Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. Л. Климонтович, К работе Р. Л. Стратоновича “Цепочка уравнений ББГКИ для бимолекулярных химических реакций”, *ТМФ*, 1997, том 111, номер 2, 179–181

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1000>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.6.47.48

26 апреля 2023 г., 17:01:49

Ю. Л. Климонтович*

К РАБОТЕ Р. Л. СТРАТОНОВИЧА
“ЦЕПОЧКА УРАВНЕНИЙ БГКИ ДЛЯ
БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ”

13 января 1997 г. скоропостижно скончался один из самых ярких ученых современности и замечательный человек Руслан Леонтьевич Стратонович.

Я познакомился с ним в 1955 г., когда на семинаре кафедры физики колебаний физического факультета Московского университета он докладывал результаты своей кандидатской диссертации. Она была посвящена в большой мере теории флуктуаций в автоколебательных системах. Меня поразила глубина его познаний, легкость, с которой он разбирал самые сложные вопросы теории и эксперимента. После семинара состоялась моя первая с ним научная беседа. Она продолжалась в течение долгого пешего пути от университета до Малой Бронной, где он в то время жил.

Результаты диссертации легли в основу его первой монографии “Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике”. Она была опубликована в 1961 г., переведена на английский язык и неоднократно издавалась за рубежом. По широте охвата материала, по оригинальности она не имела в то время себе равных в литературе. Во многом он опередил своих современников на несколько десятилетий. Эта книга до сих пор остается непревзойденной.

Диапазон научных интересов Руслана Леонтьевича удивительно широк – от теории колебаний и теории информации до теории квантовых измерений, от термодинамики до самых тонких вопросов теории стохастических процессов и статистической физики. Математики знают, сколь легко и глубоко он владел математическим аппаратом.

В последние годы он увлекался вопросами квантовой теории измерений и опубликовал на эту тему ряд интересных статей. В то же время он выполнил ряд очень сложных и глубоких исследований по кинетической теории систем с химическими реакциями [1–3]. Последняя работа из этой серии и публикуется в настоящем выпуске ТМФ. В связи с этой публикацией уместно сказать несколько слов и о других работах этой серии.

Известен ряд статей и монографий, в которых газы с химическими реакциями описываются на основе кинетического уравнения с учетом неупругих процессов (см. [4]). Однако статистическая теория, позволяющая дать вывод кинетических уравнений для газов и плазмы с учетом химических реакций, стала развиваться сравнительно недавно [5–11]. В этих работах на основе обратимых уравнений механики частиц и уравне-

* Физический факультет Московского государственного университета, Москва, Россия;
e-mail: ylklim@hklm.phys.msu.su

ний микроскопического поля был дан вывод необратимых кинетических уравнений для функций распределения переменных всех компонентов химически реагирующих газов и плазмы.

Так, в книге автора [5] впервые было дано систематическое изложение кинетической теории частично ионизованной плазмы. В ней в поляризационном приближении установлены кинетические уравнения для функций распределения электронов, ионов и атомов, а также дана полная классификация и установлена структура всех (по восемь в каждом уравнении) интегралов столкновений с учетом, в частности, процессов ионизации и рекомбинации. Было показано, что в рассматриваемом поляризационном приближении для частично ионизованной плазмы справедлива H -теорема.

Метод описания неравновесных процессов в плазме с учетом неупругих столкновений лег в основу дальнейших исследований [6–8].

В работах [9–11] при тех или иных существенных ограничениях H -теорема была доказана и для химически реагирующих газов. В работе Руслана Леонтьевича [1] впервые было дано наиболее общее доказательство этой теоремы с учетом процессов ассоциации и спонтанной диссоциации. Развитый в работе [1] метод открыл возможность рассмотрения этих процессов не только для модели Больцмана, но и в рамках более общей теории Боголюбова.

В работе [1] учет связанных состояний осуществлен в рамках весьма оригинальной классической модели. Работа [2] посвящена доказательству H -теоремы для более общего случая. Именно внутренние состояния молекул являются квантовыми, а координаты и импульсы их центров масс являются квазиклассическими переменными.

Наконец, в последней работе цикла [3], посвященного доказательству H -теоремы, дано наиболее общее квантовое решение этого вопроса на примере бимолекулярной реакции. Развитый метод доказательства применим и к более сложным реакциям.

Обратимся теперь к работе Руслана Леонтьевича, которая публикуется в настоящем выпуске журнала ТМФ. Отправным пунктом в ней служит классическая работа Н. Н. Боголюбова “Методы динамической теории в статистической физике”, которая была опубликована в 1946 г. Исходным в этой работе является динамическое обратимое уравнение Лиувилля. На его основе установлена знаменитая цепочка зацепляющихся уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (система уравнений ББГКИ). Было показано, как на основе уравнения Лиувилля при тех или иных приближениях можно получить основные уравнения кинетической теории газов и плазмы – уравнения Больцмана, Ландау и Власова.

В квантовой теории аналогичные уравнения были установлены в работах Боголюбова и Гурова. Исходными служили уравнение для матрицы плотности системы и соответствующая цепочка уравнений для последовательности одночастичной, двухчастичной и более сложных матриц плотности.

В работе Р. Л. Стратоновича, публикуемой в настоящем выпуске журнала ТМФ, решена очень трудная задача установления вида цепочки уравнений ББГКИ для химически реагирующих газов с бимолекулярными реакциями. Это открывает возможность для наиболее общего вывода кинетических уравнений.

Вывод кинетических уравнений начинается с простейшего случая, когда имеются только две молекулы. Тогда без учета химических превращений для плотностей распределения двухатомных молекул справедливы уравнения Лиувилля (3.3), (3.4). С учетом химических превращений они заменяются уравнениями (3.12а), (3.12б).

Далее подобным же образом цепочка уравнений ББГКИ (4.1) без учета химических превращений обобщается при учете бимолекулярных реакций.

Наконец, рассматривается еще более сложная задача построения уравнений для функций распределения субмолекул. В результате решается основная задача работы – вывод кинетических уравнений для одномолекулярных распределений.

Чтение работ Р.Л. Стратоновича, в частности его последней работы, не является легким занятием. Даже простое воспроизведение полученных им результатов требует от читателя высокой математической и физической подготовки. При чтении возникает много вопросов, которые, к великому сожалению, мы уже не можем задать автору.

При жизни Руслана Леонтьевича я старался не докучать ему своими научными проблемами, поэтому виделись мы не так уж часто. Однако сама потенциальная возможность обращения к нему стимулировала преодоление возникающих вопросов. С уходом Руслана Леонтьевича из жизни мы лишились такой возможности. Это существенно обедняет нашу жизнь и делает ее более трудной. Теперь в еще большей мере мы должны полагаться на собственные силы.

Список литературы

- [1] Р.Л. Стратонович. ЖЭТФ. 1990. Т. 98. С. 1233.
- [2] Р.Л. Стратонович. ЖЭТФ. 1992. Т. 101. С. 838.
- [3] Р.Л. Стратонович. ЖЭТФ. 1994. Т. 106. С. 753.
- [4] Д. Гиршфельдер, Ч. Кертис, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
- [5] Ю.Л. Климонтович. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980.
- [6] Yu. L. Klimontovich, D. Kremp. Physica A. 1981. V. 109. P. 517.
- [7] Yu. L. Klimontovich, D. Kremp, W. Kraeft. Adv. Chem. Phys. 1987. V. 58. P. 175.
- [8] Ю.Л. Климонтович, Х. Вильгельмссон, И. П. Якименко, А. Г. Загородний. Статистическая теория плазменно-молекулярных систем. М.: Изд-во МГУ, 1990.
- [9] Б. В. Алексеев. Математическая кинетика разреженных газов. М.: Наука, 1982.
- [10] Е. Г. Колесниченко. Кинетические уравнения теории химически реагирующих газов. М.: Изд-во МГУ, 1983.
- [11] Л. С. Полак, А. В. Хачоян. Хим. физика. 1983. Вып. 7. С. 896.

Поступила в редакцию 13.II.1997 г.