

Linjie Donglixue De Lilun Fenxi

● 刘翠梅 著

临界动力学的 理论分析

中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press

临界动力学的理论分析

刘翠梅 著

中国矿业大学出版社

内 容 简 介

本书全面系统地论述了动力学临界现象,深入研究了系统在临界点附近发生的非平衡现象.研究中具体包括非平衡相变的临界标度理论和普适性、Glauber 动力学和 Kawasaki 动力学、动力学标度假设和重整化群方法、动力学临界指数、多自旋跃迁临界动力学、钻石型等级晶格上 Glauber-Ising 模型的临界动力学、交替相互作用 Gauss 模型的临界动力学以及描述动力学性质的各类物理量.介绍了研究临界动力学的基本理论方法,包括平均场近似、标度分析、重正化群、统计模型精确解、级数展开及计算机数值模拟等.

本书可作为高等院校物理学专业高年级大学生和研究生的教学参考书,也可供有关教师和理论物理、凝聚态物理工作者和科技人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

临界动力学的理论分析/刘翠梅著. —徐州:中国矿业
大学出版社,2007.8

ISBN 978 - 7 - 81107 - 673 - 8

I. 临… II. 刘… III. 临界点—动力学—理论研究
IV. O313

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 123187 号

书 名 临界动力学的理论分析

著 者 刘翠梅

责任编辑 王江涛

责任校对 张海平

出版发行 中国矿业大学出版社

(江苏省徐州市中国矿业大学内 邮编 221008)

网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail cumtpvip@cumtp.com

排 版 中国矿业大学出版社排版中心

印 刷 徐州中矿大印发科技有限公司

经 销 新华书店

开 本 850×1168 1/32 印张 7.875 字数 203 千字

版次印次 2007 年 8 月第 1 版 2007 年 8 月第 1 次印刷

定 价 27.00 元

(图书出现印装质量问题,本社负责调换)



刘翠梅 1962年生，河南省夏邑县人。现任商丘师范学院物理与信息工程系副教授，主要从事一般力学和相变理论的研究。2006年获河南省教学标兵称号，2006年获河南省教学技能大赛一等奖。出版专著1部，主编、参编教学用书2部，主持省级科研项目3项，参加国家级科研项目2项，发表学术论文20余篇。

前 言

临界动力学研究系统在临界点附近发生的非平衡现象,即在临界点附近系统由非平衡态向平衡态的过渡过程。与平衡态情况相比,在临界点附近,自然界会呈现出许多复杂而有趣的非平衡现象,像扩散、波的传播、阻尼、中子和光子的弹性散射等。在这些现象中,描写动力学性质的物理量,如输运系数、弛豫率、多时关联函数以及对时间有关的微扰的响应函数等,均呈现发散状态。所有这些,都可以在实验中进行检测。临界动力学就是从理论上研究上面这些现象的。具体说来就是建立一些理论模型,对模型进行求解,再把结果与实验结果进行比较,以检验理论的正确性。与平衡态相变问题相比较,临界动力学问题在研究上要复杂得多。在临界动力学的研究中,我们需要知道系统状态位形或其他量随时间的演化,物理量怎样随与时间有关的外加微扰而变化,当外加扰动撤去后,系统怎样达到热力学平衡态等。人们主要感兴趣的是在临界点附近,序参量或其他慢变量的大尺度涨落是怎样随时间演化的。理论和实验都表明,在临界点附近,序参量会随时间缓慢变化。在一定的假设和限制条件下建立一些唯象的动力学方程,这些假设和限制基于系统内部微观情况的考虑,这样的动力学方程是我们研究临界动力学的基础。临界动力学的研究已经有着较长的历史,形成的理论主要有:Van Hove 等提出的临界慢化的经典理论,也称为 Van Hove 理论;模-模耦合(mode-coupling)理论;动力学标度和普适性假说等。采用的方法主要有:解析的方法、重整化群方法、级数展开和计算机模拟等。

本书共分十一章。第一章研究非平衡相变的临界现象,介绍非平衡相变的临界标度理论及普适性, NPC 系统规格化模型,局域序参量的概率分布,广义势的临界渐近形式,空时关联函数及其临界奇异行为;导出一组普适的 NPC 标度关系,计算出的 4 种 NPC 普适类的临界指数与目前已知的实验及理论结果相吻合。第二章研究平衡相变与非平衡相变的临界联系,介绍两者在临界点邻域的相互关系,两者相似性的根源,以 NPC 规格化模型为基础,从参考态、势函数、可标度性、相关函数、临界指数、标度律及普适性等角度分析和考察了平衡相变临界现象与非平衡相变临界现象的联系。第三章研究动力学临界现象,研究跃迁机制对临界动力学性质的影响、一些特殊系统上临界动力学行为,对于 Gauss 自旋系统,提出多自旋跃迁的临界动力学,计算系统的动力学指数;研究长程相互作用 Gauss 系统、交换相互作用 Gauss 系统以及等级晶格上 Ising 系统的临界动力学。第四章研究具有长程相互作用的 Gauss 模型,求出配分函数的精确解、动力学临界指数,确定临界点。第五章研究多自旋跃迁临界动力学,提出一个多自旋跃迁模型,研究具有最近邻作用的 Gauss 系统的动力学临界现象,计算出磁化强度随时间的演化,精确地求出弛豫时间和动力学临界指数。第六章研究钻石型等级晶格上 Glauber-Ising 模型的临界动力学、外场下 Ising 模型的临界性质,采用 TDRG 方法求出等级晶格上的动力学指数。第七章研究交替相互作用的动力学 Gauss 系统,提出了多自旋跃迁机制,精确求解 Gauss 系统的主方程,通过求解局域磁化强度计算动力学临界指数。第八章研究不均匀催化表面晶格上 Dimer-dimer 模型的临界动力学,发现任一反应物的脱附现象和催化表面的几何特征对非平衡相变都有着非常重要的影响。第九章研究小世界网络上的临界动力学,基于有

向小世界网络上的类自旋模型,引入一个周期性的磁场,并运用 Monte Carlo 模拟,讨论在非平衡相变的情况下出现的随机共振现象。第十章研究不可逆的非完全、完全聚集湮灭反应的标度关系,得到 n 种群的完全聚集湮灭反应过程的集团浓度、总粒子数和总质量等量的标度关系。第十一章研究非平衡相变的动态过程,讨论几种非平衡相变的数学模型和激光中的非平衡相变现象。

本书写作过程中得到商丘师范学院王新民教授、傅景礼教授、李汝良教授、崔玉亭教授、陈向炜教授、王明泉教授、杨三序教授、郑世旺教授、董红副教授、李艳敏副教授,北京交通大学李俊卫博士等的支持和帮助。在此,对关心本书出版的各位同志表示诚挚的感谢。限于作者水平,书中难免有疏漏,敬请读者指正。

作 者

2007 年夏

目 录

第一章 非平衡相变的临界现象	1
§ 1.1 引言	1
§ 1.2 非平衡相变临界规格化模型及处理方法	4
§ 1.3 非平衡相变的临界参考态及耗散参量	7
§ 1.4 序参量的临界支配作用及其演化	10
§ 1.5 局域序参量构型的临界粗粒化	14
§ 1.6 随机广义势的临界渐近形式	20
§ 1.7 空时相关函数及临界奇异性	26
§ 1.8 非平衡相变的临界可标度性	32
§ 1.9 非平衡相变临界指数及标度律	39
§ 1.10 非平衡相变临界指数的普适类 普适性及实验比较	43
参考文献	46
第二章 平衡相变与非平衡相变的临界联系	52
§ 2.1 引言	52
§ 2.2 平衡相变临界现象与非平衡相变临界现象的 主要差异及相似之处	52
2.2.1 临界参考态的差异	52
2.2.2 控制参量内涵的区别	52
2.2.3 外场控制参量耦合的不同	53

2.2.4	临界退化程度的差异	53
2.2.5	维持稳定条件的差异	53
2.2.6	平衡相变临界现象与非平衡相变临界现象的 相似点	53
§ 2.3	参考态及可标度性的临界联系	54
§ 2.4	相关函数的临界相互关系	56
§ 2.5	标度律及普适性的临界联系	58
	参考文献	60
第三章	动力学临界现象	62
§ 3.1	引言	62
§ 3.2	Glauber 动力学和 Kawasaki 动力学	64
3.2.1	Glauber 动力学	64
3.2.2	Kawasaki 动力学	67
§ 3.3	改进的 Glauber 动力学	69
§ 3.4	动力学标度假设和重整化群方法	71
3.4.1	动力学标度假设	71
3.4.2	动力学重整化群方法	72
§ 3.5	研究的问题及意义	73
	参考文献	74
第四章	具有长程相互作用的 Gauss 模型	76
§ 4.1	引言	76
§ 4.2	临界点	78
4.2.1	配分函数的精确解	79

4.2.2 临界点的确定	81
§ 4.3 临界动力学	85
4.3.1 主方程	85
4.3.2 精确的结果	87
4.3.3 动力学临界指数	90
§ 4.4 二维和三维的情况	92
§ 4.5 小结	95
参考文献	96
第五章 多自旋跃迁临界动力学	99
§ 5.1 引言	99
§ 5.2 多自旋跃迁动力学的主方程	101
§ 5.3 一维动力学 Gauss 模型	105
5.3.1 近邻自旋对集团跃迁	105
5.3.2 一般自旋对跃迁模型	108
§ 5.4 二维系统的自旋集团跃迁	110
5.4.1 5-自旋集团	111
5.4.2 4-自旋跃迁	117
§ 5.5 三维系统的自旋集团跃迁	121
§ 5.6 小结	124
参考文献	125
第六章 钻石型等级晶格上 Glauber-Ising 模型的 临界动力学	129
§ 6.1 引言	129

§ 6.2	外场下 Ising 模型的临界性质	131
§ 6.3	TDRG 方法	138
§ 6.4	最简单的等级晶格	141
§ 6.5	其他等级晶格上的动力学指数	148
§ 6.6	小结	150
	参考文献	152
第七章 交替相互作用 Gauss 模型的临界动力学		156
§ 7.1	引言	156
§ 7.2	主方程	157
§ 7.3	动力学临界指数	160
§ 7.4	小结	162
	参考文献	163
第八章 不均匀催化表面晶格上		
	Dimer-dimer 模型的临界动力学	166
§ 8.1	引言	166
§ 8.2	表面吸附与催化反应模型	168
8.2.1	表面吸附与催化反应模型简介	168
8.2.2	ZGB 模型	168
8.2.3	Dimer-dimer 模型	172
§ 8.3	模拟方法	175
§ 8.4	计算机模拟结果	180
8.4.1	参加反应的一种粒子出现脱附对动力学 相变行为的影响	180

8.4.2 晶格表面 inert-sites 对 动力学相变的影响	182
8.4.3 晶格表面具有固定 inert-sites 时 不同脱附率对动力学相变的影响	183
8.4.4 固定脱附率下不同数目 inert-sites 对 动力学相变的影响	185
§ 8.5 小结	185
参考文献	187
第九章 小世界网络上的临界动力学	190
§ 9.1 引言	190
9.1.1 复杂网络简介	190
9.1.2 小世界网络	192
§ 9.2 模型和算法	193
§ 9.3 动力学相变	195
§ 9.4 随机共振	197
§ 9.5 小结	203
参考文献	203
第十章 聚集湮灭过程的临界动力学	207
§ 10.1 引言	207
§ 10.2 聚集湮灭过程的标度指数	208
§ 10.3 小结	212
参考文献	213

第十一章 非平衡相变的动态过程	215
§ 11.1 引言	215
§ 11.2 序参量	216
§ 11.3 非线性方程中的支配原则	221
§ 11.4 几类非平衡相变的数学模型	225
11.4.1 线性矩阵的一个实本征值变为正， 一个定态跃迁到新的定态或多稳定态解	225
11.4.2 一对复本征值穿过虚轴——定态解为 极限环	226
11.4.3 锁频	228
§ 11.5 激光中的非平衡相变现象	231
参考文献	234

第一章 非平衡相变的临界现象

§ 1.1 引言

在物质系统内部,相与相之间在结构、功能、性态等方面的差异是由于其内部有序度和对称性的差别而引起的,这可用序参量来表征.广义而言,相变是物质系统由一种稳定状态(恒定性态)向另一种稳定状态(恒定性态)的跃迁过程,即指当外场和控制参量连续变化达到某个临界值而引起系统内部对称性的破缺和有序度的突变.临界点是相变现象中的一个关节点,相变系统在临界点邻域表现出非常奇特的行为.当控制参量和外场趋近于某个临界点时,系统在微观水平上调整着自身,预示着将出现大的涨落.在临界点,反映系统有序度的序参量连续地出现或消失,某些物理量出现反常涨落和奇异发散.虽然各种纷繁的相变系统所含的变量有很大的差异,但其临界行为都显示出极大的相似性,不论其包含的物质和变量如何特殊,在临界点邻域它的变化规律和发展趋势是相同的,这就是临界现象^[1,2].

在自然界存在的各种相变中,根据其所处的状态背景的不同相变可分为平衡相变(如气液相变、铁磁相变等)和非平衡相变(如贝纳对流、激光相变等)两大类,即相变不仅可以发生在平衡态系统中,也可以发生在非平衡态系统中,相应地临界现象也可按其临界背景参考态的不同分为平衡相变临界(简记为 EPC)和非平衡相变临界(简记为 NPC)两类.

平衡相变是平衡态系统由一个平衡均匀态向另一个平衡均匀态的跃迁过程,其临界背景参考态是平衡态.人们对 EPC 现象的认识比较早^[3~6].早在 19 世纪 70 年代, Van der Waals 就给出了气液相变临界现象具有普适意义的 Van der Waals 方程.20 世纪 30 年代 L. D. Landau 提出了更加普适的平均场理论,该理论的图像直观,推导简捷,抓住了 EPC 现象的重要特征,成为进行粗略分析时的一个有价值的工具,但其结果与实际情况有时偏差较大.1965 年 B. Widon 第一次指出:系统的热力学函数在 EPC 点邻域将随临界距离和外场的变化而改变着它的尺度,但其函数的形式不变,这就是标度理论的基本思想.其数学表述为:热力学函数是约化控制参量和外场的广义齐次函数.他运用这一思想得到了 EPC 指数间的关系(EPC 标度律).1966 年 L. P. Kadanoff 将这一思想用于伊辛模型获得成功,并导出了 EPC 的超标度律,提出了普适性的概念.标度理论和普适概念的出现,较为清晰、准确地描述了平衡相变系统趋于 EPC 点的热力学行为,使 EPC 理论向前迈进了一大步.20 世纪 70 年代初 K. Willson 等人受到标度思想的启示,巧妙地把重正化群方法用于 EPC 理论中,取得了重大突破,它不仅给出了平衡态临界相变的正确描述,更精确地算出了 EPC 指数值,同时也证实了 EPC 标度律和普适性的正确性,使 EPC 理论趋于成熟.可以说平衡相变的临界标度理论是现代平衡相变临界理论的一块稳固基石.

非平衡相变是非平衡系统由一个非平衡定态向另一个非平衡定态的跃迁过程,其临界参考态是非平衡定态.非平衡相变问题与平衡相变问题一样地古老,然而长期以来一直未引起人们的重视,直到 20 世纪六七十年代耗散结构理论^[7]、协同学理论^[8]以及其他一些自组织理论的出现^[9,10],才引发了人们对非平衡相变现象的

广泛兴趣. 由于其涉及面广, 渗透到许多领域, 其思想不仅在物理学中得到应用, 在自然科学的其他学科中也有着应用. 人们从不同的领域对之进行了广泛的研究和讨论, 在边缘学科、交叉学科甚至社会科学领域也有人进行了探讨, 不断发现其应用价值, 这些都促进了非平衡相变理论的发展. 然而临界现象是相变理论的一个关键问题, 由于非平衡相变系统与平衡相变系统的状态背景截然不同, 其结构及关联因素要复杂得多, NPC 的问题有其自身的特殊性, 情况更复杂, 内容更丰富. 一方面, 人们对 NPC 现象及其性质和规律的认识还很不充分, 特别是对 NPC 的标度理论、演变机制、临界指数、标度律、普适性以及 NPC 巨涨落的触发机理和 NPC 动态重正化等方面的研究还有待深入. 另一方面, 虽然非平衡相变与平衡相变差异很大, 其状态背景截然不同, 但它们的临界行为却有着许多相似之处, 如临界慢化、序度突变、对称性破缺、关联发散、标度等价、临界巨涨落等. 这些共同特征绝非偶然巧合, 其间必有某种内在的联系. 虽然已有许多学者开始着手于这类现象的研究和讨论^[11~17], 但就目前而言, NPC 理论还远未形成体系, 对两种临界现象相似的根源探讨甚少, 且大多仅限于定性的或零散的讨论, 还未能完全找出 NPC 现象与 EPC 现象两者间的直接联系. 从建立 NPC 理论体系、揭示两类相变的共同机理以及完善整个相变理论的角度来看, 系统地对 EPC 和 NPC 这两类临界现象的相似根源和统一性进行全面深入的考察具有重要意义.

针对以上情况, 我们根据非平衡相变系统的自身特点以及它与平衡相变临界现象及状态背景的异同, 建立了一个具有一定普适意义的描述一般非平衡相变系统的 NPC 规格化模型, 并在此基础上对非平衡相变的临界性质进行了讨论和研究.

§ 1.2 非平衡相变临界规格化模型及处理方法

平衡相变过程是处于平衡态的系统在平衡态的大背景下从一种均匀质态向另一种均匀质态的变化过程,即是由一种平衡态向另一种平衡态的跃迁,其临界参考态是平衡态.而非平衡相变过程则是处于非平衡态的系统在非平衡定态的大背景下,从一种确定质态向另一种确定质态的变化过程,即是由一种非平衡定态向另一种非平衡定态的跃迁,其临界参考态是非平衡定态.

一切非平衡系统都存在着耗散,非平衡定态由细致平衡、循环平衡和耗散平衡原理所支配^[18~21].在定态系统中,大量微观的元过程和元作用相互弥补和抵消,保证了总的宏观状态呈现出稳定性,而这种稳定性需不断地耗散物质、能量或信息来维持.为了考察上的方便,对于一个处于定态稳定的非平衡相变系统,可对之进行规格化处理,将一般的非平衡相变过程用规格化模型来模拟和描述.其过程是把整个非平衡系统看成由 N_e 个等大小的、线度为单位长度 e 的单位立方小体元组成,在 d 维空间中,每个立方小体元的体积为

$$\Delta V_{r_i} = e^d \quad (1.1)$$

其中 d 为系统的空间维数,系统中的第 i 个小体元可用其中心位矢 r_i 来标志.设该系统中要描述某一非平衡物理过程时应考虑的各物理量分别为 $q_1, q_2, \dots, q_k, \dots$ 它们都是时间 t 和空间 x 的函数.为描述上的方便,我们将这些物理量看成是状态矢量 q 的各个分量,即

$$q(x, t) = \{q_1(x, t), q_2(x, t), \dots, q_k(x, t), \dots\} \quad (1.2)$$

系统中,第 i 个小体元 t 时刻所处的状态可用 $q(x, t)$ 在体元