Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1972

УДК 536.7

В. В. ФЕДОРОВ

ВЫЧИСЛЕНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ В АДИАБАТИЧЕСКИ ИЗОЛИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Методом ансамблей Гиббса получена точная формула для вычисления флуктуаций в системах, описываемых классическим микроканоническим распределением. Рассмотрены флуктуации в гравитирующем газе.

Статистический подход, основанный на методе Гиббса, есть наиболее последовательный подход к проблеме флуктуаций [1]. Термодинамическая теория флуктуаций ограничивается рассмотрением лишь малых флуктуаций и приближенных соотношений. С помощью метода Гиббса получены точные формулы для флуктуаций термодинамических величин в системах, описываемых каноническим распределением [2 и 3]. Но для микроканонического распределения аналогичные вычисления не проводились.

В случае системы в термостате флуктуации, как известно, вычисляются следующим образом.

Пусть гамильтониан системы есть $H(x, a)$, где a — внешние параметры. В случае канонического распределения, дифференцируя по a выражение для среднего значения динамической величины $u(x, a)$, можно получать соотношение [2], названное Я. П. Терлецким леммой Гиббса:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial a} - \overline{\frac{\partial u}{\partial a}} = -\frac{1}{\theta}\,\overline{(u-\bar{u})\left(\frac{\partial H}{\partial a} - \overline{\frac{\partial H}{\partial a}}\right)}. \tag{1}$$

При помощи леммы Гиббса можно находить флуктуации и корреляции различных величин. Пусть $Q_k(x)$ — обобщенные координаты системы (объем, индукция, число частиц и т. п.) и пусть в направлении этих обобщенных координат действуют соответствующие им постоянные силы a_k (давление, напряженность поля, химический потенциал), так что для гамильтониана системы можно написать

$$H(x, a) = H_0(x) + \sum_k a_k Q_k(x), \tag{2}$$

откуда следует

$$\frac{\partial H(x, a)}{\partial a_k} = Q_k(x). \tag{3}$$

Тогда, используя лемму Гиббса, можно получить известные выражения для корреляции произвольной динамической величины $u(x)$ и обобщенной координаты $Q_k(x)$:

$$\overline{(u-\bar{u})(Q_k-\bar{Q}_k)} = -\theta\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial a_k} - \overline{\frac{\partial u}{\partial a_k}}\right).$$

Если положить $u(x) = Q_k(x)$, то

$$\overline{(Q_k-\bar{Q}_k)^2} = -\theta\frac{\partial\bar{Q}_k}{\partial a_k};$$

т. е. для того, чтобы вычислить флуктуации обобщенной координаты, достаточно знать зависимость среднего этой обобщенной координаты от обобщенной силы. Например, если положить $Q_k=V$, то $a_k=p$, и для флуктуаций объема мы имеем

$$\overline{(V-\bar{V})^2} = -\theta\frac{\partial\bar{V}}{\partial p}. \tag{4}$$

Аналогичным образом вычислим флуктуации в адиабатически изолированной системе, когда энергия системы E сохраняется. Такая система описывается микроканоническим распределением

$$w(x, a) = \frac{1}{\Omega(E, a)}\delta[E-H(x, a)],$$

где $\Omega(E, a)$ находится из условия нормировки:

$$\Omega(E, a) = \int\limits_{(x)}\delta[E-H(x, a)]\,dX.$$

Среднее динамической величины $u(x, a)$ определяется, как обычно:

$$\bar{u}(E, a) = \frac{1}{\Omega(E, a)}\int\limits_{(x)}u(x, a)\,\delta[E-H(x, a)]\,dx. \tag{5}$$

Чтобы найти термодинамические величины в адиабатически изолированной системе, надо знать фазовый объем системы $\Gamma(E, a)$:

$$\Gamma(E, a) = \int\limits_{H(x,a)\leqslant E}dx.$$

Тогда, как известно, энтропия системы S выражается через Γ:

$$S = k\ln\Gamma,$$

а другие термодинамические величины находятся из энтропии:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E},\quad \frac{p}{T} = \frac{\partial S}{\partial V}\ \text{и т. д.} \tag{6}$$

Для дальнейших вычислений понадобятся следующие формулы дифференцирования:

если $\Phi(E, a) = \int\limits_{H(x,a)\leqslant E}\varphi(x)\,dx$, то

$$\frac{\partial\Phi}{\partial E} = \int\limits_{(x)}\varphi(x)\,\delta[E-H(x, a)]\,dx, \tag{7}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a} = - \int\limits_{(x)} \varphi(x) \frac{\partial H}{\partial a} \delta[E - H(x, a)]\, dx. \tag{8}$$

Соотношение (7) выводится в книге Хинчина [4], соотношение (8) получается аналогично.

Флуктуации в адиабатически изолированных системах будем искать аналогично тому, как это делалось в случае канонического распределения. Дифференцируя выражение для $\bar{u}(E, a)$ по параметру a, найдем обобщение леммы Гиббса на случай микроканонического распределения, а затем из леммы Гиббса получим выражение для флуктуаций.

Дифференцируя (5) по параметру a и учитывая (7), получим

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial a} = - \frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Omega}{\partial a} \bar{u} + \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial}{\partial a} \int\limits_{H(x,a) \leqslant E} u(x, a)\, dx. \tag{9}$$

Из равенства

$$\frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial \Gamma}{\partial E} = \frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial \Gamma}{\partial a},$$

учитывая (5), (7) и (8), получим:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial a} = - \frac{\partial}{\partial E} \left(\Omega \frac{\overline{\partial H}}{\partial a} \right). \tag{10}$$

Подставим (10) в (9) и, преобразуя второе слагаемое в (9) по формуле (8), найдем лемму Гиббса в случае микроканонического распределения:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial a} - \overline{\frac{\partial u}{\partial a}} = \frac{1}{\Omega} \bar{u} \frac{\partial}{\partial E} \left(\Omega \frac{\overline{\partial H}}{\partial a} \right) - \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial E} \left(\Omega\, \overline{u \frac{\partial H}{\partial a}} \right). \tag{11}$$

Перепишем лемму Гиббса в виде, удобном для изучения флуктуаций:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial a} - \overline{\frac{\partial u}{\partial a}} = - \frac{1}{\Omega} \frac{\partial}{\partial E} \left[\Omega\, \overline{(u - \bar{u}) \left(\frac{\partial H}{\partial a} - \frac{\overline{\partial H}}{\partial a} \right)} \right] - \frac{\partial \bar{u}}{\partial E} \frac{\overline{\partial H}}{\partial a}. \tag{12}$$

Так же, как и в случае канонического распределения, положим, что u есть обобщенная координата $Q(x)$, и a — обобщенная сила, действующая в направлении обобщенной координаты Q. Тогда, учитывая (3), получим

$$\frac{\partial}{\partial E} [\Omega\, \overline{(Q - \bar{Q})^2}] = - \Omega \left[\frac{\partial \bar{Q}}{\partial a} + \bar{Q} \frac{\partial \bar{Q}}{\partial E} \right]. \tag{13}$$

Таким образом, в отличие от канонического случая, для вычисления флуктуаций в случае микроканонического распределения недостаточно знать зависимость $\bar{Q}(a)$. В этом случае надо знать выражение для $\Omega(E, a)$, т. е. надо знать фазовый объем системы $\Gamma(E, a)$.

Рассмотрим флуктуации объема системы, если система есть идеальный газ. Объем V примем за обобщенную координату, тогда обобщенной силой будет давление p. Из (13) получим

$$\frac{\partial}{\partial E} [\Omega\, \overline{(V - \bar{V})^2}] = - \Omega \left[\frac{\partial \bar{V}}{\partial p} + \bar{V} \frac{\partial \bar{V}}{\partial E} \right]. \tag{14}$$

Для идеального газа фазовый объем известен:

$$\Gamma(E)=\frac{\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)}E^{\frac{3N}{2}}V^N. \tag{15}$$

Из (6) найдем уравнение состояния

$$pV=\frac{2}{3}E, \tag{16}$$

тогда из (14) получим дифференциальное уравнение относительно $\overline{(V-\overline{V})^2}$:

$$\frac{\partial}{\partial E}\left[\Omega\overline{(V-\overline{V})^2}\right]=\frac{\Omega}{2}\frac{\overline{V}^2}{E},$$

решая которое, найдем флуктуации объема:

$$\overline{\left(\frac{V-\overline{V}}{\overline{V}}\right)^2}=\frac{1}{3N-2}.$$

Таким образом, как и в случае канонического распределения,

$$\sqrt{\overline{\left(\frac{V-\overline{V}}{\overline{V}}\right)^2}}\sim\frac{1}{\sqrt{N}}\text{ при } N\to\infty.$$

Применим соотношение (14) к более сложной системе. В работе [5] рассматривались флуктуации гравитирующего газа в предположении, что газ находится в равновесии с термостатом. Потенциальная энергия газа бралась приближенно равной:

$$U=-\alpha\gamma\frac{m^2N^2}{V^{1/3}}, \tag{17}$$

где N — число частиц в системе, m — масса частицы, V — объем системы, γ — гравитационная постоянная, α — числовой множитель порядка единицы, зависящий от геометрического распределения масс.

Это приближение соответствует случаю постоянной плотности и применялось для исследования систем, размеры которых порядка размера Галактики [6, 7].

Тогда, учитывая, что давление P равняется

$$P=\frac{N\theta}{V}-\frac{\partial U}{\partial V},$$

из (4) найдем выражение для флуктуаций объема:

$$\overline{\left(\frac{V-\overline{V}}{\overline{V}}\right)^2}=\frac{1}{N}\left[1-\frac{4}{9}\alpha\gamma\frac{m^2}{\theta V^{1/3}}N\right]^{-1}. \tag{18}$$

Отсюда следует, что для систем галактических размеров вероятность больших флуктуаций не становится исчезающе малой при $N\to\infty$, а, наоборот, может приближаться к единице. Хотя полученная формула является грубо оценочной, она позволяет сделать качественный вывод о возможности относительно больших флуктуаций при достаточно больших размерах системы.

Существенным недостатком полученного выражения для флуктуаций, в гравитирующем газе является то, что оно получено в предположении, что газ находится в равновесии с термостатом. Более реален случай адиабатически изолированной системы гравитирующих частиц. В приближении (17) легко найти фазовый объем такой системы:

$$\Gamma(E)=\frac{\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2}+1\right)}(E-U)^{\frac{3N}{2}}V^N, \tag{19}$$

откуда, используя (6), найдем уравнение состояния:

$$PV=\frac{2}{3}E+\frac{\alpha\gamma}{3}\frac{m^2N^2}{V^{1/3}}. \tag{20}$$

Используя (14) и учитывая, что $E<0$, найдем флуктуации объема:

$$\overline{\left(\frac{V-\bar{V}}{\bar{V}}\right)^2}=-\frac{1}{2(E-U)^{\frac{3N}{2}-1}}\int\frac{(E-U)^{\frac{3N}{2}-1}}{E-\frac{2}{3}U}dE. \tag{21}$$

При $E\to\frac{2}{3}U$ для флуктуации объема адиабатически изолированной системы гравитирующего газа можно написать

$$\overline{\left(\frac{V-\bar{V}}{\bar{V}}\right)^2}\approx-\ln\left(E-\frac{2}{3}U\right). \tag{22}$$

Чтобы сравнить со случаем гравитирующего газа, находящегося в равновесии с термостатом, перепишем (18) в виде

$$\overline{\left(\frac{V-\bar{V}}{\bar{V}}\right)^2}=\frac{1}{N}\left[1+\frac{2}{3}\frac{U}{E-U}\right]^{-1},$$

откуда легко найти, что при $E\to\frac{1}{3}U$

$$\overline{\left(\frac{V-\bar{V}}{\bar{V}}\right)^2}\approx\frac{U}{E-\frac{1}{3}U}. \tag{23}$$

Таким образом, для адиабатически изолированного газа получилось другое значение энергии, при которой возникают большие флуктуации, и другой закон возрастания флуктуаций, но подтвердился качественный вывод о возможности больших флуктуаций в больших системах.

В заключение автор выражает благодарность проф. Я. П. Терлецкому за поставленную тему и постоянное внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гиббс Дж. Основные принципы статистической механики. М., Гостехиздат, 1946.
2. Терлецкий Я. П. Статистическая физика. М., «Высшая школа», 1966.
3. Мюнстер А. В сб.: «Термодинамика необратимых процессов». М.—Л., 1962.

4. Хинчин Л. Я. Математические основания статистической механики. М., Гостехиздат, 1943.
5. Терлецкий Я. П. ЖЭТФ, **22**, 506, 1952.
6. Jeans I. H. Astronomy a. Cosmogony, Cambridge, 1928, p. 337.
7. Лебединский А. И. В сб.: «Вопросы космогонии». М., Изд-во АН СССР, 1954, стр. 113—117.

Поступила в редакцию
8.7 1971 г.

Кафедра
теоретической физики