

物理
吕树臣

平衡与非平衡

临界现象

吕树臣 著

Critical phenomena in equilibrium
and nonequilibrium system

哈尔滨出版社

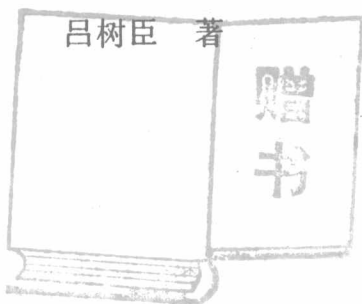
湛师图书馆



A1353906

平衡与非平衡临界现象

吕树臣 著



044.2

38



哈尔滨出版社

责任编辑：宁常琿

封面设计：孙博文

平衡与非平衡临界现象

Pingheng Yu Feipingheng Linjie Xianxiang

吕树臣 著

哈尔滨出版社出版发行

哈尔滨市龙江印刷厂印刷

850×1168毫米 1/32开本 11.5印张 285千字

1998年1月第1版 1998年1月第1次印刷

印数1~1000册

ISBN 7-80639-093-6/0·5 定价：20.00元

内容提要

本书阐述了平衡与非平衡临界现象的基本概念、基本方法和最新进展,重点介绍了平衡与非平衡临界现象的理论在磁性多层膜与超晶格以及化学反应中的应用,其中许多内容都是近期研究成果。

全书共分八章:系综理论,相变与临界现象,双时格林函数及其应用,磁性多层膜与超晶格的相变与临界现象,非平衡相变,非平衡统计算符,非平衡统计力学中的运动方程,反应-扩散系统的动力学。

本书可供高等院校相关专业的研究生、教师和从事这一研究领域的科研工作者参考。

Abstract

The fundamental ideas, methods and the newest advancements in critical phenomena of equilibrium and nonequilibrium systems are introduced in the present book. And the theory is applied to study magnetic multilayer structures and superlattices and chemical reaction systems. Many recent investigation results are given.

The book is divided into eight chapters: Ensemble theory, Phase transition and critical phenomena, Double-time Green's function and its applications, Phase transition and critical phenomena in magnetic multi-layer structures and superlattices, Nonequilibrium phase transition, Nonequilibrium statistical operator, Equation of motion in nonequilibrium statistical mechanics, Dynamics of reaction-diffusion system.

The book can provide reference for university graduate students and teachers in relevant majors and the researchers who are engaged in the field.

序

平衡与非平衡临界现象一直是国际上凝聚态物理和统计物理的前沿研究课题之一,目前已成为跨越多种学科的学术领域,广泛受到物理学、化学、金属学和生物学工作者们的关注。它研究的范围极其广泛,显然,不是一本专著所能覆盖的。近年来对平衡与非平衡临界现象的研究进展迅速,已积累了许多重要研究成果。然而,这些重要研究成果只能在期刊上找到,尚缺少系统的介绍。

本书致力于向读者系统地介绍研究平衡与非平衡临界现象的基本方法和近期主要的研究成果,以增进读者对这一研究领域的了解和需求。全书大致分两个部分。第一部分主要阐述平衡系统的临界现象,重点介绍基本理论和方法以及它们在人工微结构材料—磁性多层膜和超晶格体系中的应用;第二部分主要阐述非平衡临界现象,特别是化学反应中的非平衡相变与临界现象,同时还介绍了非平衡态统计物理学的近期研究成果。

本书在写作过程中,获得多方面的支持和协助。首先,应感谢哈尔滨师范大学凝聚态物理研究所所长王选章教授近年来在磁性多层膜和超晶格临界行为的研究方面的指导和合作,本书第四章的许多学术见解与他领导的研究集体的科研工作是分不开的。本书的部分内容曾为哈尔滨师范大学物理系开过选修课程,也曾在哈尔滨 CFS 研究小组讲授过。我应感谢这个跨学科的小组对本书的部分章节的研讨和予以我的启示。其次,还要感谢黑龙江省教委自然科学基金和哈尔滨师范大学优秀青年基金对本书予以的资助。此外,日本大阪大学化学系小森田精子教授和大阪市立大学物理系菅野礼司教授曾阅读了本书的部分内容并曾予以大量的资料,南京大学物理系欧阳容百教授和美国 Arizona State University

化学系主任林圣贤教授就本书的部分内容曾通信进行过研讨,高红同事为本书绘制了部分图形,哈尔滨出版社刘培杰先生和哈尔滨师范大学化学系李健华先生对本书的出版予以大力的协助,在此一并向他们表示衷心地感谢。限于水平,错误与不妥之处,请读者指正。

吕树臣

1997年12月于哈尔滨

目 录

序

第一章 系综理论	1
第一节 统计系综	1
第二节 刘维方程	6
第三节 吉布斯统计系综	10
第四节 玻色-爱因斯坦和费米-狄拉克统计	18
第五节 两种玻色气体反应混合系统的玻色-爱因斯坦凝聚	26
第六节 超流费米流体	30
参考文献	38
第二章 相变及临界现象	39
第一节 引言	39
第二节 平均场理论	41
第三节 描述连续相变的参量	54
第四节 重整化群的基本思想	69
第五节 重整化群方法在二维 Ising 模型中的应用	78
第六节 平均场重整化群及其应用	87
第七节 有效场重整化群	94
参考文献	97
第三章 双时格林函数及其应用	100
第一节 推迟格林函数的定义和运动方程	100
第二节 格林函数运用方法	107
第三节 格林函数在铁磁理论中的应用	114

第四节	格林函数在双原子共振激发谱中的应用	140
第五节	格林函数在超流费米流体中的应用	157
	参考文献	162
第四章	磁性多层膜与超晶格的相变与临界现象	164
第一节	引言	164
第二节	超晶格相变的平均场理论框架	166
第三节	超晶格临界行为的有效场理论	184
第四节	格林函数在超晶格中的应用	191
第五节	Ising 铁磁膜的临界行为	198
	参考文献	212
第五章	非平衡相变	216
第一节	引言	216
第二节	稳定性与推广的最小熵产生定理	222
第三节	化学反应中的非平衡相变	231
第四节	化学反应扩散系统中的非平衡临界现象	246
第五节	流体的 Benard 现象	256
	参考文献	271
第六章	非平衡统计算符	273
第一节	导论	273
第二节	非平衡过程与不可逆过程	275
第三节	非平衡统计密度算符的建立	278
第四节	非平衡统计密度算符的应用	288
	参考文献	302
第七章	非平衡统计力学中的运动方程	304
第一节	引言	304
第二节	运动方程的推导	307
第三节	广义流体动力学方程的量子统计力学推导	314
第四节	广义朗之万方程	322

第五节	最小熵产生定理和超熵判据的统计推导	324
参考文献		330
第八章	反应-扩散系统的动力学	332
第一节	引言	332
第二节	粒子数守恒方程	333
第三节	广义流方程及动力学系数	336
第四节	单分子反应	344
参考文献		350

Shu - Chen LU

《Critical Phenomena in Equilibrium and Nonequilibrium Systems》

CONTENTS

Preface.

Chapter One Ensemble Theory	1
Sec.1 Statistical ensemble	1
Sec.2 Liouville equation	6
Sec.3 Gibbs' statistical ensemble	10
Sec.4 Bose - Einstein and Fermi - Dirac Statistics	18
Sec.5 Bose - Einstein condensation in binary mixture system with gas feaction	26
Sec.6 Superfluid Fermi flow	30
References	38
Chapter two Phase Transition and Critical Phenomena ..	39
Sec.1 Introduction	39
Sec.2 Mean - field theory	41
Sec. 3 Parameters used to describe continuous phase transition	54
Sec.4 The basic idea of renormalization group	69
Sec.5 Renormalization group method in two - dimension Ising model	78
Sec. 6 Mean - field renormalization group and its application	87

Sec.7 Effective-field renormalization group	94
References	97
Chapter three Double-Time Green's Function and Its Applications	100
Sec.1 Definition of retarded Green's function and the equation of motion for Green's function.....	100
Sec.2 Application of Green's function	107
Sec.3 Green's function in ferromagnetic theory	114
Sec.4 Green's function method in two-atom resonance fluorescence	140
Sec.5 Green's function method in superfluid Fermi flow	157
References	162
Chapter four Phase Transition and Critical Phenomena in Magnetic Multi-layer Structures and Superlattices	164
Sec.1 Introduction	164
Sec.2 Mean-field theory in superlattice phase transition	166
Sec.3 Effective-field method in superlattice critical phenomena	184
Sec.4 Green's function in superlattices	191
Sec.5 Critical behaviours in Ising ferromagnetic film	198
References	212
Chapter Five Nonequilibrium Phase Transition	216
Sec.1 Introduction	216
Sec.2 Stability and the theorem of the generalized minimum entropy production	222
Sec.3 Nonequilibrium phase transition in chemical	

reactions	231
Sec.4 Nonequilibrium critical phenomena in chemical reaction-diffusion systems	246
Sec.5 Benard phenomenon in fluid	256
References	271
Chapter Six Nonequilibrium Statistical Operator	273
Sec.1 Introduction	273
Sec.2 Nonequilibrium processes and irreversible processes	275
Sec.3 Establishment of nonequilibrium statistical Operator	278
Sec.4 Applications of nonequilibrium statistical Operator	288
References	302
Chapter Seven Equation of Motion in Nonequilibrium Statistical Mechanics	304
Sec.1 Introduction	304
Sec.2 Derivation of equation of motion	307
Sec.3 Quantum statistical mechanical derivation of gener- alized hydrodynamic equations	314
Sec.4 Generalized Langevin's equation	322
Sec.5 Statistical derivation of the theorem of minimum entropy production and the criterion of superentropy	324
References	330
Chapter Eight Dynamics of Reaction-Diffusion System	332
Sec.1 Introduction	332

Sec.2 Conservation equation of particle number.....	333
Sec.3 Generalized flow equation and kinetic coefficients	336
Sec.4 Unimolecular reaction-diffusion system	344
References	350

第一章 系综理论

统计物理学所研究的对象和热力学所研究的对象一样,都是研究与温度有关的热现象。它所研究的具体系统都是由大量微观粒子所构成的宏观客体。关心的是这些大量的微观粒子的集体行为怎样影响系统的宏观物理性质,以及怎样建立宏观量与微观量之间的联系。

一般来说,构成系统的大量微观粒子之间存在各种相互作用。系统的能量除包含单个粒子的能量外,还包含粒子间相互作用的能量。此时单粒子概念已不能由它自身的坐标和动量来确定,它还和其他粒子的坐标、动量有关。也就是说,任何一个粒子的状态发生变化都会影响其余粒子的运动状态。在这种情况下,我们必须把系统当做一个整体来考虑,处理有相互作用的粒子组成的系统在统计物理学里通常采用系综理论。

第一节 统计系综

在统计力学中,我们研究系统在给定的宏观条件下的宏观性质,就是说所研究的系统处在某种确定的宏观约束条件下,如,对与外界没有相互作用的孤立系统,其宏观约束条件是系统具有确定的粒子数、体积和能量。给定了宏观约束条件,系统的宏观状态虽然是确定的,但是系统的微观运动状态却是多种多样的。统计物理学的任务之一,就是要确定宏观量与微观量之间的联系。为了建立二者之间的联系,首先必须明确系统的微观运动状态。它是构造统计系统理论的基础。

1.1.1 微观运动状态

在经典力学中,系统的动力学状态(即微观运动状态)用系统的一对共轭坐标来描述,即用广义坐标 q_i 和广义动量 p_i 。对于一个由 N 个粒子组成的系统,若共有 $3N$ 个自由度,系统的微观运动状态可用 $(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$ 来表示。若以 $q_i (i=1, 2, \dots, 3N)$, $p_i (i=1, 2, \dots, 3N)$ 为坐标轴建立 $6N$ 维坐标系称为相空间(或 Γ 空间),那么系统的微观运动状态在相空间里表示为一个点,称为相点。系统的动力学状态随时间的演变可用相点在相空间里画出的一条曲线来表示,称为相点在相空间里的轨迹。系统的可观测量,如能量、动量、角动量等是广义坐标和广义动量的函数,统称为动力学函数或力学量,表示为 $B(q, p)$ 。

在经典力学中,若给出表示系统能量的动力学函数 $H(q, p)$, H 称为哈密顿量,则系统的状态随时间的演化由下面的正则运动方程确定:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = - \frac{\partial H(q, p)}{\partial q_i} \quad (i=1, 2, \dots, 3N) \quad (1.1.1)$$

由方程组(1.1.1)的解 $q_i(t)$ 和 $p_i(t)$ 的唯一性可知,通过相空间的每个点只能画出一条满足(1.1.1)式的轨迹。当系统从不同的初态出发而运动,相空间中的代表点(相点)就将沿着不同的轨道运动,任何两个轨道都是不相交的。

由(1.1.1)式可知,任意动力学函数 $B(q, p)$ 的数值随时间也是变化的,变化速率由下式确定:

$$\frac{d}{dt} B(q, p) = \sum_{n=1}^{3N} \left(\frac{\partial B}{\partial q_n} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_n} - \frac{\partial B}{\partial p_n} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_n} \right)$$

或者

$$\frac{dB}{dt} = \{B, H\} \quad (1.1.2)$$

其中

$$\{B, H\} = \sum_{n=1}^{3N} \left(\frac{\partial B}{\partial q_n} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_n} - \frac{\partial B}{\partial p_n} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_n} \right) \quad (1.1.3)$$

称为动力学量 B 和 H 的泊松括号。

(1.1.2) 式是经典的动力学的基本方程。当动力学函数 B 等于 q_i 和 p_i 时, (1.1.2) 式变为方程组 (1.1.1)。由 (1.1.2) 式可以看出, 一个保守力学系统的哈密顿量在运动中不变, 这就是能量守恒, 它可以表示为

$$H(q, p) = E \quad (1.1.4)$$

这里 E 是表示系统能量的常数。在相空间里, (1.1.4) 式表示一个 $(6N-1)$ 维的曲面, 称为能量曲面。一个保守系的相点所经历的轨迹一定位于能量曲面上。

在量子力学中, 系统所处的微观运动状态 (或称量子态) 由波函数或用一组完全集合的力学量的量子数来表示, 这组量子数的数目等于系统的自由度数。系统的一个微观状态由特定数值的一组量子数决定。状态的演化由下列的薛定谔方程决定:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad (1.1.5)$$

其中 \hat{H} 为作用于波函数 ψ 的哈密顿算符, \hbar 为普朗克常数。

物质微观粒子的动力学状态若遵从经典力学的规律, 在此基础上建立的统计力学称为经典统计力学; 微观粒子的动力学状态若遵从量子力学规律, 由此而建立的统计力学称为量子统计力学。经典统计物理学与量子统计物理学的主要区别在于对微观运