Доклады Академии наук СССР
1973. Том 212, № 6

УДК 533.70:541.124

ФИЗИКА

Г. А. СКОРОБОГАТОВ, Б. Э. ДЗЕВИЦКИЙ

НЕКОТОРЫЕ СЛЕДСТВИЯ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДЛЯ БОЗОНОВ

(Представлено академиком В. А. Фоком 25 XII 1972)

1. Пусть в объеме V заключен набор некоторых агрегатов (коллоидные частицы, молекулы газа и т. п.) A_i, $i=1, 2, \ldots, N$, одной и той же природы, которые могут отличаться друг от друга по запасу ($A_i \geqslant 0$) некоторой субстанции A. Считаем, что агрегаты имеют не обязательно механическую природу, так что их движение в пространстве—времени может и не описываться какой-либо функцией Гамильтона или Лагранжа. Пусть между агрегатами возможен обмен скалярной субстанцией A:

$$A_{i_1}+A_{i_2}+\ldots+A_{i_\alpha} \to A_{j_1}+A_{j_2}+\ldots+A_{j_\beta}, \qquad (1, \alpha, \beta)$$

где $\alpha=1, 2, \ldots, \Omega$; $\beta=2, 3, \ldots, \omega\,(1)$ для $\alpha=1$; $\beta=1, 2, \ldots, \omega\,(\alpha)$ для $\alpha>1$; $i_1, \ldots, i_\alpha$, $j_1, \ldots, j_\beta$ принимают целочисленные значения от 1 до M.

При достаточно больших N (предположение I) в системе оказывается достаточно много агрегатов с одинаковым запасом субстанции A. Тогда при условии, что вероятность пребывания агрегата в любой части объема V одинакова (предположение II), для любого момента времени t можно ввести понятие концентрации $[A_i]$ агрегатов A_i, $i=1, 2, \ldots, M$. Эволюция концентраций во времени полностью описывается законом действующих масс формальной химической кинетики [1], т. е. феноменологическими уравнениями баланса. Именно, если обозначить через $k(i_1, \ldots, i_\alpha; j_1, \ldots, j_\beta) \geqslant 0$ константу скорости реакции $(1, \alpha, \beta)$ через $\varkappa(i_1, \ldots, i_\alpha; j_1, \ldots, j_\beta) \geqslant 0$ — некоторые линейные функции от констант скорости и через $S(\alpha, \beta)$ — сумму

$$S(\alpha, \beta)=\sum_{i_2=1}^{M}\ldots\sum_{i_\beta=1}^{M}\sum_{j_1=1}^{M}\ldots\sum_{j_\alpha=1}^{M}\{\varkappa(j_1, j_2, \ldots, j_\alpha; i_1, i_2, \ldots, i_\beta)[A_{j_1}]\ldots[A_{j_\alpha}]-$$

$$-\varkappa(i_1, j_2, \ldots, j_\alpha; j_1, i_2, \ldots, i_\beta)[A_{i_1}][A_{j_2}]\ldots[A_{j_\alpha}]\}, \qquad (2)$$

то течение процессов (1) во времени будет описываться на феноменологическом уровне системой дифференциальных уравнений

$$\frac{d[A_{i_1}]}{dt}=\sum_{\alpha=1}^{\Omega}\sum_{\beta=1}^{\omega(\alpha)} S(\alpha, \beta), \quad i_1=1, 2, \ldots, M, \qquad (3)$$

с начальными условиями $[A_i]=A_{i0}$ при $t=t_0$, причем всегда $S(1, 1)=0$.

Пусть свойства агрегатов таковы, что их запас субстанции A либо может принимать все действительные значения от $A_{\min}$ до $A_{\max}$ (предположение III), либо пробегает дискретный ряд значений, но этот ряд так плотен, что с большой точностью можно принять предположение III. Тогда возможно ввести неотрицательную гладкую и интегрируемую по x на отрезке $(-\infty, \infty)$ крупноструктурную функцию распределения $f(x, t)$, так что имеет смысл понятие концентрации агрегатов, обладающих в момент времени t запасом субстанции A от x до $x+\Delta x$ (эта концентрация равна $f(x, t)\Delta x$). При этом система уравнений (3) остается в силе, если в ней в качестве концентраций использовать величины $f(x, t)\Delta x$. При достаточно мелких частичных отрезках Δx, но и не таких мелких, чтобы потеряло смысл понятие концентрации $f(x, t)\Delta x$ («грубозернистая структура»), систему (3) в силу интегрируемости $f(x, t)$ можно с достаточной точностью представить одним интегродифференциальным уравнением

$$\frac{\partial f(x_1, t)}{\partial t} = \sum_{\alpha=1}^{\Omega} \sum_{\beta=1}^{\omega(\alpha)} I(\alpha, \beta), \quad f(x_1, t) = f_0(x_1) \text{ при } t = t_0, \tag{4}$$

где аналогично (2) использовано обозначение

$$I(\alpha, \beta) = \int dx_2 \dots dx_\beta \int [\varkappa(y_1, y_2, \dots, y_\alpha;\ x_1, x_2, \dots, x_\beta) f(y_1, t) \dots f(y_\alpha, t) - \\ -\varkappa(x_1, y_2, \dots, y_\alpha;\ y_1, x_2, \dots, x_\beta) f(x_1, t) f(y_2, t) \dots f(y_\alpha, t)] dy_1 \dots dy_\alpha, \tag{5}$$

причем всегда $I(1, 1) = 0$. В (5) $\varkappa \geqslant 0$ являются интегрируемыми функциями своих аргументов, не зависящими от порядка аргументов внутри каждой группы (до и после знака ;):

$$\varkappa(x_1, x_2, x_3, \dots, x_\alpha;\ y_1, \dots) = \varkappa(x_2, x_1, x_3, \dots, x_\alpha;\ y_1, \dots) = \dots \tag{6}$$

Если из процессов (1) могут протекать только те, при которых число агрегатов не меняется, то при $\alpha \neq \beta$ всегда $S(\alpha, \beta) = 0$ или $I(\alpha, \beta) = 0$ и уравнение (4) упрощается:

$$\frac{\partial f(x_1, t)}{\partial t} = \sum_{\alpha=2}^{\Omega} I(\alpha, \alpha). \tag{7}$$

Нетрудно видеть, что пространственно-однородное уравнение Больцмана в пространстве энергий имеет вид (7) для $\Omega = 2$. Таким образом, кинетические уравнения физики типа уравнения Больцмана, т. е. уравнения для грубозернистых функций распределения, носят существенно характер уравнений баланса ([1]), в которых все, что идет от механики, оказывается включенным в конкретный вид функции $\varkappa$. Например, закон сохранения субстанции A, принцип детального равновесия ([2]) и симметричность взаимодействий в процессах $(1, \alpha, \alpha)$ проявляются тем, что функции $\varkappa$ обладают соответственно свойствами

$$\varkappa(x_1, \dots, x_\alpha;\ y_1, \dots, y_\alpha) = \delta(y_1 + \dots + y_\alpha - x_1 - \dots - x_\alpha) \lambda(x_1, \dots, x_\alpha;\ y_2, \dots, y_\alpha), \tag{8}$$

$$\varkappa(x_1, \dots, x_\alpha;\ y_1, \dots, y_\alpha) = \varkappa(-y_1, \dots, -y_\alpha;\ -x_1, \dots, -x_\alpha), \tag{9}$$

$$\varkappa(-x_1, \dots, -x_\alpha;\ -y_1, \dots, -y_\alpha) = \varkappa(x_1, \dots, x_\alpha;\ y_1, \dots, y_\alpha). \tag{10}$$

Итак, вид функций $\varkappa$ в кинетических уравнениях (7) несет информацию непосредственно о природе элементарных процессов (1). Учитывая это замечание, применим формально-кинетический подход к анализу квантового уравнения Больцмана для бозонов ([3]):

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1, t)}{\partial t} = \int \delta(p_1'^2 + p_2'^2 - p_1^2 - p_2^2) \delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \lambda(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2;\ p_{11}', p_{12}') \times \\ \times \{f(\mathbf{p}_1', t) f(\mathbf{p}_2', t) \cdot [1 + sf(\mathbf{p}_1, t)][1 + sf(\mathbf{p}_2, t)] - f(\mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{p}_2, t) \times \\ \times [1 + sf(\mathbf{p}_1', t)][1 + sf(\mathbf{p}_2', t)]\} d^3\mathbf{p}_2\, d^3\mathbf{p}_1'\, d^3\mathbf{p}_2' \tag{11}$$

где $s = (2\pi\hbar)^3 (2S+1)^{-1}$.

Нетрудно видеть, однако, что (11) не имеет канонического вида (7). В то же время уравнение (11) справедливо лишь в термодинамическом пределе и записано для крупноструктурной функции распределения

$f(\mathbf{p}, t)$ ([4]), а потому должно иметь природу уравнений баланса. Для разрешения этого противоречия рассмотрим один частный случай процессов $(1, \alpha, \beta)$.

2. Пусть в некоторой системе протекают только двух- и трехчастичные процессы $(1, 2, 2)$ и $(1, 3, 3)$, а в качестве субстанции A выступает импульс частиц. Изложенный в п. 1 формализм сохранится, если тройки индексов i, j или тройки переменных x, y в (1)–(10) считать составляющими трехмерных векторов. В рассматриваемом случае (3) запишется так:

$$\frac{d[A_\mathbf{i}]}{dt} = \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{j}=1}^{M} \{\varkappa(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \mathbf{i}, \mathbf{j})[A_\mathbf{p}][A_\mathbf{q}] - \varkappa(\mathbf{i}, \mathbf{j}; \mathbf{p}, \mathbf{q})[A_\mathbf{i}][A_\mathbf{j}]\} +$$

$$+ \sum_{\mathbf{j},\mathbf{l},\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{r}=1}^{M} \{\varkappa(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}; \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{l})[A_\mathbf{p}][A_\mathbf{q}][A_\mathbf{r}] - \varkappa(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{l}; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r})[A_\mathbf{i}][A_\mathbf{j}][A_\mathbf{l}]\}, \tag{12}$$

где $\varkappa(\mathbf{i}, \mathbf{j}; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \nu k(\mathbf{i}, \mathbf{j}; \mathbf{p}, \mathbf{q})$, $\varkappa(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{l}; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}) = \mu k(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{l}; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r})$, причем $\nu = {}^1/_2$ для $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$, $\mathbf{p} \neq \mathbf{q}$; $\nu = 1$ для $\mathbf{i} = \mathbf{j}$, $\mathbf{p} \neq \mathbf{q}$; $\nu = 2$ для $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$, $\mathbf{p} = \mathbf{q}$; $\mu = {}^1/_{12}$ для $\mathbf{i} \neq \mathbf{j} \neq \mathbf{l}$, $\mathbf{p} \neq \mathbf{q} \neq \mathbf{r}$; и т. д., а компоненты трехмерного вектора $\mathbf{i}$ пробегают значения от 1 до M.

Уравнение (7), соответствующее системе (12), будет иметь вид

$$\partial f(\mathbf{p}_1, t)/\partial t = \int_{-\infty}^{\infty} [\varkappa(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2'; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) f(\mathbf{p}_1', t) f(\mathbf{p}_2', t) -$$

$$- \varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2') f(\mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{p}_2, t)] d^3\mathbf{p}_2\, d^3\mathbf{p}_1'\, d^3\mathbf{p}_2' +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} [\varkappa(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_3'; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) f(\mathbf{p}_1', t) f(\mathbf{p}_2', t) f(\mathbf{p}_3', t) -$$

$$- \varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_3') f(\mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{p}_2, t) f(\mathbf{p}_3, t)] d^3\mathbf{p}_2\, d^3\mathbf{p}_3\, d^3\mathbf{p}_1'\, d^3\mathbf{p}_2'\, d^3\mathbf{p}_3'. \tag{13}$$

Пусть функции $\varkappa$ обладают следующими свойствами:

$$\varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2') = \delta(p_1'^2 + p_2'^2 - p_1^2 - p_2^2)\, \delta(\mathbf{p}_1' + \mathbf{p}_2' - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\, \lambda(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_{11}', \mathbf{p}_{12}'), \tag{14}$$

$$\varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2') = \varkappa(\mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2'; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2), \tag{15}$$

$$\varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2', \mathbf{p}_3') =$$

$$= \sum_{\{i,j,k\}} \sum_{\{l,m,n\}} \delta(\mathbf{p}_l' - \mathbf{p}_i)\, \delta(\mathbf{p}_m' - \mathbf{p}_i) \frac{\beta(\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k; \mathbf{p}_m', \mathbf{p}_n') + \beta(\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k; \mathbf{p}_l', \mathbf{p}_n')}{6} \tag{16}$$

$$\beta(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2') \equiv s\varkappa(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{p}_1', \mathbf{p}_2'), \quad s > 0, \tag{17}$$

где $\lambda \geqslant 0$, δ – дельта-функция Дирака и $\{i, j, k\}$, $\{l, m, n\}$ означают циклическую перестановку $\{1, 2, 3\}$.

Свойство (14) – это закон сохранения энергии и импульса в процессах $(1, 2, 2)$ обмена импульсами между частицами; (15) – сумма свойств (9), (10) для процессов $(1, 2, 2)$. Далее, (16) при выполнении (17) обладает свойством типа (6), т. е. является настоящей формально-кинетической константой скорости реакции. Свойства (16), (17) означают, что мы рассматриваем только такие тройные столкновения $(1, 3, 3)$, в результате которых конечные импульсы и энергии каждой из двух среди трех столкнувшихся частиц оказываются равными исходному импульсу и энергии какой-либо (с одинаковой вероятностью) одной частицы из столкнувшейся тройки. Из свойств (16), (17) вытекает, что в рассматриваемых трехчастичных процессах (1, 3, 3) закон сохранения энергии и импульса выполняется. Соблюдается также свойство симметрии (10), но (9) не выполняется. Однако это не приводит к какому-либо противоречию, так как принцип детального равновесия эквивалентен симметрии функционала (3) на стр. 123 в ([2]), а для нашего взаимодействия (1, 3, 3) такой функционал не существует (из-за несиловой природы взаимодействия (1, 3, 3) со свойствами (16), (17)).

Подстановка (15)—(17) в (13) после ряда преобразований дает

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1,t)}{\partial t}=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\varkappa(\mathbf{p}_1',\mathbf{p}_2';\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2)\{f(\mathbf{p}_1',t)f(\mathbf{p}_2',t)[1+sf(\mathbf{p}_1,t)+sf(\mathbf{p}_2,t)]-$$

$$-f(\mathbf{p}_1,t)f(\mathbf{p}_2,t)[1+sf(\mathbf{p}_1',t)+sf(\mathbf{p}_2',t)]\}d^3\mathbf{p}_2\,d^3\mathbf{p}_1'\,d^3\mathbf{p}_2'. \qquad (18)$$

Подставляя (14) в (18) и группируя члены, получим окончательно (11).

Можно показать, что единственным неотрицательным и интегрируемым в интервале $(-\infty,\infty)$ стационарным решением уравнения (11) является $f(\mathbf{p})=s^{-1}\left[\exp\left(\frac{(\mathbf{p}-m\mathbf{v}_0)^2}{2mT}-\frac{\mu}{T}\right)-1\right]^{-1}$, где μ — химический потенциал, которое совпадает с функцией распределения в случае статистики Бозе — Эйнштейна ([3]) для частиц со спином S, если положить $s=(2S+$ $+1)^{-1}(2\pi\hbar)^3$.

Таким образом, мы доказали теорему (т е о р е м а β) о том, что *поведение достаточно многочисленного набора одинаковых частиц, вступающих между собой в двух- и трехчастичные взаимодействия* (1, 2, 2), (1, 3, 3) *с константами скорости вида* (14)—(17), *описывается бозонным квантово-механическим уравнением Больцмана.*

Наоборот, поскольку последнее имеет природу уравнений баланса, то методом от противного можно доказать о б р а т н о е у т в е р ж д е н и е: *из вида* (11) *следует, что все бозоны обладают способностью к особому несиловому* (*т. е. не представимому функцией Гамильтона*) *трехчастичному взаимодействию* (1, 3, 3), *описываемому функциями* (16), (17) *со значением* $s=(2\pi\hbar)^3(2S+1)^{-1}$.

Сколь реально существование трехбозонных процессов (1, 3, 3) со свойствами (16), (17)? Наши рассуждения аналогичны рассуждениям Эйнштейна, который, исходя из распределения Планка, получил новую, ранее неизвестную информацию о взаимодействии излучения с веществом, сделав вывод о способности атомов к стимулированному излучению. Точно так же и мы, но только в нестационарном случае, исходя из кинетического уравнения Больцмана для бозонов, получаем новую информацию и делаем вывод о существовании у всех бозонов неклассического трехчастичного «стимулированного рассеяния» со свойствами (16), (17), являющегося следствием обменного взаимодействия.

В заключение приносим глубокую благодарность М. А. Листенгартену, Ф. М. Куни и Ю. Н. Демкову за стимулирующие дискуссии и ценные замечания.

Ленинградский государственный университет
им. А. А. Жданова

Поступило
13 XII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Г. А. Скоробогатов, Б. Э. Дзевицкий, ЖФХ, 47, 566 (1973). [2] Ю. Н. Демков, Вариационные принципы в теории столкновений, М., 1958. [3] К. П. Гуров, Основания кинетической теории, «Наука», 1966. [4] С. Фудзита, Введение в неравновесную квантовую статистическую механику, М., 1969.