

谈谈统计物理学的对象和方法

柏柏林 (中国科学院理论物理研究所)

物理学探索自然界的奥秘,有三个基本的认识发展方向。对于微观世界的研究,从分子、原子、原子核到“基本”粒子,涉及越来越小的时间和空间尺度,其小无内,不可穷尽。引力理论、天体物理,探讨大范围的宇观的时空结构和物质运动,其大无外,同样不可穷尽。另一方面,“一生二、二生三、三生万物”,量的变化导致物质运动由简单到复杂、由低级到高级的各种形态和阶段,直至生命和意识,这个发展过程同样是没有止境的。基础自然科学的多数分支,其实都是以第三个发展方向为对象。物理学研究的只是其中比较初始,因而也更为基本的过程。统计物理学则在宏观与微观描述之间、物理学和其他学科之间,起着一种桥梁作用。本文拟从几个侧面,粗浅地讨论一下统计物理学的对象和方法,介绍它的一些概念和范畴。

宏观与微观:物质结构的层次和物理学描述的层次

分子、原子、原子核、电子以及其他各种“基本”粒子,作为物质结构的单位是人们所熟悉的。它们又是物质运动的单位,而且在一定的相互作用条件下,组成与结构单位并不等同的运动单位。例如,金属中的电子通过与组成晶格骨架的原子核的相互作用,可以在条件适合时产生有效的相吸作用,成双配对地运动。又如,一个在固体中运动的电子,可以使周围的晶格稍有畸变,它是到那里畸变到那里,宛如一个更复杂的粒子。这样的运动单位有自己的动量、能量,相当长寿命,甚至独特的光谱线等等,通常称之为“准粒子”或“元激发”。各类宏观物体中的准粒子名目繁多,声子、极化子、激子、等离激元、超导金属中的库珀对、液氦中的旋子……。它们与作为物质结构单位的粒子有一条根本区别,就是不能离开环境独立存在,然而它们作为物理对象的确定性,并不亚于任何“基本”粒子。

无论粒子或准粒子,都可能有许多不同的运动方式:前后、上下、左右的平动,各种振动和转动,还可能有一些不那么直观的内在运动和集体运动。每一种运动方式叫作一个自由度。统计物理的研究对象,就是由大量粒子、准粒子组成,具有大量自由度的系

统。由于它突出抓住“大量”这一特点,“微观”和“宏观”的划分也就更为相对,通常首先不是指物质结构的层次,而是用以区别物理描述的层次。

现代自然科学使人类对自然界的认识跨越了很大的时空尺度。空间范围从基本粒子“内部”的 10^{-13} 厘米,到现代天文观测手段所及的一百亿光年即 10^{23} 厘米,相差 10^{36} 倍。时间范围从原子寿命 10^{-23} 秒,到我们所知的这一部分宇宙的寿命一亿亿年即 10^{31} 秒,也差 10^{54} 倍。物理思维中常把十倍左右的数量变化忽略掉,视为同一个“量级”。现代科学所知的物理世界,在时间和空间两方面都跨越了四十个量级。然而就我们对物理世界的描述而言,必须把这几十个量级划分成许许多多的层次。这不仅是因为物质的结构和运动本来表现出阶段和层次,而且因为我们的每种观测手段,从高能加速器到射电望远镜,都局限于某些层次。尺有所短,寸有所长,每种物理仪器都有它所瞄准的主要层次,虽然有一定的调整变化余地(“动态范围”),也不可能跨越许多个量级。同时,每种仪器还有其观测精度或分辨能力,超过这一限度的物质运动必须改用其他手段研究。这有如用放大镜看画,作品的整体结构和主题自然是在视野之外,颜料和画布的分寸细节也还无法鉴赏。描述层次的划分,可以举两个极端的例子。研究银河系的旋臂结构,把整个天体看成“微观”粒子,讨论这种粒子组成的连续的气体中物质的运动和分布,研究单个原子核或基本粒子,为了强调其内部的无限多自由度,又可以把它看成“宏观”系统,和液滴类比等等。这两个例子都可引到统计物理的概念和方法来处理。

描述单个或少量粒子的运动和相互作用的科学,可以统称之为“力学”。无论是描述天体运行的经典力学,反映电子运动的量子力学,表征电子与电磁场相互作用的量子电动力学,包括相对论力学,从统计物理的观点看来,都是“微观”理论,即使我们近似地掌握了它们,同时还知道了粒子间的全部相互作用力,也不可能直接运用这些规律来刻画宏观物体的性质,

* 拟作者在1978年全国自然辩证法讨论会上的一个报告改写。

即使可以写出来全部方程,也无法准确知晓和利用全部初始条件来求解这些方程。

应当强调指出,这并不仅仅是一种技术性的困难。“大量”相互作用粒子的行为,出现本质上的新特点,我们的认识和描述方法也必须作质的改变。一滴水里面有近百万亿亿个分子,一片晶体的半导体中杂质原子的数目仍有成千上万亿,每立方厘米普通液体或固体中的原子数目大致是 10^{23} 的量级,即使是所谓“稀薄”气体或“低密度”等离子体,其中每一小块体积中的粒子数目,至少仍要以亿计量。这些数量是如此之大,以致于把它们看成“无穷大”往往更符合于实际一些。统计物理中常令粒子数和系统的体积趋向无穷大,但保持单位体积内的粒子数有限,这叫做热力学极限。只有取了热力学极限之后,许多数量关系才得以简化,物理图象也更为清楚。

为了得到一些启示,设想一个粒子在三角形三个顶点之间随机跳跃(图1),三种可能的初始状态,即粒子处于第1、2或3点上,可以用三个矢量

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

代表。如果粒子现在处于某点,则一次跳跃后它必定离开此点,以各为 $1/2$ 的概率达到另外两点之一。新的状态可以用一个方阵(“转移矩阵”)来代表初始状态的矢量来得到。例如

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

从任何给定的状态出发,经过N次跳跃后达到各点的概率,都可以用转移矩阵乘N次求得。计算虽不难,但每种具体条件都有其特殊的答案。然而有一种情形却很简单,那就是不论从什么状态出发,经过无穷多次跳跃后,粒子达到每个点的概率都是 $1/3$ 。事实上也很容易证明,转移矩阵的无穷次方是

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

统计物理学中的热力学极限当然更为复杂。然而这个随机过程的简例,反映了统计物理的一种基本精神:研究那些不受具体初始条件影响的普遍性质。“大量”这个背景,使我们从微观物理出发研究宏观系统的性质时引用概率统计方法,如同力学中使用微分

方程一样地自然和精确。统计物理学的名称也就由此而来,它并不是一门新学科,上一世纪麦克斯韦和玻耳兹曼研究气体分子运动论是它的诞生,本世纪初吉布斯和爱因斯坦的工作中已经形成它的理论体系。它作为无穷多自由度系统理论的威力,则是近二十多年来在与量子场论的互相影响中逐步显现出来。

一个“层次”,一个“大量”,抓住这两条才能理解统计物理学的特殊地位。它并不象原子或分子物理学那样具有确定的研究领域。任何由大量是较小的单位或层次组成的系统,都可以成为统计物理学讨论的对象。正是在这个意义上,我们说统计物理学既是物理学,又是方法论。作为物理学,它的主要对象是气体、液体、固体、等离子体等等“多体系统”,也涉及更复杂的化学和生物过程;作为方法论,它探讨如何从单个或少量粒子的运动规律出发,以概率统计的方法推断和说明由大量粒子组成的物体的性质。也正是由于“大量”这一特殊的矛盾,使得量子力学的创立并未从根本上改变统计物理学的理论体系。微观粒子的行为和不可区分性,以新的统计分布(玻色-爱因斯坦分布和费密-狄拉克分布)丰富了统计物理学的内容,自然地解决了经典统计中曾经存在的一些困难,例如由粒子的不可区分性说明了原来推导中须引进的 $N!$ 因子。从基本精神看,统计物理学与量子力学更为一致。量子力学的诠释受益于统计概念,这是大家所熟悉的。近几年的研究表明,甚至处理经典经典具有无穷多自由度系统的涨落时,也要自然地引入不对易的算子,遇到某种不含普朗克常数的波动力学,这方面的研究,还在继续。

大量相互作用粒子组成的系统,有些本质上不同于力学系统的新的行为呢?至少可以指出三类:一是出现不平衡、不可逆的过程,二是在温度或其他参数改变时系统的状态会发生突变,三是出现大量粒子协同动作才可能产生的有序和结构。

平衡与非平衡:平衡附近和远离平衡的差别

历史上统计物理学的任务首先在于说明平衡态的性质。早在人类认识物质的微观结构之前,就形成了描述宏观物体的科学体系,这就是使用体积、温度、压力、比热、压缩率、膨胀率等等可以测量的参数,坚持能量守恒、热过程不可逆等热力学定律的热力学体系。热力学主要描述平衡态,对于非平衡态,它除了指出孤立系统最终必须趋向平衡外,几乎没有给出更为积极的基础知识。平衡态的统计物理学,作为热力学的微观基础,已经是发展完备的理论。除了少数孤立难题,和它本身的理论基础所引起的数学问题外,平衡统计

目前并不是活跃的研究领域。研究重心早已转入非平衡现象，我们在后面再谈。为了说明平衡统计的基本方法，不妨先介绍一个至今悬而未决的难题。

解决任何一个平衡统计问题的过程，可以归结为如下三部曲。第一步是求解一个“力学”问题，得到系统的能谱 E_n ，它可能依赖于一些参数。第二步是对一切可能的能量状态计算如下的指数和

$$Z = \sum_n \exp(-E_n/kT),$$

其中 T 是绝对温度， k 是玻耳兹曼常数。称之为配分函数或统计和。第三步是建立与热力学的关系，实际上就是把指数和换成单个指数，令 $Z = e^{-F/kT}$ ， F 就是热力学中的自由能。一切热力学量都通过求 F 对各个参数的导数得到，而不须使用其他运算。除了理想气体等少数特例，真正用这个三部曲得到解决的实际问题微乎其微，因为第一步并非统计的力学问题，对于多粒子系统已经极难求解，而第二步的数学困难很大，通常要靠各种近似方法或避开计算去寻求定性结论。

由于指数是极为光滑的连续函数，求和更便函数的性质变好，历史上对这一套三部曲的严重怀疑，就在于它能不能说明磁铁在升温过程中突然失去磁性这类相变现象，以及相变点附近许多物理性质的反常。为了试图回答这个难题，伊辛 (Ising) 在 1925 年提出一个非常简单的统计模型。在晶体的每个格点 i 上放一个磁矩 σ_i ，它可以有向上 ($\sigma_i = 1$) 或向下 ($\sigma_i = -1$) 两种取向。只考虑最近邻磁矩的相互作用，当它们取向相同 ($\sigma_i \sigma_j = 1$) 时，能量是负 J ，而取向相反 ($\sigma_i \sigma_j = -1$) 时，能量是 J 。这样就绕过了力学问题，直接给出了能谱

$$E(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j,$$

(近邻 $\langle i,j \rangle$)

其中字母 σ 代表各个格点上的 σ_i 取 +1 或 -1 的一种具体分布方式。计算配分函数

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-E(\sigma)/kT}$$

(一切可能的 σ)

的手段并不简单。伊辛本人只解决了一维链 (即磁矩排列成一条直线) 的情形，发现没有相变。他还给出一些似是而非的论据，说明二维和三维情形下也不会有相变。直到 1944 年昂萨格 (Onsager) 以精妙的数学技巧得出了二维伊辛模型，人们才明白二维是有相变的，但比热尖峰 (图 2) 只有在取了热力学极限之后才突出起来。这是平衡态统计物理的一项辉煌成就，是后来授与昂萨格诺贝尔奖金的根据之一。杨振宁对于二维伊辛模型也作过重要贡献。然而半个多世纪以来一直未能严格计算出更为实际的三维伊辛模型，甚至连解决途径也不清楚。

非平衡统计问题的提出虽然与平衡问题同样悠

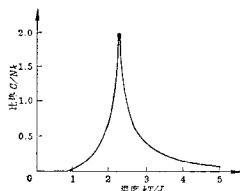


图 2 二维伊辛模型的比热

久，但是直到过几十年才逐渐形成一些重要概念，勾划出理论体系。一个稳定的平衡态附近，主要的趋势是走向平衡。如果对系统施以短暂的扰动，则取消扰动后系统经一段时间后就重新回到平衡。所需的这一段时间称为弛豫时间，这类过程称为弛豫过程。如果强行维持使系统处于不平衡的外界条件 (“力”)，则系统的响应是产生持续不断的 “流”。例如，维持电位差，导致电流；保持温度差，出现热流；造成浓度差，形成粒子流……。这些流就是电荷、能量、质量等等转移，是要消耗能量的。这类过程称为输运过程或耗散过程。如果离开平衡不远，“流”和“力”是成比例的，比例系数是物质本身的一种宏观参数，称为输运系数。电导率、热传导系数、粘滞系数等等，都是输运系数。宏观的平衡态，对应瞬息万变的微观运动方式，是微观运动的一种平均的表现。因此各种宏观参数总是在平均值得附近起伏波动。如果对系统中 “微观大，宏观小” 的部分作测量，则这种围绕平均值的涨落尤为清楚。

弛豫、输运、涨落是平衡态附近主要的非平衡过程，它们都是由趋向平衡这一总的倾向决定的，因而有深刻的内在联系。非平衡统计物理的重要成果，是证明了输运系数对称原理和涨落耗散定理。输运过程可以错综复杂地进行。例如，温度差不仅直接引起热流，还可以引起质量流 (这就是用于同位素分离的热扩散)、电流 (温差电效应) 等等，另一方面浓度差不仅造成扩散流，还能引起热扩散。如果适当选择物理量，则甲种力形成或乙种流，乙种力导致的甲种流，这两个交叉的输运过程，其输运系数是相等的。这就是输运系数对称原理。其实早在 1854 年汤姆孙用热力学方法分析热电效应时，就建立了第一个这种对称关系，但是这一原理的普遍证明则是 1931 年昂萨格给出的。涨落耗散定理说明，输运系数由相应物理量的涨落平均值决定。1928 年证明电路中热噪声形成的随机电动势的平均值与元件的电阻 (这也是输运系数) 成正比，

这也就是涨落耗散定理的一种表达。1905年爱因斯坦研究布朗运动时，把它与扩散系数联系起来，也是另一种意义上的涨落耗散定理。定理的一般证明，五十年代才臻于完备。

关于平衡与非平衡的描述，与物理世界时间层次的划分有密切关系。如果考察气体分子的碰撞过程，它持续约 $10^{-10} \sim 10^{-13}$ 秒，这里只能使用微观的力学描述。碰撞过程的“力学”总是可逆的。相对于两次碰撞之间的自由飞行时间 ($10^{-10} \sim 10^{-13}$ 秒)而言，碰撞过程可以略而不计。输运系数对称原理就是在这一描述水平上证明的。这时可以看到，输运系数虽然出现在不可逆过程中，对称原理本身却恰恰是微观运动可逆性的表现。如果进一步忽略碰撞间隔，只关心宏观状态发生显著变化的时间尺度，例如流体各部分温度达到平衡的时间，我们就采用了与热力学类似的宏观描述。流体力学就是这样的体系，它只剩下五个量来代表每个“微观大、宏观小”范围内的运动自由度。从统计物理出发，我们不仅知道了流体力学方程中的粘滞系数等怎样与微观描述发生联系，还懂得如何改进这些方程本身。我们并不是说宏观不可逆性是随着描述层次变粗才出现的，而是强调要正确反映客观存在的不可逆性，我们必须采用较粗的描述方式。这个由细到粗、由小到大的过程，正是统计物理的研究对象。

平衡态比较单纯，非平衡态丰富多采。只考虑平衡附近的现象，只抓住趋向平衡这一种倾向，统计物理就是极不完全的理论。我们必须往远离平衡的方向前进。初看之下，这里有千奇百怪的自然现象，似乎很难建立统一理论。事实上直到现在还不清楚，能否把类似输运系数或涨落耗散定理这样的概念普遍地推广到离平衡较远的状态。

然而离平衡足够远时，出现了新的现象：有些宏观系统突然进入新的更有节更有组织的状态。出现这些状态的条件各不相同，但有一些共同的规律。第一，通常有某个参数达到一定阈值，新状态才突然出现。这是一种临界现象，很像普通平衡态下的相变。第二，新状态具有更丰富的时间和空间结构，例如呈现周期变化或宏观尺度上的花纹图案。第三，只有不断从外界提供能量，这些结构才能维持下去。第四，新结构一旦出现，就具有和平衡态类似的稳定性，不容易因外界条件的微小改变而消失。这类现象目前常称为“耗散结构”，在日常生活中也能遇到。质量欠佳的日光灯管，在一定条件下突然进入辉光放电状态，出现黑白相间的条纹，有时这些条纹还沿着灯管运动，这就是一种耗散结构。这是非平衡统计物理中迅速发展的新的一章。生物体是不是更高级的耗散结构？也许这里会打开一条通向生命科学的道路。

现在我们有比较完整的图象，平衡附近是以趋向平衡为主的各种过程，远离平衡时可能经过复杂形成耗散结构。这两个在一定意义上相反的过程都是宏观系统所特有的。

对称与相似：自相似变换和 置正化群的妙用

无论平衡态的相变，还是远离平衡的突变，有序和结构的出现，通常都伴随着对称的改变。其实，最对称的世界是没有任何秩序和结构的。那是在“盘古开天地”之前，天地混沌，无所谓上、下、左、右，没有任何特殊方向和特殊点，也无从区分过去和未来。一切“对称操作”都是允许的，有无穷多种“对称元素”。一旦可以看到“对称”，有一个立方或六角晶体摆在我们面前，已经是失去了不计其数的对称元素，只剩下寥寥数十个。首先明白这一点的，可能是老居里，他曾经过“非对称创造了世界”的妙语。更复杂的物质结构形式，其实没有任何原来意义下的对称，但是又有着大量局部的、近似的对称性质。对称变换在统计物理中，如同在理论物理的其他分支中一样，起着重要的建设作用。我们结合这一点，介绍近几年统计物理学中一项重要突破：置正化群概念的引入。

先考虑一类具有自相似性的几何图案。请看图3，其中每个方框内套有四个小方框，如此无限嵌套下去，每个黑点内部还有无穷多同样的结构，而图3本身只不过是更大的方框中的一个小组。整个图形往大小两个方向无限地重复下去，把它适当地放大或缩小若干倍，都可以和原有图形重合。连续放大两次的效果，也能用一次放大做到。我们说，这个图案有一个自相似变换群。如果加一条限制，只许不断缩小尺度，但

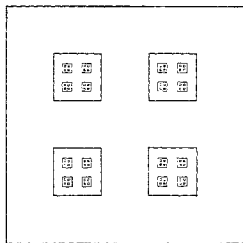


图3 自相似图案

不准放大，方框小到一定程度就把它抹黑，不再分辨其内部结构。这样就只剩下单方向的自相似变换，这是一个“半群”。这里的“抹黑”，很像统计物理学中的平均，带来了某种不可逆性的味道。

这种几何游戏式的考虑，在统计物理学中找到了重大应用。取一块相当大的磁铁（把它看成无穷大！），在温度远高于相变点时，其中磁矩的排列是完全混乱的，表现不出宏观的磁性。当温度下降，接近相变点时，每个磁矩的影响范围都逐渐扩大，要求其他磁矩采取与自己平行的取向。这个影响半径又称为关联长度。到了相变点，关联长度成为无穷大，于是整个晶体内的磁矩突然沿一个方向排列好（究竟沿哪个方向，倒是由偶然因素决定的）。设想在很接近相变点处用统计物理的方法研究这块磁铁，把单个磁矩间的相互作用能写出来，然后计算配分函数。这很象前面介绍的伊辛模型，原则上也可以把每个磁矩看成一组，计入各组之间的相互作用能。只要适当改变一下相互作用强度和缩小空间尺度，这样得到的物理图象和算得的配分函数应当基本上与原来相同，在相变点上则完全相同。换句话说，配分函数在一个自相似的半群变换下具有不变性。正如反映线性变换本质的是变换中的一些不变量——变换矩阵的本征值，自相似变换的不变量决定物理量在相变点上的奇异行为。1972年威尔逊(K. G. Wilson)引用量子场论中的重整化群技术，在相变理论中实现了一次突破，终于越出了统治多年的平均场理论。重整化群的数学相当复杂，但是物理图象就象上面介绍的那样简单。它在统计物理学中开辟了一条新的途径，不是去直接计算配分函数，而是研究配分函数在某些变换下的不变性质，由之得出深刻的结论。八年来的进展表明，重整化群技术已经成为统计物理学宝库中的必备兵器。

有限与无限：无穷多自由度和无穷维数学

统计物理研究具有大量运动自由度的宏观系统。在每个具体情形下，这个“大量”都是有限确定上限的数。然而它是如此之大，增加或减少几个粒子也没有影响。因此，认为粒子数无限多才更好地反映了客观世界。这就是上面所说的取“热力学极限”：令粒子数和系统的体积趋向无穷，但单位体积内的粒子数（粒子数密度）仍是有限的。事实上统计物理学中的一些根本问题，只有在取了热力学极限之后才变得更明朗。

首先，统计物理的方法能否描述相变这类突变现象，人们曾经有过怀疑。因为统计平均使一切函数变得更为光滑，而相变是“连续性的中断”，是尖峰和跳跃。自从四十年代初求得伊辛模型的数学严格解之后，

懂得了无穷、尖峰等都是取热力学极限的结果。对于有限个粒子组成的系统，比热即使有尖，也是有限的，后来实验也证实了这些看法。

其次，统计“平均”是什么意思下的平均？对于微观运动而言，物理测量是一种时间平均，这里还取了另一个极限：测量时间比微观运动的特征时间大无穷多倍，因此微观运动的初始状态等都不应当影响测量结果。实际上统计物理中不会去计算时间平均，而是把它换成了另一种平均：取一个系统的无穷多个样本，它们的差别只在于初始条件不同，既然时间平均不依赖于初始条件，它就可以换成对同一时刻一切系统样本的平均。统计物理学把这叫做“系综平均”。

这两种平均究竟相同否？这就是著名的遍历（又称“各态历经”）问题，因为如果一个力学系统从一个初始状态出发，确实要经历一切可能的状态的话，就很容易证明时间平均等于系综平均。最近几年遍历理论中又得出一些具体结果。例如，证明了有限个非简谐振子是非遍历的，而有限个弹性刚球组成的系统反而是遍历的。这两个结论都有点与物理直观相违，因为非简谐振子是经常用来代表各种“实际”的物理模型的系统，它应能趋向平衡，用统计方法处理；而有限个相互作用的简谐振子或弹性刚球组成的系统，根本不会趋向热平衡，出路何在呢？看来在于无穷多自由度。已经证明无穷多个简谐振子组成的系统是遍历的。统计物理学的基础要从无穷多自由度出发来建立。

无穷多自由度带来了一套无穷维的数学：无穷维的函数空间、无穷维的矩阵、对无穷多个函数变量的连续积分……，一句话，进入了泛函分析的领域。还有另一类处理无穷多自由度系统的物理理论，那就是量子场论。从数学结构上看，统计物理与量子场论是彼此相通的。近二十多年来，这两方面的发展经常互相促进，形成了一些强有力的方法，解决了一批难题。统计物理和量子场论也遇到完全相似的困难，例如发散问题，但是在统计物理中可以同途异地对论不变性、规范不变性乃至算子的不对易性等复杂的原则和细节，使发散的出現和消除过程看得更清楚。

在结束本文之前，关于统计物理学与数学的关系，想再说几句。平衡统计与概率论，非平衡统计与混沌过程理论的关系，顾名思义即显而易见。相变、耗散结构理论是托姆(R. Thom)的突变论、以及非线性方程分支点理论的实例，特别是重整化群技术，在概念上又可稍超越托姆理论，因为后者相当于平均场理论。至于从平衡统计理论中发展起来的遍历问题，早就成为泛函分析的一枝，当然物理学工作者仍关心其结论。统计物理学的对象，比较容易有敏感的认识和类比，希望它也能引起数学工作者的关注。

谈谈超导金属中的准粒子

——与郝柏林同志商榷

曹惟炎 (中国科学院物理研究所)

《自然杂志》3卷9期郝柏林同志的《谈谈统计物理学的对象和方法》一文中,在列举名目繁多的准粒子时,将“超导金属中的电子对”也误认为是一种准粒子。熟悉现代超导微观理论的人都知道,在超导体中,电子对(即所谓库柏对)恰好不是准粒子。从统计物理学的角度来看,电子对有点类似玻色-爱因斯坦凝聚中的“凝聚质”,它不携带熵,因而它不是元激发(即准粒子)。那么,超导体中的准粒子是什么呢?它是库柏对因热激发(或其他类型的激发)而拆散后形成的正常电子。在绝对零度时,超导体处于基态,这时所有导电电子都结成电子对,超导体中没有元激发或准粒子。随着温度的升高,一部分电子对受热激发而被拆散,只有这时,超导体中才开始出现一些准粒子。一对准粒子可以通过放出声子而复合为电子对。准粒子可以“产生”和“湮灭”,其数目在体系中是可变的。总之,在超导金属中的电子对是准粒子的“对立物”,而不是准粒子。众所周知,和超导体有关的隧道效应应有两类(它们的发现者都获得了诺贝尔奖金),一类叫作准粒子隧道效应,它是和正常电子相联系的隧道效应;另一类叫作约瑟夫森效应,它是电子对的隧道效应。利用准粒子隧道过程,可将准粒子通过隧道注入势垒另一侧的超导体中,使另一侧超导体处于有过剩准粒子的非平衡态,从而研究超导体中准粒子的扩散、复合等非平衡过程。

郝柏林同志是用两个例子来向读者介绍准粒子这一重要物理概念的。原文中有如下一段话,“例如,金属中的电子通过与组成晶格骨架的原子核的相互作用,可以在条件适合时产生有效的相吸作用,成双配对地运动。又如,一个在固体中运动的电子,可以使周围的晶格稍有畸变,它走到哪里畸变随到哪里,宛如一个更复杂的粒子。这样的运动单位有自己的动量、能量、相当长的寿命,甚至独特的光谱线等等,通常称之为‘准粒子’或‘元激发’。……”

在所举的第一个例子中,错误至少有三点:第一,组成金属晶格骨架的一般不是原子核(也许金属氢是例外),而是金属离子。原子核与离子差别颇大,它们间的体积大小的差别可高达 10^4 倍!尽管

如此,这一错误和下面两者相比,是较不重要的。

第二,金属中的电子不是与组成晶格骨架的原子核(离子)的相互作用,而是与原子核(离子)组成的晶格骨架的相互作用,才在条件适合时产生有效的相吸作用的。这两种说法的差别至关重要。在超导体中,一对电子通过交换虚声子(即与晶格作用)在一定条件下会导致吸引,形成束缚态,这里的每一个虚声子都与整个晶格骨架有关。在超导体中运动的电子所“看”到的是整个由离子组成的点阵,而不是“组成晶格骨架的原子核”。

第三,已知前述,这种成双配对运动的电子对,根本不是准粒子。

至于郝柏林同志介绍给读者的第二个例子,也不是无可非议的。朗道(Ландау)在研究超流的液氦(He I)时,首先引入了元激发这一概念。这是众所公认的朗道学派对凝聚态物理的卓越贡献。朗道这一思想的情趣是,元激发(准粒子)是凝聚态物质中的集体激发。He I 中的旋子与声子都是液氦中的集体激发,每一个元激发都与整个液氦体系相联系。固体中的声子对应固体中激发的弹性波,它显然是与整个晶格有关的运动,显然是一种集体激发,只是把准粒子看作是“穿了衣服”的电子,或宛如一个更复杂的粒子,似乎没有把握住准粒子这一概念的主要特征。事实上,这种更复杂的,能引起晶格畸变的电子,并不一定都是准粒子。例如形成库柏对的电子,是受正离子屏蔽了的一个更复杂的粒子(库仑屏蔽对导致超导也十分重要),它在金属中运动时会引起晶格畸变(发射或吸收虚声子),这种过程,即使在绝对零度也会发生,可见它们不是准粒子。

朗道的学生们(Абрикосов等)在所著《统计物理学中的量子场论方法》一书中,正确地阐述了朗道关于准粒子的观点,“……应当立即强调指出,元激发是由于系统内粒子的集体作用而产生的,因此属于整个系统,而不属于个别粒子。元激发的数目也完全不必等于系统内的粒子总数。”

最后,还想指出一点,原文中有这样一句话,“它们(指准粒子)与作为物质结构单位的粒子有一条根本

前的事物,对于那些我们已经选择的,但不过以某种方式讲出来而还没有发现出来的所有定律来说,“实在”和物质,它们都必须建立在亿万次这样的观察者-观察对象的作用的统计性上吗?简言之,黑洞以后,通过风景中这两奇异之处,到山的那一边如果不是通过观察提问和偶然性作答案来构造“现象”那样,构造出“参与宇宙”,我们又可以期望看到另一类什么样的宇宙呢?

如果“参与宇宙”的概念使得世界异常空虚,我们可以回忆一下塞缪尔·约翰逊(Samuel Johnson)关于踏石头的议论。不管在理论究竟如何,脚趾上的痛已足以知道石头是实实在在的。最近几十年来我们已经断定固态物质是由电子、原子核和绝大部分真空所组成,但它仍是固体。同样这也将使石头仍为实在,即使将它考虑为完全是真空。

数学的例子

数学也是没有真空的真空,一个熟知的定理告诉我们,平面三角形的三内角之和为 180° 。但是当我们复习所有的定义、假设和公理准备证这一定理时,发现论述最后变成了等同于 $0=0$ 的一个恒等式。没有恒等式吗?因而也就没有定理了。这可能要花300页计算机纸来写出一个定理的所有基本部分,通常的证明只要两张纸就可以了。不过当把定理的所有部分合并成整体以及定理是有用时,最终它仍然合并成一个恒等式。就象图8的绳结那样,这个结只要拉一下就会化为乌有。

作为自激电路的参与宇宙

看一下空荡荡的院子,我们知道比赛必须在划了

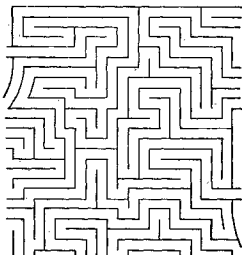


图9 迷宮象征在观察仪器和被观察系统之间的弯曲曲面的分界线。

一条线把院子分为两半后才能开始进行。这条界线划在何处不是很重要,但划与不划却是个实质性问题。“基本现象”不可能没有观察仪器和被观察系统之间的分界线,但这分界线可以划分得象迷宫一样(图9),使得从某一观点来看是在观察仪器一边,而从另一观点来看则在被观察系统一边。

从“用虚无来排除无意义”到由分界线来排除它,从分界线到“现象”,从一个现象到许多现象,从许多现象的统计性到规律性和结构,这些考虑引导我们最终会问是不是最好不要把宇宙设想为一个自激电路(图10),自大爆炸伊始,宇宙扩张并冷却。在极长时期的动态发展后,它开始在一旁观察,观察-被观察作用转而给宇宙有形的“实在”,不仅在现在而且还要追溯到原始。讲宇宙象一个自激电路是再一次暗示它是个参与宇宙。

如果我们在这里考察的观点是正确的话,那末观察者-被观察对象这一原则足以建立一切事物。如果它不能考虑定律的建立,不能考虑时空是定律的一部分,以及不能考虑定律与物质无关,那末参与宇宙的构思就会摇摇欲坠,并且必须加以摒弃。除了通过一种乱七八糟的方法(即通过亿万次观察者-被观察对象作用的统计性,这种作用每次自身又都是极端随机的)以外,再也没有别的方法可用来建立定律了。

两种试验

除了根据每样东西都有一条出生之路的条件推导出量子论的结构(就象在那种奇特方式的二十问答题(下转684页))

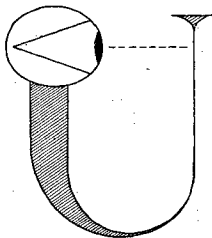


图10 被看作自激电路的宇宙。开始时它很小(字母U的右上方),然后它长大(U的弯曲处),恰好成为(左上方)观察者-被观察对象,此时它甚至给宇宙的早期加上“可触及的实在性”。

作者来信一则

编辑同志：

贵刊1980年第9期所载拙作《谈谈统计物理学的对象和方法》一文中，关于二能伊辛模型严格解是“后来授予昂萨格诺贝尔奖金的根据之一”，说法不对。最近杨振宁教授来信指出，授奖决定中并未明显提及伊辛模型。落笔之前，未曾核对出处，治学不严，应当引为教训。请赐一角发表此信，以谢读者。

又该文引居里“非对称创造了世界”一语，原文 *crée le phénomène* 还是译“创造现象”为妥。一并志此，并请

撰安

郝柏林

1981年1月27日

物理杂志 4卷4期

关于宏观物体中的 “元激发”和“准粒子”

——答管惟炎同志

郝柏林 (中国科学院理论物理研究所)

《自然杂志》3卷9期刊登了我写的一篇通俗文章,其中讲到物质结构和物理描述的层次。其实写文章也有个层次。管惟炎同志从拙文二十八段话的一段中引了一百多个字,发挥了两千余言来分析批评,而且使用了那么多原文中未曾出现过的术语和概念,显然已不是在同一个层次上讨论问题。这对于《自然杂志》的大多数并非“内行人”的读者,想来也是看得分明的。如果有人简明地指出把超导金属中的电子对作为准粒子欠妥,我会投书编辑部表示基本同意,并建议读者从原文中删去这几个字。如今必须稍稍换一个层次来作出回答。不过我们还是谈宏观物体,而不局限于超导金属和液氦。

一个宏观物体可能处于许许多多的状态之中,其中能量最低、最稳定的状态称为基态。基态附近有许多能量略高一点的“低激发态”。例如一块处于基态的磁铁,全部磁矩都沿一个方向排列好(严格说来,只有无穷大的磁铁才可能有这样的基态——我们以后不得不省去一切诸如如此的但书和附笔,希望不致引起内行人“怎么能离开环境讨论无穷大的磁铁”的诘难)。现在给磁铁添加小小一点能量,它只够一个磁矩翻转过去。究竟那一个磁矩翻过来构成低激发态呢?大家机会均等。这种“允许一个或几个磁矩翻转”的可能性,带着新添加的那点能量在磁铁中传播。它宛如一种波,即“自旋波”,还可以“量子化”,看作具有一定动量和能量的准粒子——“磁子”。对于各种宏观物体,常常可以有这种类比,用“出现了几个元激发”来描述整个物体处于某种低激发态。在这种意义上,“元激发”和“准粒子”往往用作同义语。更确切些的作法,宜把与低激发态直接相关的准粒子称为元激发,而把准粒子——谓留作意义更广泛的概念。

区别,就是不能离开环境独立存在。“难道宇宙间可以找到离开环境而独立存在的东西吗?内行人也许知道郝柏林同志在这里想说明的是什么。但对于《自然杂志》的大多数读者来说,会不会认为宇宙间一切物质都是准粒子呢?其实,在某种意义上,我却是同意这

两个电子形成的库柏对,是超导金属基态的组份。实际超导体中电子对互相密密叠迭,在一个对的范围里容纳着上百万个其他对的中心。一般说来,低激发态的波函数中也含有电子对的成份。元激发谱中既有“对”拆开的“单”粒子激发,也有整个对的激发。只是使用简化的模型时,可以不去区分它们。这在巴丁和施里弗为《低温物理进展》第三卷写的著名总结中,早已说得很清楚。早在六十年代初期,我国的理论物理工作者也探讨过存在一支相当于库柏对平移的元激发的可能性,指出它对比热贡献太小,难以观测(《物理学报》1961年17卷31页)。此外,超导体中还有其他玻色型元激发,如不加库仑作用时的“集体激发”,加了之后的“等离激元”,可见把超导体中的准粒子限于库柏对拆散形成的正常电子,甚至把库柏对与元激发完全对立起来,倒是可以商榷的论点。这里需要的是认真的研究,而不是空洞议论。不过这些关于固体物理的讨论,超出了通俗文章的范围。

管惟炎同志发现我“至少有三点”错误,却忘记了物理学中最根本的出发点。为了从微扰相互作用出发说明宏观物体的性质,原则上只要考虑如下的库仑作

$$\sum_i \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,j} \frac{Ze^2}{|r_i - R_j|} + \sum_j \frac{Ze^2}{|R_i - R_j|}$$

其中 e 是电子电荷, Ze 是原子核电荷, r_i 和 R_j 分别是第 i 个电子和第 j 个原子核的坐标。至于什么时候出现晶格骨架,它是由原子核还是“离子”组成,那要看具体条件。压力很大时,原子核都是裸的,浸沉在“自由”电子的云雾中(且不讨论使质子中子反应变得有利的更大压力)。可见不只“金属氢是例外”,压力变小时,一部分电子开始局域化在原子核附近,从化学

种观点的(有不同层次的准粒子)。但他在这里讲的是“根本区别”,根据他告诉我们的办法却是“无可区别”。因为谁也不能把任何物质从环境中隔离开来,即使物理学家头脑中设想的“宇宙空间的一个自由粒子”也是如此。

中借来的离子半径等等概念才更有益。把 R_1 在原子核的平衡坐标 R_0 附近展开,才能有“声子”、“虚声子”诸般说法。我这篇短文并非固体物理学的引论,只简单提了一句最根本的相互作用,又何错之有呢?

一切论断都是有条件的。管惟炎同志如此推崇的朝道的学生关于元激发“不属于个别粒子”,其数目“完全不必等于系统内的粒子总数”等语,也是在一定条件下才对。宏观物体中确实存在着局域性或个性较强的元激发。它们与物体中一部分原子耦合密切。例如离子晶体中的强耦合极化子,基本上是一个电子“陷”到自己引起的畸变势中,成为行动缓慢的准粒子。又如强局域化的激子,其中电子和空穴甚至可能都固定在同一个原子附近。想一下这些熟知的例子,也就不必回答对于“宛如一个复杂粒子”的非议了。特别要指出,费密型元激发和玻色型元激发性质很不同。“自由”电子在恒定磁场中作螺旋运动,但是一块铜中

的导电电子在磁场中却可能作更复杂的运动。这是导电电子在特定条件下变成了准粒子,其数目由于电荷守恒而必须等于原来导电电子的总数。把这样的准粒子从铜中轰出来(离开环境),它就是普通电子,每个“准粒子”成为一个“真粒子”。玻色型的元激发则多数是集体的产物,相互作用消失,准粒子也没有了。

顺便提一下,人们使用“环境”一词,总有特定的具体意义。我在文章中说“不能离开环境”,那环境就是前半句中的“宏观物体”。管惟炎同志质问道:“难道宇宙间可以找到离开环境而独立存在的东西吗?”把自己讨论的对象局限在“超导金属”这一特定环境中,把别人文章中的“环境”强行推广为宇宙空间。这也不是在同一层次上讨论问题。至于管文中其他一些词语或欠妥之处,如电子对“不携带荷”,“库伦屏蔽对导致超导也十分重要”等等,因为超出商榷范围,在此不予评论。

(上接 681 页)

梦中产生谜底“云”)以外,检验这些观点的试验看来没有一个更象在某一天能做得到,也不是更有趣和更有教益。预言本身并没有提供比下面那种情况更中肯的试验:物理学的每一定律被推到极端情况将被发现是统计的和近似的,而不是数学上完美的和精确的。

“不用定律的定律”之挑战

我们能够问问我们自己把乍一看非常模糊的象不用定律的定律、没有物质的物质之类的东西放到公式中去是不是绝顶荒谬的。我们脚下没有坚实的土地,我们怎么能希望向前运动呢?于是我们记得爱因斯坦必须作出同样的奇迹,他必须用一种新的语言重新表达物理学的一切。他的弯曲空间似乎是从我们称之为坚实的东中取走了所有确定的结构。在把物理学整个儿移到新基础之上之后,它终于显示出它本身永远是清楚和有用的。在这里,我们绝不偷工减料,我们必须把此庄严的科学结构放到观察者-被观察对象基本作用的基础上去。没有一个已经经历过我们时代的相对论和量子论革命(通过爱因斯坦的工作)的人怀疑理论物理接受这个更大的挑战的能力。

[陆维宗译 朱世昌校]

译校后记

惠勒(John Archibald Wheeler)是美国当代著名的理论物理学家,在国际上也享有极高的声誉。他现任美国得克萨斯奥斯汀大学阿史贝尔·史密斯(Ashbel Smith)物理教授和中心主任。他的贡献是杰出的,是他首先预言黑洞的存在。在相对论天体物理和量子理论方面有不少开创性的成就,著作甚丰。

本文《Beyond the Black Hole》是他的新作,文中系统论述了当代物理学面临的两大困境,即黑洞和量子论中的困难。黑洞既是当代物理学的一大成就,但也给物理学带来了根本性的困难。黑洞和宇宙大爆炸模型一样,有所谓时空奇点,时空从大爆炸“开端”,宇宙万物演化发展,一旦膨胀成黑洞以及随之必然发生大崩溃而又到达时空奇点,时间就“终止”了,空间成了一个点,时空曲率成为无穷大。一切物理定律失去意义。一切物理状态被撕得粉碎。另一个困难就是迄今已延续了几十年的对微观粒子和场的量子理论的解释等。

面对理论物理的这一深刻危机,围绕着黑洞理论所揭示的矛盾的意义远远超过了对黑洞物理本身,正影响着整个物理学的未来。物理学正面临着一场革命,出路在哪里呢?作为一个本人曾超过一个又一个物理学高峰,也曾经带领过一代又一代年轻的物理学家登上一层楼又一层的物理阶梯的惠勒来说,今天,他站在当代理论物理的顶峰上,回顾了物理学走过的艰难历程,总结了近代理论物理的三大成就,即电磁场理论、引力理论和规范场理论,所有这些物理定律的背后隐藏着什么机制呢?作者指出这三个问题都来自于对称性和可破入性要求。揭示定律的对称性考虑隐藏了定律背后的机制。这既是理论物理发展中的历史教训,也是今天我们面临的课题。理论物理发展到今天,尽管其内容越来越复杂、多样、抽象和千变万化,并进入越来越深的层次,但我们越是深入下去,越感到我们已经认识到的东西是多么少。我们从洞察当前面临的两大困境中能得到些什么启示和信息呢?我们为什么会陷入困境呢?我们又该转向哪里去寻找出路呢?对此,作者以通俗生动而富有启发性的语言,提出了一系列迫切而深刻的问题和新的观点,指出我们应该如何来重整个自然界、看宇宙本身、看物理规律、看时空、看今天物理学所面临的根本问题。所有这些对我们有很大的启发和教益,值得我们深思。

[朱世昌 陆维宗]