохраняющихся величин имеет отличное от нуля среднее значение в равновесном состоянии системы?

72. Чем объясняется, что развитие системы по уравнениям неравновесной термодинамики сопровождается ослаблением условий применимости этих уравнений?

73. Что такое статистический вес макроскопического состояния системы?

74. ** Как известно, условие $n r_0^3 << 1$, где n – плотность числа частиц и r_0 – радиус их взаимодействия, означает идеальность газа, т.е. возможность пренебрежения взаимодействием частиц в термодинамических величинах равновесного газа. Является ли существенным взаимодействие частиц газа в кинетическом уравнении

Больцмана, справедливом при соблюдении того же самого условия $n r_0^3 << 1$?

75. * В неравновесных жидкостях и газах существует, в отличие от равновесных жидкостей и газов, дальний порядок. Чем физически объясняется этот дальний порядок, и к каким сложностям приводит он в уравнениях неравновесной статистической термодинамики?

76. * Могут ли быть помимо налагаемых фундаментальными законами сохранения еще и другие жесткие запреты на развитие системы?

77. * Используется ли инвариантность скобок Пуассона относительно канонических преобразований при переходе к явному описанию динамической зависимости физической величины от времени.

78. Чем объясняется нелинейность кинетического уравнения Больцмана при линейности лежащей в его динамической основе цепочки уравнений Боголюбова?

79. Как ведут себя слагаемые в кинетическом уравнении Больцмана при отражении времени?

80. Почему кинетическое уравнение Больцмана не применимо к газу из электрически заряженных частиц?

81. *** Интегрирование по большим промежуткам времени даже и весьма точного уравнения движения может приводить к весьма большим погрешностям. Почему функциональное выражение для двухчастичной функции распределения F_2 через одночастичную функцию распределения F_1, получаемое интегрированием по времени весьма точного при разреженности газа уравнения $\partial F_2 / \partial t + i L_2 F_2 = 0$ (L_2 – двухчастичный оператор Лиувилля), сохраняет точность этого уравнения?

82. *** Можно ли при малости основного параметра неравновесной теории представить эффекты памяти в управляющих уравнениях в формально локальном по времени виде, допускающем постановку задачи Коши к управляющим уравнениям?

83. * В чем состоит квантовый аналог утверждения классической статистики о постоянстве полной функции распределения вдоль фазовой траектории системы?

84. Сформулировать правило соответствия между классической и квантовой статистиками.

85. Какие требования к потенциалу взаимодействия частиц предъявляются в кинетическом уравнении Больцмана?

86. * Какому общему условию должны удовлетворять времена установления и развития стадии неравновесного процесса, чтобы стадия заметно проявлялась в полном неравновесном процессе системы?

87. *** Показать, что соотношение $\rho_s(x_1,\ldots,x_s) = \prod_{i=1}^{s} \rho_1(x_i)$, где $s = 1, 2, \ldots$, $\rho_s(x_1,\ldots,x_s)$ – s-частичная функция распределения, $x_i \equiv \vec{r}_i, \vec{p}_i$ – координаты и импульсы отдельной частицы системы, отвечает максимуму энтропии системы при заданной одночастичной функции распределения.

88. *** Найти выражение для энтропии газа в приближении статистически независимых его частиц через одночастичную функцию распределения. Пояснить размерности величин в этом выражении.

Часть II. ОТВЕТЫ[2)]

3**. Будем в квантовом случае пользоваться координатным представлением, в котором x и $f(x)$ – числовые величины, а импульс p представляет собой оператор – обозначим его через $\hat{p}$, определяемый согласно $\hat{p} = -i\hbar\,\partial/\partial x$. В квантовом случае имеем тогда очевидную цепочку операторных равенств

$$\left[\hat{p}^2, f(x)\right] = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) - f(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + 2\,\frac{\partial f(x)}{\partial x}\,\frac{\partial}{\partial x}\right) =$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + 2\,\frac{\partial f(x)}{\partial x}\,\frac{i}{\hbar}\,\hat{p}\right).$$

Эта цепочка показывает, что $(i/\hbar)\left[\hat{p}^2, f(x)\right] \underset{\hbar \to 0}{\longrightarrow} 2p\,\partial f(x)/\partial x$, где в правой части мы вернулись к прежнему обозначению p импульса частицы. Отсюда уже непосредственно следует искомое соотношение $(i/\hbar)\left[\hat{p}^2, f(x)\right] \underset{\hbar \to 0}{\longrightarrow} \left\{p^2, f(x)\right\}$, поскольку $2p\,\partial f(x)/\partial x = \left\{p^2, f(x)\right\}$ в классическом случае.

4**. Обозначая через f' производную от функции f по ее аргументу, имеем $\partial f(\hat{\rho}(t))/\partial t = f'(\hat{\rho}(t))\,\partial\hat{\rho}(t)/\partial t$. Поскольку L есть оператор дифференцирования первого порядка, то имеем также $Lf(\hat{\rho}(t)) = f'(\hat{\rho}(t))L\,\hat{\rho}(t)$. Сравнивая полученные равенства, учитывая при этом уравнение Лиувилля $\partial\hat{\rho}(t)/\partial t = -iL\,\hat{\rho}(t)$, приходим к $\partial f(\hat{\rho}(t))/\partial t = -iLf(\hat{\rho}(t))$. Интегрируя это по времени, получаем искомое равенство $f(\hat{\rho}(t)) = e^{-itL} f(\hat{\rho}(0))$. Ввиду $\hat{\rho}(t) = e^{-itL}\hat{\rho}(0)$, получаем также и искомое равенство $f\left(e^{-itL}\hat{\rho}(0)\right) = e^{-itL} f(\hat{\rho}(0))$.

[2)] Ответы даны лишь на относительно сложные вопросы.

5**. Используя определение операторной функции, представим $f\left(\hat{\rho}(0)\right)$ в виде разложения по степеням $\hat{\rho}(0)-\hat{\rho}_0$ в круге сходимости разложения. Имеем, очевидно,

$$e^{-it\hat{H}}\left(\hat{\rho}(0)-\hat{\rho}_0\right)^n e^{it\hat{H}} = \left[e^{-it\hat{H}}\left(\hat{\rho}(0)-\hat{\rho}_0\right)e^{it\hat{H}}\right]^n \quad (n = 0, 1, \dots)$$

и, следовательно,

$$e^{-it\hat{H}} f\left(\hat{\rho}(0)\right) e^{it\hat{H}} = f\left(e^{-it\hat{H}}\hat{\rho}(0)e^{it\hat{H}}\right)$$

(используем систему единиц с $\hbar = 1$). Отсюда с учетом того, что в квантовом случае действие оператора e^{-itL} на произвольный оператор $\hat{G}$ определяется согласно $e^{-itL}\hat{G} = e^{-it\hat{H}}\hat{G}e^{it\hat{H}}$, получаем искомое равенство $f\left(e^{-itL}\hat{\rho}(0)\right) = e^{-itL} f\left(\hat{\rho}(0)\right)$. Ввиду $\hat{\rho}(t) = e^{-itL}\hat{\rho}(0)$, получаем также и искомое равенство $f\left(\hat{\rho}(t)\right) = e^{-itL} f\left(\hat{\rho}(0)\right)$. Заметим, что дифференцированием его по времени легко получить еще и $\partial f\left(\hat{\rho}(t)\right)/\partial t = -iL\, f\left(\hat{\rho}(t)\right)$.

6***. Из вывода уравнения Лиувилля ясно, что такое же уравнение справедливо не только для $\hat{\rho}(t)$, но и для произвольной функции $f\left(\hat{\rho}(t)\right)$ от $\hat{\rho}(t)$. Таким образом:

$$\frac{\partial f\left(\hat{\rho}(t)\right)}{\partial t} = -\sum_j \left\{ \frac{\partial}{\partial q_j}\left[\frac{\partial \hat{H}}{\partial p_j} f\left(\hat{\rho}(t)\right)\right] - \frac{\partial}{\partial p_j}\left[\frac{\partial \hat{H}}{\partial q_j} f\left(\hat{\rho}(t)\right)\right]\right\}.$$

Интегрируя это по всему фазовому пространству системы, преобразуя интегралы от полных производных по переменным интегрирования к интегралам по поверхности, пренебрегая затем этими интегралами в силу граничных условий для замкнутой системы, получим $\int' d\Gamma\, \partial f\left(\hat{\rho}(t)\right)/\partial t = 0$. Отсюда и вытекает искомое равенство $(d/dt)\int' d\Gamma f\left(\hat{\rho}(t)\right) = 0$. Заметим, что при $f\left(\hat{\rho}(t)\right) = -\hat{\rho}(t)\ln\hat{\rho}(t)$ из этого равенства следует $d\sigma(t)/dt = 0$, где $\sigma(t) \equiv -\int' d\Gamma\, \hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)$ – энтропия системы, т.е. следует сохранение энтропии замкнутой системы, развивающейся во времени по уравнению Лиувилля.

7***. Представив $f(\hat{\rho}(0))$ согласно определению операторной функции в виде разложения по степеням $\hat{\rho}(0) - \hat{\rho}_0$ в круге сходимости разложения, легко получаем равенство $e^{-it\hat{H}} f(\hat{\rho}(0)) e^{it\hat{H}} = f\left(e^{-it\hat{H}} \hat{\rho}(0) e^{it\hat{H}}\right)$ (используем систему единиц с $\hbar = 1$). Учитывая, что по уравнению Неймана справедливо $\hat{\rho}(t) = e^{-it\hat{H}} \hat{\rho}(0) e^{it\hat{H}}$, представим полученное равенство как $f(\hat{\rho}(t)) = e^{-it\hat{H}} f(\hat{\rho}(0)) e^{it\hat{H}}$. Дифференцируя это по времени, получим уравнение

$$\partial f(\hat{\rho}(t))/\partial t = -i\left(\hat{H} f(\hat{\rho}(t)) - f(\hat{\rho}(t))\hat{H}\right)$$

– такое же, что и уравнение Неймана, но только не для самого оператора $\hat{\rho}(t)$, а для его функции $f(\hat{\rho}(t))$. Применяя к полученному уравнению операцию взятия шпура, используя возможность совершать циклическую перестановку операторных множителей под знаком шпура, имеем $Sp\left[\partial f(\hat{\rho}(t))/\partial t\right] = 0$. Отсюда и вытекает искомое равенство $(d/dt) Sp\left[f(\hat{\rho}(t))\right] = 0$. Заметим, что при $f(\hat{\rho}(t)) = -\hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)$ из этого равенства следует $d\sigma(t)/dt = 0$, где $\sigma(t) \equiv -Sp\left[\hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)\right]$ – энтропия системы, т.е. следует сохранение энтропии замкнутой системы, развивающейся во времени по уравнению Неймана.

8*. Для средней энергии системы $\overline{E}$ в классической теории имеем $\overline{E} = \int' d\Gamma\, \hat{H}\, \hat{\rho}(t)$. Дифференцируя это по t, учитывая уравнение Лиувилля $\partial\hat{\rho}(t)/\partial t = -iL\,\hat{\rho}(t)$, получим

$$d\overline{E}/dt = -i\int{}' d\Gamma\, \hat{H} L \hat{\rho}(t).$$

Используя $L\left(\hat{Q}\hat{G}\right) = \left(L\hat{Q}\right)\hat{G} + \hat{Q}L\hat{G}$ и $L\hat{H} = 0$, имеем тогда

$$d\overline{E}/dt = -i\int{}' d\Gamma\, L\left(\hat{H}\hat{\rho}(t)\right).$$

Оператор L приводит к полным производным по переменным интегрирования. Учитывая, что интеграл от таких производных равен нулю в силу теоремы Гаусса–Остроградского и граничных условий для замкнутой системы, приходим к $d\overline{E}/dt = 0$. Это и есть искомый результат.

9*. Для средней энергии системы $\overline{E}$ в квантовой теории имеем $\overline{E} = Sp\left[\hat{H}\hat{\rho}(t)\right]$. Дифференцируя это по t, учитывая уравнение Лиувилля $\partial\hat{\rho}(t)/\partial t = -iL\hat{\rho}(t)$, получим

$$d\overline{E}/dt = -iSp\left[\hat{H}L\hat{\rho}(t)\right].$$

Используя $L\left(\hat{Q}\hat{G}\right) = \left(L\hat{Q}\right)\hat{G} + \hat{Q}L\,\hat{G}$ и $L\hat{H} = 0$, имеем тогда

$$d\overline{E}/dt = -iSp\left[L\left(\hat{H}\hat{\rho}(t)\right)\right].$$

Оператор L приводит к коммутатору оператора $\hat{H}\hat{\rho}(t)$ с оператором $\hat{H}$. Учитывая возможность совершить циклическую перестановку операторных множителей под знаком шпура, приходим к $d\overline{E}/dt = 0$. Это и есть искомый результат.

10*. При динамическом развитии во времени имеем $\hat{Q}(t) = e^{itL}\hat{Q}(0)$, $\hat{G}(t') = e^{it'L}\hat{G}(0)$. Учитывая самосопряженность оператора L при определении скалярного произведения от $\hat{Q}$ и $\hat{G}$ с помощью $\left\langle \hat{Q}\hat{G}^{*}\right\rangle$ (а также $i^{*} = -i$), приходим к искомому результату $\left\langle \hat{Q}(t)\hat{G}^{*}(t')\right\rangle = \left\langle \hat{Q}(t-t')\hat{G}^{*}(0)\right\rangle$. Проведенные рассуждения сохраняются полностью и при редуцированном развитии во времени, когда $\hat{Q}(t) = e^{it(1-\mathsf{P})L}\hat{Q}(0)$, $\hat{G}(t') = e^{it'(1-\mathsf{P})L}\hat{G}(0)$, поскольку при этом оператор $(1-\mathsf{P})L$ – тоже самосопряженный.

11**. Учитывая преобразование Фурье $f_{\vec{k}} = V^{-1/2}\int d\vec{r}e^{-i\vec{k}\vec{r}}f(\vec{r})$, имеем

$$\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = V^{-1}\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,'e^{-i\vec{k}\vec{r}+i\vec{k}'\vec{r}\,'}\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle.$$

Используя здесь $\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle = \left\langle \hat{Q}(\vec{r}-\vec{r}\,')\hat{G}^*(0)\right\rangle$, а также преобразование Фурье $\hat{Q}(\vec{r}-\vec{r}\,') = V^{-1/2}\sum_{\vec{k}''} e^{i\vec{k}''(\vec{r}-\vec{r}\,')}\hat{Q}_{\vec{k}''}$, получим

$$\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = V^{-3/2}\int d\vec{r}\int d\vec{r}\,'e^{-i\vec{k}\vec{r}+i\vec{k}'\vec{r}\,'}\sum_{\vec{k}''} e^{i\vec{k}''(\vec{r}-\vec{r}\,')}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}''}\hat{G}^*(0)\right\rangle.$$

Выполняя интегрирование по $\vec{r}$ и $\vec{r}\,'$ до суммирования по $\vec{k}''$, учитывая $\int d\vec{r}e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'')\vec{r}} = V\delta_{\vec{k}\vec{k}''}$ и $\int d\vec{r}\,'e^{i(\vec{k}'-\vec{k}'')\vec{r}\,'} = V\delta_{\vec{k}'\vec{k}''}$, имеем тогда

$$\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = V^{1/2}\sum_{\vec{k}''}\delta_{\vec{k}\vec{k}''}\delta_{\vec{k}'\vec{k}''}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}''}\hat{G}^*(0)\right\rangle = V^{1/2}\delta_{\vec{k}\vec{k}'}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*(0)\right\rangle.$$

Отсюда следует $\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = 0$ при $\vec{k} \neq \vec{k}'$. Искомое равенство $\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}}\right\rangle$ тогда очевидно. Заметим, что выбранная нами нормировка прямого и обратного преобразования Фурье не имела значения.

12**. Учитывая преобразование Фурье $f_{\vec{k}} = V^{-1/2}\int d\vec{r}e^{-i\vec{k}\vec{r}}f(\vec{r})$, запишем исходное соотношение $f(\vec{r}) = \int d\vec{r}\,'\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle\varphi(\vec{r}\,')$ как

$$f_{\vec{k}} = V^{-1/2}\int d\vec{r}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\int d\vec{r}\,'\left\langle \hat{Q}(\vec{r})\hat{G}^*(\vec{r}\,')\right\rangle\varphi(\vec{r}\,').$$

Используя здесь обратное преобразование Фурье $\hat{Q}(\vec{r}) = V^{-1/2}\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}}\hat{Q}_{\vec{k}}$ и такое же преобразование для $\hat{G}(\vec{r}\,')$ и $\varphi(\vec{r}\,')$, имеем

$$f_{\vec{k}} = V^{-2}\int d\vec{r}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\int d\vec{r}\,'\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3} e^{i\vec{k}_1\vec{r}-i\vec{k}_2\vec{r}\,'+i\vec{k}_3\vec{r}\,'}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}_1}\hat{G}^*_{\vec{k}_2}\right\rangle \varphi_{\vec{k}_3}\ .$$

Выполняя интегрирование по $\vec{r}$ и $\vec{r}\,'$ до суммирования по $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3$, учитывая $\int d\vec{r}e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_1)\vec{r}} = V\delta_{\vec{k}\vec{k}_1}$ и $\int d\vec{r}\,'e^{-i(\vec{k}_2-\vec{k}_3)\vec{r}\,'} = V\delta_{\vec{k}_2\vec{k}_3}$, получим тогда

$$f_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3}\delta_{\vec{k}\vec{k}_1}\delta_{\vec{k}_2\vec{k}_3}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}_1}\hat{G}^*_{\vec{k}_2}\right\rangle \varphi_{\vec{k}_3}\ ,$$

а ввиду $\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}'}\right\rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}}\right\rangle$, получим также

$$f_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3}\delta_{\vec{k}\vec{k}_1}\delta_{\vec{k}_2\vec{k}_3}\delta_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\left\langle \hat{Q}_{\vec{k}_1}\hat{G}^*_{\vec{k}_2}\right\rangle \varphi_{\vec{k}_3}\ .$$

Отсюда и следует искомое равенство $f_{\vec{k}} = \left\langle \hat{Q}_{\vec{k}}\hat{G}^*_{\vec{k}}\right\rangle \varphi_{\vec{k}}$. Заметим, что выбранная нами нормировка прямого и обратного преобразования Фурье имела значение.

13*. Для средних плотностей сохраняющихся величин $a(t)$ (числа частиц, энергии и импульса) имеем в представлении волновых векторов законы сохранения $\partial a(t)/\partial t = -ik_\beta\left\langle \Delta\hat{j}_\beta\right\rangle^t$. Искомый вклад в производную $\partial a(t)/\partial t$, вносимый квазиравновесным распределением, равен тогда $-ik_\beta\left\langle \Delta\hat{j}_\beta\right\rangle^t_l$. Используя $\left\langle \Delta\hat{Q}\right\rangle^t_l = \left\langle \left(\Delta\hat{Q}\right)\hat{a}^+\right\rangle\cdot\left\langle \hat{a}\hat{a}^+\right\rangle^{-1}\cdot a(t)$, можем представить этот вклад как $-ik_\beta\left\langle \left(\Delta\hat{j}_\beta\right)\hat{a}^+\right\rangle\cdot\left\langle \hat{a}\hat{a}^+\right\rangle^{-1}\cdot a(t)$. Видно, что он как раз и описывается частотной матрицей в уравнениях линейной неравновесной термодинамики (см. уравнения (61.4) и выражение (61.14) из [1]).

14*. В термодинамическом пределе частичные функции распределения ρ_s $(s = 1, 2, \dots)$ ведут себя пропорционально $(N/V)^s$ при $N/V \to 0$. Это имеет решающее значение для существования иерархии временных масштабов в цепочке уравнений Боголюбова при $N/V \to \infty$.

15***. Из вывода кинетического уравнения Больцмана с помощью цепочки уравнений Боголюбова ясно, что это уравнение справедливо для родовой одночастичной функции распределения $\rho_1(\vec{r}, \vec{p}, t)$, нормированной согласно $\int d\vec{r} \int d\vec{p} \rho_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = N$ и обладающей тем смыслом, что $\rho_1(\vec{r}, \vec{p}, t) d\vec{r} d\vec{p}$ есть среднее число каких-либо (не выделенных воображаемой маркировкой) одинаковых частиц газа в элементе $d\vec{r} d\vec{p}$. Нужный для кинетического уравнения Больцмана родовой смысл одночастичной функции распределения виден и из его феноменологического вывода как уравнения баланса числа частиц. Действительно, в этом балансе могут участвовать все, а не какие-то выделенные частицы газа. Перейти в кинетическом уравнении Больцмана от родовой к видовой функции распределения нельзя даже и чисто формально. В самом деле, видовая одночастичная функция в N раз меньше родовой одночастичной функции, и тогда при таком переходе в уравнении Больцмана возник бы, благодаря его нелинейности, множитель N, который бесконечно велик в термодинамическом пределе.

16*. Поскольку основными элементарными актами в кинетическом уравнении Больцмана являются парные столкновения частиц, то для применимости уравнения Больцмана достаточно уже того, чтобы одночастичная функция распределения и потенциал внешнего поля (если оно присутствует) не менялись существенно на расстояниях, на которых происходят парные столкновения частиц, т.е. на расстояниях порядка радиуса взаимодействия частиц.

17*. Из динамического обоснования кинетического уравнения Больцмана с помощью цепочки уравнений Боголюбова видно [1, с.311], что уравнение Больцмана и сама кинетическая стадия вступают в силу уже по истечении характерного времени $r_0/\bar{v}$ (r_0 – радиус взаимодействия частиц, $\bar{v}$ – их средняя тепловая скорость), за которое происходят парные столкновения частиц – основные элементарные акты в кинетическом уравнении Больцмана. Это время не зависит от объема газа и его плотности. Оно весьма мало: $r_0/\bar{v} \sim \left(10^{-12} \div 10^{-13}\right)c$.

18**. При интегрировании по всем телесным углам, а значит, и по всем прицельным параметрам, сечение $I(g, \theta)$ встречается в уравнении Больцмана в виде его произведения с величиной $F_1(\vec{p}_1', t)F_1(\vec{p}_2', t) - F_1(\vec{p}_1, t)F_1(\vec{p}_2, t)$ (см. формулу (77.11) из [1]). При $b \gtrsim r_0$, когда $\vec{p}_1' = \vec{p}_1$ и $\vec{p}_2' = \vec{p}_2$ (столкновения практически не происходят), эта величина обращается в нуль. Сказанное и объясняет, почему в кинетическом уравнении Больцмана не проявляются расходящиеся вклады от интегрирования по бесконечно большим прицельным параметрам b.

19*. В актах парных столкновений частиц сохраняются число частиц, их энергия и импульс. Это и объясняет, почему интеграл столкновений в кинетическом уравнении Больцмана не влияет на изменение со временем средних плотностей числа частиц, их энергии и импульса. Далее, дополнительный к интегралу столкновений "конвективный" член в кинетическом уравнении Больцмана, соответствующий развитию со временем отдельной частицы по одночастичному уравнению Лиувилля, не может менять энтропию, остающуюся постоянной всегда при развитии замкнутой системы по уравнению Лиувилля. Это и объясняет, что ответственность за изменение энтропии со временем ложится в кинетическом уравнении Больцмана только на интеграл столкновений.

20**. Кинетическая стадия в эволюции газа характеризуется тем, что на ней произвольное начальное распределение частиц газа по их скоростям приближается к локальному (в каждой пространственно-временной точке) распределению Максвелла. Гидродинамическая же стадия в эволюции газа характеризуется тем, что на ней локальное распределение Максвелла, достигаемое к концу кинетической стадии, приближается к единому для всего газа финальному распределению Максвелла. Характерные времена установления и развития кинетической стадии равны соответственно $r_0/\bar{v}$ и $\lambda/\bar{v}$ (r_0 – радиус взаимодействия частиц, λ – длина свободного пробега частиц, $\overline{v}$ – их средняя тепловая скорость). Оба времени не зависят от полного объема газа. Поскольку $\lambda \sim 1/n r_0^2$ (n – средняя плотность числа частиц), то отношение времен $r_0/\overline{v}$ и $\lambda/\overline{v}$ равно $n r_0^3$ – основному малому параметру неравновесной теории на кинетической стадии. Характерные времена установления и развития гидродинамической стадии равны соответственно $\lambda/\overline{v}$ и $L/\overline{v}$ (L – масштаб пространственной неоднородности газа). Отношение этих времен равно λ/L – основному малому параметру неравновесной теории на гидродинамической стадии. Время $\lambda/\overline{v}$ развития кинетической стадии совпадает по порядку величины со временем ее продолжительности. Это же время совпадает по порядку величины и со временем установления гидродинамической стадии.

21**. Необратимое стремление на гидродинамической стадии к состоянию полного статистического равновесия газа сопровождается существованием звуковых волн. Как результат, это стремление имеет осцилляционно-затухающий характер. Осцилляции проявляются в первом порядке по малому параметру λ/L на гидродинамической стадии (λ – длина свободного пробега частиц газа, L – масштаб пространственной неоднородности газа). Затухание же проявляется лишь во втором порядке по малому параметру λ/L . Осцилляции, таким образом, происходят в L/λ раз ($L/\lambda >> 1$) быстрее, чем происходит затухание. Они, следовательно, и определяют быстроту изменения со временем параметров сокращенного описания гидродинамической стадии. Характерное время развития гидродинамической стадии задается при этом периодом звуковых колебаний, который по порядку величины равен L/u , где u – скорость звука, имеющая в газе тот же порядок величины, что и средняя тепловая скорость его частиц $\overline{v}$. Определяемое же затуханием характерное время продолжительности гидродинамической стадии (время достижения на ней финального состояния равновесия газа) оказывается соответственно в L/λ раз больше характерного времени L/u развития гидродинамической стадии, т.е. оказывается по порядку величины равным $L^2/u\lambda$. Заметим, что на предшествующей гидродинамической стадии кинетической стадии в газах различия между временем развития стадии и временем продолжительности стадии нет. Оба времени на кинетической стадии по порядку величины равны $\lambda/\bar{v}$.

22***. Вследствие законов сохранения числа частиц, энергии и импульса замкнутой системы, число частиц, энергия и импульс в финальном состоянии равновесия системы оказываются такими же, что и в начальном состоянии системы, когда они определялись заданным начальным распределением в системе. Заданное начальное распределение в системе позволяет, таким образом, найти число частиц, энергию и импульс в финальном состоянии равновесия, а тогда позволяет найти по ним и значения параметров сокращенного описания в финальном равновесном распределении. Нужно, однако, иметь в виду следующее важное обстоятельство. В статистической физике широко используется понятие о "ящике", в который заключается система. Ящик необходим, чтобы можно было говорить об объеме системы V и ее числе частиц N , о термодинамическом предельном переходе. В газах ящик необходим еще и потому, что он сдерживает газ от неограниченного расширения. Создавая пристеночный отталкивательный потенциал, ящик не нарушает сохранения числа частиц и энергии системы, однако, нарушает сохранение ее импульса. В финальном состоянии равновесия системы, в котором плотность массы и массовая скорость однородны по всему объему системы, импульс системы равен произведению массы системы на скорость движения ящика. В системе отсчета, в которой ящик покоится, массовая скорость будет тогда равна нулю. Совместно с законами сохранения числа частиц и энергии системы это и позволяет полностью найти значения всех параметров сокращенного описания в финальном равновесном распределении.

23**. Налагая начальное условие ослабления корреляций и рассматривая в управляющих уравнениях лишь времена, которые по крайней мере на время корреляции больше момента времени, относящегося к начальному условию ослабления корреляций, мы тем самым удерживаем в управляющих уравнениях лишь частные решения уравнения Лиувилля. В этих частных решениях, а следовательно, и в самих управляющих уравнениях уже нарушена свойственная уравнению Лиувилля (и всей механике) симметрия относительно отражения времени. Появляющаяся при этом в управляющих уравнениях "стрела направленности времени из прошлого в будущее" показывает роль начального условия ослабления корреляций в необратимости во времени управляющих уравнений.

24*. Как уже отмечалось при ответе на вопрос 13, частотная матрица в представлении волновых векторов дается выражением $-ik_\beta \left\langle \left(\Delta\hat{j}_\beta\right)\hat{a}^+ \right\rangle \cdot \left\langle \hat{a}\hat{a}^+ \right\rangle^{-1}$. В силу инвариантности относительно пространственного отражения, входящие в это выражение корреляторы фурье-компонент $\Delta\hat{j}_\beta$, $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ будут четными функциями $\vec{k}$. В низшем порядке по величине малого параметра kr_c (r_c – радиус корреляций) неравновесной теории выражение для частотной матрицы может быть записано как $-ik_\beta \left\langle \left(\Delta\hat{j}_{\beta,\vec{k}=0}\right)\hat{a}^+_{\vec{k}=0} \right\rangle \cdot \left\langle \hat{a}_{\vec{k}=0}\hat{a}^+_{\vec{k}=0} \right\rangle^{-1}$, где пренебрегается уже членами порядка $\left(kr_c\right)^3$ и выше. Поправка к этому выражению имеет, таким образом, более высокий порядок малости по величине малого параметра неравновесной теории, чем главный член матрицы памяти. Это и обеспечивает возможность совместного рассмотрения матрицы памяти и частотной матрицы.

25*. Достигаемое в равновесных каноническом и большом каноническом распределениях Гиббса огромное уменьшение параметров сокращенного описания – всего до одного или двух – обязано существованию аддитивных интегралов движения: энергии и числа частиц.

26*. Положительная определенность абсолютной температуры T тела вытекает из выражений для средних в каноническом или большом каноническом ансамблях. Благодаря кинетическим вкладам от высоких скоростей частиц или потенциальным вкладам от отталкивательного керна, функция Гамильтона $\hat{H}$ тела может принимать сколь угодно большие значения. Поскольку в выражения для средних под знаком интегралов по фазовому пространству входит $\exp\left(-\hat{H}/k_B T\right)$ (k_B – постоянная Больцмана), то для сходимости интегралов необходимо $T > 0$. Для химического потенциала тела ограничения на знак нет. Действительно, при сближении частиц тела его функция Гамильтона резко возрастает, так что возможное число частиц тела всегда ограничено и суммы в выражениях для средних в большом каноническом ансамбле при $T > 0$ сходятся при любом вещественном значении химического потенциала тела.

28*. Требование замкнутости системы существенно для утверждения о монотонном возрастании энтропии системы со временем. В незамкнутой же системе, способной обмениваться теплом с окружением, имеется еще и поступление или отвод энтропии извне. Только часть энтропии системы, которая связана с внутренними процессами в системе (с возникновением в ней диссипативных потоков), является при этом монотонно возрастающей со временем.

29**. Ответственным за получение в линейной неравновесной термодинамике линейных соотношений между диссипативными потоками и термодинамическими силами служит условие $r_c/L << 1$, обеспечившее локальный в пространстве и во времени вид этих соотношений (r_c – радиус корреляций, L – масштаб пространственной неоднородности системы). То, что условие $r_c/L << 1$ всегда имеет место на гидродинамической стадии, и объясняет возможность применения линейных соотношений между диссипативными потоками и термодинамическими силами к нелинейной неравновесной термодинамике. Разумеется, при этом коэффициенты в линейных соотношениях становятся уже зависящими от локальных значений термодинамических параметров в пространственно-временной точке, к которой относятся линейные соотношения.

30**. Вследствие своего локального во времени и в пространстве характера, уравнения неравновесной термодинамики формируются уже за времена, оцениваемые как r_c/u (r_c – радиус корреляций, u – скорость звука). Будучи не зависящими от размеров системы, эти времена много меньше растущих неограниченно с увеличением размеров системы времен, за которые система способна обменяться массой, энергией и импульсом с ее окружением. Сказанное и объясняет, почему уравнения неравновесной термодинамики одинаковы и для замкнутых, и для незамкнутых систем. Отсутствие замкнутости системы проявляется при этом лишь в изменении граничных условий для системы на ее поверхности с окружением.

31*. Динамические величины, четные или нечетные по текущим значениям импульсов частиц системы, называются четными или нечетными по отношению к отражению времени.

32*. Согласно гипотезе Онсагера развитие гидродинамических квазиинтегралов движения со временем происходит по тому же закону, что и развитие средних от этих квазиинтегралов, т.е. по уравнениям линейной гидродинамики. Обоснование этой гипотезе можно получить, если начальные условия для уравнений линейной гидродинамики приближенно относить к моменту времени, в который функция распределения была квазиравновесна (подробнее см. [1, с.251, с.252]).

33**. В общем случае газов и жидкостей время установления гидродинамической стадии по порядку величины равно r_c/u (см. формулу (69.7) из [1], u – скорость звука). В случае газов это время, как показывает исследование кинетического уравнения Больцмана, оценивается величиной $\lambda/\bar{v}$ ($\bar{v}$ – средняя тепловая скорость частиц газа). Это же время характеризует и продолжительность в газах кинетической стадии, предшествующей в них гидродинамической стадии. Приравнивая времена r_c/u и $\lambda/\bar{v}$, учитывая, что в газах скорость звука u имеет тот же порядок величины, что и средняя тепловая скорость частиц газа $\bar{v}$, приходим к искомому результату: $r_c \sim \lambda$. Этот результат легко объясняется физически. Сохраняя информацию о своем состоянии на протяжении всего свободного движения, частицы газа передают ее другим частицам лишь после пролета длины свободного пробега.

35*. В жидкостях имеем $\bar{r} \sim 1/n^{1/3}$ $(n = N/V)$. Тогда: $r_0/\bar{r} \sim \left(n r_0^3\right)^{1/3}$. Поскольку в жидкостях $n r_0^3 \sim 1$, то в них $r_0/\bar{r} \sim 1$. В газах справедливо по-прежнему $\bar{r} \sim 1/n^{1/3}$. В них, кроме того, имеем $\lambda \sim 1/n r_0^2$. Тогда: $r_0/\bar{r} \sim \left(n r_0^3\right)^{1/3}$, $r_0/\lambda \sim n r_0^3$ и $\bar{r}/\lambda \sim \left(n r_0^3\right)^{2/3}$. Поскольку в газах $n r_0^3 << 1$, то в них $r_0 << \bar{r} << \lambda$.

37**. Если сделать допущение, что полная функция распределения $\hat{\rho}$ остается неизменной в пределах отдельной ячейки фазового пространства, то тогда операция интегрирования $\int' d\Gamma$ сводится к операции суммирования по фазовым ячейкам. Появляющаяся при этом дискретность позволяет (в согласии с [1, с.49]) утверждать, что $\sigma = -\int' d\Gamma\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \geq 0$, а также позволяет показать соблюдение общего требования к энтропии об ее минимуме в наиболее упорядоченном ансамбле.

38*. Ответ дается формулами (64.6), (64.15) и (64.21) из [1].

39*. Ответ дается формулами (66.2), (66.3), (66.7) и (66.8) из [1].

41*. Термодинамический предельный переход состоит в том, что $V \to \infty$ и $N \to \infty$ при $N/V = \mathrm{const}$. Чтобы выделить систему с определенными V и N , в статистической физике используют понятие о "ящике", в который заключается система. Такой ящик создает отталкивательный пристеночный потенциал, обеспечивающий неизменность V и N .

47*. Поскольку возрастание энтропии, а значит, и необратимое стремление к равновесию проявляются во втором порядке по малому параметру kr_c (k – волновое число, r_c – радиус корреляций), то время релаксации системы на гидродинамической стадии возрастает пропорционально $(kr_c)^{-2}$ при $kr_c \to 0$. Как ясно из условий пространственной периодичности, минимальное значение $k \neq 0$ обратно пропорционально линейному размеру системы. По истечении достаточно большого времени "выживут" лишь гидродинамические моды с наиболее малыми k . Поэтому время полной релаксации системы на гидродинамической стадии будет пропорционально квадрату линейного размера системы.

51*. Управляющие уравнения вступают в силу спустя время корреляции t_c после начального условия ослабления корреляций (подробнее см. [1, с.62]).

52**. По известной теореме Пуанкаре система, имеющая конечную энергию и заключенная в ограниченный объем, должна возвратиться через достаточно большой промежуток времени в сколь угодно малую окрестность почти любого наперед заданного начального состояния. Как показывает грубая оценка, период возврата (цикл Пуанкаре) по порядку величины равен $\exp(N)$ и, следовательно, чрезвычайно велик при большом числе частиц N . Совершая термодинамический предельный переход до того, как уменьшается основной малый параметр неравновесной теории и устремляется на бесконечность верхний предел изменения по времени запаздывания в управляющих уравнениях, мы тем самым исключаем циклы Пуанкаре. Иными словами, делаем период цикла много большим интересующих нас времен порядка характерного времени изменения квазиинтегралов движения, выбранных в качестве параметров сокращенного описания.

53**. В силу инвариантности относительно пространственного отражения, приближение локального равновесия в слабо неравновесных системах нарушается лишь во втором порядке по величине малого в них параметра r_c/L (r_c – радиус корреляций, L – масштаб пространственной неоднородности системы).

54***. Замкнутость системы, а значит, и постоянство ее энергии играют принципиальную роль в утверждении о возрастании энтропии. Утверждать возрастание энтропии в открытой системе при постоянстве ее средней энергии нельзя. Это видно уже из простого примера, в котором открытая система поддерживается в стационарном состоянии. Действительно, при этом средняя энергия системы остается постоянной. При этом, однако, остается постоянной, а отнюдь не возрастает, и ее энтропия.

55***. По формуле (28.30) из [1] имеем $\left\langle \hat{a}_{(m)\vec{r}} \hat{a}_{(m')\vec{r}'} \right\rangle = -\delta A_{(m)\vec{r}} \big/ \delta F_{(m')\vec{r}'}$. Интегрируя это по $\vec{r}$ и $\vec{r}\,'$, учитывая $\hat{a}_{(m)} = \int d\vec{r}\,\hat{a}_{(m)\vec{r}}$, $\hat{a}_{(m')} = \int d\vec{r}\,'\hat{a}_{(m')\vec{r}'}$ и $A_{(m)} = \int d\vec{r} A_{(m)\vec{r}}$, используя операторное тождество $\int d\vec{r}\,'\, \delta/\delta F_{(m')\vec{r}'} = \partial/\partial F_{(m')}$, где $F_{(m')}$ – термодинамические параметры в состоянии равновесия системы, получим искомое выражение $\left\langle \hat{a}_{(m)} \hat{a}_{(m')} \right\rangle = -\partial A_{(m)} \big/ \partial F_{(m')}$, в правой части которого стоят термодинамические производные равновесной термодинамики.

56***. В любом реальном эксперименте свойства макроскопического тела воспринимаются как результат коллективного поведения его частиц сразу за достаточно большой промежуток времени. Только как усредненные за такой промежуток времени и нужно, следовательно, понимать свойства макроскопического тела в каждый "текущий" момент времени. При чрезвычайной сложности и запутанности фазовых траекторий в макроскопической системе практически невозможно тогда говорить об отдельном механическом состоянии системы в текущий (в указанном смысле) момент времени. Практически можно говорить лишь о вероятности нахождения системы в отдельных участках ее фазового пространства, т.е. говорить о статистическом ансамбле механических состояний системы. Это и объясняет необходимость вероятностно-статистического подхода к изучению макроскопических систем в классической теории.

59***. В начале кинетической стадии распределение частиц газа по их скоростям может быть произвольным при каждом положении частиц в пространстве. В конце кинетической стадии распределение частиц газа приближается к локальному (в каждый пространственно-временной точке) распределению Максвелла. Это распределение служит начальным для последующей – гидродинамической стадии. В конце гидродинамической стадии распределение частиц газа приближается к единому для всего газа финальному распределению Максвелла. Видим, таким образом, следующее. На кинетической стадии статистическое описание состояния газа дается одночастичной функцией распределения, зависящей в текущий момент времени от шести переменных – координат и импульсов частицы. На гидродинамической стадии описание состояния газа дается плотностями числа частиц, энергии и импульса, определяющими на этой стадии локальное распределение Максвелла. Хотя указанных плотностей и пять (плотность импульса – векторная величина), однако каждая из них зависит в текущий момент времени уже только от трех переменных – координат пространственной точки, к которой относятся плотности. Происходит, следовательно, весьма значительное сокращение в статистическом описании состояния газа. В конце гидродинамической стадии сокращение в статистическом описании состояния газа достигает своего предела. Оно дается всего пятью числовыми параметрами – одинаковыми во всем газе плотностями числа частиц, энергии и импульса. В отсутствие движения газа как целого, оно дается даже и двумя числовыми параметрами – средним числом частиц и средней энергией системы или, что эквивалентно, химическим потенциалом и температурой системы.

66**. Поскольку плотность потока числа частиц сама есть плотность сохраняющейся величины, то в ней отсутствует вклад от неравновесной добавки к квазиравновесному распределению. И тогда $\hat{I}_{1\beta}(t) = 0$ (см. формулу (61.16) из [1]). Формула (65.10) из [1] дает при этом ответ на первый вопрос. Ответ на второй вопрос дается формулами (65.18) и (65.19) из [1], в которых учтено, что микроскопические аналоги вязкого и теплового потоков не могут коррелировать между собой вследствие их противоположной четности по времени.

67*. Ответ дается в [1, с.268].

68*. Информация о состоянии частицы, в котором она оказалась в результате ее последнего соударения, сохраняется частицей на протяжении всего ее последующего свободного движения вплоть до ее очередного столкновения. Лишь после пролета частицей длины свободного пробега эта информация передается другой частице газа. На длине свободного пробега и проявляется, следовательно, корреляционное влияние одних частиц газа на другие.

69*. Говоря о взаимодействиях, обычно имеют в виду силовое влияние одного физического объекта на другой. Говоря же о корреляциях, обычно имеют в виду вероятностно-статистическое влияние состояния одного физического объекта на состояние другого физического объекта. Конечно, первопричиной корреляций являются силовые взаимодействия. Однако радиус корреляций может во много раз превосходить радиус взаимодействий (см. ответ на вопрос 68).

70*. Примерами сохраняющихся в замкнутой системе величин являются ее полное число частиц (при однокомпонентности системы), энергия и импульс. Примером несохраняющейся в замкнутой системе величины является энтропия. Следует, однако, сделать следующее важное замечание. Чтобы задать объем системы и ее число частиц, необходимо ввести внешнее отталкивательное поле на внешней поверхности системы – поместить систему в "ящик". В присутствии внешнего поля (не зависящего от времени) энергия системы и, конечно, ее число частиц остаются сохраняющимися величинами. Однако импульс системы становится уже не сохраняющейся величиной.

74**. В кинетике газа взаимодействие частиц проявляется полностью посредством столкновений частиц. При разреженности газа, когда $n r_0^3 \ll 1$, взаимодействие проявляется полностью даже и посредством парных столкновений частиц. Исчерпывающей характеристикой таких столкновений служит дифференциальное сечение рассеяния. С его помощью учитывается в кинетическом уравнении Больцмана взаимодействие частиц. Это взаимодействие весьма существенно. Оно вызывает стремление газа к термодинамическому равновесию.

75*. В неравновесных жидкостях и газах присутствуют звуковые возмущения. Вследствие своего волнового характера, эти возмущения приводят к корреляциям, которые с течением времени передаются на все более и более далекие расстояния. Сказанное и объясняет существование дальнего порядка в пространственно-временном поведении плотностей сохраняющихся величин в неравновесных жидкостях и газах. Чтобы при этом обеспечить локальный пространственно-временной характер кинетических коэффициентов в уравнениях неравновесной статистической термодинамики, нужно сформулировать уравнение так, чтобы кинетические коэффициенты в них не содержали вкладов от плотностей сохраняющихся величин – не содержали проекций на гидродинамические квазиинтегралы движения. Эффективный способ преодоления возникающих сложностей дает метод операторов проектирования на гидродинамические квазиинтегралы движения.

76**. Помимо законов сохранения может налагать жесткие запреты на развитие системы еще и ее "неэргодичность". Пример неэргодической системы дают достаточно плотно упакованные бильярдные шары, взаимная перестановка которых невозможна, хотя она и допустима законами сохранения.

77*. Чтобы перейти к явному описанию динамической зависимости физической величины от времени, нужно выразить величину через координаты и импульсы частиц системы в начальный момент времени. Для этого, в свою очередь, нужно перейти в скобке Пуассона в уравнении $d\hat{F}/dt = \left\{\hat{H}, \hat{F}\right\}$ ($\hat{F}$ – физическая величина, $\hat{H}$ – функция Гамильтона) от координат и импульсов частиц системы в текущий момент времени к координатам и импульсам частиц в начальный момент времени. Здесь и используется инвариантность скобок Пуассона относительно канонических преобразований.

81***. Функциональное выражение для F_2 через F_1 формируется [1, с.311] уже на не зависящих от степени разреженности газа временах $r_0/\overline{v}$ (r_0 – радиус взаимодействия частиц, $\overline{v}$ – их средняя тепловая скорость). Эти времена много меньше времен, интегрирование по которым весьма точного при разреженности газа уравнения $\partial F_2 / \partial t + iL_2 F_2 = 0$ могло бы привести к заметным погрешностям. Сказанное и дает ответ на вопрос.

82***. При малости основного параметра неравновесной теории – отношения характерных времен развития быстро и медленно меняющихся величин – можно свести интегралы по времени запаздывания, описывающие эффекты памяти в управляющих уравнениях, к локальным в текущем времени разложениям по этому параметру. Сказанное и показывает возможность представить эффекты памяти в управляющих уравнениях в формально локальном виде, допускающем постановку задачи Коши. Учет эффектов запаздывания путем разложения по основному малому параметру неравновесной теории осуществлялся Боголюбовым в кинетической теории газов [1, с.309].

83*. Квантовым аналогом развивающихся вдоль фазовой траектории системы величин является оператор, отвечающий этим величинам в представлении Гейзенберга. Переход к представлению Гейзенберга достигается, как известно, применением операторов $\exp\left(it\hat{H}/\hbar\right)$ и $\exp\left(-it\hat{H}/\hbar\right)$ соответственно слева и справа к операторам в представлении Шредингера ($\hat{H}$ – гамильтониан системы, $\hbar$ – деленная на 2π постоянная Планка). Учитывая выражение $\hat{\rho}(t) = \exp\left(-it\hat{H}/\hbar\right)\hat{\rho}(0)\exp\left(it\hat{H}/\hbar\right)$ для статистического оператора $\hat{\rho}(t)$ в представлении Шредингера, видим тогда, что в представлении Гейзенберга статистический оператор не меняется со временем. А это и есть искомый квантовый аналог утверждения классической статистики о постоянстве полной функции распределения вдоль фазовой траектории системы.

86*. Нужно, очевидно, чтобы было мало отношение времени установления стадии к времени развития стадии. Поскольку это отношение как раз и определяет основной на стадии параметр неравновесной теории, то его малость равносильна малости основного параметра неравновесной теории.

87***. Вопрос упирается в рассмотрение квазиравновесного распределения в системе, которое обеспечивает максимум энтропии системы при заданных параметрах ее сокращенного описания. Используя определение одночастичной функции распределения $\rho_1(x)$ через полную функцию распределения в системе $\rho(x_1, \ldots x_N)$ (N – число частиц системы), обозначая x_1 через x, учитывая симметрию функции $\rho(x_1, \ldots x_N)$, имеем цепочку равенств

$$\rho_1(x) = \frac{1}{(N-1)!}\int dx_2 \ldots dx_N \rho(x, x_2, \ldots x_N) =$$

$$= \frac{1}{(N-1)!}\int dx_1 \ldots dx_N \delta(x - x_1)\rho(x_1, \ldots x_N) =$$

$$= \frac{1}{N!}\int dx_1 \ldots dx_N \left[\sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)\right]\rho(x_1, \ldots x_N).$$

Видим, что $\rho_1(x) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i) \right\rangle$, где символ $\langle\ \rangle$ означает усреднение по $\rho(x_1, \ldots x_N)$. Таким образом, среднее от величины $\sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)$ при каждом значении переменной x является заданным для квазиравновесного распределения в системе при сокращенном ее описании с помощью одночастичной функции распределения. Переменная x и величина $\sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)$ играют, следовательно, роль индекса m и величины $\hat{A}_m$ в рассуждениях на страницах 52 и 53 из [1]. По формуле (8.3) из [1] имеем тогда для квазиравновесного распределения $\rho_l(x_1, \ldots x_N)$ в системе:

$$\rho_l(x_1, \ldots x_N) = \exp\left[-\Phi - \int dx f(x) \sum_{i=1}^{N} \delta(x - x_i)\right],$$

где постоянная Φ связана с нормировкой распределения, функция $f(x)$ играет роль множителя Лагранжа (зависящего от x). Выполняя интегрирование, представим полученный результат как

$$\rho_l(x_1,\ldots x_N) = \exp(-\Phi)\prod_{i=1}^{N}\exp\left[-f(x_i)\right].$$

Определяя функцию f из условия

$$\frac{1}{(N-1)!}\int dx_2\ldots dx_N\,\rho_l(x_1,\ldots x_N) = \rho_1(x_1),$$

означающего способность квазиравновесного распределения обеспечивать правильную одночастичную функцию распределения, видим, что зависимость $\exp\left[-f(x)\right]$ от x пропорциональна зависимости $\rho_1(x)$ от x. Приходим тогда к

$$\rho_l(x_1,\ldots x_N) = \mathrm{const}\cdot\prod_{i=1}^{N}\rho_1(x_i).$$

При даваемом этим соотношением распределении в квазиравновесном состоянии системы имеем для s-частичной функции распределения

$$\rho_s(x_1,\ldots x_s) = \mathrm{const}\cdot\prod_{i=1}^{s}\rho_1(x_i).$$

Определяя константу из нормировочного условия

$$\int dx_1\ldots dx_s\rho_s(x_1,\ldots x_s) = N!/(N-s)!,$$

учитывая $N!/(N-s)! = N^s$ при $s << N$, приходим к искомому соотношению

$$\rho_s(x_1,\ldots x_s) = \prod_{i=1}^{s}\rho_1(x_i).$$

Заметим, что оно имеет аналогичный вид

$$F_s(x_1,\ldots x_s) = \prod_{i=1}^{s}F_1(x_i)$$

и, будучи записанным через функцию $F_s(x_1,\dots x_s)$, определяемую согласно $\rho_s(x_1,\dots x_s) = n^s F_s(x_1,\dots x_s)$ ($s = 1, 2, \dots$). Именно в таком виде и формулировалось начальное условие ослабления корреляций в динамическом обосновании уравнения Больцмана.

88***. В приближении статистически независимых частиц функция распределения в газе $\rho_N(x_1,\dots,x_N)$ (N – число частиц в газе, $x_i \equiv \vec{r}_i, \vec{p}_i$ ($i = 1,\dots,N$) – координаты и импульсы отдельной частицы в газе) разбивается на произведение $\rho_1(x_1)\dots\rho_1(x_N)$ одночастичных функций распределения. Находя нормировочный множитель перед этим произведением с помощью соотношений нормировки $\int dx_1\dots dx_N \rho_N(x_1,\dots,x_N) = N!$, $\int dx_1 \rho_1(x_1) = N$, имеем

$$\rho_N(x_1,\dots,x_N) = \frac{N!}{N^N}\rho_1(x_1)\dots\rho_1(x_N).$$

Используя приведенные выше соотношения в определении

$$\sigma = -\frac{1}{N!}\int dx_1\dots dx_N \rho_N(x_1,\dots,x_N) \ln \rho_N(x_1,\dots,x_N)$$

энтропии газа σ, напишем цепочку равенств

$$\sigma = -\frac{1}{N^N}\int dx_1\dots dx_N \rho_1(x_1)\dots\rho_1(x_N)\left[\ln\frac{N!}{N^N} + \sum_{i=1}^{N}\ln \rho_1(x_i)\right] =$$

$$= -\frac{1}{N^{N-1}}\int dx_1 \rho_1(x_1)\ln \rho_1(x_1)\int dx_2\dots dx_N \rho_1(x_2)\dots\rho_1(x_N) - \ln\frac{N!}{N^N} =$$

$$= -\int dx_1 \rho_1(x_1)\ln \rho_1(x_1) - \ln\frac{N!}{N^N}.$$

Отсюда и следует ответ на поставленный вопрос. Учитывая формулу Стирлинга $\ln N! = \ln(N/e)^N$ ($N \gg 1$), можем представить полученный результат в виде выражения

$$\sigma = -\int dx_1 \rho_1(x_1) \ln \rho_1(x_1) + N \; ,$$

обычно и используемого при доказательстве *H*-теоремы Больцмана.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Куни Ф.М.* Статистическая физика и термодинамика. М.: Наука, 1981.