

# 高等统计物理

## 说 明

本课程是热力学和统计物理基础上的高级课程，所以，不再系统地讲授热力学理论和近独立子系统统计物理（相当于林宗涵老师书的前七章）。对这部分内容，我会用一次课的时间回顾一下，请同学们也复习一下热统 I（重点是林老师书的第一、二、三、七章），以便更好地学新的内容。本课程内容主要包括（1）平衡态统计物理的系综理论；（2）不同空间维数的量子统计；（3）相变和临界现象：朗道理论。（4）相变和临界现象：标度理论和临界指数；（5）相变和临界现象：重整化群；（6）量子相变和 K-T 相变；（7）数值重整化群和密度矩阵重整化群简介；（8）非平衡态统计物理：Boltzmann 输运方程、H 定理和线性响应理论；（9）非平衡态统计物理：涨落现象；（10）统计物理中的数值计算方法：分子动力学简介；（11）统计物理中的中的数值计算方法：蒙特卡罗模拟；（12）量子蒙特卡罗模拟。（1）-（9）是板书，数值方法简介用 ppt。期末考试考（1）-（9）的知识，占总成绩的 60%；（1）-（9）相关的平时习题计入平时成绩；数值计算由我在课堂主讲，作业是分组文献阅读，读一些经典的数值计算原创文章，做一些小系统的编程计算，就所得结果进行课堂交流。这部分也计入平时成绩。平时成绩占总成绩 40%。

## 目 录

|     |                         |
|-----|-------------------------|
| 第一章 | 回顾热力学                   |
| 第二章 | 统计物理基本概念和近独立粒子系统统计物理的回顾 |
| 第三章 | 微正则系综                   |
|     | § 3.1 经典统计系综            |
|     | § 3.2 量子统计系综            |
|     | § 3.3 微正则系综             |
| 第四章 | 正则系综                    |
|     | § 4.1 从微正则系综到正则系综       |
|     | § 4.2 热力学量              |
|     | § 4.3 能量涨落、热力学极限和经典极限   |
|     | § 4.4 应用：非理想气体的状态方程     |
| 第五章 | 巨正则系综                   |
| 第六章 | 量子统计 d=1,2,3            |
|     | § 6.1 巨正则系综导出玻色统计和费米统计  |
|     | § 6.2 量子统计和波函数          |
|     | § 6.3 路径积分和量子统计         |
|     | § 6.4 任意子、辫子群和其他        |
|     | § 6.5 一维统计：与相互作用相关性     |
| 第七章 | 相变、临界现象和重整化群简介          |
|     | § 7.1 朗道二级相变理论简介        |
|     | § 7.2 临界现象和临界指数         |

|   |
|---|
| § 7.3 量子相变                              |
| § 7.4 Ising 模型： § 7.4.1 平均场近似           |
| § 7.4.2 一维伊辛模型的精确解                      |
| § 7.4.3 二维伊辛模型的精确解                      |
| § 7.4.4 1+1 维量子伊辛模型                     |
| § 7.5 重整化群： § 7.5.1 实空间 RG              |
| § 7.5.2 举例：一维伊辛模型                       |
| § 7.6 数值重整化群和 DMRG 简介：                  |
| § 7.6.1 动量空间 RG；                        |
| § 7.6.2 Wilson's 数值 RG                  |
| § 7.6.3 DMRG 简介                         |
| § 7.7 Kosterlitz-Thouless 相变            |
| 第八章 非平衡态统计物理                            |
| § 8.1 引言                                |
| § 8.2 Boltzmann 积分微分方程： § 8.2.1 漂移项的计算； |
| § 8.2.1 碰撞项的计算                          |
| § 8.3 H 定理，H 函数和熵                       |
| § 8.4 Boltzmann 方程的应用                   |
| § 8.5 线性响应理论：力学扰动                       |
| § 8.6 线性响应理论：热力学扰动                      |
| § 8.7 涨落现象：热力学量： § 8.7.1 准热力学理论；        |
| § 8.7.2 高斯分布；                           |

|   |
|---|
| § 8.7.3 涨落的空间关联                         |
| § 8.8 涨落现象：随机外力和布朗运动：                   |
| § 8.8.1 朗之万方程；                          |
| § 8.8.2 布朗粒子的扩散；                        |
| § 8.8.3 布朗运动中的时间关联                      |
| § 8.8.5 涨落-耗散定理；                        |
| § 8.8.6 布朗运动类似的物理过程：电路中的热噪声和电压涨落；       |
| § 8.8.7 散粒噪声                            |
| § 8.9 主方程和福克-普朗克方程：                     |
| § 8.9.1 Master 方程                       |
| § 8.9.2 福克-普朗克方程                        |
| 第九章 统计物理中计算方法简介                         |
| § 9.1 引言                                |
| § 9.2 分子动力学简介： § 9.2.1 Verlet algorithm |
| § 9.2.2 辛算法                             |
| § 9.3 蒙特卡罗方法：                           |
| § 9.3.1 概说                              |
| § 9.3.2 均匀或权重取样                         |
| § 9.3.3 对平衡体系的马尔可夫链取样                   |
| § 9.3.4 重要性取样 Metropolis algorithm      |
| § 9.3.4 伊辛模型                            |

#### § 9.4 相变和蒙特卡罗模拟

#### § 9.5 变分蒙特卡罗

#### § 9.6 量子蒙特卡罗:

##### § 9.6.1 相互作用玻色子, SSE 算法

##### § 9.6.2 相互作用费米子, Determinantal QMC

##### 和连续时间 QMC

#### 教科书和参考文献

- [1] 热力学与统计物理, 林宗涵, 2006, 北京大学出版社
- [2] 统计物理学, 苏汝铿, 2003, 高等教育出版社
- [3] Statistical Mechanics 3<sup>rd</sup> Edition, P. K. Pathria and P. D. Beale, 2012, 世界图书出版社
- [4] Statistical Mechanics 2<sup>nd</sup> Edition, F. Scwabl, 2006, Springer
- [5] Statistical Mechanics, R. P. Feynman, 1998
- [6] Statistical Physics, L. D. Landau and E. M. Lifshitz, 1980.
- [7] Thermodynamics of a One-Dimensional System of Bosons with Repulsive Delta-Function Interaction, C. N. Yang and C. P. Yang, J. Math. Phys. 10, 1115 (1963).
- [8] General Theory for Quantum Statistics in Two Dimensions, Y. S. Wu, Phys. Rev. Lett. 52, 24, 2103 (1984).

- [9] "Fractional statistics" in arbitrary dimensions: A generalization of the Pauli principle, F.D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 67, 937 (1991).
- [10] Statistical Distribution for Generalized Ideal Gas of Fractional Statistics Particles, Y. S. Wu, Phys. Rev. Lett. 73, 922 (1994).
- [11] Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups, S. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
- [12] Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, S. White, Phys. Rev. B48, 10345 (1993).
- [13] Numerical Simulation in Statistical Physics, P. Viot, 2006, <http://www.lptmc.jussieu.fr/user/viot/COURS/simulation.pdf>
- [14] 分子模拟, 陈正隆, <http://vdisk.weibo.com/s/aQWdvCGsXljz9>
- [15] Stochastic series expansion method with operator-loop update, A. W. Sandvik, Phys. Rev. B 59, R14157, (1999).
- [16] Quantum Monte Carlo, K. Haule, 2006: <http://www.physics.rutgers.edu/grad/509/qmc.pdf>

## 第一章 热力学与统计物理

热力学和统计物理研究的是热现象。热力学是热现象的宏观唯象理论。统计物理则研究热现象的微观理论。热力学不管物体是由什么物质组成, 不管微观结构, 把物质看成连续介质。统计物理则一开始就考虑物质是由大量微观粒子组成, 由微观性质出发, 结合统计规律, 导出宏观性质。下面我们总结一下热力学和统计物理 I 的主要结论:

### 1.1 热力学的基本概念与基本规律

\* 平衡态: 在没有外界影响一条件下, 物体各部分的性质长时间不发生变化而达到的状态。

\* 热平衡定律: A 与 B 平衡, B 与 C 平衡, 则 A 与 C 平衡。

\* 温度: 衡量物体间是否达到平衡的物理量称为温度。一切达到热平衡的物体温度相等。

\* 确定温度具体数值的规则叫温标。

\* 物态方程: 物体的物理状态由几何参量 ( $V, A, L$ ), 力学参量 ( $p, \sigma, F$ ), 电磁参量 ( $E, P, \vec{M}, M$ ) 和化学参量等描述, 温度与这些状态参量之间遵从关系

$$T = T(p, V, \dots)$$

称为物态方程。

\* 内能: 绝热 (不与外界有热交换) 过程中外界对物体做功与初态末态内能差  $U_2 - U_1 = W_a$  (外界对物体作绝热功)。

\* 热力学第一定律: 推广到非绝热过程, 系统从外界吸热  $Q = U_2 - U_1 - W_a$ , 即能量守恒。

\*  $C_y = \frac{dQ_y}{dT}$  称为热容,  $y$  表示不变量,  $y = V$ , 定容,  $y = p$  定压, 等。

单位质量的  $C_y$  称为比热。

\* 内能是状态函数,  $H = U + pV$  是焓, 是绝热过程中外界做功的度量,  $\Delta U = W_a$  是绝热过程中外界吸热做功  $Q_p = \Delta H$

\* 焓: 对可逆过程, 态函数焓

$$\Delta S = S - S_0 = \int_{初态(i)}^{终态(f)} \frac{dq}{T} \quad \text{与过程无关}$$

\* 热力学第二定律:

$$\Delta S \geq \int_{(i)}^{(f)} \frac{dq}{T}$$

焓熵比及理

\* 热力学基本方程: 第一定律 + 第二定律

$$dU = Tds + \sum_i F_i dg_i, \quad \text{例如: } dU = Tds - pdv$$

例如, 对 p-V-T 系统

$$dU = Tds - pdv$$

\* 自由能:  $F = U - TS$

$$dF = dU - d(TS)$$

例如:  $dF = -sdt - pdv$  (等温等压向自由能减少的方向)

\* Gibbs 自由能:

$$G = F + pV$$

例如:  $dG = -sdt + vdP$

等温等压过程, G 永不增加

## 1.2 均匀系(单相系)的平衡

\* 均匀系, 顾名思义, 就是各部分性质完全一样以均匀

\* 均匀系的微小可逆过程由热力学基本微分方程

描述. 根据自变的不同, 可以有四种等价描述,

例如对 p-V-T 系统: 自然 Maxwell 关系

$$dU = Tds - pdv \quad (S, V) \quad \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V$$

$$dH = Tds + vdp \quad (S, p)$$

$$dF = -sdt - pdv \quad (T, V)$$

$$dG = -sdt + vdp \quad (T, p)$$

\* 可能的热力学量:

(1) p, V, ...; T

(2) 与热力学方程联系, 热力学量的函数

即各种变化, 膨胀系数, 压缩系数,

热容系数, ... 可求. (热力学, 热力学)

U, S, F, G 等不可直接测出

(3) 应用: 理想气体, 范德瓦耳斯气体,

超流体, 超导体等

(复相系, 例如水)

## 1.3 单系系的相变热力学

(单一物质)

\* 单相系当处于单一系(即相同化学性质), 讨论相变, 就是整个单相系性质发生的变化, 从一平衡态变为另一平衡态

\* 系统处于某一相中, 就是系统处于热力学平衡中

热力学平衡判据:  $S = S_{max} \Leftrightarrow$  孤立系处于平衡态

数学表达为:  $\delta S = 0, \delta^2 S < 0, \delta U = \delta V = \delta N = 0$

S: 准变动, 可动, 变动

\*  $\delta S = 0, \delta^2 S < 0$ , 挑出局部相对极大, 真正极大是几个极大中最大的那个, 其他极大称为亚稳

\*  $\delta S = 0, \delta^2 S = 0$ , 这时,  $\delta^3 S = 0$  是保证稳定的条件.  $\delta^2 S < 0$  保证系统是稳定的. 这样稳定的系统称为临界态. 例如气-液相变的临界点

\* 焓熵判据对孤立系. 从应用角度, 热力学平衡也可用 (1) 自由能判据, (T, V, N) 不变, 自由能极小  $F = F_{min}$

(2) 吉布斯自由能判据, (T, p, N) 不变,  $G = G_{min}$

(3) 内能判据: (V, S, N) 不变,  $U = U_{min}$

~~相变热力学~~ ~~平衡判据~~

\* 对单相系, 讨论可动, 则内能的基本

热力学方程是: (对 p-V-T 系统)

$$dU = Tds - pdv + (u - Ts + pv)dN$$

$$u - Ts + pv = \frac{G}{N} \equiv \mu, \quad \text{化学势, 1 mol 的 Gibbs 函数}$$

$$(U = Nu, V = Nv, S = Ns)$$

\* 所有的热力学基本微分方程都多一项  $\mu dN$

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S, V} = -\left(\frac{\partial H}{\partial N}\right)_{S, p} = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T, V} = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T, p}$$

$$d\mu = -sdt + vdp$$

$$U = F - \mu N = U - TS - \mu N = F - G \quad \text{称为巨势}$$

\* 所有平衡判据都要考虑  $\mu dN$  这一项

\* 由平衡判据, 可以得出达到平衡的条件, 即状态变量之间的关系. 例如, 焓熵判据可给出两相之间的平衡条件是

$$T_1 = T_2, p_1 = p_2, \mu_1 = \mu_2$$

相平衡 力学平衡 相变平衡 (不发生相变)

(二相,  $S_i, U_i, V_i, N_i, i=1,2$  都可变, 但是体积不变, 总熵不变, 总内能不变)

又例如, 若总熵不变, 则  $\delta F=0$  条件  
得出:  $p_1 = p_2, \mu_1 = \mu_2=0$ . 熵不变系统  
化学势为 0. 例如, 麦克斯韦, 声子.

\* 由平衡稳定判据, 可得稳定条件. 稳定条件  
往往由一些响应系数给出, 例如, 自由能极小,  
要求定容比热  $C_V > 0$  和 等温压缩系数  
 $\kappa_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T > 0$ . 等.

\* 根据相平衡条件, 可以得出相图:

例如, 二相平衡:  $\mu_1 = \mu_2, T_1 = T_2, p_1 = p_2 = p$ .  
则  $\mu_1(T, p) = \mu_2(T, p)$  给出  $T-p$  平面上一条曲线,  
这就是二相共存线. 若共有三相,  $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$   
则完全确定  $(T, p)$ , 这也就是三相点. 另外,  
过某一点  $(T, p)$  后, 只有一个相是稳定的. 这样  
一点是临界点. 水相图.

\* 在研究低量化学反应过程中, 实验总结  
出一条规律是: 在等温等压条件下, 反应向放热  
方向进行, 即  $\Delta H < 0$ .

\* 热力学表明, 等温等压化学反应向着  $\Delta G$  方向进行.

\*  $\Delta G = \Delta H - T \Delta S \Rightarrow \lim_{T \rightarrow 0} (\Delta S)_T \rightarrow 0$  Nernst 定理

\* 热力学第三定律:

(1) Nernst 定理

(2) 绝对熵  $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$ .

(3) 不可能通过有限步骤使物体冷却到绝对零度.

### 1.5 线性非平衡热力学

\* 线性非平衡态热力学: 线性即偏离平衡态  
不远. 在每一个宏观小、微观大的区域, 可用  
(局域)平衡近似.

\* 傅里叶定律  $\Rightarrow$  推广的热力学第一定律 (把  
小块内度心动能加上)

\* 对小块, 热力学微分方程成立.

\* 第二定律,  $\theta = \frac{1}{T}$  表示小块熵产生

\* 关于相变, 我们以后将详细讲, 暂时就不  
再继续展开.

1.4 热力学第三定律: 多组分相平衡和化学平衡

\* 多组分就是不同化学 (广义) 组成的系统, 平衡  
态又可以由  $(T, p, N_1, \dots, N_k)$ .  $(N_1, \dots, N_k) = \{N_i\}$ .

\* 基础热力学方程中  $\mu dN \rightarrow \sum_i \mu_i dN_i$ .

$$\mu_i = \left( \frac{\partial G}{\partial N_i} \right)_{T, p, \{N_j\}_{j \neq i}}$$

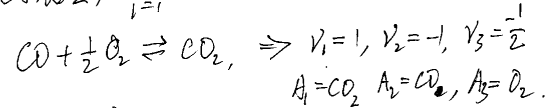
\*  $(T, p, \{N_i\})$  满足 Gibbs 关系:

$$S dT - V dp + \sum_i N_i d\mu_i = 0.$$

其中只有  $k+1$  个是独立.

\* 若不发生化学反应, 相平衡条件可类似导出.

\* 发生化学反应,  $\sum_i \nu_i A_i = 0$ , 例如



则化学平衡条件是

$$\sum_i \nu_i \mu_i = 0.$$

“+”为生成物  
“-”为反应物

则  $\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_s + \theta$ ,  $\vec{J}_s$  为热流密度

$\vec{J}_s = \frac{\partial \epsilon}{\partial T}$ ,  $\vec{J}_s$  为热流,  $\theta = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial t} \right) > 0$   
热产生率

\*  $\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_n = 0$ , 粒子守恒.

$n$  为 density.  $\vec{J}_n$  为 particle current density.

\* 输运过程:

(1) 热传导 Fourier 定律:  $\vec{J}_s = -\kappa \nabla T$  扩散系数

(2) 扩散 Fick 定律:  $\vec{J}_n = -D_n \nabla n$

(3) 欧姆定律:  $\vec{J}_e = \sigma \vec{E} = -\sigma \nabla \phi$

一般  $\vec{J} = (J_1, \dots, J_n)$  为热力学流,  $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$   
为力, 则  $J_k = \sum_{\lambda} L_{k\lambda} X_{\lambda}$ ,  $L_{k\lambda}$  一动力系数.

\* 昂萨格倒易关系:  $L_{k\lambda} = L_{\lambda k}$ .  $L$  是时对称阵

•

第=章 统计物理基本假定和近独立  
粒子系统统计的结果回顾.

把握好宏观物体和现象实验基础上得出一些规律的经验总结,与物体微观细节无关。统计物理则研究大量微观粒子,从经典、量子物理的基本原理出发,综合大量粒子呈现出的新规律:统计规律,导出宏观物体的性质。

## 2.1 微观状态扫描

\* 经典：组成宏观物体~基本单元~粒子，或“粒子”，  
可以是分子、原子，也可以是光子、自旋，等。我们这  
称为“粒子”，用广义坐标  $(q, p)$  ( $q^a, a=1, \dots, r$ )  
描述，单粒子能量  $\varepsilon = \varepsilon(q, p)$ 。一个微观大，宏  
观小~单粒子相空间中的体积： $d\omega = dq dp$ 。  
对  $N$  粒子组成~宏观物体，广义坐标和广义动量  
( $q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s$ ),  $S = N \cdot r$  ~~相空间~~ 多粒子相空间  
$$d\Omega = dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s$$
  
 $\{q_1, \dots, q_s; p_1, \dots, p_s\} = \Gamma$  称为相空间，一个点就代表  
一个微观状态。

\* 不同设计~数据,造成不同~系统误差. (14)

~~2.2 设计标准~~

## 2.2 平衡态位计 $m$ 等几率原理

\* 宏观观测是宏观小、微观大，宏观连续、微观不连续，每次观测都对应于极大数目的微观状态。所以，除了微观运动规律外，统计规律必须引出。这是由宏观系统与外界的作用不可避免及随机性决定的。所以几个决定宏观状态~变量与巨观~微观状态~联系也必然由几率性相联系。

\* 宏观又是相互微观量统计平均值.

\* 在一定的宏观状态下,微观状态出现的几率是均匀的  
物理基础假设给出.

\* 对于一个孤立子, 即  $(E, V, N)$  固定~系统. 最简单, 朴素~假设是等几率假设, 改称为等几率原理:  
对于处于平衡态下的孤立子, 系统各子可能~微观状态出现的几率相等.

\* 可能~微观状态是指与宏观状态  $(E, V, N)$  相容的微观状态

\*量子: 单粒量子由一组量子数标志,

即一组可对易力学量所对应的本征值描述 (本征值可连续, 也可能是分立). 例如, 对自由粒子的 ~~本征值~~ 本征值, 能的本征值与经典一样, 都是连续的. 但在一个盒子中, 波函数  $\psi(x) \propto e^{ikx}$ , 而是离散的, 他也要考虑  $m$ .

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{L^2 m} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad q = \frac{2\pi \hbar}{L} (n_1, n_2, n_3).$$

对于(3)-群, 可以有不同量子态, 例如  $n_1=0, n_2=1, n_3=2,$

$\vec{n} = (0, \pm 1, \pm 2)$ , 与它都有相同~性质, 简并度  $g = 4$ .

\* 量子经典对应: 单粒子状态  $\leftrightarrow \Delta\omega = h\nu$  单粒子作功

\* 量子场论的同一性: 用数量描述粒子, 无论是光子、原子、电子还是自旋粒子, 都是全同的。

\* 在三维或更高空间, 只有玻色子和费米子.

\* 在  $d=2, 1$ , 可以有反非玻色、又非费米统计。  
(见后面讲)

\* 全同费米子不能处于同一单粒子状态. (Pauli 原理)

\* 如果~~电子~~可以“局域化”，则可分群。如局域在 $\alpha$ 区域 $\alpha$ 区域 $\beta$ 及 $\gamma$ ，不能带中 $\pi$ 电子，...

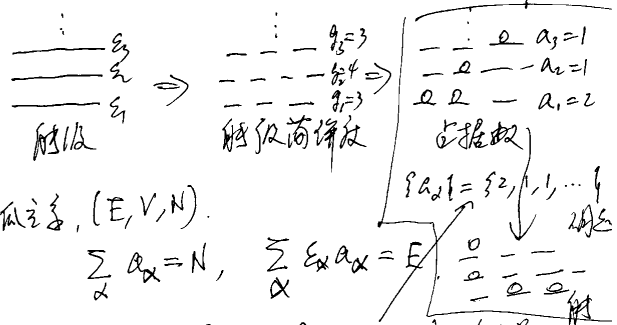
2.3 近独立粒子系统 - 统计物理

\* 近独立是指相互作用很弱, 只对体系总能量起作用, 但对体系总角动量又做贡献可忽略。

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i$$

$\varepsilon_i$  为第  $i$  个粒子的能量

\* 对给定的特征,  $g_{\alpha}$ ,  $\alpha=1, \dots$ , 是特征指标,  $g_{\alpha}$  为每个特征~商阶数 (recall 在 Box 中自由因子). 由于特征~全局性, 0 指标不重要, 重要~是每个特征上占据~特征数  $g_{\alpha}$ .  $\{g_{\alpha}\}$  称为接触数~级次分布



\* 对孤立子,  $(E, V, N)$ .

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha} = N, \quad \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha} = E$$

\* 给定一个能级分布由分布  $\{a_i\}$ , 由于每个单粒子的能量可有多不同状态,  $\therefore$  一个能级分布可以有不同微观状态 ~~对应~~ 与  $\{a_i\}$  对应, 设  $W(\{a_i\})$  为对应一能级分布态数. 由等几率原理,  $\{a_i\}$  出现的几率  $P(\{a_i\}) \propto W(\{a_i\})$ .

\* 量子态也有可区分和不可区分, 对可区分的,

$$W(\{a_\alpha\}) = \frac{N!}{\prod_\alpha a_\alpha!} \prod_\alpha g_\alpha^{a_\alpha}$$

与  $g_\alpha$  有关, 就是简并度贡献. 而前一个因子就是  $N$  个粒子放在不同盒子中, 每个盒子放  $a_\alpha$  是  $m$  组合数. 由最可几分布, 可以证明配分函数, 有热力学量, 则可求出所有热力学量. 这是 Boltzmann 统计的结果

\* 对 Fermi 子和 Bose 子, 它们在不同能级上仍是可区分的, 只要考虑能级中  $m$  不可分辨性和 Pauli 原理. 结果是

$$(对 Fermion) W_F(\{a_\alpha\}) = \prod_\alpha \frac{g_\alpha!}{a_\alpha! (g_\alpha - a_\alpha)!}$$

$$W_B(\{a_\alpha\}) = \prod_\alpha \frac{(g_\alpha + a_\alpha - 1)!}{a_\alpha! (g_\alpha - 1)!}$$

\* 最可几分布结果导出 Bose 和 Fermi 统计配分函数

\* 近独立子系的统计物理结果可以推广到一般情况, 但最可几分布推导方式不成. 这就是我们这门课要讲的一部分内容.

任何物理可观测值是微观力学量的统计

平均值  $\bar{O} = \int d\Omega \rho D \cdot \int d\Omega \rho = 1$

\* 系统处于某一微观状态 (把话说开) = 处于该微观状态的系综 (说清楚)

\* 处于  $d\Omega$  中的  $\rho d\Omega$  个系综, 集合称为一个统计系综. 即系综是假想  $m$  和所研究系 (性质完全相同). 彼此独立, 处于某一微观状态  $m$  下子系一集合.

### §3.2 刘维 (Liouville) 定理

刘维定理: 子集  $m$  几率密度 (或代表点密度) 在运动中不变, 即  $\frac{d\rho}{dt} = 0$  或  $\frac{d\tilde{\rho}}{dt} = 0$ .

刘维定理: ~~代表点~~ 代表点密度守恒 ~~不变~~ ~~不变~~ ~~不变~~

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_\rho = 0, \quad \vec{J}_\rho = \rho \vec{v}$$

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial q_i}, \frac{\partial}{\partial p_i} \right), \quad \vec{v} = \left( \dot{q}_i, \dot{p}_i \right)$$

用正则方程代刘维定理:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \{ \rho, H \} = 0$$

## 第三章 微正则系综

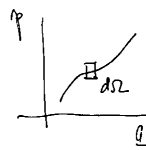
平衡态统计一般理论是系集理论, 它适用于任何宏观多粒子系统. 统计系集包括微正则, 正则和巨正则系集, 前者是基础, 但后者在实际计算中更方便.

### §3.1 经典统计系集

经典力学中微观状态就是相空间中  $m$  一个点, 它变化遵从正则运动方程

$$\dot{q}_i = -\frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad i=1, \dots, s$$

$(q_i(t), p_i(t))$  形成一条相轨道, 相点 (主) 运动.



$$d\Omega = dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s$$

是相体元,

设  $\Gamma$  为给定物理条件下所有可能微观状态,  $\rho d\Omega$  为  $d\Omega$  中  $m$  微观状态数, 则

$$\rho d\Omega = \frac{\delta \Omega}{\Gamma} = \frac{\rho d\Omega}{\int \rho d\Omega}$$

状态出现在  $d\Omega$  内几率.  $\rho = \frac{\delta}{\Gamma}$  几率密度.

正则方程

$$\frac{d\tilde{\rho}}{dt} + \tilde{\rho} \{ \tilde{\rho}, H \} = 0 \quad (1)$$

$$\therefore \frac{d\tilde{\rho}}{dt} = \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \sum_i \left\{ \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial p_i} \dot{p}_i \right\}$$

$$= -\tilde{\rho} \sum_i \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right\} = -\tilde{\rho} \{ \tilde{\rho}, H \}$$

正则方程  $\frac{d\tilde{\rho}}{dt} + \tilde{\rho} \{ \tilde{\rho}, H \} = 0$  或  $\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial t} + \rho \{ \rho, H \} = 0$

\* 刘维定理是相空间代表点密度的运动方程, 是力学定律. 但它的统计假设提供依据.

\* 量子统计: 用量子态代替经典相空间;

① Schrödinger eq. 代替正则方程;

② 统计力学代替统计力学;

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(0) e^{iHt/\hbar}$$

$$\dot{\psi}(t) = -\frac{i}{\hbar} H \psi(t) e^{iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} \dot{\psi}(0)$$

$$\dot{\psi}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \psi(t)] \psi(t)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\rho, H] = 0 \quad \text{刘维方程}$$

$$\bar{O} = \sum_n \rho_n \langle O | \psi_n \rangle = \text{Tr} \rho O$$

### §3.2 量子统计系

(19)

\* 对量子系统，我们用波函数或态变量来代替经典系统~相空间~代表集。设量子系统~波函数为  $\psi_n$ ，或  $|n\rangle$ ，则  $A_n = \langle n | \hat{A} | n \rangle$  是量子系统~可观测量的平均值。

对统计系，我要考虑一系列~态， $|n\rangle, n=1, \dots$ ，其中  $n$  有  $n$  个简并度，即有  $n$  个态，这些态称为

$\nu = \sum_n \rho_n$  是一系列~几率。  $\sum_n \rho_n = 1$ 。

~~量子统计系~~ 量子统计平均值为

$$\bar{A} = \langle A \rangle = \sum_n \rho_n A_n$$

\* 统计系 (或密度矩阵)

$$\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle \rho_n \langle n|$$

$\langle ij \rangle = \delta_{ij}$ ,  $\hat{\rho}$  和  $\hat{A}$  的矩阵是

$$\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle = \sum_n \langle i | n \rangle \rho_n \langle n | j \rangle$$

$$A_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle$$

$$\bar{A} = \sum_{ij} \rho_{ij} A_{ji} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}), \text{Tr} \hat{\rho} = 1$$

### §3.3 微正则系

\* 经典微正则系， $(E, N, V)$  不变~系统，孤立系。

刘维定理  $\frac{d\rho}{dt} = 0$ ，若系统在相空间中不随时间

变，则要求的  $\frac{d\rho}{dt} = 0$  为必要条件。在一条相轨道

道内， $\rho$  为常数。或在一条相轨道 (一条轨道

道~或轨道) 内  $\rho$  为常数。但这不能保证不同轨道

道~ $\rho$  相同。微正则系~基本假设是，~~在相空间中~~

当  $H(q, p) = E$  时  $\rho = \text{const}$ 。  $H \neq E$  时， $\rho = 0$ 。考虑

则  $E$  严格为一常数很困难，量子系~处理是

$$\rho = \begin{cases} C, & \text{当 } E \leq H \leq E + \Delta E \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} C \int_{\Delta E} dq = 1, \bar{O}(q, p) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} C \int_{\Delta E} O dq$$

\* 各态历经：等几率原理或微正则系~意味着

只要时间足够长， $(E, N, V)$  对应~微正则系~态都可能

出现。即各态历经。但这与各态历经是由于微正则

存在~虫边~可忽略~与外界~相互作用导致~。而不是

由  $H$  决定~。即~是~波函数~各态历经假设。

\*  $\hat{\rho}$  的刘维方程

$|n\rangle$  满足 Schrödinger eq.

$$i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle = \hat{H} |n\rangle$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \sum_n \left\{ \left( i \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle \right) \rho_n \langle n| - |n\rangle \rho_n \left( i \frac{\partial}{\partial t} \langle n| \right) \right\}$$

$$\hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} + i [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0$$

( $\hat{\rho}$  的 Heisenberg eq.)

$$\sum_n \left( \hat{H} |n\rangle \rho_n \langle n| - |n\rangle \rho_n \langle n| \hat{H} \right)$$

\* 量子微正则系：① 如系~全同性

$$\rho_n = \begin{cases} C, & E_n = E \\ 0, & E_n \neq E \end{cases}$$

即系~能级为  $E$ ，则出几率为  $C$ ，否则为 0。

$$C \text{ 由 } \sum_n \rho_n = C \left( \sum_{n(E_n=E)} 1 \right) = 1$$

( $\rho_n$  表示  $E_n = E$  的量子态数)。

$$N(E, V, N) = \left( \sum_{n(E_n=E)} 1 \right), \text{ 则 } C = \frac{1}{N(E, V, N)}$$

作：求~系~

### §3.4 微正则系~中宏观~讨论

经典~

$$\bar{A} = \int A(q, p) \rho dq$$

$$\Rightarrow \bar{A} = \frac{1}{\Omega} \int_{H \leq E} A dq$$

$$\text{量子: } \bar{A} = \sum_{(E \leq E_n)} \rho_n A_n$$

# 第4章 正则系综

## §4.1 从微正则系综到正则系综

正则系综是指系统与大量热源接触达到平衡的系综, (T, V, N) 固定. 大量源提供确定能量.

① A 代表正则系综中 m 个系统, B 代表大量热源.

则 A+B 是一个孤立系 ( $E_{tot} = E_A + E_B$ ,  $N_{tot} = N_A + N_B$ ).

若 A 和 B 相互作用可忽略,  $E_{tot} = E_A + E_B$ . 取  $\Omega(E)$  为 A+B 的总态数, 当 A 处于某一状态, B 可处于  $\Omega_B(E_{tot} - E_A)$  态数.  $\therefore$  A 处于该状态的概率

$$P_{An} = \frac{\Omega_B(E_{tot} - E_{An})}{\Omega(E_{tot})}$$

$E_A$  对  $E_{tot}$  偏离小, 态是重要的. 由  $E_A \ll E_{tot}$ ,  $E_A \ll E_{tot}$  态是重要的. B 是具体性质不重要, 我们可用一个自由粒子来代替它. 由上节习题 1,

$\Omega_B(E_{tot} - E_A) \sim (E_{tot} - E_A)^M$ ,  $M \sim O(N_B) \sim O(N)$ . 由于 M 很大,  $E_{tot}^M (1 - \frac{E_A}{E_{tot}})^M = E_{tot}^M (1 - M \frac{E_A}{E_{tot}} + \dots)$  二项式展开把高阶项忽略不计.

内能

$$\bar{E} = \sum_n E_n P_n = \frac{1}{Z_N} \sum_n E_n e^{-\beta E_n}$$

$$= \frac{1}{Z_N} \left( -\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_n e^{-\beta E_n} \right) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N$$

$$T \text{ 强: } \frac{1}{k_B} = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial V}$$

$$P = \sum_n P_n S_n = \sum_n \frac{\partial E_n}{\partial V} e^{-\beta E_n} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N$$

$$dS = \frac{d\bar{E}}{T} + \frac{P}{T} dV = k_B (\beta d\bar{E} + \beta P dV)$$

$$= k_B \left( -\beta \frac{\partial}{\partial \beta} d \ln Z_N + dV \frac{\partial}{\partial V} \ln Z_N \right)$$

$$= k_B d \left( \ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N \right)$$

$$\therefore S = k_B (\ln Z_N - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N)$$

$$F = \bar{E} - TS = -k_B T \ln Z_N$$

## §4.3 量子极限与经典极限

(~~量子力学~~ 根号理论中, 能量用方根表示. 能量用方根, 能量是  $E$  与  $\bar{E}$  方根. 或方根. 能量方根,  $(E - \bar{E})^2 / \bar{E}^2$ , 或  $\sqrt{E - \bar{E}} / \bar{E}$ .

正则系综

$$(E_{tot} - E_A)^M = e^{M \ln(E_{tot} - E_A)}$$

$$\ln(E_{tot} - E_A) = \ln E_{tot} + \ln(1 - \frac{E_A}{E_{tot}}) = \ln E_{tot} - \frac{E_A}{E_{tot}} - \frac{1}{2} \left( \frac{E_A}{E_{tot}} \right)^2 + \dots$$

这时, 可以把  $O(E_A^2/E_{tot}^2)$  项忽略. 对  $\Omega_B$  作用同样处理.

$$P_{An} = \frac{1}{\Omega(E_{tot})} e^{-\ln \Omega_B} = \frac{1}{\Omega(E_{tot})} e^{\ln \Omega_B(E_{tot}) - \frac{\partial \Omega_B(E_{tot})}{\partial E_{tot}} E_A + \dots}$$

$$\approx \frac{\Omega_B(E_{tot})}{\Omega(E_{tot})} e^{-\beta E_A} \triangleq \frac{1}{Z_N} e^{-\beta E_A}$$

其中  $\beta = \frac{\partial \ln \Omega_B}{\partial E_{tot}}$ , 由大量度, 从熵

有  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .  $k_B$  是 Boltzmann 常数, T 是温度.

$$P_{An} \equiv P_n, \sum_n P_n = 1, \Rightarrow Z_N = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

$E_A = E_n$ ,  $Z_N$  就是正则系综的配分函数.

$$Z_N = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

## §4.2 热力学

$$A = \frac{\text{Tr}(A e^{-\beta H})}{Z_N} = \frac{1}{Z_N} \sum_n \frac{\text{Tr}(A | n \rangle \langle n |)}{\langle n | n \rangle} e^{-\beta E_n}$$

$$A = \sum_n A_{nn} P_n = \frac{1}{Z_N} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n}$$

$$= \frac{1}{Z_N} \sum_n \langle n | A e^{-\beta H} | n \rangle = \text{Tr}(A \hat{\rho})$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}$$

$$(\bar{E} - \bar{E})^2 = (\bar{E}^2 - 2\bar{E}\bar{E} + \bar{E}^2)$$

$$= \bar{E}^2 - 2\bar{E}^2 + \bar{E}^2 = \bar{E}^2 - \bar{E}^2$$

$$\bar{E}^2 = \sum_n E_n^2 P_n = \dots = \bar{E}^2 - \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} / N, V$$

$$\therefore (\bar{E} - \bar{E})^2 = -\frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} / N, V = k_B T \left( \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_{N, V} = k_B T^2 C_V$$

$\therefore$  热力学极限

$$\frac{\sqrt{(\bar{E} - \bar{E})^2}}{\bar{E}} = \frac{\sqrt{k_B T^2 C_V}}{\bar{E}} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$$

$$\propto T, \quad \propto T, \quad \propto T, \quad \propto T, \quad \propto T$$

\* 热力学极限是指,  $N, V \rightarrow \infty$ , 但子数

密度不变:  $n = \frac{N}{V}$  固定.

\* 我们前面都用对态求和, 量子

热力学  $\lambda_T = h / (2\pi m k_B T)^{1/2} \ll \bar{r}$  (平均间距)

$\Delta E = E_n - E_{n+1} \ll k_B T$  时, 可用经典力学.

$$\text{这时: } Z_N = \frac{1}{N! h^3} \int d\Omega e^{-\beta H(\Omega)}$$

$$A = \frac{1}{Z_N} \int d\Omega A e^{-\beta H}$$



§4.4 应用: 非理想气体状态方程

模型:  $E = K + V = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,j} \phi_{ij}$

$\phi_{ij} = \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$  是  $i$  与  $j$  间的作用

$Z_N = \int (d\vec{r}) e^{-\beta(K+V)}$

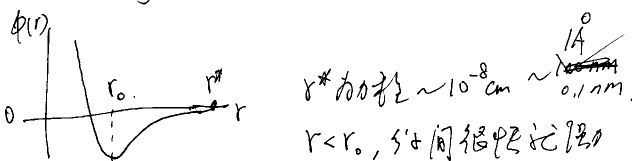
$(d\vec{r}) = \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\vec{p}_1 \dots d\vec{p}_N d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N$

对动量积分是简单的定积分, 是积掉动量

$Z_N = \frac{1}{N! \lambda_T^{3N}} Q_N(\beta, V)$ ,  $\lambda_0$  是热波长

$Q_N = \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N e^{-\beta \sum_{i,j} \phi_{ij}} = \int (d\vec{r}) \prod_{i,j} e^{-\beta \phi_{ij}}$   
是位形积分。对理想气体,  $\phi_{ij} \rightarrow 0$ ,  $Q_N = V^N$

我们假设  $\phi_{ij}$  是短程力, (例如, 范德瓦耳斯)



$$f_{ij} = e^{-\beta \phi_{ij}} - 1$$
  

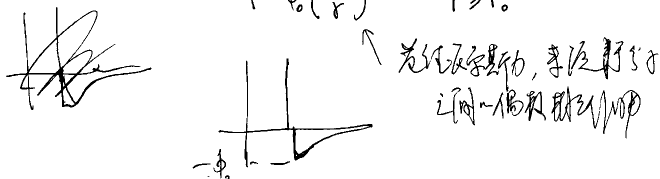
$$f(r) \Rightarrow \begin{cases} -1, & r \rightarrow 0, (\phi \rightarrow +\infty) \\ 0, & r \rightarrow r^*, (\phi \rightarrow 0) \end{cases}$$

$= \frac{N k_B T}{V} \left[ 1 - \frac{N}{2V} \int d\vec{r} f(r) \right]$

$B_2 = -\frac{N}{2} \int d\vec{r} f(r)$  即  $B_2$  是维里系数

同例求  $B_2$

$$\phi(r) = \begin{cases} +\infty & r < r_0 \\ -\phi_0 \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 & r \geq r_0 \end{cases}$$



$$B_2 = -\frac{N}{2} \int_0^\infty (e^{-\phi(r)/k_B T} - 1) 4\pi r^2 dr$$
  

$$= 2\pi N \left[ \int_0^{r_0} r^2 dr - \int_{r_0}^\infty (e^{-\phi(r)/k_B T} - 1) r^2 dr \right]$$

(设  $\phi_0 \ll k_B T$ )

$$\approx 2\pi N \left( \frac{r_0^3}{3} - \phi_0 \frac{r_0^3}{3k_B T} \right) \equiv Nb - \frac{Na}{k_B T}$$

$$\therefore p = \frac{N k_B T}{V} \left( 1 + \frac{Nb}{V} \right) - \frac{N^2 a}{V^2} \approx \frac{N k_B T}{V(1 - \frac{Nb}{V})} - \frac{N^2 a}{V^2}$$

$$\Rightarrow \left( p + \frac{N^2 a}{V^2} \right) (V - Nb) = N k_B T$$

范德瓦耳斯方程

$$Q_N = \int (d\vec{r}) \prod_{i,j} (1 + f_{ij})$$
  

$$= \int (d\vec{r}) \left( 1 + \sum_{i,j} f_{ij} + \sum_{i,j} f_{ij} \sum_{k,l} f_{kl} + \dots \right)$$

假设  $e^{-\beta \phi(r_0)} - 1 \ll 1$ , 即  $e^{-\beta \phi(r_0)/2} \ll 1$ , 则忽略高阶项,  $f_{ij}$  与  $j$  所积可忽略

$$Q_N \approx \int (d\vec{r}) \left( 1 + \sum_{i,j} f_{ij} \right)$$

$$= V^N + \frac{1}{2} N(N-1) V^{N-2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f_{12}$$
  
作积分变量  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}$ , 忽略边界效应

$$\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 f_{12} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r} f(r) = V \int d\vec{r} f(r)$$

$$\therefore Q_N \approx V^N \left( 1 + \frac{1}{2} (N^2 - N) V^{-1} \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\approx V^N \left( 1 + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\ln Q_N = N \ln V + \ln \left( 1 + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r) \right)$$

$$\approx N \ln V + \frac{N^2}{2V} \int d\vec{r} f(r)$$
 状态方程

求  $B_2$

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_N}{\partial V} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Q_N}{\partial V}$$
  

$$= k_B T \left[ \frac{N}{V} - \frac{N^2}{2V^2} \int d\vec{r} f(r) \right]$$

## 第五章 正则系综

与正则系综类似, 但库同时考虑粒子及

$E_T = E_A + E_B$ ,  $N_T = N_A + N_B$

$$p_A = p_{A,A} = \frac{\Omega_B(N_A, N_B, E_T - E_A)}{\Omega(N_T, E_T)}$$

$$= \frac{1}{\Omega(N_T, E_T)} e^{\ln \Omega_B(N_A, N_B, E_T - E_A)}$$

$$= \frac{\Omega_B(N_A, E_T)}{\Omega(N_T, E_T)} e^{-\frac{\partial \ln \Omega_B(N_A, E_T)}{\partial N_T} N_A - \frac{\partial \ln \Omega_B(N_A, E_T)}{\partial E_T} E_A}$$

$$\equiv \frac{1}{Z_A} e^{\beta \mu_A - \beta E_A}$$

去掉 A 指标,  $N_A \rightarrow N$ ,  $E_A \rightarrow E_N$

$$p_{N,n} = \frac{1}{Z_A} e^{-\beta(E_n - \mu N)}$$

由归一化,  $\sum_{n=0}^{\infty} \sum_N p_{N,n} = 1$

$$\Rightarrow Z_A = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_N = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$$

\* 巨正则系综是凝聚态物理中最常用。  
(effective)  $\mu = \text{Fermi energy}$ .

$$* \bar{N} = -\frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_G = -k_B T \left( \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_G \right)_T$$

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \frac{\partial}{\partial \ln Z_G}$$

$$S = k_B (\ln Z_G - \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G)$$

$$(\alpha = -\beta \mu)$$

$$F = -k_B T \ln Z_G + k_B T \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G$$

$$\Psi = -k_B T \ln Z_G$$

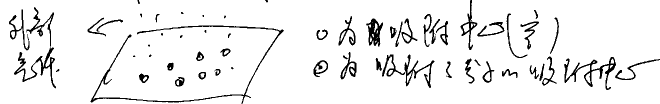
\* 能级和粒子的关系  $\sim \sqrt{N}$ .

\* 巨正则极限下

$$Z_G = \sum_N e^{-\alpha N} Z_N$$

$$Z_N = \frac{1}{N! h^3} \int d\Omega_N e^{-\beta E_N}$$

\* 应用举例: 固体表面吸附率



请  
自  
证

$$\theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{\text{被吸附分子平均数}}{\text{吸附中心数}}$$

把外部分子分为大分子及小分子，外部分子会达到平衡

$N \rightarrow \bar{N}$ .  $(T, \mu, V)$  确定，设分子被吸附后能量为  $-E_0$ ，则  $E_N = -N E_0$ .

$$Z_G = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_N e^{-\alpha N - \beta E_N} = \sum_{N=0}^{N_0} \sum_N e^{B(\mu + E_0)N}$$

$N$  表示  $N$  个分子占据  $N_0$  个吸附中心中  $N$  个时  $m$  个状态。这样  $N$  状态一共有

$$\frac{N_0!}{N!(N_0-N)!} \text{ 个, 且彼此相等.}$$

$$\therefore \sum_N = \frac{N_0!}{N!(N_0-N)!}$$

$$Z_G = \sum_{N=0}^{N_0} \frac{N_0!}{N!(N_0-N)!} e^{B(\mu + E_0)N}$$

$$= (1 + e^{B(\mu + E_0)})^{N_0}$$

$$\bar{N} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_G \Big|_T$$

$$= N_0 \frac{\partial}{\partial \alpha} e^{\alpha + \beta E_0} = \frac{N_0 e^{B(\mu + E_0)}}{1 + e^{B(\mu + E_0)}}$$

$$\therefore \theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{1}{1 + e^{-B(\mu + E_0)}}$$

理想气体,  $\mu = \text{外部气体化学势}$ , 设其为理想气体, 已知  $[8.9.9]$

$$e^{-\beta \mu} = \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2} k_B T}{p h^3}$$

$$\text{于是 } \theta = \frac{\bar{N}}{N_0} = \frac{p h^3}{p h^3 + (2\pi m k_B T)^{3/2} k_B T} e^{-E_0/k_B T}$$

$p \uparrow, \theta \uparrow; T \uparrow, \theta \downarrow$ .

习题

1. 用巨正则系综计算理想气体分子理想气体~玻尔兹曼分布。

2. 教材 8.9, 8.10, 8.12

量子统计设计:  $d=3, 2, 1$ .

这样, 我们讨论量子统计. 对  $d=3$ , 量子统计 either bosons or fermions. 对  $d=2$ , 可以是 Anyons. 对  $d=1$ , 统计性质依赖于相互作用。

§6.1 用巨正则系综导出 Bose 和 Fermi 统计

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{N_i\}} e^{-\alpha N - \beta E_N}$$

把  $E_N$  表示为  $E_{N_1, N_2, \dots}$  (为量子态)

把  $E_{N_1, N_2, \dots} = E_{N_1} + E_{N_2} + \dots = E_N$  写在一起

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{N_i\}} \sum_{\substack{E_N \\ E_{N_i} = E_N}} e^{-\alpha N - \beta E_N}$$

对自由粒子,  $E_N = \sum_i \epsilon_i a_i$ ,  $N = \sum_i a_i$

$\{a_i\}$  是一个非负分布。

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{a_i\}} \sum_{\{E_N\}} W(\{a_i\}) e^{-\alpha \sum_i a_i - \beta \sum_i \epsilon_i a_i}$$

$$= \sum_{\{a_i\}} W(\{a_i\}) e^{-\sum_i (\alpha + \beta \epsilon_i) a_i}$$

这里  $\{a_i\}$  包含了所有可能分布 (各种玻色, 各种费米)。

对玻色子

$$W_\lambda = \frac{g_\lambda!}{a_\lambda!(g_\lambda - a_\lambda)!}$$

对费米子

$$W_\lambda = \frac{(g_\lambda + a_\lambda - 1)!}{a_\lambda!(g_\lambda - a_\lambda)!}$$

$$W(\{a_\lambda\}) = \prod_\lambda W_\lambda$$

$$Z_G = \sum_{\{a_\lambda\}} \prod_\lambda [W_\lambda e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) a_\lambda}]$$

$$= \sum_{a_1} \dots \sum_{a_s} \prod_\lambda [W_\lambda e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) a_\lambda}]$$

$$= \prod_\lambda \left( \sum_{a_\lambda} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) a_\lambda} \right)$$

$$Z_\lambda(F) = \sum_{a_\lambda=0}^{g_\lambda} \frac{g_\lambda!}{a_\lambda!(g_\lambda - a_\lambda)!} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) a_\lambda} = [1 + e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda}]^{g_\lambda}$$

( $a_\lambda \leq g_\lambda$ )

$$Z_\lambda(B) = \sum_{a_\lambda=0}^{\infty} \frac{(g_\lambda + a_\lambda - 1)!}{a_\lambda!(g_\lambda - a_\lambda)!} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) a_\lambda}$$

$$\left( \text{利用 } (1-x)^{-m} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m+n-1)!}{n!(m-1)!} x^n \right)$$

$$= (1 - e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda})^{-g_\lambda}$$

$$\therefore Z_G = \prod_\lambda (1 \pm e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda})^{g_\lambda}$$

$$\therefore \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots) = e^{i\alpha_{12}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$$

对费米子, 由于 Pauli 原理

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \vec{r}_3, \dots) = 0$$

$$\text{or } \lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = 0$$

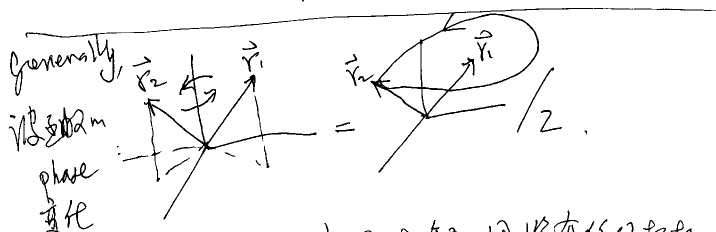
$$\text{即 } \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots), \text{ 即 } \alpha_{12} = \pm \pi$$

对 Boson:

$$\lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) \neq 0$$

$$\lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \lim_{\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2} \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_1, \dots)$$

$$\neq 0, \therefore \alpha_{12} = 0 \pm 2n\pi$$



在二维空间,  $\vec{r}_2$  绕  $\vec{r}_1$  转一周没有任何阻碍

障碍, 波函数以  $2\pi$  为周期, 即只能有 phase

$$e^{i\phi} = e^{i2\pi n} \Rightarrow \begin{cases} n = \text{odd, fermion} \\ n = \text{even, boson} \end{cases}$$

交换:  $e^{i0}, e^{i\pi/2}$

三维及以上空间 只能有 boson or fermion

$$\ln Z_G = \pm \sum_\lambda g_\lambda \ln(1 \pm e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda})$$

\* 求  $\bar{a}_3$  (玻色子分布)

$$\bar{a}_3 = \frac{1}{Z_G} \sum_{\{a_\lambda\}} a_3 \rho_{\{a_\lambda\}}$$

$$= \frac{1}{Z_G} \sum_{\{a_\lambda\}} a_3 W_{\{a_\lambda\}} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_3) a_3}$$

$$= \frac{1}{Z_G} \sum_{\{a_\lambda\}} a_3 W_{\{a_\lambda\}} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_3) a_3}$$

$$= \frac{1}{Z_G} \sum_{a_3} a_3 W_{a_3} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_3) a_3}$$

$$= -\frac{1}{Z_G} \frac{\partial}{\partial \alpha} Z_G = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z_G$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \alpha} (\pm g_\lambda \ln(1 \pm e^{-\alpha - \beta \varepsilon_\lambda}))$$

$$= \frac{g_\lambda}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_\lambda} \pm 1}$$

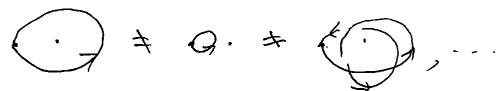
§6.2 量子统计和波函数 (Feynman)

设  $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$  是 N 粒子波函数

我们交换  $\vec{r}_i, \vec{r}_j$  两粒子, 根据量子统计原理

$$|\psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots)|^2 = |\psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots)|^2$$

在二维空间,



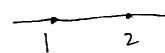
例如

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto (z_1 - z_2)^\alpha, \quad z_1 \text{ 与 } z_2 \text{ 交换}$$

$$\Rightarrow (z_2 - z_1)^\alpha = (-1)^\alpha (z_1 - z_2)^\alpha$$

phase 为  $e^{i\alpha\pi}$ . 下面将详细讨论之, (这称为 anyon, 任意子).

在三维空间



三维空间中交换只能通过碰撞, 一维空间中交换性质与统计原理密切相关, 我们也将简单介绍一下.

### §6.3 路径积分与量子统计

对正则系综，密度矩阵

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr} e^{-\beta H}}$$

$\rho(\beta)$  是归一化的

$\tilde{\rho} = e^{-\beta H}$  是非 normalized 的密度矩阵

$$-\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\tilde{\rho} H)$$

$$= \left( -\frac{\partial}{\partial \beta} \tilde{\rho} \right) H = \left( \tilde{\rho} H \right)$$

$$= (H \tilde{\rho}) = H \tilde{\rho}$$

$$\therefore -\frac{\partial \tilde{\rho}}{\partial \beta} = H \tilde{\rho}, \quad (\tilde{\rho}(0) = 1)$$

这是薛定谔方程，在任何表象都对，在坐标表象

$$-\frac{\partial \tilde{\rho}(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = H_x \tilde{\rho}(x, x'; \beta)$$

$$\tilde{\rho}(x, x'; 0) = \delta(x - x')$$

Formally:  $\tilde{\rho} = e^{-\beta H}$  redefine:  $u = \beta \hbar$

$$\tilde{\rho}(u) = e^{-H u / \hbar}$$

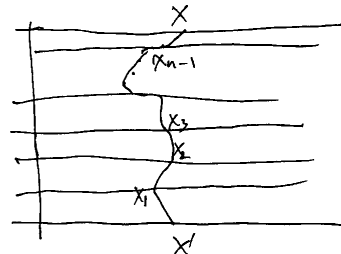
$$\text{Formally: } \tilde{\rho}(u) = e^{-H u / \hbar}$$

$$[\hbar \beta] = [\tau], \text{ 于是取 } u = \hbar \beta$$

$$\rho(u) = e^{-H \epsilon / \hbar} e^{-H \epsilon / \hbar} \dots e^{-H \epsilon / \hbar} = \rho_0 \rho_1 \dots \rho_n$$

坐标表象:

$$\rho(x, x'; u) = \int \dots \int \rho(x, x_{n-1}; \epsilon) \rho(x_{n-1}, x_{n-2}; \epsilon) \dots \rho(x_2, x_1; \epsilon) \rho(x_1, x'; \epsilon) dx_{n-1} \dots dx_1$$



$$n \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0, n\epsilon = u$$

$$\rho(x, x'; u) = \int \mathcal{D}x \Phi[x(u)]$$

$$\Phi[x(u)] = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ \epsilon \rightarrow 0 \\ u = n\epsilon}} \rho(x, x_{n-1}; \epsilon) \dots \rho(x_1, x'; \epsilon)$$

$$\mathcal{D}x[u] \quad \mathcal{D}x(u) = \lim_{n \rightarrow \infty} dx_1 \dots dx_{n-1}$$

以一维自由粒子为例,  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

$$\rho(x, x'; \epsilon) \approx \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar \epsilon}} e^{-\frac{m}{2\hbar \epsilon} (x - x')^2}$$

$$\rho(x, x'; u) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{dx_1}{\sqrt{2\pi \hbar \epsilon}} \dots \frac{dx_{n-1}}{\sqrt{2\pi \hbar \epsilon}} e^{-\frac{m\epsilon}{2\hbar} \left[ \left( \frac{x - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 + \dots + \left( \frac{x_1 - x'}{\epsilon} \right)^2 \right]}$$

$$\frac{x_k - x_{k-1}}{\epsilon} \rightarrow \frac{dx(\tau)}{d\tau} = \dot{x}(\tau)$$

$$\rho(x, x'; u) = \int \mathcal{D}x e^{-S/\hbar}$$

$$\text{其中 } S = \int_0^u d\tau L(\tau), \quad L(\tau) = \frac{m}{2} (\dot{x}(\tau))^2$$

$$Z = \text{Tr} \rho, \text{ 在坐标空间}$$

$$Z = \int dx \rho(x, x) = \int \mathcal{D}x(u) e^{-\int_0^{\hbar \beta} d\tau L}$$

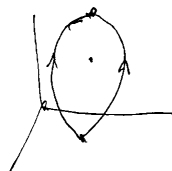
这时任何正则系综都对，对正则系综

$$Z_G = \int \mathcal{D}x(u) e^{-S_G}, \quad S_G = S - \mu N$$

6.4 路径积分和基态:  $d=2$ .  
partition function 中  $u \rightarrow it$ , 就是量子统计中一维自由粒子。

$$\rho(x, x'; \tau) = \int \mathcal{D}x e^{i \int_0^\tau d\tau L}$$

$\mathcal{D}x$  是对所有可能的路径积分。在一维空间，任何路径对态的相位的贡献是  $2\pi$ 。但在二维空间



路径“1”和“2”不闭合，对“1”和“2”不能连续地改变。

$$\therefore \mathcal{D}x \rightarrow \mathcal{D}x \phi(x) \mathcal{D}x$$

后与  $\mathcal{D}x$  中所有路径都可以连续改变。也是二维空间中所有可改变一维路径等性质。



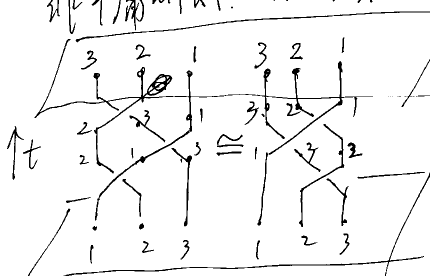


(4b)

一图 二图 三图, ...

但没有如此理由说所有  $\mathcal{R}(\alpha)$  都相同. 量子告诉我们  $\mathcal{R}(\alpha)$  是一个复数. 但  $\mathcal{R}(\alpha)$  的取值中  $\mathcal{R}(\alpha)$  的取值之平方根  $\mathcal{R}(\alpha)$  在一个 phase factor, 即  $|\mathcal{R}(\alpha)|=1$ .

若二维空间有  $N$  个粒子, 则记  $R^{2N} = \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N = M_N$ , 是位空间. 是多维空间,  $\therefore$  有很多非平庸的  $\mathcal{R}(\alpha)$ . 又  $\mathcal{R}(\alpha)$  分类

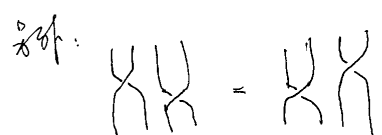


Braiding! Braid group. 辫子群

思考题: 为什么 Fermion 的自旋是半整数 Boson 的自旋是整数?

对  $N$  个粒子, 有  $B_N(R^2)$ . 显然,  $B_N$  中一定有许多子群 (无限, nonabelian) 都可以用最近邻  $\sigma_i$  类  $n$  braiding 来生成, 记  $\sigma_i$  是  $x_i$  与  $x_{i+1}$  的交换, 且左  $\sigma_i$  与右  $\sigma_i$  互逆也成立:  $\sigma_i^{-1} = \sigma_i^\dagger$

$$\sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_i = \sigma_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

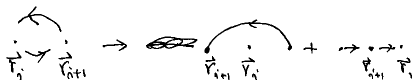


群与群是一个 non-abelian group 但一维表示是 Abelian. 三维  $\Rightarrow$  是群  $\Rightarrow$  是群

$$\sigma_i \sigma_k = \sigma_k \sigma_i \quad (k \neq i \pm 1)$$

这就是一个群与群关系  $\Rightarrow$  有一个子群. 设

$\phi(\sigma_i)$  是生成元的一维表示.  $\phi(\sigma_i) = e^{-i\theta}$  满足群与群关系. ( $0 \leq \theta < 2\pi$ ). 当  $\theta=0$ ,  $\Rightarrow$  Bose 统计, 当  $\theta=\pi$ ,  $\Rightarrow$  Fermi 统计.  $\theta = \pi$  是费米统计.



(4b)

$$\phi(\sigma_i) = e^{-i\theta} = \exp[-i\theta \sum_j \Delta \phi_{ij}]$$

$$e^{-i\theta \sum_j \Delta \phi_{ij}} = \exp[-i\theta \sum_j \Delta \phi_{ij}]$$

其中只有  $\Delta \phi_{i,i+1} = \pm \pi$ , 其他  $\Delta \phi_{ij} = 0$ .

推广到一般  $2m$  维:

$$\phi(\alpha) = \exp\left(-i\theta \int dt \frac{d}{dt} \sum_j \Delta \phi_{ij}\right). \quad r = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

$$\therefore \text{传播子 } K(r'; r) = \int \exp\left[i \int dt \left[ L - \frac{\theta}{\pi} \frac{d}{dt} \sum_j \Delta \phi_{ij} \right]\right] \psi(r, t)$$

现在考虑  $\psi(r, t)$  的演化. 记  $\psi(r, t)$  是多值函数. 由传播子  $K(r'; r)$  演化.

记  $\psi(r, t)$  是多值函数. 由传播子  $K(r'; r)$  演化.

$$\psi(r, t) = \int_{M_N} dr' K(r'; r) \psi(r', t)$$

设  $M_N$  中  $n$  个同胚类. 设

$$\psi(r, t) = \exp\left\{-i\theta \int_{\gamma} d\left(\sum_j \Delta \phi_{ij}\right)\right\} \psi(r, t)$$

现在考虑  $\psi(r, t)$  的演化. 记  $\psi(r, t)$  是多值函数. 由传播子  $K(r'; r)$  演化.

$$\psi(r, t) = \int dr' K(r'; r) \psi(r', t)$$

定义  $\psi(r, t) = \exp\left\{-i\theta \int_{\gamma} d\left(\sum_j \Delta \phi_{ij}\right)\right\} \psi(r, t)$ ,  $\therefore$  考虑  $\psi(r, t)$  的演化. 记  $\psi(r, t)$  是多值函数. 由传播子  $K(r'; r)$  演化.

$$\psi(r, t) = \int dr' K(r'; r) \psi(r', t)$$

$K$  包括从  $t \rightarrow t'$  时的 braiding 因子. 即

$$\psi(r, t) = \prod_{i < j} \frac{(z_i - z_j)^{\theta/\pi}}{|z_i - z_j|^{\theta/\pi}} \psi(z, t)$$

$$= \prod_{i < j} (z_i - z_j)^{\theta/\pi} f(z, t)$$

则  $\theta$  的正确给出 (统计) 参数. 交换对称

# §6.5 一维设计: 相对作用排斥 (5)

在一维空间, 任意两个粒子要交换位置就必然相互接触, 所以粒子自由运动, 设计与排斥作用相互接触. ~~我们举一个例子~~. 首先, 我们推广 Bose

例子. 和 Fermi (设计:  $N$  个 particle 占据  $G$  个态).

$$W_{as} = \frac{[G + (N-1)(1-s)]!}{N! [G - sN - (1-s)]!} \rightarrow \text{就是说: 是 } \Gamma\text{-funct.}$$

$$\text{当 } s=0, W_0 = \frac{[G+N-1]!}{N! [G-1]!} = W_B$$

$$\text{当 } s=1, W_1 = \frac{[G+N-1]!}{N! (G-N)!} = W_F$$

$0 < s < 1$ , 则是对 Bose 和 Fermi (设计) 推广. 如果有一个分布  $\{N_\alpha\}$ , 则

$$W = \pi \frac{[G_\alpha + N_\alpha - 1 - \sum_{\beta \neq \alpha} s_{\alpha\beta} (N_\beta - s_{\alpha\beta})]!}{N_\alpha! [G_\alpha - 1 - \sum_{\beta \neq \alpha} s_{\alpha\beta} (N_\beta - s_{\alpha\beta})]!}$$

取  $s_{\alpha\beta} = s \delta_{\alpha\beta}$ , 则  $s=0$ ,  $s=1$

$$W_0 = \pi \frac{(G_\alpha + N_\alpha - 1)!}{N_\alpha! [G_\alpha - 1]!}, W_1 = \pi \frac{G_\alpha}{N_\alpha! (G_\alpha - N_\alpha)!} = W_F$$

例2: Calogero-Sutherland (Fermion) (5)

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i < j}^N \frac{\lambda(\lambda+1)}{L^2} \sin^2\left(\frac{\pi(x_i - x_j)}{L}\right)$$

$L \rightarrow \infty$ . 相对作用  $\rightarrow \frac{\lambda(\lambda+1)}{L^2} (x_i - x_j)^2$

$$S(k, k') = \lambda \delta(k - k') = \delta(k - k') + (\lambda - 1) \delta(k - k')$$

$$\therefore \theta = 2\pi(\lambda - 1) \sin(k - k')$$

$\lambda = 1 \Rightarrow$  Fermion,  $\lambda = \frac{1}{2}$  semion.

$\lambda = 2$ , dual semion.

可以根据 Bethe Ansatz 写出“单粒子能量” $\epsilon(k)$ .

这个  $\epsilon(k)$  一般由一个积分方程解出 (但是对 CS model:

$$\epsilon(k) = \begin{cases} (k^2 - k_F^2)/\lambda, & |k| < k_F \\ k^2 - k_F^2, & |k| > k_F \end{cases}$$

系统  $Z_G$ :

$$Z_G = \prod_k (1 + e^{-\epsilon(k)/T})$$

(~~这是~~)

这里  $s_{\alpha\beta}$  表示不同“量子”指标之间相互排斥.

一个例子:

例1. 8 相对作用玻色子 ( $C=0, 15\text{eV}$ )

$$H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + 2C \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j), C > 0.$$

这个 H 是可解的. 我们作“Fourier”展开, 在动量空间, 总能量  $E = \sum k_i^2$ .

$\alpha \rightarrow k$  在取连续极限下,  $\alpha \rightarrow k$

$$S_{\alpha\beta} \rightarrow S(k, k') = \delta(k - k') + \frac{1}{2\pi} \theta'(k - k')$$

其中  $\theta = -2 \tan^{-1}(k/C)$ . (Bethe Ansatz)

$$\theta'(k - k') = \frac{-2C}{C^2 + (k - k')^2} \quad (\text{Yang-Yang})$$

当  $C \rightarrow \infty$ ,  $\theta' = 0$ ,  $S(k, k') = \delta(k - k')$   $\rightarrow$  ideal Fermion

当  $C \rightarrow 0$ ,  $S(k, k') = -\delta(k - k')$   $\rightarrow$  ideal Boson.

在中间一般  $C$ , 称为推广的理型气体.

第七章 相变、临界现象和重费米离子

热力学中不同物理性质的体系称为不同相, 例如, 固体、液体和气体. 不同相可以相互转变, 称为相变. 在一些特殊条件下, 两相或三相可以平行. 这些条件就是相变线. 于是, 可以根据这些相变线, 画出参量空间-相图. 根据相图, 当相平行时, 可以发生相变.

一级相变: 相变时, 两相化学势相等, 但熵不相等.

二级相变: 相变时, 熵相等, 即  $\mu^a = \mu^b = 0$ ,  $s^a - s^b = -\left(\frac{\partial \mu^a}{\partial T}\right)_P + \left(\frac{\partial \mu^b}{\partial T}\right)_P \neq 0, \dots$

二级相变:  $\Delta \mu = 0$ ,  $\Delta s = 0$ ,  $\Delta v = 0, \dots$  但

$$\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2}, \frac{\partial^2 \mu}{\partial T \partial P}, \frac{\partial^2 \mu}{\partial P^2} \text{ 不连续或发散.}$$

这些  $\Delta C_P, \Delta \alpha, \Delta \kappa$  在相变点附近成为奇点.

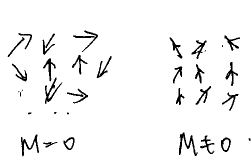
同样可以定义二级相变. 但二级相变一例只有 BEC. 三级相变在自然界还未发现.

( $k-T$ , 有无限级相变之说)

## §7.1 朗道=二级相变理论简介 (1)

朗道理论描述=二级相变的唯象理论。引了3个重要概念：序参量和对称性破缺。

序参量是用于区分两相不同“物理量”，例如，在磁性物质中，有顺磁相和铁磁相。在高温时，每个电子的自旋取向在空间是随机的，作为其平均值的物理量，磁化强度  $M=0$ 。随着温度降低，由于电子之间的交换相互作用，铁磁相中原子中的电子自旋趋于同向，平均值  $M \neq 0$ 。  $M=0$  到  $M \neq 0$  的温度就是临界温度  $T_c$ 。

$M=0$   $M \neq 0$   

 这与  $M$  称为铁磁序参量。

自旋有“转动不变性”（自旋=SU(2)不变性）而在低温， $M \neq 0$  表明电子自旋取向取某一方向，“转动不变性”破坏。这称为对称性破缺。降温引起  $M \neq 0$  是电子之间相互作用造成，即

称为“自发破缺”。SU(2)对称也可由外加磁场引起，称为“显式破缺”。序参量也是对称性破缺的结果。这样“对称性”，“序参量”和“自发破缺”的例子很多：

|        |                       |                    |
|--------|-----------------------|--------------------|
| 固液相变   | 平移不变性                 | DLRO               |
| 液体-液晶  | 转动不变性                 | 密度-各向异性            |
| 超导-金属  | 基态粒子数守恒               | 电子波函数 <sup>2</sup> |
| 绝缘-超导体 | $k \rightarrow 0$ 对称性 | ODLRO              |

$(CuZn)$  二次固溶体结构  
 有序相变 溶质原子有序性  
 $\frac{w_1 - w_2}{w_1 + w_2}$   $\frac{w_1 - w_2}{w_1 + w_2}$

也有一些不是二级相变，但“序参量”概念仍

有用。相变例子：

气-液相变 一级相变， $P_{liquid} - P_{gas} \neq 0$ 。  
 外场下超导-金属相变 一级相变， $|\psi|^2$  变化。  
 理想绝缘-超导体 二级相变， $T=0$  破色对称。

朗道理论要求是考虑自由能随序参量变化

近按序参量展开。能给出序参量对称性破缺的依赖。林恩那书中举了  $H=0$  时  $M$  的例子。请记录。这里再举一超导的例子，即所谓GL理论。超导体中 Gibbs 自由能为序参量  $\psi$  (电子波函数) 的函数，在临界点  $g_s(\psi=0) = g_n$ 。  $g_n = f - B \cdot \mu$  是正常态 Gibbs free energy。展开  $g_s(\psi)$

$$g_s(\psi) = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \dots \quad (\psi \text{ 是复数})$$

当  $T < T_c$ ,  $g_s < g_n$ ,  $\therefore A(T) < 0$ , ( $A(T_c) = 0$ ),  $\therefore$

$$A(T) = (T - T_c) \left( \frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}$$

$B(T)$  是  $|\psi|^4$  系数， $\therefore$  取 const. 即可。

$$B(T) = B(T_c) = B_c$$

在物理上，要求自由能极小。

$$\frac{dg_s}{d\psi} = 0 \Rightarrow A + B_c |\psi|^2 = 0$$

$$\Rightarrow |\psi|^2 = -\frac{A}{B_c} \Rightarrow g_s = g_n - \frac{A^2}{2B_c}$$

另一方面， $g_n - g_s = \mu_0 H_c^2(T)/2$ ,

$\therefore$  在  $T_c$  附近

$$H_c^2(T) = \frac{A^2}{\mu_0 B_c} = \frac{(T - T_c)^2}{\mu_0 B_c} \left( \frac{\partial A}{\partial T} \right)_{T=T_c}^2$$

$$\Rightarrow H_c \propto T - T_c$$

GL理论超出原有Landau理论一地方是，假设序参量  $\psi$  有空间分布，这样， $g_s$  也有空间分布，

$$g_s = g_n + A|\psi|^2 + \frac{B}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m} |(-i\hbar \nabla \psi)|^2$$

总 Gibbs 自由能为

$$G_s = \int d^3r g_s(\vec{r})$$

$$\frac{\delta G_s}{\delta \psi} = 0 \Rightarrow \begin{cases} A\psi + B|\psi|^2\psi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = 0 \\ \nabla \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi = 0 \end{cases} \quad (\text{在边界上})$$

GL方程。一个简单应用 序参量-相变图 考虑弱场  $|\vec{A}| \ll |\psi|$ ，则可在GL方程中忽略  $A$ ，而  $\psi$  与  $\psi_0 = \psi_0(0) = \sqrt{\frac{f}{B_c}}$  很接近。定义  $f = \frac{A^2}{B_c}$ ，取  $f^* = f$ 。则

$$-\frac{f^2}{2m\alpha} \nabla^2 f + f - f^3 = 0,$$

$$\text{" } \zeta^2(T) \text{ " } \zeta^2 \nabla^2 f + f - f^3 = 0.$$

3 是这方程的特征长度. 半无限大起算.

$$\delta \begin{cases} \text{SC} \\ \text{Normal} \end{cases} \quad \zeta^2 \frac{d^2 f}{dz^2} = -f(1-f^2).$$

$$\text{边界条件 } \frac{df}{dz}, \int_{-\infty}^0 dz \quad \begin{cases} f(z=0)=0, \frac{df}{dz}|_{z=0}=\infty \\ f(z=\infty)=1, \left(\frac{df}{dz}\right)_{z=\infty}=0 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^0 \zeta^2 \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{df}{dz} \right) = \int_{-\infty}^0 \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{4} f^4 - \frac{1}{2} f^2 \right).$$

$$\frac{1}{2} \zeta^2 \left( \frac{df}{dz} \right)^2 = \frac{1}{4} f^4 - \frac{1}{2} f^2 + \frac{1}{4} = \frac{1}{2} (1-f^2)^2.$$

$$\text{取 } \frac{df}{dz} > 0, \quad \frac{df}{dz} = \frac{1-f^2}{\sqrt{2}\zeta(T)}, \quad f = \tanh \frac{z}{\sqrt{2}\zeta(T)}.$$

在临界点附近,

$$\zeta(T) = \frac{\hbar}{[2m^* (T_c - T) \frac{dA}{dT_c}]^{1/2}} \rightarrow \infty, \quad T \rightarrow T_c.$$

序参量  $m$  趋于零. 在相变点  $\rightarrow \infty$ .

(2) 临界等温线 "平理线",  $\delta$ .

$$H = M^{\delta} \operatorname{sgn}(M), \quad (T=T_c, H \rightarrow 0).$$

$$(p-p_c) \sim |p-p_c|^{\delta} \operatorname{sgn}(p-p_c), \quad (T=T_c, p \rightarrow p_c)$$

$$(H-H_c) \sim |H-H_c|^{\delta}, \quad (T=T_c). \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{外场} \sim \text{序参量}^{\delta} \\ \downarrow \qquad \downarrow \\ \delta \qquad \delta \\ T=T_c \end{array} \right.$$

(3)  $\chi_0^0$  或  $\chi_T$ ;  $\delta$ .

$$\chi_0^0 = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \Big|_{H \rightarrow 0}, \quad \text{superconductivity 零磁阻率.}$$

$$\chi_0^0 \sim (T-T_c)^{-\delta}, \quad \text{无论是 } (T \rightarrow T_c^+ \text{ 还是 } T \rightarrow T_c^-).$$

$$\text{零磁阻率 } K_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad \text{等温压缩率}$$

$$K_T \sim (T-T_c)^{-\delta}, \quad (T \rightarrow T_c, p \rightarrow p_c).$$

(4) 比热 (比热),  $\alpha$ .

$$\text{磁比热 } C_H^0 \sim |T-T_c|^{-\alpha}, \quad (H \rightarrow 0)$$

$$\text{比热 } C_V \sim |T-T_c|^{-\alpha}, \quad (T \rightarrow T_c, p=p_c).$$

(5) 关联长度  $\xi$

$$\text{例如 } f \sim e^{-\frac{z}{\xi}}, \quad \delta \rightarrow 0$$

## §7.2 临界现象和临界指数 (二) 相变

在上节, 我们看到了临界点, 在临界点附近  $\xi(T) \propto (T-T_c)^{-\nu}$ . 物理学在临界点出现时对  $\Delta T$  的依赖称为临界现象, 需指数称为临界指数. 根据  $\nu$  的不同, 临界指数有  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ .

物理量  $m$  (统计平均值) 在临界点附近按

$$e = \frac{T-T_c}{T_c} \text{ 展开: } f(e) = A e^{\lambda} (1 + B e^{\mu} + \dots), \quad \lambda > 0.$$

$$\lambda = \lim_{e \rightarrow 0} \frac{\ln f(e)}{\ln e} \text{ 就是临界指数.}$$

(1)  $\beta$  序参量随温度变化, 例如

$$\begin{aligned} M(T) &\propto (T-T_c)^{\beta} \\ |M| &\propto (T-T_c)^{\beta} \\ \text{序参量} &\sim |T-T_c|^{\beta} \\ \text{磁化率} &\sim |T-T_c|^{-\beta} \end{aligned}$$

(5) 关联长度, 临界指数  $\nu$ .

对于任一物理量  $A(T), B(T)$

$$\langle A(T) - \langle A \rangle \rangle \langle B(T) - \langle B \rangle \rangle$$

称为  $A, B$  之间的关联函数, 例如对自旋系统

$$\langle (S_i - \langle S \rangle) (S_j - \langle S \rangle) \rangle \quad (\text{格点位置 } i, j)$$

称为自旋-自旋关联函数.

若  $A=B, T=T_c$ ,

$$G(r) = \langle (A(r) - \langle A \rangle)^2 \rangle \text{ 则代表 } A(r) \text{ 的均方}$$

在平均场下, 在临界点附近, 一般地

$$G(r) \sim \frac{1}{r} e^{-r/\xi},$$

则  $\xi$  称为关联长度. 在临界点附近

$$\xi \sim |T-T_c|^{-\nu}$$

超导体 GL eq:  $\xi \sim |T-T_c|^{-1/2}$

磁关联长度  $\xi \sim |T-T_c|^{-1/2}$

与实验经常有明显偏差. 平均场  $\circledast$  estimation.



(b) 关联函数,  $\eta$

(64)

平均场理论中关联函数  $\sim$  指数 decay 到临界点是发散的. 正确结果是

(a)  $G(r) \sim r^{-d+2-\eta}$ .  $d$  是空间维数.

关联函数  $G(k) \sim k^{-2+\eta}$ .  $G(k) \propto \int dr G(r) e^{ikr}$

这些临界指数都在实验上可测, 但由于临界点附近  $\sim$  发散很大, 每次测到平衡所需时间很长 (临界慢化), 测到精度不足 (见材料 p480). 但分析这些结果发现, 不同指数之间存在着一定关系, 称为标度律

$d+2\beta+\gamma=2$

$\gamma = \beta(\delta-1)$

$\gamma = \nu(2-\eta)$

$\nu d = 2-\alpha$

6 个临界指数,

4 个约束,

2 个独立.

5.7 量子相变和 ~~量子相变~~

(65)

量子相变是指  $T=0$  时, 系统不同相之间由于某参数  $g$  的变化引起相变. 对一个有限系统, 设  $H(g)$  为哈密顿,  $g$  是 coupling constant, 一般来讲,  $E(g)$  是  $g$  的平滑函数, 不会发生相变. 有一种情况例外:  $H = H_0 + gH_1$ , ~~如果~~  $[H_0, H_1] = 0$ . 这时,  $H_0$  和  $H_1$  可以同时同时对角化, 有共同本征函数.

$E_n = E_n^{(0)} + g E_n^{(1)}$

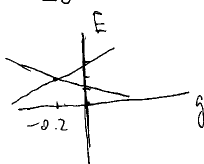
$E_0 = E_0^{(0)} + g E_0^{(1)}$ ,  $E_1 = E_1^{(0)} + g E_1^{(1)}$ . 若在某  $g = g_c$ .

$E_0(g_c) = E_1(g_c)$ , 则  $g_c = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{E_0^{(1)} - E_1^{(1)}} (< 0)$

例如.

$E_1 = 2 + g^3$

$E_0 = 1 + g^2 (-2)$ ,  $g_c = -\frac{1}{5}$



level crossing

的相变

这些关系与具体系统和微观细节无关. (15)

具有一定的普适性 (普适性假设).

系统临界行为由  $\eta$  决定, 空间维数  $d$  和序参量维数  $n$ . 具有相同  $d$  和  $n$  的系统属于同一个普适类, 具有相同临界行为. ~~不是指序参量~~

如果是实数,  $n=1$ , 复数  $n=2$ , 三维自旋,  $n=3$ .

$n=1$ , 气液相变中的密度差,  $\sim$  合金中占位序差.

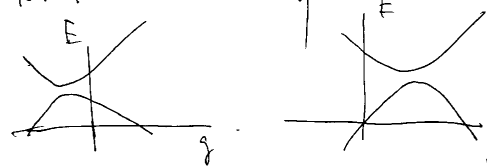
$n=2$ , 平面自旋模型 (XY 模型), 超流, 超导体中的超流态与波函数.

$n=3$ , 海森堡模型中的磁化涨落函数.

\* 普适性背后的物理原因是到临界点的关联长度无穷大. 这时, 描述系统其他特征量, 例如, lattice spacing, 相互作用强度及微观细节, (晶格对称性) 都不重要, 被系统公共合作所屏蔽掉.

在大多数情况下,  $[H_0, H_1]$  不为零, 这种

level cross 会被打开.



(也可以至  $g \rightarrow \infty$  处出现).

在 infinite lattice 系统, 有可能出现两种情况,

(i) 简单 level cross. (ii) 打开  $\sim$  gap 无限接近于零.

这就是量子相变. 在相变前后, correlation function 会有定性不同.

由此我们看到, 量子相变发生在能隙  $\Delta \rightarrow 0$  或是  $\Delta$  无限接近于 gapless. 即

$\Delta \sim |g - g_c|^{\frac{1}{\nu}}$  (把  $T \rightarrow 0$ ).

于是 non-universal, 微观细节 ~~影响~~ 普适.

( $g \rightarrow g_c$  时可能不一样).

类似地, 也可以定义 correlation length 若

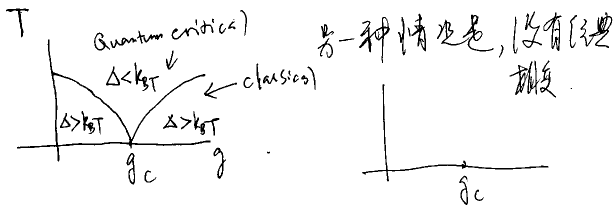
$\xi \sim |g - g_c|^{-\nu}$ ,

则  $\Delta \sim \xi^{-2}$ .

有限温度, 分为二种情况,

①  $k_B T > \Delta$ , 这时, 量子涨落要比热涨落强.  
 (称为 Quantum critical).

②  $k_B T < \Delta$ , 这时, 量子涨落解耦比热涨落强,  
 热涨落 Dominant. 这时, 会发生经典相变.



### §7.4 Ising model.

为了对相变、临界指数, 量子相变有一个更直观~感受, 我们讨论 Ising model.

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - B \sum_i S_i^z$$

$$S_i^z = \pm \frac{1}{2} (\hbar). \text{ or } S_i^z \rightarrow \sigma_i = \pm 1.$$

由此,

$$F = -k_B T \ln Z_N$$

$$= -N k_B T \left[ \ln 2 + \ln \cosh \left[ \frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right] \right]$$

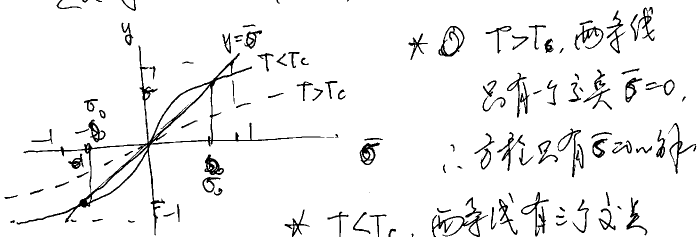
$$M = N \bar{\sigma} = - \frac{\partial F}{\partial B} = N \tanh \left( \frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right)$$

$$\Rightarrow \bar{\sigma} = \tanh \left( \frac{B}{k_B T} + \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right)$$

自洽方程.

$$B=0, \bar{\sigma} = \tanh \left( \frac{2J}{k_B T} \bar{\sigma} \right) \equiv \tanh \left( \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right)$$

$$\text{定义 } y = \tanh \left( \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right), y = \bar{\sigma}$$



\*  $T > T_c$ , 两曲线  
 只有一个交点  $\bar{\sigma} = 0$ .

$\therefore$  方程只有  $\bar{\sigma} = 0$  解.

\*  $T < T_c$ , 两曲线有三个交点

即  $T > T_c$  为无序相  
 $T < T_c$  为有序相.

$\bar{\sigma} = \begin{cases} 0 \\ \pm \sigma_0 \end{cases}$

$\therefore \ln \cosh x \geq 0$  且  $x=0$  时为 0  $\therefore \bar{\sigma} = 0$  自发破缺!

### §7.4.1 平均场近似.

首先让我看看平均场近似,

$$H = - \sum_i \sigma_i (B + J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_{ij})$$

$$= - \sum_i \sigma_i (B + \bar{h}).$$

$$\text{用 } \bar{\sigma}_{ij} \text{ 代替 } \sigma_{ij}, \text{ 且认为 } \sum_{\langle ij \rangle} \bar{\sigma}_{ij} = \sum_{\langle ij \rangle} \bar{\sigma} = \frac{z}{2} N \bar{\sigma}.$$

$$H_{MF} = - \sum_i (B + \bar{h}) \sigma_i \quad \bar{h} = \frac{zJ}{2} \bar{\sigma}.$$

$$\text{这样, } Z_N = \sum_{\sigma_1} \cdots \sum_{\sigma_N} \exp [B \sum_i \sigma_i + \bar{h} \sum_i \sigma_i]$$

$$= \sum_{\sigma_1} \prod_{i=1}^N \exp \beta (B + \bar{h}) \sigma_i$$

$$= \sum_{\sigma_1} \prod_{i=1}^N \exp \beta (B + \bar{h}) \sigma_i \cdots \sum_{\sigma_N}$$

$$= \sum_{\sigma_1} \exp \beta (B + \bar{h}) \sigma_1 \sum_{\sigma_2} \exp \beta (B + \bar{h}) \sigma_2 \cdots$$

$$= \prod_i \left( \sum_{\sigma_i} \exp \beta (B + \bar{h}) \sigma_i \right)$$

$$= \prod_i \left( \exp \beta (B + \bar{h}) + \exp \beta (B - \bar{h}) \right)$$

$$= \left[ 2 \cosh \left( \frac{B + \bar{h}}{k_B T} \right) \right]^N$$

显然,  $H(\sigma_i) = H(\sigma_i)$ , 有左右对称性,  
 系统处于  $\bar{\sigma} = 0$  或  $\bar{\sigma} = \pm \sigma_0$  态,  $\Rightarrow$  自发破缺.

自发破缺 = 自发对称性破缺.

注意  $\bar{\sigma}_0$  是 T 的函数, 当  $T \sim T_c$  时,  $\bar{\sigma}_0 \sim 0$ .

$$\therefore \tanh x \approx x$$

$$\tanh \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \approx \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} - \frac{1}{3} \left( \frac{T_c}{T} \bar{\sigma} \right)^3 = \bar{\sigma}$$

$$\Rightarrow \frac{T_c}{T} - \frac{1}{3} \left( \frac{T_c}{T} \right)^3 \bar{\sigma}^2 = 1, \quad \bar{\sigma}^2 = \frac{3(T/T_c)^3}{(T/T_c)^3 - 1} \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)$$

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)^3} = \sqrt{3} \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right)^{3/2}$$

$$\Rightarrow M \sim (T - T_c)^{3/2}.$$

有 F, 熵的近似  $C_B = \begin{cases} 0, & T \rightarrow T_c^- \\ 3N k_B, & T \rightarrow T_c^+ \end{cases}$

还可证明:  $M \sim (T - T_c)^{1/2}$ ,

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} \sim (T - T_c)^{-1/2} \quad \text{作图.}$$

$$M(T_c, B) \sim B^{1/2}.$$

$\Rightarrow$  在平均场下,  $\beta = \frac{1}{2}, \alpha = 0, \gamma = 1, \delta = 3.$   $T_c = \frac{2J}{k_B} = \text{finite}.$

### §7.4.2 一维伊辛模型严格求解

(平均场近似? 用转移矩阵法)

$$Q \quad H = -J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - h \sum_n \sigma_n \quad (\sigma_i = \pm 1) \quad \text{PBC.}$$

$$Z = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp \left\{ K \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} \right\} \exp \left\{ B \sum_n \sigma_n \right\}$$

$\downarrow \quad \quad \quad \downarrow$   
 $J/kT \quad \quad \quad h/kT$

$$= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp \{ B \sigma_1 \} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \exp \{ K \sigma_1 \sigma_2 \} \dots$$

$\dots \exp \{ B \sigma_N \} \delta_{\sigma_N, \sigma_1} \exp \{ K \sigma_N \sigma_1 \}$

$$\begin{aligned} (V_1)_{\sigma_i, \sigma_j} &= \exp(K \sigma_i \sigma_j) \\ (V_2)_{\sigma_i, \sigma_j} &= \exp(B \sigma_i) \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \end{aligned} \quad \begin{pmatrix} \sigma_i = \pm 1 \\ \sigma_j = \pm 1 \\ 2 \times 2 \text{ 矩阵} \end{pmatrix}$$

$$V_1 = \begin{pmatrix} \exp K & \exp(-K) \\ \exp(K) & \exp K \end{pmatrix}, \quad V_2 = \begin{pmatrix} \exp B & 0 \\ 0 & \exp(-B) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} (V_2)_{\sigma_1, \sigma_1} (V_1)_{\sigma_1, \sigma_2} \dots (V_2)_{\sigma_N, \sigma_N} (V_1)_{\sigma_N, \sigma_1} \\ &= \text{Tr}(V_2 V_1 \dots V_2 V_1) = \text{Tr}(V_2 V_1)^N \\ &= \text{Tr}(V_1^N V_2^N) \equiv \text{Tr}(V^N) \end{aligned}$$

$\downarrow$   
PBC

### §7.4.3 二维伊辛模型

二维 Ising model 在 PBC,  $h=0$  时可严格求解。  
对  $2 \times 2$  格子, 可用转移矩阵法求解。办法是先解一条链, 然后再看耦合。当  $h=0$ , 一维的转移矩阵

$$\begin{aligned} V &= \exp(K) I + \exp(-K) \sigma_x \\ &= \exp K (I + \exp(-2K) \sigma_x) \end{aligned}$$

$$\text{定义常数 } a: \tanh a = \exp(-2K)$$

$$\text{又 } \exp(a \sigma_x) = I \cosh a + \sigma_x \sinh a$$

现在要把  $V$  写成一个单 spin 形式。

$$\begin{aligned} V &= A \exp(a \sigma_x) \\ &= A \cosh a (I + \tanh a \sigma_x) \\ &= A \cosh a (I + \exp(-2K) \sigma_x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow A \cosh a = e^K \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\tanh a}}$$

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{\cosh a \sqrt{\tanh a}} = \frac{1}{\sqrt{\cosh a \sinh a}} = \sqrt{\frac{2}{\sinh 2a}} \\ &= \sqrt{\frac{2}{\sinh 2K}} \end{aligned}$$

基中

$$V = \begin{pmatrix} \exp(K+B) & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K+B) \end{pmatrix}$$

$$\det(V - \lambda) = 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} = e^K \cosh B \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 B + e^{2K}}$$

$$\therefore \text{Tr } V^N = \text{Tr} \left[ \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N \right] = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

$$= \lambda_+^N (1 + (\lambda_-/\lambda_+)^N) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N$$

$$\therefore f = F/N = -\frac{1}{N} \ln Z = -\beta^{-1} \ln \lambda_+$$

(free energy per spin)

$$\begin{aligned} M &\propto -\frac{\partial f}{\partial h} = \beta^{-1} \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial B} = \frac{\partial \ln \lambda_+}{\partial B} \\ &= \sinh B (\sinh^2 B + e^{-4K})^{-1/2} \\ &\xrightarrow{B \rightarrow 0} 0 \quad \therefore \text{在有限温度下没有相变。} \end{aligned}$$

(而在平均场下,  $T_c = \frac{2J}{k_B} \neq 0$ ,  $\therefore$  平均场下  $T=0$  处发生相变)

$$\text{当 } T \rightarrow 0, \quad M \propto \frac{\sinh B}{\sinh B} = 1 \quad \text{是有序相。}$$

$\therefore T_c = 0$ . 这时, 没有通常 critical exponents 的定义, 见 Pathria 书相变讨论。

二维  $2M \times 2M$

$$Z = \sum_{\{\sigma_{m,n}\}} e^{K_1 \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^z \sigma_{m,n+1}^z + K_2 \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^z \sigma_{m+1,n}^z}$$

对给定的  $m$ ,

$$\begin{aligned} \text{第一部分就是 } \prod_j V_1(j, m), \quad V_1(m) &= (\sinh 2K_1)^{N/2} \exp(K_1 \sum_j \sigma_j^z) \\ \text{第二部分 } e^{K_2 \sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z} &\equiv V_2(m) \end{aligned}$$

$\begin{pmatrix} 2M \times 2M \\ \text{矩阵} \end{pmatrix}$

$$\text{这样 } Z = \text{Tr}(V_1^M V_2^M) = \text{Tr } V^M$$

$V_1$  和  $V_2$  都是  $2M \times 2M$  矩阵。

$$\begin{aligned} V_m \text{ 对角化: } \text{定义 } C_j &= \exp(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_l^+ \sigma_l^-) \cdot \sigma_j^- \\ C_j^+ &= \exp(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_l^- \sigma_l^+) \cdot \sigma_j^+ \end{aligned}$$

$$\sigma_{j\pm} = (\sigma_j^x \pm i \sigma_j^y)/2$$

$$\{C_j^+, C_k\} = \delta_{j,k}, \quad \text{其他为 } 0$$

Jordan-Wigner 变换。  $C^+ C = \sigma^+ \sigma$

例证:  $\sigma_j = [\exp(i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^+ c_l)] c_j$

$$\sigma_j = \begin{bmatrix} & \\ & \end{bmatrix} c_j^+$$

在  $V_1$  和  $V_2$  中  $\sigma_j$  这样变换.  $\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$

这样,  $V_1 = (\sinh 2K)^{N/2} \exp[-2K \sum_j (\sigma_j^+ \sigma_j - \frac{1}{2})]$

$$= (\sinh 2K)^{N/2} \exp[-2K \sum_j (c_j^+ c_j - \frac{1}{2})]$$

在  $V_2$ ,  $\sigma_j \rightarrow \sigma_x = \sigma_j^+ - \sigma_j$ , 代入上式得:

$$V_2 = \exp \left\{ K_2 \sum_{j=1}^M (c_j^+ - c_j)(c_{j+1}^+ + c_{j+1}) \right. \\ \left. - (-1)^{\hat{n}} (c_M^+ - c_M)(c_1^+ - c_1) \right\}$$

$$\hat{n} = \sum_{x=1}^M c_x^+ c_x$$

$V_1, V_2$  是自由费米子理论. 可以对角化.

结果是 (16)

$$\frac{E}{N} = -\beta^{-1} \left[ \ln(2 \sinh 2k_1)^{1/2} + \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \epsilon_2 d\theta \right]$$

$$\cos \epsilon_2 = \cosh 2k_2 \cosh 2a - \sinh 2k_2 \sin 2a \cos \theta$$

一些结果:  $T_c$  由  $\sinh 2a = \sinh 2k_c$  定

当  $J_1 = J_2$  时,  $\frac{k_c T_c}{J} \approx 2.27$ .

\* 比如  $C \propto \ln |1 - \frac{T}{T_c}|$ .

\*  $M(T) \sim \begin{cases} (1 - \frac{T}{T_c})^{1/8} & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases}$

\*  $g(r) \sim \begin{cases} (T_c - T)^{1/4} e^{-r/2\xi} / (r^2)^{1/2} & T > T_c \\ (T - T_c)^{1/4} e^{-2r/3\xi} / (r^2)^{1/2}, & T < T_c \end{cases}$

$\xi \sim (T - T_c)^{-1}$

\*  $\chi \sim |t|^{-7/4}$

|                        | MF                             |
|------------------------|--------------------------------|
| $\alpha = 0$ (ln)      | $\alpha = 0$ (discontinuation) |
| $\beta = \frac{1}{8}$  | $\beta = \frac{1}{2}$          |
| $\gamma = \frac{7}{4}$ | $\gamma = 1$                   |
| $\delta = 1$           | $\delta = 3$                   |
| $\eta = \frac{1}{4}$   | $\eta = 1$                     |

( $g=15$ )  $\delta=3$  一样.

### §7.4.4 1+1 维 Ising model. (11)

1+1 维 (时间+空间) 的 Ising model 又叫横场 Ising model.

$$H = -K \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - h \sum_n \sigma_n^z$$

由于  $[\sigma_n^x, \sigma_n^z] \neq 0$ ,  $\sigma_n^x$  和  $\sigma_n^z$  不对易, 由于  $\vec{h} \cdot \vec{\sigma} = h \sigma^x$ , 在  $x$  方向, 占主导, 又叫横场.

为证明 1+1 维 Ising model 与 2 维 Ising model 等价. 证明: 证明 0+1 维 spin 模型与 1 维 Ising 模型等价.

$$Z_{1D} \leftrightarrow \text{Tr} e^{-H/kT}$$

↓

$H_x = -h_x \sigma_x$ ,  $h_x = K \Delta x$ ,  $(K_1 \gg 1)$

$h_x \Delta x = e^{-2K}$ ,  $p/\Delta x = M$ ,  $h_x \beta M = e^{-2K}$

前面我们已经知道, 当  $K \rightarrow \infty$  时为 0+1 维 Ising model.

$$Z_1 = \text{Tr} V^M$$

$$= \text{Tr} [e^{K(1 + e^{-2K} \sigma_x)}]$$

$$V = V_1 = e^{K(1 + e^{-2K} \sigma_x)} \quad (12)$$

$$= \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} (1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_x)$$

$$V^M = (\frac{M}{\beta h_x})^{M/2} (1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_x)^M$$

$$= (\frac{M}{\beta h_x})^{M/2} (1 - \Delta \tau H_x)^{M/2}, \quad (\Delta \tau = \frac{\beta}{M})$$

$$= (\frac{M}{\beta h_x})^{M/2} [(1 - \Delta \tau H_x)^{1/2}]^M = (\frac{M}{\beta h_x})^{M/2} e^{-\beta H_x}$$

$\therefore M \rightarrow \infty$ ,  $Z_{1D} \sim \frac{\text{Tr} V^M}{M} \sim \text{Tr} e^{-\beta H_x}$ , up to a const.

即, 1+1 维 Ising model 与 0+1 维 spin 模型等价.

$$= \text{Tr} e^{-\beta H}$$

即, 1+1 维 Ising model 与 0+1 维 spin 模型等价.

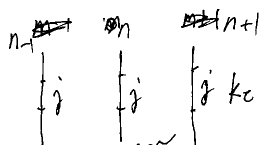
$$H = \sum_n \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - h \sum_n \sigma_n^z$$

$$V = V_1 V_2 = e^{K(1 + e^{-2K} \sigma_x)} e^{K(1 + e^{-2K} \sigma_x)}$$

$$V = e^{K(1 + e^{-2K} \sigma_x)} e^K$$

$$\sum_{m,n} \sigma_{m,n}^x \sigma_{m+1,n}^x = e^{\sum_m \sigma_m^x \sigma_{m+1}^x}$$

= 1D Ising model



一条 chain,  $K$  - 1D Ising coupling

$$V_n(j) = \sqrt{\frac{M}{\beta h_x}} \left( 1 + \frac{h_x \beta}{M} \sigma_n^x \right)$$

$$V_n^M \sigma = \left( \frac{M}{\beta h_x} \right)^{M/2} e^{-\beta H_Q(n)}, \quad H_Q(n)$$

$$= h_x \sigma_n^x, \quad \frac{h_x \beta}{M} = e^{-2K}$$

链间耦合:

$$e^{K \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^z \sigma_{m,n+1}^z} = \prod_{m,n} e^{K \sum_{m,n} \sigma_{m,n}^z \sigma_{m,n+1}^z} \approx e^{\frac{K}{\Delta t} \beta \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z}$$

$$\approx e^{\beta K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z}$$

$$\therefore H_{2D} = -\beta \left( -K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - h_x \sum_n \sigma_n^x \right)$$

$$Z_{2D} \Rightarrow Z = \text{Tr} e^{-\beta \left( -K \sum_n \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - h_x \sum_n \sigma_n^x \right)}$$

## §7.5 重整化群

我们已看到, 用平均场理论研究相变, 虽然可以给出一些定性的结果, 但定量的估计与各种临界指数与实验相差甚远, 精确的当然是最可靠的。但精确可解模型很少, 且不能反映实际物理系统。Kadanoff 首先提出了利用关联长度与临界点发散, 系统宏观特征尺度已不重要, 可以通过标度变换来把体系不断变简单, 但临界行为不变, 从而去计算临界指数。Kadanoff 并没有建立一个完整的理论, 原因是标度变换后, 要想保持变换后 Hamiltonian 与变换前一致不容易。Wilson 成功地发展了 Kadanoff 的思想, 建立重整化群理论, 广泛应用于 Kondo 问题, 取得非常好的结果。现在已有各种不同 RG theories, 例如: 实空间 RG, 动量空间 RG, 逐层 RG, 泛函 RG, PMRG, ... 其基本思想都是 (1) 作“粗粒化”尺度变换

$$h \Delta z = e^{-2K_c}, \quad K \Delta z = K_x$$

critical point.

$$\sinh 2K_x \sinh 2K_c = 1, \quad K_c \gg 1$$

$$\Rightarrow \frac{2K \Delta z}{2h \Delta z} = 1. \Rightarrow K = h. \text{ Quantum critical point.}$$

$K > h$ , Ferromagnetic order

$K < h$ , Quantum disorder.

$$\text{事实上, 在 } \mu_j^z = \prod_{i < j} \sigma_i^x, \quad \mu_i^x = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$$

$$\text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr} e^{-\beta \tilde{H}}$$

$$\tilde{H} = -h \sum_i (\mu_i^z \mu_{i+1}^z - K \mu_i^x)$$

当  $h = K$  时, self-dual.  $\odot$

但,  $\mu^z$  order  $\Leftrightarrow \sigma^z$  disorder.

$\mu^x$  disorder  $\Leftrightarrow \sigma^z$  order.

$\therefore$  critical point 在  $K=h$ .

(1) 平均场理论, 不可能开窍了.  $\therefore$  RG 是“构造”的“Group”, 是“半群”, 找出 RG 变换.

(2) 且不必去计算 (线性化重整化群变换, 线性化临界点). (3) 确定不动点, 找出临界点. 不动点是及相应参数. (3) 对线性 RG 变换, 确定临界指数.

在重整化群中, 一些很复杂的物理问题可以计算出来. 在一些 RG 中, 主要的是  $\beta$  函数有时不在确定 critical exponents. 例如, DMRG, 主要的是确定系统的 ground states 及低能激发. 从而确定一个体系的低能特性.

### §7.5.1 Real space RG

最直观的 RG 是 RSRG. 例如, ~~1D Ising~~ (Decimation)

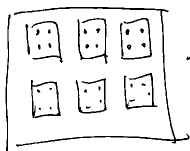
Kadanoff's blocks of spins. 对 1D spin model.

把  $l^d$  ( $d$  是空间 dimensions,  $l$  是 integer)

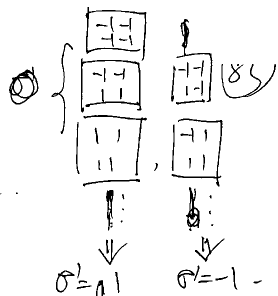
个 spin 看成一个 spin. 但 ~~spin~~ spin 与 ~~spin~~ spin 性质相同. 例如,  $\sigma \rightarrow \sigma'$  都是  $\pm 1$ .

原  $N$  个 sites,  $\Rightarrow N' = l^{-d} N$  sites.

$$\vec{r}' = \ell^{-1} \vec{r}$$



$l=2, d=2$



又例 decimation (1D Ising)

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \{-\beta H_N[\{\sigma_i\}]\}$$

把其中  $N-N'$  个 spins 先求和掉. 希望

$$Z = \sum_{\{\sigma_{i'}\}} \exp \{-\beta H_{N'}[\{\sigma_{i'}\}]\}$$

例如, 1D Ising model. 求和掉所有奇数格.

如果两个子链中自由能/边界熵相等即

$$N' f^{(s)}(t', h') = N f^{(s)}(t, h) \quad \left( t = \frac{T-T_c}{T_c}, h \leftarrow \text{外场} \right)$$

$$\Rightarrow f^{(s)}(t, h) = \ell^{-d} f^{(s)}(t', h')$$

$t$  和  $t'$  都是  $2$  的幂,  $\therefore$  线性关系.

$$t' = \ell^{y_t} t, \quad h' = \ell^{y_h} h$$

$y_t$  和  $y_h$  待定.

根据 scaling 假设,  $f$  应:

是齐次的,  $\therefore f$  应满足

$$\frac{h'}{|t'|^{d/2}} = \frac{h}{|t|^{d/2}} = 1$$

13) 时, 为了消除  $\ell^{-d}$ ,  $f$  应满足

$$f^{(s)}(t', h') = |t'|^{d/2} f^{(s)}(h'/|t'|^{d/2})$$

$$\Rightarrow f^{(s)}(t, h) = |t|^{d/2} \tilde{f}^{(s)}(h/|t|^{d/2})$$

$$f^{(s)}(t, h) = \ell^{-d} |t'|^{d/2} \tilde{f}^{(s)}(h/|t'|^{d/2}) = |t|^{d/2} \tilde{f}^{(s)}(h/|t|^{d/2})$$

如果这些都可以做到, 则边界熵是常数

$$C_h = \frac{\partial f^{(s)}}{\partial t} \sim |t|^{-(2-d/2)} \Rightarrow \alpha = 2 - \frac{d}{2}$$

$$\frac{M}{N} = \frac{\partial f^{(s)}}{\partial h} = |t|^{d/2} |t|^{-d} \frac{d}{d(h/|t|^{d/2})} \tilde{f}^{(s)}(h/|t|^{d/2}) \sim |t|^{\frac{d}{2}-d} \Rightarrow \beta = \frac{(d-y_h)}{y_t} = 2 - \alpha - \Delta$$

$$\frac{\partial M}{\partial h} = \frac{\partial^2 f^{(s)}}{\partial h^2} = |t|^{d/2} |t|^{-2d} \frac{d^2}{d(h/|t|^{d/2})^2} \tilde{f}^{(s)}(h/|t|^{d/2})$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

§ 2.5.2 例子: 1D Ising model

例: 1D Ising model.

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \sum_{i=1}^N (K_0 + K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{B}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})) \right\}$$

( $K_0=0, K=\beta J, B=\beta h$ ) 取  $N=\text{even}$ .

$$\exp \dots = \frac{1}{2^N} \exp \left[ K_0 + K \sigma_1 \sigma_{N+1} + \frac{1}{2} B (\sigma_1 + \sigma_{N+1}) \right] = \frac{1}{2^N} \exp \left\{ 2K_0 + K (\sigma_{j-1} \sigma_j + \sigma_j \sigma_{j+1}) + \frac{1}{2} B (\sigma_{j-1} + 2\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right\}$$

对  $\sigma_j = \pm 1$  求和

$$= \frac{1}{2} \exp \left\{ 2K_0 + K_0 (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + \frac{1}{2} B (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1} + 2) \right\} + \exp \left\{ 2K_0 - K_0 (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + \frac{1}{2} B (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1} - 2) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \exp \left[ 2K_0 + \frac{1}{2} B (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) \right] \cdot 2 \cosh (K_0 (\sigma_{j-1} + \sigma_{j+1}) + B)$$

§ 4.1 例子: 1D Ising model

$$\xi = \Delta/\beta = y_h/(d-y_t) \quad [\gamma = \beta(1-\alpha)] \Rightarrow \gamma_0$$

correlation length, rescaling

$$\xi' = \ell^{-1} \xi$$

而找到的希望  $\xi \sim |t|^{-\nu}, \xi' \sim |t'|^{-\nu}$

$$\ell^{-1} = \left( \frac{\xi'}{\xi} \right) = \left( \frac{t'}{t} \right)^{-\nu} = \ell^{-\nu y_t}, \quad y_t = 1, \nu = \frac{1}{y_t}$$

$$\therefore \left[ d\nu = d/y_t = 2 - \alpha \right]$$

$$g(r) = \langle \sigma(\vec{r}) \sigma(\vec{0}) \rangle \sim r^{-(d+2-\eta)}$$

$$g(r) = \langle \sigma(\vec{r}) \sigma(\vec{0}) \rangle \sim r^{-(d+2-\eta)}$$

$$\therefore \sigma'(\vec{r}) = \ell^{(d+2-\eta)/2} \sigma(\vec{r})$$

$$\text{scaling relation: } \gamma = (2-\eta)\nu$$

$$\eta = d+2-2y_h$$

$$\sigma'(\vec{r}) = \ell^{y_h} \sigma(\vec{r})$$

即  $\sigma$  与  $h$  - 样 rescaling.

$\langle \sigma \rangle$  与  $h$  - 样.  $\checkmark$

hyper scaling relation!!!!

$\therefore \sum_N(K, B) = e^{N'K'} \sum_{N'}(K', B')$

写成ln形式:  
 $K' = \frac{1}{4} \ln [\cosh(2K+B) \cosh(2K-B)] - \frac{1}{2} \ln \cosh B$   
 $B' = B + \frac{1}{2} \ln [\cosh(2K+B) / \cosh(2K-B)]$

Fixed points: RG eqs.  
 $R(K) = K', R(B) = B'$

Fixed points:  
 $R(K^*) = K^*, R(B^*) = B^*$

当  $K=0$ , 对任何  $B$ , fixed point 成立. (这是 trivial fixed point).

另一个 fixed point 是  $K=\infty, B=0$ .

也就是说, 取  $h=0$ , 当  $T \rightarrow 0$ .

在这个 fixed point 附近

$K' = \frac{1}{2} \ln \cosh 2K \approx \frac{1}{2} \ln(e^{2K}/2) = K - \frac{1}{2} \ln 2$

$B' = B + \frac{1}{2} \ln e^{2B} = 2B$ . (由于  $K=\infty$ , 且  $B$  接近 0)

这时, 设  $t = \exp(-4K)$ , ( $p > 0$ ), 则  $t^* = 0$ .

即  $t' = 2^{p/2} t$ .

由  $\frac{h'}{h} = \frac{h}{h} \Rightarrow \frac{h'}{h} = 1$

$\therefore l=2, y_t = p/2, B'=2B \Rightarrow y_h=1$ .

$\Rightarrow \alpha = 2 - 2/p, \beta = 0, \gamma = 2/p, \delta = 0, \eta = 1$ .

5 Pathria 书 & exact (见第 13.2)

一维 Ising model 是一个非常特别的情况. 一般 RG 性质可由固定点附近. (线性化) RG 方程得出. 对于一个有  $n$  个 coupling constants 的模型. 做 decimation:  $N' = l^{-d} N, z' = l^{-1} z$  ( $l > 1$ )

$K' = R_l(K)$ . ( $R_l^0 = I$ )

$R^{(n)} = R_l(R^{(n-1)}) = \dots = R_l^n(K^{(0)})$ ,  $n=0, \dots$

correlation length  $\xi^{(n)} = l^{-n} \xi^{(0)}$

Singular free energy singular part of free energy / per site

$f_s^{(n)} = l^{nd} f_s^{(0)}$   $\rightarrow$  singular

$\sigma_{2j+1, 1, 3, \dots} \rightarrow \sigma_j^{1, 2, 3, \dots}$

$Z = \sum_{\{\sigma_j\}} \prod_{j=1}^{N/2} \exp(2K_0)^{\frac{1}{2}} \cosh(K(\sigma_j + \sigma_{j+1}) + B) \exp[\frac{1}{2} B(\sigma_j' + \sigma_{j+1}')] ]$

如果要求  $Z$  是描述 Ising model, 即

$Z = \sum_{\{\sigma_j\}} \exp \left\{ \sum_{j=1}^{N'} [K_0 + K' \sigma_j \sigma_{j+1}' + \frac{1}{2} B'(\sigma_j' + \sigma_{j+1}')] \right\}$

也就是说:  $\sigma_j' = \sigma_{j+1} = 1, \sigma_j' = -\sigma_{j+1} = -1, \sigma_j' = -\sigma_{j+1} = \pm 1$  时, 指数相等.

$\exp(K_0 + K_0 + B) = \exp(2K_0 + B) \cosh(2K + B)$

$\exp(K_0 + K' - B) = \exp(2K_0 - B) \cosh(2K - B)$

$\exp(K_0 - B') = \exp(2K_0) 2 \cosh B$

设  $\exp(K_0) = x, \exp K' = y, \exp B' = z$

$xy = 2 \exp(2K_0 + B) \cosh(2K + B)$

$xy/z = 2 \exp(2K_0 - B) \cosh(2K - B)$

$x/z = 2 \exp 2K_0 \cosh B$ . 对  $B$  求导.

$e^{K_0} = x = 2 e^{2K_0} [\cosh(2K+B) \cosh(2K-B) \cosh^2 B]^{1/4}$

$e^{K'} = y = [\cosh(2K+B) \cosh(2K-B) / \cosh^2 B]^{1/4}$

$e^{B'} = z = e^B [\cosh(2K+B) / \cosh(2K-B)]^{1/2}$

$R_l(K^*) = K^*$

fixed point.  $\Rightarrow z(K^*) = l^{-1} z(K^*)$

$\Rightarrow z(K^*) = 0, \text{ or } \infty$ . 对相变,  $z(K^*) = \infty$ .

现在我想看不动点的性质. 在  $K^*$  附近

$K = K^* + \delta K$

$\Rightarrow K' = K^* + \delta K' = R_l(K^* + \delta K)$

$\delta K' = R_l(K^* + \delta K) - K^* \approx A_l \delta K$

若  $\delta K$  和  $\delta K'$  都是小量, 则

$\delta K' = \left. \frac{dR_l}{dK} \right|_{K=K^*} \delta K \equiv A_l^* \delta K$

$A_l^*$  是由  $R_l^*$  线性化得到的一阶矩阵, 设

$\lambda_i$  是特征值,  $\phi_i$  是特征向量. 是一组基, 则

$\delta K = \sum_i \phi_i$

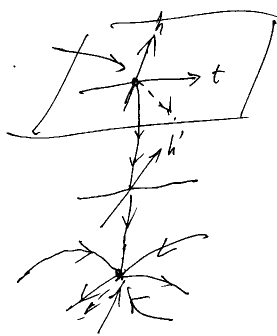
$\delta K' = \sum_i u_i A_l^* \phi_i = \sum_i u_i \lambda_i \phi_i = \sum_i u_i' \phi_i$

$\therefore$  在一组基中,

$u_i^{(n)} = \lambda_i^n u_i^{(0)}$

(2). 若  $\lambda_i < 1$ ,  $u_i$  是 irrelevant variable.  $FK'$  越来  
来越小, 子空间趋近  $K^*$ , 稳定性越强.

physical fixed point.



\* Real space RG (PWI)  
 $d > 2$  有团唯.  $\varepsilon = 4-d$   
 展开. 在量子场论中很  
 有用.

\* Längen Kett:  
 $\sigma_i \rightarrow \sigma_{in}, n \rightarrow \infty$ .

动点问题的“Scaling”不变性。即是说当  
参数为  $\lambda \rightarrow 0$  时不变。 ( $\lambda \rightarrow 0$ , 坐标不变)

准聚态理论也可以用动量守恒来解释, 但不如  
要在于“守恒”, 即  $\mu = \mu_0 + \mu_1$ .  $\mu > \mu_0$ ,  $\mu > \mu_1$ .

具体做法是在  $k$  空间中引进一个 ~~cut~~ cut 加入，~~物理过程~~ 把  $|k| > \Lambda$  的部分去掉。而留下  $|k| \leq \Lambda$  部分。这相当于在实空间中的粗粒化过程。把时域中的短程  $m$  ( $|k|$  大  $m$ ) 部分求和掉，把长程部分留下 ( $|k|$  小  $m$  部分)。rescaling  $\Lambda \rightarrow \Lambda/b$ ,  $b > 1$ , ~~即~~ 就等效于实空间中 rescaling

$N' = l^{-d} N$  ( $l > 1$ ). 功为空间  $m$  重整化群方程  
常微分方程化. 把物理模型映射到一个 effect  
场论. 用路径积分办法来做. 通常又称为  
泛函重整化群方法. ~~这~~ 这是种处理强  
相互作用的研究强关联电体系, 例如.  
金属导体. 这也是数值重整化群一种.

→ Real space 一樣, 但 Hysteresis critical expts.  
也 沒 relevant, irr. in marginal.

§ 7.6 数值重整化群和DMRG分析 (9)

§ 7.6.1 引言...

在讨论NRG和DMRG之前, 我们先 remark  
动量空间重整化群.

讨论 / 稿

动量守恒重整化群。  
重整化这个概念~~起源于量子场论~~<sup>起源于量子场论</sup>, ~~它~~<sup>它</sup>源于“紫外发散”(UV)。这些发散~~在相~~<sup>在相</sup>定义中需要~~与~~<sup>与</sup>抵消, 这就是场论中的“正规化”。引入抵消项将其去掉, 即“重整化”。重整化在时空中取得了非凡的成功。在此以后, 一般认为一个可以描述微观世界的理论必须能够重整化。基本粒子的标准模型“SU(3) x SU(2) x U(1)”规范理论就是一个可重整的理论。而现代四种基本相互作用中, 没有自洽地时代化的理论是引力理论: 广义相对论是不可重整的。但为什么? 这是物理学家 William G. 所提出的一个问题。所有其他相互作用的所谓重整化是基于“~~它~~”。

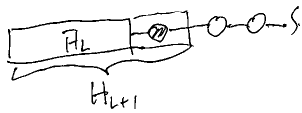
§7.6.2 Wilson's NRG.

RG 的基本思想就是保留我们想研究的 fixed point 附近物理状态而把其它贡献不大的物理状态“剥掉”，“求和掉”。就以凝聚态物理而言，我们研究  $\omega \sim 0$  物理状态就是基态和 low-lying excitations. Wilson NRG 的基本思想也是如此；

1. 把一给 lattice 子空间中  $m$   $L$  子 sites 子空间拿出来, 做精确对角化. ( $H_L$ )
  2. 精确对角化  $H_L$  后, 取出  $m$  个 lowest eigenvalues  $E_i$  和 eigenstates  $\psi_i$ , ( $i=1, \dots, m$ ).
  3. 把  $H_L$  作 transformation:  $O_L^\dagger H_L O_L$ ,  $O_L$  是
  3. 定义  $O_L = (\psi_1, \dots, \psi_m)$ ,  ~~$O_L = (\psi_1, \dots, \psi_m)$~~
- $$\bar{H}_L = O_L^\dagger H_L O_L = \begin{pmatrix} \psi_1^\dagger \\ \vdots \\ \psi_m^\dagger \end{pmatrix} (E_1 \psi_1, \dots, E_m \psi_m) = \begin{pmatrix} E_1 & & \\ & \ddots & \\ & & E_m \end{pmatrix}$$
- $$\bar{A}_L = O_L^\dagger A_L O_L = \begin{pmatrix} \psi_1^\dagger A_L \psi_1 & \dots & \psi_1^\dagger A_L \psi_m \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_m^\dagger A_L \psi_1 & \dots & \psi_m^\dagger A_L \psi_m \end{pmatrix} = (\bar{A}_L)_{m \times m}$$
- max matrix



4. 加-site,  $H_L \rightarrow H_{L+1}$ . 这时需要重新 L 与 sites 与外部 site 的耦合.
5. 用  $H_{L+1}$  代替  $H_L$ , 重复 2.



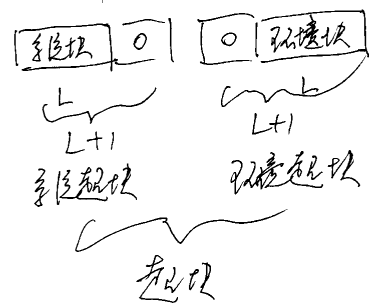
$H_{L+1}$  在空间维数  $L \times m \rightarrow S \times m$ . ~~是~~ 在  $L$  上用了 site 在空间维数. 2.6.3 DMRG 简介

Wilson DMRG 的  $\psi_i, i=1, \dots, m$  是  $L$  sites 子系统的基矢, 与外部的  $m$  sites 耦合. 例如, 用周期边界或  $\phi$  固定边界.  $\phi$  和  $\psi$  与  $\psi$  子系统的边界与  $\psi$  子系统的边界不一样. 如何选择  $\psi$  子系统的边界与  $\psi$  子系统的边界是很大的问题. White 的思路是加一些 sites 进去, 在扩大的子系统中 (superblock) 做对角化, 再投影到没扩大的子系统中. 这样, 边界条件在扩大的 site 上, 对没扩大的 system blocks 子系统的影向不大. 这种做法对长程相互作用子系非常有效, 原因是 ~~投影到~~ 投影到

~~没扩大的子系是唯一~~  $m$ . 但对有相互作用子系, 以 superblock 做基矢, 投影到 system blocks 可得多值  $m$ :  $14_6 \rightarrow 14_2, 14_3 \rightarrow 14_2$ . 如何从中选出最合适的  $14_2$ ? 这就是 DMRG 方法的核心.

### 2.6.3 DMRG 简介

我在这再作一简单介绍. 最初称为无穷链基矢. 考虑一子系, 为了更好地处理边界条件, 引入与之一模一样的环境块. 对称性和  $\psi$



新基矢. 组成  $\psi$  子系. 环境和环境块.  $\psi$  和  $\psi$  组成  $\psi$  子系.

超块边界条件可以是开边界条件.

DMRG 的符号过程如下, 首先设在一低能保留态由  $m$ . 一般为  $m$  基矢.

- 首先构造一基矢数目超过  $m$  的超块. 但小到足以用精确对角化解之.
- 精确对角化超块. 取出最低基态 (一般为基态).
- 这些态用 system 超块  $|i\rangle$  和环境超块  $|j\rangle$

基态  $m$  基矢是  $|i\rangle = \sum_j \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$ . 投影到 system 超块  $m$  reduced density matrix 是

$$P_{ij} = \sum_{\text{环境}} \psi_{ij} \psi_{ij}^* = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{ij}$$

$$\text{Tr } P = \sum_i P_{ii} = 1.$$

对角化  $P$ , 有本征值  $\lambda_i \geq 0$ ,  $\sum \lambda_i = 1$ , 本征态  $|u\rangle$ .

四. 如果  $\lambda = 1, \dots, s$ ;  $s < m$ . 则保留所有  $|u\rangle$ . 如果  $s > m$ , 则保留  $m$  个最大的  $\lambda$ .

5. 系统中以最大的  $m$  个态. 用  $|u\rangle, u=1, \dots, m$ . 构造  $O = (|u\rangle, \dots, |u\rangle)$ . 把  $H_{\text{sys}} \rightarrow \tilde{H}_{\text{sys}} = O^\dagger H_{\text{sys}} O$ .  $H_{\text{air}} \rightarrow \tilde{H}_{\text{air}} = O^\dagger H_{\text{air}} O$ . (力弱也作要的调整).

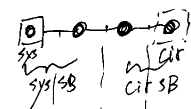
五. 以新的  $\tilde{H}$  代替  $H$ , 在  $\text{system}$  和  $\text{circumstance}$  块中加一格表. 形成新的  $m$  子系超块和环境超块. 作循环. 直到收敛满意.

例: spin  $1/2$  Heisenberg model

$$H = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$$

保留  $m=5$ , 考虑  $S_{\text{site}}^z = 0$  子空间.

(1)  $L=4$



$$B_L, S_L, S_R, B_R$$

左右边界  $\lambda > 1/2$  基态.

$$H_{B_L=1} = H_{S_L} = H_{S_R} = H_{B_R=1} = 0$$

$$S_{B_L=1}^z = S_{S_L}^z = S_{S_R}^z = S_{B_R=1}^z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$S_{B_L=1}^+ = S_{S_L}^+ = S_{S_R}^+ = S_{B_R=1}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_{B_L=1}^- = S_{S_L}^- = S_{S_R}^- = S_{B_R=1}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

4个格点  $S_{\text{tot}}=0$  的态是 6 个。基。

$$\begin{pmatrix} | \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\ | -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix}$$

$$H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4$$

在这 6 个态下：

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{3}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

求出  $\psi = (0.149429, -0.557678, 0.408248, 0.408248, -0.557678, 0.149429)^T$   
 $= (c_1 = (c_i))^T$

$| \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle + \dots$   
 $= \frac{1}{\sqrt{6}} (| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle + \dots$

$$P(i_1, i_2, i_3, i_4) = \sum_{j_1, j_2} \psi_{i_1 i_2 j_1 j_2}^* \psi_{j_1 j_2 i_3 i_4}$$

$\{ | i_1, i_2 \rangle = \{ | \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle, | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle, | -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle, | -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \}$  得  $4 \times 4$  RDM

$$P = \begin{pmatrix} -0.022329 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.477671 & 0.455342 & 0 \\ 0 & 0.455342 & -0.477671 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.022329 \end{pmatrix}$$

## § 7.7. K-T 相变简介

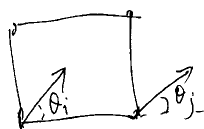
(106)

2016 年诺贝尔奖授予了三位研究拓扑态的科学家。K-T 相变是通常相变，即有序度的变化，但又不同于对称性破缺引起的相变，而是由电子和磁矩的相互作用引起的相变。这与我们现在研究的拓扑态、拓扑相变不是一回事。拓扑相变是  $\psi$  的变化。Thouless 在 1983 年：IQHE 中拓扑态的  $\psi$  变化。在课程中，由于拓扑相变与统计物理的关系还不明确，我们只对 K-T 相变作一简介。

K-T 相变是从研究 2 维 X-Y 模型入手。设 2 维方格，每个格点有一个 spin。也只有 X, Y

$\vec{S} = (S_x, S_y)$

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$



$$= -J S^2 \sum_{\langle i, j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

根据 Negan-Mermine 定理，不存在有限温度相变。但我们的模型与模型  $m$  近似相似和低温近似

2 维化  $P: W = (0.022329, 0.455342, 0.022329, 0.022329)^T$

$$\Rightarrow u^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^3 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, u^4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$S=4<5$  全部保留。

$$O = (u^1, u^2, u^3, u^4)$$

把 system 看作 4 个 spin 系统，与  $B_{L=2}$  之间是  $4 \times 4$  变换。取  $B_{L=2}$  与  $B_{L=1}$  的 system 变换。与  $B_{L=1}$  变换： $| B_{L=2} \rangle = 0$  ( $| B_{L=1} \rangle \otimes | S_L \rangle$ )。

$$H_{B_{L=2}} = 0 (H_{B_{L=1}} + \vec{S}_{B_{L=1}} \cdot \vec{S}_L) O^T$$

$$S_{B_{L=2}}^z = 0 (I \otimes S_L^z) O^T, S_{B_{L=2}}^+ = 0 (I \otimes S_L^+) O^T$$

因此得到下步  $m$  全部信息。如  $n$  个新基和系统环境。形成  $S_{L=2}$  和  $S_{R=2}$ 。总链长变成 36。即新子块  $B_{L=2}$  为  $\dim=4$ ，system superblock  $\dim=4 \times 2=8$ ，格点超块在  $S_{\text{tot}}=0$  下为  $\dim=20$ 。写出  $20 \times 20$  mH。2 维化。取最低能态，求出  $\psi$ ，得到  $S_{L=2}$  中  $8 \times 8$  有效矩阵。 $8 > 5$ 。取其中最大  $5 \times 5$  wM。125 8 vectors.  $(u^1, \dots, u^5) = 0$  是  $5 \times 8$  变换阵。再  $| B_{L=2} \rangle = 0 (| B_{L=1} \rangle \otimes | S_L \rangle)$ 。求出  $H_{B_{L=3}}, S_{B_{L=3}}^z, S_{B_{L=3}}^+ = 0 (I \otimes S_L^z) O^T$

发现特性与 2 维一样，应该属于 2D 相。根据  $\psi$  的性质。这是展开：

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_i)}$$

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_i)}$$

$$= \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} e^{-\beta H(\theta_i)}$$

$$= \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \langle i, j \rangle (1 + \beta J \cos(\theta_i - \theta_j) + O(\beta^2))$$

spin-spin correlation function

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \langle i, j \rangle (1 + \beta J \cos(\theta_i - \theta_j) + O(\beta^2))$$

$$\sim \left( \frac{\beta J}{2} \right)^{|i-j|} \sim \exp \left[ -\frac{|i-j|}{\xi} \right]$$

$$= \exp \left( -\ln \left( \frac{2}{\beta J} \right)^{|i-j|} \right) = \exp \left( -\frac{|i-j|}{\xi} \right)$$

$\xi$  是 correlation length.

另一方面，在低温极限， $(\theta_i - \theta_j)$  是小量。( $-J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ ,  $\vec{S}_i \parallel \vec{S}_j$ )  $\therefore \cos(\theta_i - \theta_j) = 1 - \frac{1}{2} (\theta_i - \theta_j)^2 + \dots$

$\therefore H = \frac{1}{2} \int d^2x \left[ (\partial_t \theta - \partial_x \phi)^2 + (\partial_t \phi + \partial_x \theta)^2 \right] \Rightarrow a^2 (\partial_x \theta)^2 + a^2 (\partial_y \theta)^2 = a^2 (\nabla \theta)^2$

在连续极限

$\beta H = \beta E_0 - \frac{\beta}{2} \int d^2x |\nabla \theta(x)|^2$

$\beta E_0 = 2\beta J L^2 / a^2$ ,  $L$  是 square lattice 线性,  $a$  是 lattice spacing

这时,  $\langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle \sim \left| \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{a} \right|^{-\frac{1}{2\pi\beta}}$

与  $\exp$  的  $\sim$  exponential decay 类似, 这是一个代数 decay, 称为代数长程序。

$\therefore$  存在一个相变点。

这与相变有直接对称性自发破缺的定理。是如何产生的呢? 首先, 我们注意到一点,  $H$  看起来像是一个  $\phi$  的二次项, 但有一个  $\theta$  的差, 即  $\theta + 2\pi \equiv \theta$ , 是一个周期性。我们不能用通常的  $\text{rescale}$  方法来  $\text{rescale } \theta$ 。

也就是说, 这个相变可能与这个周期性有关。

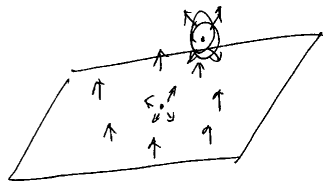
$\nabla \cdot \frac{\delta H}{\delta \theta} = 0 \Rightarrow \nabla^2 \theta = 0$

解是: ①  $\theta = \text{const.}$  ②  $\nabla \theta = (-\frac{y}{r}, \frac{x}{r})$ .

$\oint \nabla \theta \cdot d\vec{x} = 2\pi \cdot \text{winding number} = 2\pi n$

$\oint \nabla \theta \cdot d\vec{x} = 2\pi$  一般地  $\oint \nabla \theta \cdot d\vec{x} = \oint d\theta = 2\pi n$

$\theta$  是一个 vortex:

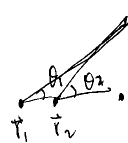


$(\nabla \theta \cdot \nabla \theta) = \left( \frac{x^2 + y^2}{r^4} \right) = \frac{1}{r^2}$

$\therefore$  单个 vortex  $\sim$  能量  $\frac{J}{2} \int d^2x (\nabla \theta)^2 \sim E_0 = \frac{J}{2} \int_a^L r dr \int_0^{2\pi} d\theta \cdot \frac{1}{r^2} = J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right)$

这是  $\log$  发散。

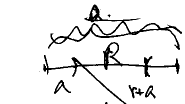
在 zero-temperature, 这种 vortex 解不能单独存在。但可以有一对  $+1$  和  $-1$  vortex 成对出现。它们的能量有限:  $\sim \ln(R/a)$ 。



在无穷远处,  $\theta - \theta_0 \approx 0$ .

$\therefore +1$  - vortex 和  $-1$  - vortex 相互抵消。

相对角动量贡献



$\Delta U = \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 + \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 = 2J\pi \ln\left(\frac{R}{a}\right)$

$\therefore \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 = 2J\pi \ln\left(\frac{R}{a}\right)$

$R$  是两个 vortices 之间的距离。

是有限的。

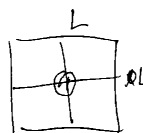
$E_{\text{vortex}} = \int d^2x (\nabla \theta)^2 + \int d^2x (\nabla \theta)^2$

$\approx \int_{\text{core}} d^2x (\nabla \theta)^2 + \int_{\text{core}} d^2x (\nabla \theta)^2 + \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 + \int_a^R r dr d\theta (\nabla \theta)^2 = 2E_{\text{core}} + 2J\pi \ln\left(\frac{R}{a}\right)$

有限能量。这给出了一个吸引势。

这很像一个二维库仑气体,  $\therefore XY$  model dual to 2 维带电荷的气体。charge  $\Leftrightarrow$  vorticity.

K-T 相变 critical  $T_c$ :  $F = -\frac{\partial E}{\partial R} \approx -\frac{1}{R}$



一个 vortex 占的面积是  $a^2$  数量级。

在  $L^2$  的面积中, 可以有  $(L/a)^2$  个可能的 vortex 位置。

$\therefore$  在有限温度, 一个 vortex 的自由能是  $(S = \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right))$

$F = U - TS = (J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right) - T \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right))$

$= (J\pi - \frac{2}{\beta}) \ln\left(\frac{L}{a}\right)$

$\therefore$  当  $J\pi - \frac{2}{\beta} < 0$  时, 单个 vortex 可以挣脱出来。

发生相变。  $T_c = J\pi / 2k_B$ .

KT 相变~特点:

① 从低温端→临界点, 超流密度, 即序参量有跃变.

② KT 相变  $F(T) = \begin{cases} \frac{1}{T} e^{-2B(T-T_K)^K}, & T \geq T_K \\ 0, & T \leq T_K \end{cases}$

⇒ 此相及各阶段商都连续.

② ⇒ 无奇阶相变. ① ⇒ 一级相变.

KT 相变~实验记录:

D.J. Bishop and J.D. Reppy.

PRL 40, 1727 (1978)

超流氦气膜  $\rho_s(T_K) \sim$  跃变.

## §8.1 引言

非平衡统计物理, 在我们课程中, 只讲授偏离平衡态的近平衡态. 在这里耗散和涨落是一对主要矛盾. 耗散包含弛豫和输运二种现象.

\* 弛豫过程: 当平衡态受到小扰动, 则会偏离平衡, 一旦扰动取消, 系统经过一定时间(弛豫时间)后回到平衡. 从扰动中获取能量或物质会被耗散掉.

\* 输运过程: 适当控制外界条件, 例如温差、浓度差、电位差(称为广义力或 potential), 使系统维持在近平衡态, 则系统内会产生持续不断的, 与外力成正比的“流”(热流、粒子流、电流). 这反映耗散、质子和电荷的转移, 称为输运过程. 这过程消耗能量或物质, 所以也是耗散过程.

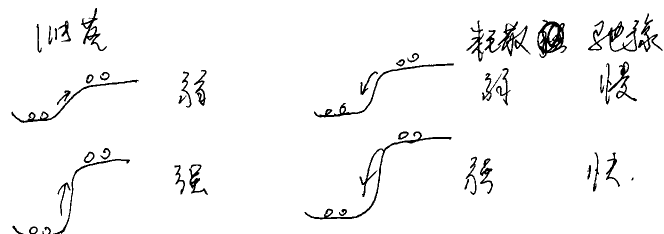
\* 涨落过程: 涨落是系统从平衡态向非平衡态的过程. 可分为二类: (i) 由物质本身(或物理状态)不连续引起, 宏观物理量围绕平衡态(或量子基态)平均值涨落. (ii) 随机外力作用于宏观小物体导致

导致“小物体”位置的变化. 例如布朗运动, 电路中的热噪声, 等.

涨落与耗散是一对紧密联系, 相辅相成~矛盾的统一.

(一) 二种弛豫过程: (i) 平衡态下涨落引起~偏离会回到平衡态 (ii) 系统受外力扰动, 驱动到非平衡态, 撤掉外力, 会回到平衡态. 这两种弛豫过程在本质上是一样的.

(二) 涨落越强, 系统的耗散也越强.



涨落与耗散的联系由涨落-耗散定理反映.

(涨落-耗散定理是说: 当有一个超量子过程) 有耗散, 耗散成热, 则存在一个与之超量子过程有联系的输运过程. 例如

\* 电阻耗散动能 ↔ 布朗运动 (把动能耗散成热能)

\* 电阻和 Johnson noise (电路中的热噪声): 电阻耗

电耗散成热 ↔ 电路中电阻产热耗散成电流. (Nyquist 定理)

\* 光吸收和辐射: 系统吸收光子能量 ↔ 辐射光子耗散成电磁波.

非平衡统计物理的研究方法:

\* 最早发展~方法是 Boltzmann 方程: 单粒子的分布函数  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  受外力和粒子之间碰撞后随时间~变化. 用于研究耗散、弛豫和输运过程. 量子力学定理 (H 定理).

\* 在近平衡态, Kubo 线性响应理论为研究输运过程提供了更好~框架. 若 Boltzmann 方程与经典力学中~牛顿定律相似, 线性响应理论则与经典力学中~哈密顿正则方程相似. (因此刘维方程) 因此, 后者更容易用于量子问题. 由刘维方程出发, 加上因果律给出一个确定~时间方向可以“证明”或“导出”Boltzmann 方程. 这样可以更好地理解耗散从哪来. 刘维方程是哈密顿力学~海森堡方程. 是时间反演不变~微分运动方程, 没有耗散. 耗散~来反源于, 对密度的子. 只有刘维方程~折达律是趋于平衡.

这就设定了一个时间方向，破坏了时间反演不变性，造成耗散。

\* 研究非平衡设计更有效。重心的方法是熵统计力学理论，耗散的存在与相空间导致的熵 Green's function 奇点至  $t=0$  平面下半平面以通。

\* 研究线性问题则与系统具体动力学细节无关。从量子力学，涨落一般是一种简单的随机过程，马氏可过程：分布函数随时间演化在  $t$  时刻的分布概率与最近前一时刻的体系状态有关。分布函数随时间演化的方程称为主方程 (Master 方程) 中如果随机变量可以连续取值，则称为 Fokker-Planck 方程。

\* 如果到涨落问题中直接研究随机运动的统计性质，则可研究含随机力的布朗方程：朗之万方程。

\* 从量子观来看，Master 方程研究在 Schrödinger 表象进行，朗之万方程研究在 Heisenberg 表象进行。

\* 这非平衡非平衡理论，称为非线性非平衡统计物理。研究还很挑战，我不讲授。

### 3.2 Boltzmann 统计微分方程

非平衡统计力学确定非平衡态的分布函数。在平衡态，分布函数  $f_0 = f_0(v) = f_0(E)$  与系统平衡时间  $t$  无关。例如，玻色统计 (量子统计)

$$f_0 = \frac{1}{e^{\beta E} \pm 1} \quad \text{但在非平衡态, } f = f(r, v, t).$$

Boltzmann 方程就是研究 ~~经典稀薄气体~~ 稀薄气体的  $f$ 。

(i) 经典：  $\lambda_T \ll \bar{r}$ ,  $\lambda_T = \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}}$  是热波长

则对波函数可忽略。  $\bar{r}$  是分子间的平均距离。

这时气体处于  $2m$  气体 ( $0^\circ\text{C}$ ,  $1\text{ atm}$ ) 下。例如氮气  $n = 2.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ,

$$\bar{r} \sim n^{-1/3} \sim 3.3 \times 10^{-7} \text{ cm}$$

$$m \sim 6.7 \times 10^{-27} \text{ g}$$

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \sim 0.17 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\therefore \frac{\bar{r}}{\lambda_T} \approx 6190.$$

除了 ~~量子低能~~ 低能  $\sim$  量子外，一般  $m$  气体 (密或不) 都是经典。

在这一章，我是不可能讲授非平衡统计的全部内容。我在这里要讲的主要内容：

(1) Boltzmann eqs., H 定理, 输运系数估计

(2) 线性响应理论, 输运和扩散等

(3) 涨落理论: 布朗运动, Master 方程,

Langvin eq.; 涨落-耗散定理

参考书: 杨守智, 苏汝铿; 吕朗宏; 霍根平和刘仁。

霍根平和刘仁。

(ii) 稀薄和长程力:  $\bar{r} \gg d$  (相互作用)

力程), 这样, 气体的大部分时间内自由运动, 发生碰撞的时间短, 范围小。这样, 可以把“运动”和“碰撞”分开考虑。(即“运动”时又“碰撞”, “碰撞”时无“运动”, 仍对气体为例,

$\bar{r} \sim 3.3 \times 10^{-7} \text{ cm}$ , 而相互作用是范德瓦耳斯力,  $d \sim 10^{-8} \text{ cm}$ . 用经典平均自由程估计,  $\lambda \sim \frac{1}{n\sigma} \sim 0.12 \times 10^7 \text{ cm}$ ,  $\lambda/d \sim 10^4$ .

(iii) 稀薄和长程力也允许碰撞可忽略。

为了导出 Boltzmann 方程, 还需作进一步简化:

(i). 忽略分子结构, 采用刚球模型代替范德瓦耳斯力。

(ii). 引入分子碰撞恒假设: 两分子在碰撞过程中速度都是相交换。

下面我们导出  $f(r, v, t)$  随时间变化的方程:

$f(r, v, t)$  表示  $t$  时刻在相空间点  $(r, v)$  附近体积元内的平均分子数。

$t \rightarrow t+dt$ , 只由碰撞引起

$$[f(\vec{r}, \vec{v}, t+dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)] d^3\vec{r} d^3\vec{v} = \frac{\partial f}{\partial t} d^3\vec{r} d^3\vec{v}$$

先把“运动”和“碰撞”部分分开。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c$$

$d = \text{drift}$ , 外力作用下的漂移。

$c = \text{collision}$ .

### §8.2.1 漂移项的计算

$$\frac{df}{dt} = [f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + d\vec{v}, t+dt) - f(\vec{r}, \vec{v}, t)] dt = 0 \quad \text{在运动中守恒}$$

$$\therefore \frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d + \sum_i \left( \dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} + \dot{\vec{v}}_i \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}_i} \right) = 0 \quad \text{守恒}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d = - \dot{\vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \dot{\vec{v}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}$$

$$= - \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (\vec{v} \cdot \vec{F})$$

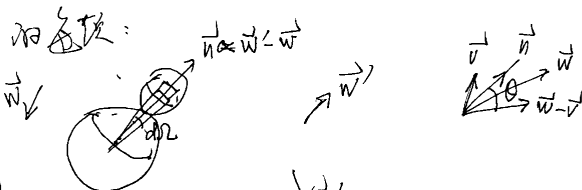
$\vec{v} = \vec{a} = \vec{F} / m$  (单位质量外力)

$$\therefore \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_d dt d^3\vec{r} d^3\vec{v} = - (\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}}) dt d^3\vec{r} d^3\vec{v}$$

玻尔兹曼方程的证明比较复杂, 我会把证明过程讲给大家听 (或见书)。  
现在, 我来解释

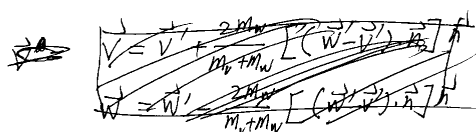
$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll.}} = \int (f'_V f'_W - f_V f_W) \Lambda d^3\vec{w} d\Omega$$

的项:



$$\Lambda = 4\pi^2 |\vec{v} - \vec{w}| \sin\theta \quad f'_V = f(\vec{r}, \vec{v}', t) \quad f'_W = f(\vec{r}, \vec{w}', t)$$

$$f'_V = f(\vec{r}, \vec{v}', t), \quad f'_W = f(\vec{r}, \vec{w}', t)$$

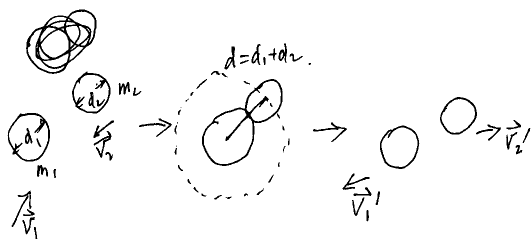


$$\vec{v}' = \vec{v} + \frac{2m_W}{m_V + m_W} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{w}' = \vec{w} - \frac{2m_V}{m_V + m_W} [(\vec{w} - \vec{v}) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

### §8.2.2 碰撞项的计算

碰撞项的计算需要复杂的几何。

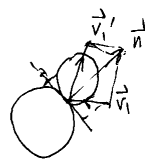
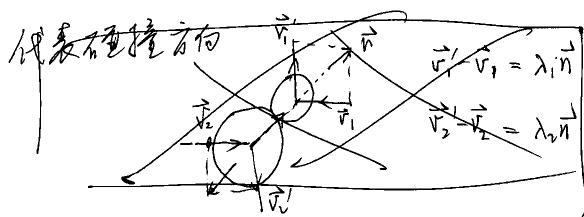


例球: 弹性, 动量守恒

$$m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 = m_1 \vec{v}'_1 + m_2 \vec{v}'_2$$

$$\frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_1 v'^2_1 + \frac{1}{2} m_2 v'^2_2$$

4个方程, 6个未知数。还有2个任意数。比如



$$\vec{v}'_1 - \vec{v}'_2 = \lambda_1 \vec{n} \quad \vec{v}_1 - \vec{v}_2 = \lambda_2 \vec{n}$$

$\vec{n} = (\theta, \varphi)$  代表球面方向。

(1' 在与之垂直方向,  $v'_1 = v_1$ , 表示速度不变。  
"1" 没有受力。) (找  $\vec{n}$  找  $\vec{v}$  方向, 在  $\vec{v}$  方向)

$\vec{v}_1 \cdot \vec{n} = \vec{v}'_1 \cdot \vec{n}$  则  $\vec{n} \perp \vec{v}_1 - \vec{v}'_1$  (即  $m_1 \vec{v}_1 - m_1 \vec{v}'_1 \propto \vec{F}$ )

① 由  $\vec{n}$  确定 对  $\vec{v}$  任意  $m \vec{n}$ , 上面有 3 个方程。(6 个方程, 除去  $v_1 = v'_1$ , 有 5 个独立)

② 与解. 动量守恒的 3 个方程合在一起, 8 个方程, 有 8 个未知数 ( $\vec{v}'_1, \vec{v}'_2, \lambda_1, \lambda_2$ ), 可解。

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{2m_2}{m_1 + m_2} [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{2m_1}{m_1 + m_2} [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

两式相减

$$\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1 = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 - 2 [(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) \cdot \vec{n}] \vec{n}$$

$$\Rightarrow (\vec{v}'_2 - \vec{v}'_1)^2 = (\vec{v}_2 - \vec{v}_1)^2$$

$$(\vec{v}'_2)^2 = v_2^2$$

④ 反过来说, 如果  $(\vec{v}_1', \vec{v}_2') \rightarrow (\vec{v}_1, \vec{v}_2)$  这样  
 的碰撞, 也  $\vec{v}_1' = \vec{v}_1 + \vec{v}_2 - \vec{v}_1' = \vec{v}_1 - \vec{v}_2 + \vec{v}_1'$

$$\vec{v}_1' - \vec{v}_1 = \lambda_1 \vec{n} \rightarrow \vec{v}_1 - \vec{v}_1' = \lambda_1' \vec{n}', \quad \lambda_1' = \lambda_1$$

$$\lambda_1' (-\vec{n}) \Rightarrow \lambda_1' = -\lambda_1$$

$$\therefore \vec{v}_1 = \vec{v}_1' + \frac{2m_2}{m_1+m_2} [(\vec{v}_2' - \vec{v}_1') \cdot (-\vec{n})] (-\vec{n})$$

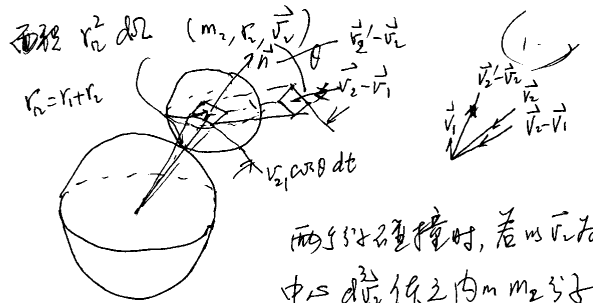
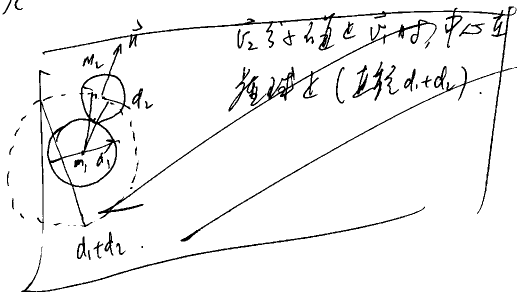
$$\vec{v}_2 = \vec{v}_2' - \frac{2m_1}{m_1+m_2} [(\vec{v}_2' - \vec{v}_1') \cdot (-\vec{n})] (-\vec{n})$$

由于  $(\vec{v}_1' - \vec{v}_1) \cdot \vec{n} = -(\vec{v}_2' - \vec{v}_1) \cdot \vec{n} = (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \cdot \vec{n}$   
 与正碰撞相符。

现在来计算  $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$ . 记  $f_i = f(\vec{v}_i, t)$ ,

$f_i'(\vec{v}_i, \vec{v}_i', t)$ . 记  $\Delta f_i^{(t)}$  为在  $dt$  时间内在空间体  $d^3v_i$  中  
 碰撞 (出)  $d^3v_i$  的分子数, 则它变化为

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_c dt d^3v_i = \Delta f_i^{(+)} - \Delta f_i^{(-)}$$



两分子碰撞时, 若以  $\vec{v}_1$  为  
 中心  $d^3v_1$  体之内  $m_2$  分子  
 碰撞方向落在以  $\vec{n}$  为法向  $m_1$  立体角  $d\Omega$  内  
 则必位于以  $r_1^2 d\Omega$  为底, 以  $v_2 \cos \theta dt$   
 为高柱体内, 该柱体体积为  $r_1^2 d\Omega v_2 \cos \theta dt$   
 其中包含处于  $d^3v_2$  内分子数为

$$(f_2 d^3v_2) r_1^2 d\Omega v_2 \cos \theta dt$$

再乘以  $m_1$  分子数

$$(f_1 d^3v_1) (f_2 d^3v_2) r_1^2 d\Omega v_2 \cos \theta dt$$

=  $dt$  时间内, 处于  $d^3v_1$  内分子受到  $d^3v_2$  内  
 分子在碰撞方向处于  $d\Omega$  内分子碰撞数  $(\Delta f_i^{(-)})$

$$\Delta f_i^{(-)} = f_1 f_2 \Lambda_n d^3v_1 d^3v_2 dt d^3v$$

$$\Lambda_n = r_1^2 v_2 \cos \theta$$

( $f_i$  与  $f_j$  是相互独立, 且  $f_i$  与  $f_j$  是相互独立)

$\Delta f_i^{(-)}$  使  $d^3v_i$  内分子数减少:  $(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}_1', \vec{v}_2')$   
 对立体角积分, 再对  $d^3v_2$  积分, 即是碰撞出  $d^3v_i$  分子数

$$\Delta f_i^{(-)} = \left[ \int f_1 f_2 \Lambda_n d\Omega d^3v_2 \right] dt d^3v_i$$

同样,  $(\vec{v}_1', \vec{v}_2', -\vec{n}) \rightarrow (\vec{v}_1, \vec{v}_2)$  给出

$$\Delta f_i^{(+)} = \left[ \int f_1' f_2' \Lambda_n' d\Omega' d^3v_2' \right] d^3v_1' dt d^3v'$$

$\Lambda_n'$  与  $\Lambda_n$ , 形式上是一样. 只是变量变了而已.

$$d^3v_1' d^3v_2' = |J| d^3v_1 d^3v_2 \quad \text{但 } (\vec{v}_1' = \vec{v}_1)$$

$(\vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow (\vec{v}_1', \vec{v}_2')$  是一正交变换.  $|J|=1$ .

$$\therefore \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c dt d^3v_1 d^3v_2 = \Delta f_i^{(+)} - \Delta f_i^{(-)}$$

$$= \left[ \int (f_1' f_2' - f_1 f_2) d^3v_2 \Lambda_n d\Omega \right] dt d^3v_1 d^3v_2$$

$\therefore$  Boltzmann 方程是

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \int (f_1' f_2' - f_1 f_2) \Lambda_n d^3v_2 d\Omega$$

$$f_i^{(+)} = f(\vec{r}, \vec{v}_i, t), \quad f_i^{(-)} = f(\vec{r}, \vec{v}_i', t)$$

### § 8.3 H 定理, H 定理和大商

在很多场合, 我们可以用大商  $H$  来定义

$$H = - \sum p_i \ln p_i$$

例如信息论中的 Shannon 大商. 其实, 这样的大商  
 表达式起源于 Boltzmann.  $H$  定理:

$$H = \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) \ln f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3v d^3r$$

例如, 对于平衡态  $n$  分子气体,  $n = \frac{N}{V}$  是常数,

平衡态分布函数是 Maxwell 分布

$$f = n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{mv^2}{2kT} \right\}$$

$$\Rightarrow H = \int f \left( \ln n + \frac{3}{2} \ln \frac{m}{2\pi kT} - \frac{mv^2}{2kT} \right) d^3v d^3r$$

$$\left( \int f d^3v = n, \quad \frac{1}{n} \int \frac{mv^2}{2} f d^3v = \frac{3}{2} kT \right)$$

$$= N \left[ \ln \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \ln \left( \frac{m}{2\pi kT} \right) - \frac{3}{2} \right]$$

而单位分子熵是大商.

$$S = N k_B \left[ \ln \frac{N}{V} + \frac{3}{2} \ln T + \frac{5}{2} + \frac{3}{2} \ln \left( \frac{2\pi m k_B}{h^2} \right) \right]$$

$$\Rightarrow S = -k_B H + C$$

略去常数项,  $S \propto -H$ , 比例常数是  $k_B$

利用 Boltzmann 方程, 可以证明

$\frac{dH}{dt} \leq 0$ , 称为 H 定理. (而且等式仅当平衡成立.) 这还是在 1872 年 - 定律 - ~~证明~~ 设计物理“证明”. 是 Boltzmann 对设计物理重要贡献.

$$\frac{dH}{dt} = \int \left( \frac{\partial f}{\partial t} \ln f + f \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial t} \right) d^3\vec{r} d^3\vec{v}$$

$$= \int (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial t} d^3\vec{r} d^3\vec{v}$$

$$\begin{aligned} \text{B. eq.} &= - \int (1 + \ln f) \left( \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \right) d^3\vec{r} d^3\vec{v} \\ &- \int (1 + \ln f) \left( \vec{f} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \right) d^3\vec{r} d^3\vec{v} \\ &- \int (1 + \ln f) (f f_1 - f' f'_1) d^3\vec{v} d^3\vec{v}_1 \wedge d\Omega d\vec{r} \end{aligned}$$

第 1 项:  $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot (\vec{v} f \ln f) = \vec{v} \cdot (1 + \ln f) \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}$

$$\text{而 } \int d^3\vec{r} \vec{v} \cdot (\vec{v} f \ln f) = \oint \vec{v} \cdot (\vec{v} f \ln f) d\Omega = 0$$

第 2 项:  $\frac{\partial}{\partial \vec{v}} \cdot \vec{f} = 0$ . (一般 - 散度 - 散度)

$$\therefore \int \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (\vec{f} f \ln f) d^3\vec{v} = \oint d\Omega \int \vec{f} f \ln f d\vec{v} = 0$$

#### § 8.4 Boltzmann 方程 - 应用

这里我们从简单介绍 Boltzmann 方程 - 一些应用.

首先, Boltzmann 方程可以推广到对气体, 即

$\lambda_T \approx \lambda_D$ . 这时,  $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$  需要修改. (林. (10.4.10))

其次, 不再是经典和量子情形,  $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$  是解 Boltzmann eq. 中最棘手. 一般 - 办法 - 是引入弛豫时间的近似. 即线性化

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \approx - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

$f$  为非平衡分布函数,  $f^{(0)}$  为 ~~平衡~~ (局域) 平衡分布函数,  $\tau$  为趋向平衡的弛豫时间.

设  $f$  与  $\vec{r}$  无关, 即  $f^{(0)}$  是基态平衡分布. 弛豫时间  $\tau$  意义: 设外力为 0,  $\therefore$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad \because f \text{ 与 } \vec{r} \text{ 无关, } \therefore$$

$$\frac{d(f - f^{(0)})}{d(f - f^{(0)})} = - \frac{dt}{\tau}$$

$$f(\vec{r}, t) - f^{(0)}(\vec{r}) = [f(\vec{r}, 0) - f^{(0)}(\vec{r})] e^{-t/\tau}$$

$\tau$  是趋向平衡所需时间.

但  $\vec{v}$  边界在  $v \rightarrow \infty$ , 而  $f(v)|_{v \rightarrow \infty} = 0$ .

$\text{B. eq.} : n = \int f d^3\vec{v} = \text{finite.}$

$\therefore$  dynamic eqs 对  $\frac{dH}{dt}$  - 贡献为 0

$$\therefore \frac{dH}{dt} = - \int (1 + \ln f_1) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d^3\vec{v}_1 d^3\vec{v}_2 \wedge d\Omega d\vec{r}$$

1 & 2, 都是积分变量,  $\therefore$

$$\frac{dH}{dt} = - \int (1 + \ln f_1) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d^3\vec{v}_1 d^3\vec{v}_2 \wedge d\Omega d\vec{r}$$

对称性:  $\frac{dH}{dt} = - \frac{1}{2} \int (2 + \ln(f_1 f_2)) (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d(\dots)$

$$v'_1 \leftrightarrow v_1, \text{ 又 } d(\dots)' = d(\dots)$$

$$\Rightarrow \frac{dH}{dt} = - \frac{1}{2} \int (2 + \ln(f'_1 f'_2)) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) d(\dots)$$

对称性:  $\frac{dH}{dt} = - \frac{1}{4} \int [\ln(f_1 f_2) - \ln(f'_1 f'_2)] (f_1 f_2 - f'_1 f'_2) d(\dots)$

$\geq 0$

"=" 在  $f_1 f_2 = f'_1 f'_2$  时成立.

$$\therefore \frac{dH}{dt} \leq 0 \Rightarrow \frac{dS}{dt} \geq 0$$

$f_1 f_2 = f'_1 f'_2$  称为细致平衡条件.

\* 微观信息和熵产生率 (熵, 熵产)

平衡态  
熵产生

输运问题中最重要问题之一是电子输运

讨论. 用弛豫时间近似, 可以研究金属自由电子气输运过程. 对金属中自由电子气,  $f^{(0)}$  满足 Fermi 分布

$$f^{(0)}(p) = \frac{1}{e^{(E(p) - \mu)/k_B T} + 1}$$

$E(p) = \frac{p^2}{2m}$ ,  $\mu$  是化学势. 单位体积内处于动量间隔  $\vec{p}$  内 - 平均电子数为

$$2 \times \frac{d^3\vec{p}}{h^3} f^{(0)}, \text{ 2 来自 spin } \uparrow, \downarrow.$$

Boltzmann eq. reads

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = - \frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$

设电子在弱外电场中,  $\vec{F} = -e\vec{E}$ , 电场是均匀的, 稳态  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ ,  $\therefore$

$$e\vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \frac{f - f^{(0)}}{\tau}, \quad f = f^{(0)} + f^{(1)} + \dots$$


保留到一级:

$$e\vec{E} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{p}} = \frac{f^{(1)}}{\tau} \Rightarrow f^{(1)} = e\tau \vec{E} \cdot \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{p}}$$

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{E}} \frac{\partial \vec{E}}{\partial \vec{p}} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{E}} \vec{v}$$



$f \approx f^{(0)} + e\tau \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \vec{E}}$  ~~非平衡~~  
 可以把上式看作  $f^{(0)}(e + e\tau \vec{E} \cdot \vec{\nabla})$ , 即能看作  
 一个 shift.

现在, 取  $\vec{E}$  方向为  $x$  轴, 则在  $dt$  时间内  
 通过垂直于  $x$  方向面之  $dA$  面电流是  
  

$$J_e dt dA = \int v_x dt dA \frac{2d^3p}{h^3} f$$

$$(J_e = ne v_x = \frac{2d^3p}{h^3} f e v_x)$$

即  $J_e = e \int v_x (f^{(0)} + f^{(1)}) \frac{2d^3p}{h^3}$ ,  
 $v_x = p_x/m$ ,  $f_0(-v_x) = f_0(v_x)$ .  $\therefore$  第一项为 0.

$$J_e = e^2 E \tau \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} \frac{2d^3p}{h^3}$$

$$\left( \int d^3p = \int p^2 dp \cdot \int d\Omega \sin\theta d\varphi \right.$$

$$= 2\pi \int p^2 dp \cdot \int_0^\pi \sin\theta d\theta \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= 4\pi \int_0^\infty p^2 dp$$

$$= 4\pi \int_0^\infty p^2 dp \cdot \frac{1}{v} \frac{dE}{dp} = 4\pi \int_0^\infty p^2 dp \cdot \frac{1}{v} \frac{dE}{dp}$$

$$= e^2 E \tau \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE$$

$$D(E) = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$

$f$  不含  $\vec{r}$  和  $t$  (稳恒)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla \frac{\partial f}{\partial \vec{E}} = 0 \quad \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$$

$$\frac{d\langle v \rangle}{dt} = -\frac{eE}{m} + i\omega_c \langle v \rangle - \frac{\langle v^2 \rangle}{\tau}$$

$$\langle v \rangle = -\frac{eE/m}{1 - i\omega_c \tau} \quad \left( \begin{array}{l} E = E_x + iE_y \\ \omega_c = \frac{eB}{mc} \end{array} \right)$$

$$j = -ne\langle v \rangle = \sigma_0 E / (1 - i\omega_c \tau), \quad \sigma_0 = \frac{ne^2 \tau}{m}$$

$$\vec{j} = \vec{\sigma} \cdot \vec{E}, \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2}$$

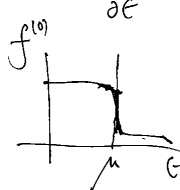
$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{ne^2 \tau}{B} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau}$$

\* 当有温度梯度时(弱), 在稳恒状态, 仍可用  
 弛豫时间近似. 但  $f$  依赖于  $\vec{r}$ , 用局域平  
 衡态的  $f^{(0)}$  可导出电导率. (见书)

$$J_e = e^2 E \tau \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE$$

$$= \frac{2e^2 E \tau}{3m} \int v_x^2 \frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} D(E) dE$$

对 Fermi gas,  $\frac{\partial f^{(0)}}{\partial E}$  只在 Fermi 面附近不为 0,  
 $T \rightarrow 0$ , Fermi 面在  $E = \mu$ .  $\therefore$   
 $\frac{\partial f^{(0)}}{\partial E} = \delta(E - \mu) f^{(0)}$



$$\therefore J_e = \frac{2e^2 \tau}{3m} \mu^2 D(\mu) E$$

$$2\pi \mu = \int_0^\mu D(E) dE$$

$$= \frac{2}{3} \mu D(\mu)$$

$$\therefore J_e = \frac{ne^2 \tau}{m} E, \quad \sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$$

正是通常零磁场电导率.

在外磁场时,

$$\vec{F} = -e\vec{E} - \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B}$$

考虑二维运动情况, 在

$$\vec{v} = v_x + i v_y, \quad B \perp x-y \text{ 平面.}$$

3.8.4 线性响应理论: 扰动

Boltzmann 方程只处理稀有, 短程相互作用.  
 处理近平衡态~非平衡统计理论是 Kubo 提出  
 的线性响应理论. 线性响应理论不仅可以用于统计物理, 也可以用于量子态偏离基态. 但是, 不仅可以计算可观测物理量, 也可用于计算量的可观测物理量.  
 线性响应理论~出发点是系统是哈密顿量可以写成

$$H = H_0 + H_e$$

$H_0$  是描述系统~哈密顿量,  $H_e(t)$  是一个小扰动.  
 我们用力学方式研究问题. 系统~波函数满足

$$\text{Schrödinger eq.: } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (H_0 + H_e) \psi$$

做正则变换,

$$\psi(t) = e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} \varphi(t), \quad \text{Sch. eq. 左乘}$$

$$i\hbar \left( -i\frac{H_0}{\hbar} \right) e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \varphi(t) + i\hbar e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \dot{\varphi}$$

$$= \text{右乘 } H_0 e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \varphi(t) + H_e e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \varphi$$

$$\Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{1}{i\hbar} \left( e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} H_e(t) e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \right) \varphi \equiv \frac{1}{i\hbar} \tilde{H}_e(t) \varphi$$

设  $t \rightarrow -\infty$  时,  $\varphi(t) = \phi_m$ , 是 Schrödinger eq.

$m$ -个定态解. ( $t \rightarrow -\infty$ ,  $H_e(t) = 0$ ,  $H_0 \phi_m = E_m \phi$ )

开式出,

$$\psi(t) = \psi_m + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') \psi(t') dt'$$

是 Schrodinger eq. 的解. 量子力学算符  $A$  在  $t$  时刻的期望值是物理上测得的

$$\bar{A}(t) = \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) A \psi(\vec{r}, t)$$

$$= \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) e^{i\frac{H_0}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\equiv \int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) A(t) \psi(t)$$

代入

$$\psi(t) = \psi_m + \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') (\psi_m + \int_{-\infty}^{t'} \tilde{H}_e(t'') \psi(t'') dt'')$$

所谓线性响应, 就是上述的  $\psi$  代入  $\tilde{H}_e$  中, 得到:  $\psi(t) \approx \psi_m + \int_{-\infty}^t \tilde{H}_e(t') \psi_m dt'$

$$\bar{A}_m = \bar{A}(t) \approx \int d\vec{r} \psi_m^* A(t) \psi_m$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r} \psi_m^* [A(t), \tilde{H}_e(t')] \psi_m$$

$$A(t) - \bar{A}_m \approx \langle m | A(t) | m \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle m | [A(t), \tilde{H}_e(t')] | m \rangle$$

对统计系

$$\langle \bar{A} \rangle_T = \sum_m \frac{1}{Z_g} e^{-(E_m - \mu)/k_B T} \bar{A}_m$$

$$(Z_g \text{ 是巨配分函数, } \frac{1}{Z_g} e^{-(E_m - \mu)/k_B T} = p_m)$$

$$= \sum_m p_m \bar{A}_m = \text{Tr } \rho \bar{A}$$

Kubo 的线性响应理论也可由  $\rho$  满足的方程出发导出. (见苏汝铿书, 量子论)

下面举一例子.

例 1. 对电子气加冲击型势的扰动.

$$V(\vec{r}, t) = V_0 e^{i\vec{r} \cdot \vec{r}} \delta(t)$$

$$H_e = -e V_0 \int d\vec{r} \hat{n} e^{i\vec{r} \cdot \vec{r}} \delta(t)$$

$\hat{n}$  是粒子的密度算符. 按前面讨论

$$\delta \hat{n}(\vec{r}, t) = i e V_0 \int d\vec{r}' \langle [\hat{n}(\vec{r}, t), \hat{n}(\vec{r}', 0)] \rangle e^{i\vec{r} \cdot \vec{r}'} \quad t > 0$$

$$i \langle [\hat{n}(\vec{r}, t), \hat{n}(\vec{r}', 0)] \rangle_{t=0}$$

是推迟双粒格林函数, 如果系统是均匀的, 它是  $\vec{r} - \vec{r}'$ ,  $t - 0$  的函数

作 Fourier 变换

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} D(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - i\omega(\vec{k})t}$$

$$\delta n(\vec{r}, t) = e V_0 D(\vec{r}) e^{i\vec{r} \cdot \vec{r} - i\omega(\vec{r})t}$$

对给定的  $H_0$ ,  $D(\vec{r})$  可求出, 则冲击势带来的密度涨落可求出.

例 2. 电子电导率. 现在我用线性响应理论求电导率一般表达式:

$$H_e = - \int d\vec{r} \vec{j} \cdot \vec{A}, \quad \vec{A} \text{ 是外电场矢势}$$

$$\vec{j} = \vec{j}_1 - \frac{e^2}{m} \hat{n}(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}),$$

$$\vec{j}_1 = \frac{ie}{2m} \left( (\nabla - \nabla') \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}') \right)_{\vec{r}=\vec{r}'}$$

$$\text{无外场时, } \langle \vec{j} \rangle = \langle \vec{j}_1 \rangle = 0.$$

根据线性响应公式.

$$\langle j_a(\vec{r}, t) \rangle = \sum_{b=1}^3 \int d\vec{r}' dt' K_{ab}(\vec{r}t; \vec{r}'t') A_b(\vec{r}', t')$$

如果  $\nu \sim k_F$ ,  $\langle j_i j_j \rangle = 0$ , 给出电导率张量的结果.

$$K_{ab} = - \frac{e^2 \hbar}{m} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \delta_{ab}$$

$$+ i \langle [j_{1a}(\vec{r}, t), j_{1b}(\vec{r}', t')] \rangle \delta(t - t')$$

作 Fourier 变换

$$\langle j_a(\vec{r}, t) \rangle = \int \frac{d^3q d\nu}{(2\pi)^4} j_a(\vec{q}, \nu) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\nu t}$$

$$K_{ab}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \int \frac{d^3q d\nu}{(2\pi)^4} K_{ab}(\vec{q}, \nu) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - i\nu(t - t')}$$

$$A_b(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3q d\nu}{(2\pi)^4} A_b(\vec{q}, \nu) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\nu t}$$

$$\text{则 } j_a(\vec{q}, \nu) = \sum_{b=1}^3 K_{ab}(\vec{q}, \nu) A_b(\vec{q}, \nu)$$

若电场是均匀的

$$A_b(\vec{q}, \nu) = \frac{1}{i\nu} E_b(\nu) \delta(\vec{q})$$

$$j_a(\nu) = \sum_{b=1}^3 K_{ab}(0, \nu) E_b(\nu) / i\nu$$

$$\sigma_{ab}(\nu) = \frac{1}{i\nu} K_{ab}(0, \nu) \text{ 是电导率张量.}$$

$$\text{电导率张量: } \sigma_e = \frac{e^2}{3V} \int_0^\infty dt \int d\vec{x} \text{Tr } \vec{j} \cdot \vec{j} e^{-iL t} \rho_0.$$

# §8.6 线性响应理论: 稳态扰动

前面讲过, 是体系受外扰动后线性响应. 于是由引是稳态. 浓度梯度等扰动不能用一个微扰哈密顿量表示, 这时, 体系的状态是接近于局域平衡. 我们称体系受到稳态扰动 (是准平衡. 见刘氏书). 体系 Hamiltonian 是

$$H = \int d^3r H(\vec{r})$$

(例如, 对理想气体  $H(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$ )

$$\epsilon_i = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

总粒子数  $N = \int d^3r N(\vec{r})$

$d^3r$  是一个微元, 宏观上体系, 在  $d^3r$  内, 体系接近平衡态. 对局域平衡态, 局域密度分布是

$$\rho(\vec{r}) \sim e^{-\beta(\vec{r}) H_{\text{eff}}(\vec{r})}$$

$$H_{\text{eff}}(\vec{r}) = H(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})$$

系统处于局域平衡态, 密度分布为 (14)

$$\rho_L = N_L^{-1} e^{-\beta S_{\text{eff}}}$$

$$S_{\text{eff}} = \int d^3r [\ln \rho(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})]$$

$N_L$  是归一因子,  $\beta(\vec{r}) = 1/k_B T(\vec{r})$ ,  $\mu(\vec{r})$  是 local 化学势.  $T(\vec{r})$ ,  $\mu(\vec{r})$  在空间不均匀性导致了温度, 化学势. 但局域平衡态,  $\rho_L$  不能直接求出. 实际上,  $\rho_L$  不是密度分布的全部, 还需要修正项:

$$\rho = \rho_L + \delta\rho$$

$\rho$  满足刘维方程:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] = L\rho$$

$$\parallel$$

$$i\hbar \frac{\partial \delta\rho}{\partial t} = L\rho_L + L\delta\rho$$

$$\therefore \delta\rho(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iL(t-t')/\hbar} L\rho_L e^{iL(t-t')/\hbar}$$

(取  $\hbar=1$ )

(14)

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' (L\rho_L + L\delta\rho(t'))$$

用迭代法

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' L\rho_L - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left( \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' (L\rho_L + L\delta\rho(t'')) \right)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' L\rho_L + \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt' L \int_{-\infty}^{t'} dt'' L \rho_L$$

$$+ \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^3 \int_{-\infty}^t dt' L \int_{-\infty}^{t'} dt'' L \int_{-\infty}^{t''} dt''' L \rho_L + \dots$$

$$\equiv -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-\frac{i}{\hbar} L(t-t')} L \rho_L = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-iLt/\hbar} L \rho_L$$

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} L S_{\text{eff}}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} [H, \int d^3r (\rho(\vec{r}) (H(\vec{r}) - \mu(\vec{r}) N(\vec{r})))]$$

$$= -\frac{i}{\hbar} [H, \bar{\beta} S_{\text{eff}}] = -\frac{i}{\hbar} [H, \int d^3r \frac{\partial \beta(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \cdot \nabla (H - \mu N) d^3r]$$

$$= -\frac{i}{\hbar} L \int d^3r \frac{\partial \beta}{\partial \vec{r}} \cdot \nabla (H - \mu N) d^3r$$

即, 稳态  $\beta$  或  $\mu$  有梯度.

$$[H, \rho_L] = [H, \frac{1}{N_L} e^{-S_{\text{eff}}}]$$

$$= \frac{1}{N_L} [H, -S_{\text{eff}}] + \frac{1}{N_L} [H, (S_{\text{eff}})^2] + \dots$$

$$= -\frac{1}{N_L} L S_{\text{eff}} + \frac{1}{N_L} L S_{\text{eff}} S_{\text{eff}} + \dots$$

$$= -L S_{\text{eff}} \left( \frac{1}{N_L} (1 - S_{\text{eff}} + \dots) \right) = -L S_{\text{eff}} \rho_L$$

(由于  $L S_{\text{eff}}$  比  $\frac{\partial \beta}{\partial \vec{r}}$  是小量,  $\therefore \rho_L \approx \rho_0$ )

$$\approx -L S_{\text{eff}} \rho_0$$

$$= - \int d^3r \left[ \beta(\vec{r}) L H(\vec{r}) - \beta(\vec{r}) \mu(\vec{r}) L N(\vec{r}) \right] \rho_0$$

$$\rho_0 = e^{-\bar{\beta} (H - \bar{\mu} N)} / \text{Tr} e^{-\bar{\beta} (H - \bar{\mu} N)}$$

$\bar{\beta}$  和  $\bar{\mu}$  是  $\beta(\vec{r})$  和  $\mu(\vec{r})$  的空间平均值.

$$\text{由刘维方程: } \frac{\partial H(\vec{r})}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{Q}(\vec{r}) = 0$$

$$\text{连续性方程: } \frac{\partial N}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) = 0$$

$$\Rightarrow -\frac{i}{\hbar} L H(\vec{r}) = -\nabla \cdot \vec{Q}(\vec{r}), -\frac{i}{\hbar} L N(\vec{r}) = -\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r})$$

$\vec{Q}(\vec{r})$  和  $\vec{J}(\vec{r})$  是能量流和粒子流.

$$\begin{aligned}
 L\rho_L &= -i \int d^3r [\vec{p}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r})] \rho_0 \\
 &= -i \int d^3r [\vec{p}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r})] \rho_0 \\
 &= -i \int d^3r [\vec{p}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r})] \rho_0 \\
 \vec{p}(\vec{r}) &= \vec{p}(\vec{r}) - \hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}), \quad h = \mu - T \left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T
 \end{aligned}$$

$h(\vec{r})$  是 local 化学势,  $n$  是粒子数密度.  
 对于一个物理量  $B(\vec{r})$ , 例如, 磁化强度, 在平衡态时  $\text{Tr } B(\vec{r}) \rho_0 = 0$ .  $\therefore$

$$\begin{aligned}
 \langle B(\vec{r}) \rangle &= \text{Tr}(B(\vec{r}) \rho) \\
 &= -i \int_0^\infty dt' \text{Tr } B(\vec{r}) e^{-iL't'} L\rho_L \\
 &= \int_0^\infty dt' \int d^3r' \text{Tr } \vec{B}(\vec{r}) e^{-iL't'} [\vec{p}(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}') - \psi(\vec{r}') \cdot \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r}')] \rho_0
 \end{aligned}$$

若  $T(\vec{r})$  是空间均匀的,  $\frac{\partial \mu}{\partial T}$  不为 0, 则方法:

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{j}_e \rangle &= -D \nabla n, \quad \text{扩散系数} \\
 D &= \beta \left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T \frac{1}{3V} \int_0^\infty dt \text{Tr } \vec{j}_e \cdot \vec{j}_e e^{-iL't} \rho_0 \\
 &= \frac{1}{2V} \left( \frac{\partial \mu}{\partial n} \right)_T \int_0^\infty dt \text{Tr } \vec{j}_e \cdot \vec{j}_e e^{-iL't} \rho_0 \\
 \sigma_e &= \frac{e^2 \beta}{30V} \int_0^\infty dt \text{Tr } \vec{j}_e \cdot \vec{j}_e e^{-iL't} \rho_0 \quad (5.2.10) \\
 &\text{是电导率. (与 } \sigma_{ab}(v) = \frac{1}{iV} K_{ab}(0, v) \text{ 比较)} \\
 &\text{这里 } iV \rightarrow \frac{1}{\beta} = T.
 \end{aligned}$$

热力学扰动造成的一流关联函数与耗散系数 (例如电导率, 扩散系数) 之间的关系. (一流关联函数与耗散系数之间的关系). "布朗运动" 与 "耗散" 的关系. 耗散系数与 "耗散" 的关系. 耗散系数与 "耗散" 的关系. 耗散系数与 "耗散" 的关系.

若  $\vec{B}$  是空间均匀的. (1.1)

$$\langle \vec{B} \rangle = \frac{1}{V} \int_0^\infty dt \text{Tr } \vec{B} e^{-iL't} [\vec{p}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) - \psi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \vec{p}(\vec{r})] \rho_0$$

$$\begin{aligned}
 \vec{B} &= \int d^3r \vec{B}(\vec{r}) \quad \vec{j} = \int d^3r \vec{j}(\vec{r}), \quad \vec{j}_e = \int d^3r \vec{j}_e(\vec{r}) \\
 \text{若只有纵向分量, 但 } \vec{j} \neq 0, \text{ 则 } \vec{j}_e = \vec{Q}, \text{ 取 } \vec{B} = \vec{Q} \\
 \text{则 } \langle \vec{Q} \rangle &= \frac{1}{V} \int_0^\infty dt \text{Tr } (\vec{Q} \cdot \vec{Q}) e^{-iL't} \rho_0
 \end{aligned}$$

$$\langle \vec{Q} \rangle = -K \nabla T = -K \nabla \frac{1}{\beta} = +K T^2 \nabla \beta \quad (K_B = 1)$$

$$\begin{aligned}
 \text{另一方面, } (\nabla \psi \cdot \vec{Q}) \vec{Q} &= \vec{Q} (\vec{A} \cdot \vec{Q}) \vec{Q} = (A_x Q_x Q_x + A_y Q_y Q_y + A_z Q_z Q_z) \\
 \text{后面几项为 0.} &= A_x Q_x Q_x + A_y Q_y Q_y + A_z Q_z Q_z
 \end{aligned}$$

$$\therefore \langle \vec{Q} \rangle = \left( \frac{1}{3 \cdot \frac{1}{K_B T V} \int_0^\infty dt \text{Tr } \vec{Q} \cdot \vec{Q} e^{-iL't} \rho_0} \right) \nabla \beta$$

K  
热导率

§ 8.4 涨落现象: 涨落现象 (153)

涨落现象一般~统计物理书中都是单独一章. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理.

$$\sqrt{E-E_0}/E \sim 1/\sqrt{N}$$

在热力学极限 ( $n = \frac{N}{V}$  fixed when  $N$  and  $V \rightarrow \infty$ ). 这种广延量/时差可以忽略. 在正则系综, 可以同时有热力学和统计力学. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理. 涨落现象与热力学平衡态统计物理.

# 38.4.1 准正则系综

(11)

(Smoluchowski-Einstein 方法)

对于处于平衡态的孤立系，玻尔兹曼分布平衡态熵是  $S = k_B \ln W_{max}$ , 即  $W_{max} = e^{S/k_B}$

偏离平衡:  $W = e^{S/k_B}$

$$W = W_{max} e^{(S-S)/k_B} = W_{max} e^{\Delta S/k_B}$$

孤立系意味着约束条件  $\Delta E=0, \Delta V=0$ .

对正则系综, 条件变为  $\Delta E + \Delta E_0 = 0, \Delta V + \Delta V_0 = 0$ .  
 这里表示外部大热库及.  $(E = V + E_0)$  和  $(E + E_0)$  不变

$$\therefore W_T = W_{T,max} = e^{(\Delta S + \Delta S_0)/k_B}$$

$$= W_{max} e^{(\Delta S + \frac{\Delta E_0 + p \Delta V_0}{T})/k_B}$$

$$= W_{max} e^{(\Delta S_0 - T - p \Delta V)/k_B T}$$

$$= W_{max} e^{-\Delta F/k_B T}$$

$$= W_{max} e^{-(\Delta F + p \Delta V)/k_B T}$$

$$\Delta F = \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right) \Delta V + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right) (\Delta V)^2 + \dots$$

-1.      -1/2

如果保持系综的  $N$  和  $M = \text{const}$ , 则  $M = pV$  固定.

$$\Rightarrow \Delta M = p \Delta V + V \Delta p = 0 \Rightarrow \frac{\Delta p}{p} = -\frac{\Delta V}{V}$$

$$\therefore \left(\frac{\Delta p}{p}\right)^2 = \frac{(\Delta V)^2}{V^2} = -k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

$$p = \frac{N}{V}, \text{ 若 } V \text{ 固定, 则 } \Delta p \propto \Delta N$$

$$\therefore \left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2 = \left(\frac{\Delta p}{p}\right)^2 = -\frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

一般

$$\Delta p = \frac{\Delta N}{V} - \frac{N \Delta V}{V^2}$$

$$(\Delta p)^2 = \left(\frac{\Delta N}{V}\right)^2 - \frac{2 \Delta N \Delta V}{V^3} + \frac{N^2 (\Delta V)^2}{V^4}$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \frac{(\Delta N)^2}{V^2} + \frac{N^2 (\Delta V)^2}{V^4}$$

$$\frac{\overline{(\Delta p)^2}}{p^2} = \frac{(\Delta N)^2}{N^2} + \frac{(\Delta V)^2}{V^2} = 2 \left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2$$

$$\text{对理想气体, } \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = -\frac{V}{p} = -\frac{V^2}{N k_B T}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta N}{N}\right)^2 = -\frac{k_B T}{V^2} \left(-\frac{V^2}{N k_B T}\right) \propto \frac{1}{N}$$

与正则系综的结果一致.

$$W_T \approx W_{max,T} \exp\left(\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right)$$

这就是正则系综的准正则系综. 对于偏离平衡态可以用

$$\overline{(\Delta A)^2} = \frac{\int (\Delta A)^2 W d(\Delta A)}{\int W d(\Delta A)}$$

$$\text{例如, 对熵 } \int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta V)^2 \exp\left[-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right] d(\Delta V)$$

$$\overline{(\Delta V)^2} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta V)^2 \exp\left[-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right] d(\Delta V)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right] d(\Delta V)}$$

$$= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (\Delta V)^2 \frac{k_B T}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T} \frac{1}{\Delta V} d\left(\exp\left(-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right)\right)}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right) d(\Delta V)}$$

$$= -\frac{\Delta V (k_B T)}{\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T} \exp\left(-\frac{1}{2 k_B T} \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2\right) \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

$$- k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = - k_B T \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

$$\therefore \frac{\overline{(\Delta V)^2}}{V^2} = -\frac{k_B T}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$$

以上讨论好到边界去成立. 至边界处,  $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T = 0$ , 需展开  $\Delta F$  到  $(\Delta V)^4$ .

$$\Delta F = -p \Delta V - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T (\Delta V)^4 + \dots$$

$$\therefore W = W_{max} \exp[-\alpha \chi^4],$$

$$\alpha = \frac{1}{24 k_B T} \left|\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T\right|, \chi = \Delta V$$

$$\overline{(\Delta V)^2} = \frac{\int_0^\infty \chi^2 e^{-\alpha \chi^4} d\chi}{\int_0^\infty e^{-\alpha \chi^4} d\chi} = \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \frac{1}{\alpha^{1/4}} = 0.338 \left[\frac{1}{24 k_B T} \left|\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T\right|\right]^{-1/4}$$

对范德瓦耳斯气体,

$$p_c = \frac{a}{27 b^2}, v_c = 3b, T_c = \frac{8a}{27 b R}$$

范德瓦耳斯方程:

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v-b) = RT$$

$$\Rightarrow p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$$

$$\text{由 } v = \frac{N}{N_a} v, \left(v_c = \frac{N}{N_a} v_c\right), N_a = 6.02 \times 10^{23}$$

$$p = \frac{3 N k_B T}{3v - v_c} - \frac{9 N k_B T a}{8 v^2}$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v^3}\right)_T = -\frac{48 N k_B T}{(3v - v_c)^4} + \frac{27 N k_B T a}{v^5}, \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T = -\frac{27 N k_B T a}{8 v^4}$$

R, 气体常数

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_c = 0.338 \left[ -\frac{V^4}{24kT_c} \left( \frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_T \right]^{-1/2} \quad (1-)$$

$$= 0.901/\sqrt{N}$$

与一般情况  $\Delta V \propto \lambda$  比较, 水的密度要大很多.  $\therefore$  临界点时需要的在深入气 phase 的内部大很多.

§8.1.2 散射  
两应用:

天空颜色由大气层散射引起  
在太空中, 天空是黑的.

① 由于空气中密度的不均匀, 可以解释为什么天空是蓝色的. 我的考虑空气是均匀的, 这时, 受到空气密度的不均匀引起散射, 散射的强度

$$\langle I \rangle \propto \frac{1}{\lambda^4} \frac{\Delta \rho^2}{\rho^2} \quad \left( \begin{array}{l} \text{王竹溪, 统计物理导论} \\ \text{波长越长, 散射越弱} \end{array} \right)$$

② 没有密度的均匀, 则没有散射. 波长越短, 散射越强. 蓝色波长较短,  $\therefore$  我的考虑最强散射是蓝色  $\Rightarrow$  蓝天. ③ 当然, 在太阳中心的散射, 密度不均匀, 散射强度, 散射的强度.

$\therefore x=0$  时  $S$  取极大值,

$$\therefore \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} < 0.$$

$$\therefore W(x) dx \approx A e^{-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} x^2} dx, \quad \frac{1}{2} = -\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} > 0.$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(x) dx = 1, \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{\pi k}}.$$

$$W(x) dx = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} x^2} dx$$

即是  $x$  出现偏差的概率分布, Gauss 分布.

$$\therefore \bar{x^2} = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} x^2} dx = \frac{k}{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0}}.$$

$$\therefore \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} = k / \bar{x^2}, \therefore$$

$$W(x) dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi \bar{x^2}}} e^{-\frac{x^2}{2\bar{x^2}}} dx.$$

此高斯分布可以推广到多变量.

此高斯分布对  $N$  在大体积  $V$  中  $n \gg n - \bar{n}$ .

一般情况下, 用泊松分布.

① 白天, 但在清晨和傍晚, 太阳的光穿过较厚的大气层才能发生散射, 但蓝色等早就被大气吸收, 只有波长较长的红光穿过来,  $\therefore$  太阳  $\Rightarrow$  红太阳.

② 对液体, 在临界点处

$$\langle I \rangle \propto \frac{1}{\lambda^4} \left[ -\frac{V^4}{24kT} \left( \frac{\partial^3 p}{\partial V^3} \right)_T \right]^{-1/2}$$

可以使散射比正常情况下大  $\sqrt{N}$  倍.

反常透明液体由于散射变成乳白色.

§8.2 高斯分布

对任意变量  $X$ ,  $\Delta x = X - \bar{x}$ , 高斯分布

独立变量  $X$  的概率:  $S = S(X)$ .

$$\Delta S = S - \bar{S} = S(X) - \bar{S}(X) = \Delta S(X).$$

类似于体积, 情况  $X$  出现偏差的概率

$$W(x) dx \propto e^{\Delta S(x)/k_B} dx.$$

①  $x$  是连续.

$$\Delta S = \Delta S(0) + \frac{\partial S}{\partial x} \Big|_{x=0} x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x=0} x^2 + \dots$$

§8.3 密度-密度关联函数

在临界点, 我的考虑, 粒子之间在临界点时密度变化很大. 事实上, 由于在临界点, 关联长度很长, 不同空间是粒子之间关联可以导致更强的涨落. 我的线性响应理论中已经看到  $\Delta n$  空间中的涨落引起  $\Delta n$  这一关联与非零的平均值关系. 但线性响应理论没有看到在临界点附近  $\Delta n$  涨落. 在我的用线性响应理论讨论液体在临界点附近的关联函数关联.

定义 density-density correlation function

$$C(r, r') = \langle (n(r) - \langle n(r) \rangle) (n(r') - \langle n(r') \rangle) \rangle = \langle \Delta n(r) \Delta n(r') \rangle.$$

$$\langle \Delta n(r) \rangle = 0.$$

$\therefore$  如果  $\Delta n(r)$  与  $\Delta n(r')$  独立, 则  $C(r, r')$

$$= \langle \Delta n(r) \rangle \langle \Delta n(r') \rangle = 0 \Rightarrow \text{无关联}.$$

$C(r, r') \neq 0$ , 则不用地是密度涨落有联系.

考虑均匀液体,  $\langle \Delta n(r) \rangle = \bar{n}$ ,  $\bar{n}$  是常数. 由平衡态

性质,  $C(r, r') = C(r - r')$ . 若是各向同性,  $C(r - r') = C(|r - r'|)$ . 与两点的距离有关.

$$C(r - r') = C(|r - r'|).$$

C

$$C(\vec{r}) = \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\omega) \rangle$$

$$\Delta n^*(\vec{r}) = \Delta n(\vec{r}) \Rightarrow \tilde{n}_I^* = \tilde{n}_{-I}$$

$$\Delta n(\vec{r}) = \Delta n(r) \Rightarrow n_1 = n_2$$

$$|\tilde{n}_2|^2 = \int d\vec{r} d^3\vec{r}' (\Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}')) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} e^{-i\vec{q}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}$$

$$\begin{aligned} \langle n_{\vec{r}}^2 \rangle &= \int d\vec{r}' d\vec{r}'' \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}') \rangle e^{-i\vec{r} \cdot (\vec{r}'' - \vec{r}')} \\ \langle n_{\vec{r}}^2 \rangle &= \int d\vec{r}' d\vec{r}'' \langle \Delta n(\vec{r}) \Delta n(\vec{r}') \rangle e^{-i\vec{r} \cdot (\vec{r}'' - \vec{r}')} \\ &= V \int d\vec{R} \langle \Delta n(\vec{R}) \Delta n(0) \rangle e^{-i\vec{r} \cdot \vec{R}} = V \tilde{C}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\therefore C(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \langle \tilde{n}_{\vec{q}} \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$W = W_{\max} e^{-\frac{(\Delta F + p\Delta V)}{kT}} \quad \text{or} \quad W_{\max} e^{-\frac{\Delta F}{kT}}$$

$$\Delta F = \int (f - \bar{f}) d\vec{r}.$$

$f(r)$  是单位体积 local free energy. 若 T 同

2.  $\Delta f$  可經由  $\Delta n$  展開:

$$\Delta f = \frac{a}{2} (\Delta n)^2 - \frac{b}{2} (\nabla n)^2 \quad \left( \int (n - \bar{n}) d\vec{r} = \sum_{N=N_0}^{\sum} = 0 \right)$$

(~~自由展开~~), 自由展开最低阶是  $(n!)^2$ .

但此法依赖于  $m$  空间复杂度. 而哥德巴赫为 0.

这正是 Landau 二级相变理论.

$$\langle n_{\vec{q}}^2 \rangle = \frac{\int \pi d\vec{n} n_{\vec{q}}^2 / \int \pi d\vec{n}}{\int \pi d\vec{n} n_{\vec{q}}}. \quad (16) \quad (\text{Gauss})$$

$$\equiv \phi \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\eta}_2 |\tilde{\eta}_2|^2 w / \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{\eta}_2 w \quad (\text{Gauss fix})$$

$$= \frac{\sqrt{kT}}{1 + b_2^2}$$

$$\therefore C(\vec{r}) = \frac{kT}{V} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{a+bq^2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

$$C(r) = \frac{1}{V} \int \frac{1}{a+b r^2} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

$$= \frac{kT}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \frac{1}{a+by} e^{i\vec{r}\vec{r}\cos\theta}$$

$$= \frac{kT}{4\pi b} \frac{1}{r} e^{-r/\lambda}, \quad \lambda = \sqrt{\frac{b}{a}} \sim (T - T_c)^{-1/2}$$

这个 mean field 结果一改。↓ 兰能改。

在 ~~在~~ 讲流体的名称时，我们讲冲击型材料  
帮助功， $D(\dot{\gamma})$  在对流度平的时候，~~在平衡~~  
在临界点是附近，就可以与  $\langle \dot{\gamma} \rangle$  相等。

由推知,  $a = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial p}{\partial n} \right)_T$  (2分) (570) (9)

而由伯努利  $\left(\frac{\partial p}{\partial \eta}\right)_T = 0 \quad \therefore a = a_0(T - T_c).$

$$\begin{aligned} \nabla n(\vec{r}) &= \nabla \Delta n(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i \vec{z}_i e^{i\vec{z}_i \cdot \vec{r}} \\ &= \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i i\vec{z}_i e^{i\vec{z}_i \cdot \vec{r}} = \frac{1}{V} \sum_i \tilde{n}_i^* (i\vec{z}_i) e^{-i\vec{z}_i \cdot \vec{r}} \\ (\nabla n(\vec{r}))^2 &= \frac{1}{V^2} \sum_{i,j} \tilde{n}_i^* \tilde{n}_j \vec{z}_i \cdot \vec{z}_j e^{-i(\vec{z}_i - \vec{z}_j) \cdot \vec{r}} \end{aligned}$$

$$\therefore \Delta f = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \tilde{n}_{\vec{k}} \tilde{n}_{\vec{k}'} \left( \frac{a}{v} + \frac{b}{v} \vec{k} \cdot \vec{k}' \right) e^{-\gamma(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{r}}$$

$$\Delta F = \int d\vec{r} \Delta f = \frac{1}{2V} \sum_{i,i'} \tilde{n}_i \tilde{n}_{i'} \left( \frac{a}{\Omega} + \frac{b}{\Omega} \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i'} \right) \delta_{ii'}$$

$$= \frac{1}{2V} \sum_i (a + b r_i^2) |\tilde{n}_i|^2$$

$$\therefore W = W_{\max} \exp\left(-\frac{1}{2kT} \sum_i (g + b\gamma_i) |\tilde{h}_2|^2\right)$$

$$= W_{\max} \prod_q \exp\left(-\frac{q + b q^2}{2 \sqrt{k}} \tilde{h}_q^2\right).$$

由式(1)表明, 空域像素点动量之间是 local m. 不同  
动量在 ~~空域~~ 域之间是独立。是 Gauss 分布。(小位移近似)

58. 时若改意：随机外<sup>力</sup>和布朗运动

为了布朗运动, 我们已研究不少故事. 说是在花  
样这样宏观上, 微观大的微扰的随机运动. 爱因  
斯坦在他 1905 年正确地解释: 布朗运动. 对分子  
存在性, 或说物质原子性的正确作用. 现在,  
“布朗运动”代表广义的“微扰”在广义的随机  
“场”作用下随机运动. 是一类重要的力学现象.

§8.8.1 朗之万方程

用朗道方程可以对布朗运动作一非常直接

说明: ~~粒~~ ~~由~~ ~~半~~ ~~径~~ ~~方~~ ~~程~~ 布朗运动  $\sim 10^{-5} - 10^{-4} \text{ cm}$   
~~在~~ ~~的~~ ~~大~~ ~~小~~ ~~受~~ ~~的~~ ~~四~~ ~~种~~ ~~力~~ ~~作~~ ~~用~~

① 确定<sup>出</sup>外力, 例如, 重力、浮力、液体阻力等。

(2) 周围与石碰撞、极为频繁，例如  $10^{-4} \text{ cm}$  半径，  
液体与它接触为  $10^{22} \text{ cm}^3$ ，则碰撞次数为  $10^{22} \times 4/\text{秒}$   
气体与它接触为  $10^{13} \text{ cm}^3$ ， " " " "  $\approx 10^8/\text{秒}$   
 $\therefore$  间隔  $10^{-18} \text{ Sec}$  为碰撞特征时间。可见这种  
力为随机力。

∴ 布朗运动的位移满足牛顿第二定律

$$m \frac{du}{dt} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2(t) \quad (\vec{u} \text{ 是速度})$$

例如, 考虑在水平方向 (x) 上的投影, 重力和初速度, 中只有粘滞力  $-\alpha u_x = -\alpha u$ ,  $F_2(t) = X(t)$ .

$$m \frac{du}{dt} = -\alpha u + X(t)$$

这就是朗之万方程.

$$m x \frac{dx}{dt} = -\alpha x \frac{dx}{dt} + x X(t),$$

$$\parallel \quad \parallel$$

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 x^2}{dt^2} - m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = -\frac{\alpha}{2} \frac{d^2 x^2}{dt^2} + x X$$

对大的布朗位移求统计平均

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{\alpha}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \langle x X \rangle = 0.$$

由能均分定理,  $m \bar{u}^2 = kT$ .

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle - \frac{2kT}{m} = 0, \quad \tau = \left( \frac{\alpha}{m} \right)^{-1}$$

$$\Rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} t + C_1 e^{-t/\tau} + C_2$$

若在  $t=0$ ,  $\langle x \rangle$  和  $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = 0$ , 则

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2kT}{m} \left( \frac{t}{\tau} - (1 - e^{-t/\tau}) \right)$$

$$\text{若 } t \ll \tau, \text{ 则 } \langle x^2 \rangle = \int \frac{2kT}{m} \tau \left( \frac{t}{\tau} - (1 - e^{-t/\tau}) \right) = \frac{kT}{m} t^2 = \langle u^2 \rangle t^2$$

这就是说, 当观察时间  $t \ll \tau$  时, 粒子满足牛顿力学运动. 而  $t \gg \tau$ ,

$$\langle x^2 \rangle \approx \frac{2kT}{m} t = \frac{2kT}{\alpha} t \equiv 2Dt.$$

爱因斯坦首先得到了  $\langle x^2 \rangle \propto t$  关系, 与实验观测符合. (可以估算, 对水中大小为  $10^{-5} \text{ cm}$  的花粉,  $\tau \sim 10^{-7} \text{ s}$ . 这当然要比记录一个粒子的运动轨迹的时间要小得多)

§ 8.8.2 布朗运动的扩散

布朗运动中用微扰扩散解释也许可以更好的推广到其他类似过程, 即是可以推广到非随机过程.

设  $n(x,t)dx$  是在  $t$  时刻在  $x$  到  $x+dx$  之间  $n$  个粒子的概率.  $n(x,t)$  是单位截面积内  $n$  Brownian 粒子的数密度.  $\int_{-\infty}^{\infty} n(x,t) dx = 1$  表示在  $t$  时刻处于  $x=0$  附近  $t$  时刻被吸收进  $(x, x+dx)$  内的几率. 称为吸收几率.

$$\therefore n(x,t+\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-x',\tau) n(x',t) dx' = \int_{-\infty}^{\infty} f(z,\tau) n(x-z,\tau) dz$$

$$\text{若 } \tau \text{ 很小, 则 } \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x,\tau) = 1$$

$$f(x,\tau) = f(-x,\tau).$$

$\tau$  很小, 则

$$n(x,t+\tau) = n(x,t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots$$

$$\text{对 } z, \quad n(x-z,\tau) = n(x,t) - z \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \dots$$

设  $n(x-z,\tau)$  在  $z$  大时很小,  $\therefore$

$$n(x,t+\tau) \approx n(x,t) + \tau \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial t^2} + \dots$$

$$\parallel \int_{-\infty}^{\infty} f(z,\tau) \left( n(x,t) - z \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \right) dz$$

$$= n(x,t) + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad D = \frac{\langle z^2 \rangle}{2\tau} \quad \text{扩散方程.}$$

∴ 布朗运动就是一种扩散过程.

上面方程也可写成

$$\frac{\partial}{\partial t} n(x,t+\tau) - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} n(x,t+\tau) = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\partial}{\partial t} f(x-x',t) - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x-x',t) \right] n(x',t) dx' = 0$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial t} f(x-x',t) - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x-x',t) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(z,t) - D \frac{\partial^2}{\partial z^2} f(z,t) = 0.$$

$$\text{若 } f(z,0) = \delta(z) \text{ 和 } \lim_{z \rightarrow 0} f(z,0) = 0$$

$$\text{由 } \int_{-\infty}^{\infty} f(z,0) dz = 1, \text{ 和 } f(z,0) = 0, \text{ if } z \neq 0,$$

$$\text{得 } f(z,0) = \delta(z).$$

$$\therefore f(z,\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D\tau}} e^{-z^2/4D\tau}.$$

$$\Rightarrow \langle z^2 \rangle = 2D\tau. \quad \text{这又是爱因斯坦的结果.}$$

以上待证明, 这个方程是随机过程

Master 方程对 Brown 运动的推广

例.

朗之万方程  $\Leftrightarrow$  Master 方程, 从力学角度看, 一个是哈密顿力学, 讨论的是可逆运动方程, 另一个是 Schrödinger 表象, 讨论的是不可逆运动方程. 后者更易于推广到非平衡态.



# ~~布朗运动的线性响应~~

## §8.8.3 布朗运动中 $m$ 的时间关联

在讲线性响应理论时，我们前边是取平衡态的空间和时间关联。在 Brownian 运动中，随机力  $F(t)$  被设成与空间无关。但布朗运动与  $F(t)$  的时间关联有什么关系呢？为此，我们考虑  $\langle u(t) \rangle$ 。朗之万方程中取  $u(t) = \dot{x}(t) e^{-t/\tau}$

$$\frac{d}{dt} (g(t) e^{-t/\tau}) = -\frac{g(t) e^{-t/\tau}}{\tau} + \frac{x(t)}{m}$$

$$\Rightarrow \frac{dg(t)}{dt} = e^{t/\tau} (x(t)/m) = A(t)$$

$$g(t) = e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt'$$

$$u(t) = e^{-t/\tau} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{(t+t'')/\tau} A(t') A(t'')$$

$$u(t) = u(0) e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt'$$

$$u'(t) = u'(0) e^{-2t/\tau} + 2u(0) e^{-2t/\tau} \int_0^t e^{t'/\tau} A(t') dt' + e^{-t/\tau} \int_0^t dt' dt'' e^{(t+t'')/\tau} A(t') A(t'')$$

$$\langle u'(t) \rangle = u'(0) e^{-2t/\tau} + e^{-t/\tau} \int_0^t \int_0^{t'} dt' dt'' e^{(t+t'')/\tau} \langle A(t') A(t'') \rangle$$

$$t \rightarrow \infty, \langle u'(0) \rangle = kT/m,$$

$$\Rightarrow C = \frac{\sqrt{kT}}{m\tau}$$

$$\langle u'(t) \rangle = u'(0) e^{-2t/\tau} + \frac{kT}{m} (1 - e^{-2t/\tau})$$

## §8.8.4 时差-耗散定理

我们前边已经有过对耗散与耗散系数的讨论。耗散与耗散系数在空间耗散。因此，我们可以有时间耗散与耗散系数关系，对 Brownian motion,  $\tau = (\alpha/m)^{-1} \therefore \alpha = \frac{m}{\tau} = \frac{m^2}{2KT} C$

$$= \frac{m^2}{2KT} \int_0^{\infty} dt C(t)$$

$$= \frac{m^2}{2KT} \int_0^{\infty} dt \langle A(t) A(0) \rangle$$

$$= \frac{m^2}{2KT} \int_0^{\infty} ds \langle A(t) A(t+s) \rangle$$

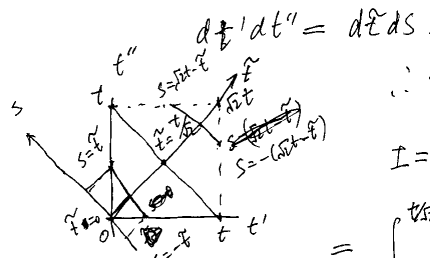
此即阻力系数  $\alpha$  与随机力  $A(t)$  的时差-耗散定理。

$$\langle u'(t) \rangle = u'(0) e^{-2t/\tau}$$

$$+ e^{-t/\tau} \int_0^t dt' dt'' e^{(t+t'')/\tau} \langle A(t') A(t'') \rangle$$

①  $\xi = t_1 + t_2, s = \frac{t_1 - t_2}{\sqrt{2}}$ , 设有时关联

$$e^{(t+t'')/\tau} \langle A(t') A(t'') \rangle = e^{t/\tau} C(s)$$



$\therefore$  得

$$I = \int dt' dt'' \dots$$

$$= \int_0^{t/\sqrt{2}} d\xi \int_{-\xi/\sqrt{2}}^{\xi/\sqrt{2}} C(s) ds$$

$$+ \int_{t/\sqrt{2}}^{\sqrt{2}t} d\xi \int_{-\sqrt{2}t+\xi}^{\xi} C(s) ds$$

对 Brownian 运动,  $C(s) \sim \delta(s)$  瞬时, (Markov 过程),  $C(s) = C \delta(s)$

$$\therefore I = \int_0^{t/\sqrt{2}} d\xi \int_{-\xi/\sqrt{2}}^{\xi/\sqrt{2}} C \delta(s) ds = \frac{C}{\sqrt{2}} (e^{2t/\tau} - 1)$$

还可以证明扩散系数 (见书 B)

$$D = kT/\alpha = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} du \langle u(t) u(t+u) \rangle$$

这是线性响应理论中  $D$  由流-流关联函数的结果, 同时这里  $u(t)$  是时间-速度。在 Kubo 线性响应理论中, 关联函数可以是时间和空间关联。

## §8.8.5 Markov 过程

## §8.8.5 布朗运动类似的 Markov 过程

电路中心噪声和电压时差



$$L \frac{dI(t)}{dt} = -RI(t) + V(t)$$

若外电压为 0, 即电池短路,

在平衡态下, 仍然存在时差电压和时差电流,  $\langle I(t) \rangle = 0, \langle V(t) \rangle = 0$

这时电路噪声的随机微分方程是  
有布朗运动形式

$$\begin{aligned} I(t) &\leftrightarrow u(t) \\ L &\leftrightarrow m \\ R &\leftrightarrow \alpha \\ V(t) &\leftrightarrow X(t) \end{aligned}$$

作为练习，请推导 (11.6.6) - (11.6.17).  
在电路中，~~即时间~~ ~~即时间~~ (即时间 ~ Fourier 变换) 要  
比微分方程更简单 Brownian 运动中方便得多。作  $V(t)$   
in Fourier 变换.

$$\tilde{V}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} V(t) e^{-i\omega t} dt$$

(电压噪声功率谱)

$$\begin{aligned} \langle V(t) V(t+s) \rangle &= \int \int d\omega d\omega' \tilde{V}(\omega) \tilde{V}(\omega') e^{i\omega t + i\omega'(t+s)} \\ &= \int \int d\omega d\omega' \langle \tilde{V}(\omega) \tilde{V}(\omega') \rangle e^{i\omega t + i\omega'(t+s)} = C \delta(s) \\ &= C \int d\omega' e^{i\omega' s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{② } \langle \tilde{V}(\omega) \tilde{V}(\omega') \rangle &= \langle \tilde{V}(\omega)^2 \rangle \delta(\omega + \omega') \text{ 代入 } \int \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d\omega d\omega' \langle \tilde{V}(\omega)^2 \rangle \delta(\omega + \omega') e^{i\omega t + i\omega'(t+s)} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d\omega \langle \tilde{V}(\omega)^2 \rangle e^{i\omega s} \\ \text{③ } \langle \tilde{V}(\omega)^2 \rangle &= \frac{C}{2\pi} \text{ 与 } \omega \text{ 无关.} \\ \text{即 } K(s) &= \langle V(t) V(t+s) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \tilde{K}(\omega) e^{i\omega s} \\ \Rightarrow \tilde{K}(\omega) &= \frac{C}{2\pi} = \frac{2kTR}{2\pi} = \frac{kTR}{\pi} \\ \therefore \overline{V^2} &= \overline{V(t)^2} = K(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{K}(\omega) d\omega \\ &= 2 \int_0^{\infty} \tilde{K}(\omega) d\omega = \int_0^{\infty} 4\pi \tilde{K}(\omega) d\omega \\ &= \int_0^{\infty} d\nu S(\nu) \end{aligned}$$

$\therefore S(\nu) = 4kTR$  是电压噪声功率谱密度.

这与谱密度 1)  $\propto T$ , = 热噪声  
(2)  $\propto R$ , 电阻越大热噪声越大. (3)  $\langle \tilde{V} \rangle \neq 0$ , 即  
 $\langle \tilde{I} \rangle \neq 0$ , (4)  $S(\nu)$  与  $\nu$  无关, 即  $\tilde{V}$  又称为  
white noise. (类似于白噪声, 各种频率成分  
强度相同).

这种大噪声又称为 Johnson noise,  $S(\nu) = 4kTR$   
称为 Nyquist 定理

§8.8.8 Shot noise (散粒噪声)

另一种大噪声称为 shot noise. 由灯丝发射电子  
到达阳极时引起的大噪声. (阴极)

\* 电子发射是随机事件.  
\* 电子从发射到阳极的时间极短, 相当  
于一个瞬时的电流.

设  $n(t)$  为单位时间内发射的电子数.  $t$  时  
刻发射一个电子引起电流为  
 $i(t-t)$ .  $i(t-t)$  在  $t-t$  大时很快衰减到 0. 且根据

所有  $n$  个电子在  $t$  时间内, 电子发射引起电流是

$$I(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt n(t) i(t-t).$$

$\langle n \rangle$  为平均值, 则

$$\begin{aligned} \langle I(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle n \rangle i(t-t) dt \\ &= \bar{n} \int_{-\infty}^{+\infty} i(t-t) dt = \bar{n} \cdot e \\ \left( i(t-t) = \frac{d\delta(t-t)}{dt} \right) \text{ 对 } t \text{ 积分, } \therefore i(t-t) \text{ 集中 } t \text{ 附近. } \therefore \text{ 积分后为一个电子-电荷} \\ \Delta I &= I(t) - \langle I \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} [n(t) - \langle n \rangle] i(t-t) dt \\ \langle (\Delta I)^2 \rangle &= \int dt dt' \langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle i(t-t) i(t-t') \\ \text{由于对 Shot noise, 每次发射都是随机的} \\ \therefore \langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle &\propto \delta(t-t') \\ \text{(严格地, } \langle \Delta n(t) \Delta n(t') \rangle &= \langle n \rangle \delta(t-t'), \langle n \rangle \\ \text{可以理解为在一个大统计量与一个力学量} \\ \text{之差, } \langle \Delta n^2 \rangle &= \bar{n} ) \\ \langle (\Delta I)^2 \rangle &= \bar{n} \int_{-\infty}^{+\infty} i(t-t)^2 dt = \bar{n} \int_{-\infty}^{+\infty} i(t)^2 dt \\ \text{(Campbell 定理)} \end{aligned}$$

谱函数:

$$G(t) = \int S(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |G(t)|^2 dt = 4\pi \int_{-\infty}^{+\infty} |S(\omega)|^2 d\omega$$

$$\therefore \langle (SI)^2 \rangle = 4\pi \bar{n} \int_{-\infty}^{+\infty} |S(\omega)|^2 d\omega$$

对一给定的仪器, 例如放大,  $S(\omega)$  只在有限频率范围内不为0,  $\therefore$

$$\langle (SI)^2 \rangle = 4\pi \bar{n} |S(\omega)|^2 \Delta\omega$$

$$\text{另一方面, } S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) e^{-i\omega t} dt$$

若  $\omega t \ll 1$ ,  $e^{-i\omega t} \approx 1$ .

$$S(\omega) \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) dt = \frac{Q}{2\pi}$$

$$\therefore \langle (SI)^2 \rangle = \frac{Q^2}{2\pi} \Delta\omega \quad (\Delta\omega = 2\pi \Delta\omega)$$

$$= 2\langle I \rangle \Delta\omega \quad (\langle I \rangle = \bar{n} e.)$$

由于  $\langle I \rangle$ ,  $\langle (SI)^2 \rangle$  和  $\Delta\omega$  在

实验中是确定的, 可以用于判决. 在信号时, 在 shot noise 中发射带电荷是 quasiparticle, 所以它都用  $e$  代替. 可以判决电荷.

iii) 体系稳定时,  $P_n(x; t_k)$  与时间无关,  $P_n(x; t_1 + t_k) = P_n(x; t_k)$ .

$$(iv) \quad P_1(x_1, t_1) P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) = P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$$

$$(v) \quad \int P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_2 = 1$$

证:  $P_2(x_1, t_1)$

$$\begin{aligned} & \int \int P_1(x_1, t_1) P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int \int P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) dx_1^{x_2} = \int P_2(x_2, t_2) dx_2 = 1 \\ &= \int P_1(x_1, t_1) dx_1 \\ &\rightarrow \int P(x_1, t_1) \left[ \int dx_2 P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) \right] dx_1 \end{aligned}$$

由 iii) 得, 可证

$$\begin{aligned} & P_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ &= P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{2|2}(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) \\ &= P_1(x_1, t_1) P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \end{aligned}$$

## §8.4 主方程和福克-普朗克方程

§8.4.1 Master eq. and Fokker-Planck eq.

主方程是分布方程 (满足一般性方程, generally, 这是一个很复杂的问题). 这里我们研究 Markov 过程中主方程. Markov 过程是指体系在  $t$  时刻的概率只与体系在  $t$  时刻最邻近前一时刻的概率状态有关, 而更早的概率状态都没有影响. 例如, 在布朗运动中速度  $u(t)$ , Johnson noise 中电压  $I(t)$ . 设  $x(t)$  为随机变量 ( $u(t)$ ,  $I(t)$ , ...),  $P_1(x, t)$  表示  $t$  时刻取  $x$  值的几率.  $P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$  为  $x$  在  $t_1$  时刻取值  $x_1$ , 在  $t_2$  时刻取值  $x_2$  的几率, ...,  $P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$  条件下,  $P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$  为给定  $x$  在  $t_2$  时刻取值  $x_2$  的条件下, 在  $t_1$  时刻取值为  $x_1$  的几率.  $P_{1|2}(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3; \dots; x_k, t_k)$  为  $x$  在  $t_1$  时刻取值  $x_1$  的条件下, 在  $t_2, \dots, t_k$  时刻取值  $x_2, \dots, x_k$  的几率.

$$(i) \quad \int P_1(x, t) dx = 1$$

$$(ii) \quad \int P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_n = P_{n-1}(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1})$$

我们用数学语言来理解一下:

$$P_1(x, t) = |\psi_1(x, t)|^2$$

$$P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) = |\psi_2(x_1, t_1; x_2, t_2)|^2 \dots$$

条件几率:  $P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2)$  可以理解为  $\psi_1(x_1, t_1 | x_2, t_2)$

$$\psi_1(x_1, t_1) = \langle \psi_1(x_1, t_1) | \psi_1(x_2, t_2) \rangle$$

初态为  $|x_1, t_1\rangle$ , 末态为  $|x_2, t_2\rangle$

$$P_{1|1}(x_1, t_1; x_2, t_2) = |\langle \psi_1(x_2, t_2) | \psi_1(x_1, t_1) \rangle|^2$$

$$\psi_1(x_2, t_2; x_1, t_1) \text{ 是 } \langle \psi_1(x_1, t_1) | \psi_1(x_2, t_2) \rangle$$

$$\text{则 } |\psi_1(x_1, t_1)\rangle \sim \text{归一化波函数}$$

这样, 我们就很容易理解性质 (i) - (v).

由 iii) 得, 可证

$$\begin{aligned} & P_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ &= P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{2|2}(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) \\ &= P_1(x_1, t_1) P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \end{aligned}$$

设  $t_1 < t_2 < t_3$ , 两边对  $dx_2$

$$P_2(x_1, t_1; x_3, t_3) = \int P_1(x_1, t_1) \int dx_2 P_{1|1}(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3)$$

以定义的条件概率用于非 Markov 过程,  $P_{k|k}(x_{k+1}, \dots, x_{k+t} | x_{k+t}, \dots)$  表明  $t_{k+1}, \dots, t_{k+t}$  时刻与  $t_1, \dots, t_k$  时刻的状态有关。  
 马尔科夫过程:

$P_{n-1|1}(x_1, t_1, \dots, x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$   
 $= P_{1|1}(x_{n-1}, t_{n-1} | x_n, t_n)$ , 即  $t_n$  时刻与  $t_{n-1}$  时刻有关。即一个 Markov 过程只有  $P_1(x, t)$  和  $P_1(x_1, t_1; x_2, t_2)$  两个概率密度。如

$$\begin{aligned} P_3(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) \\ = P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{2|1}(x_1, t_1; x_2, t_2 | x_3, t_3) \\ = P_1(x_1, t_1) P_{1|1}(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3) \end{aligned}$$

过  $t_1 < t_2 < t_3$ , 两端  $dx_i$  积分

$$\frac{P_2(x_1, t_1; x_3, t_3)}{P_1(x_1, t_1)} = \frac{P_1(x_1, t_1)}{P_1(x_1, t_1)} \int dx_2 P_{1|1}(x_1, t_1; x_2, t_2) P_{1|1}(x_2, t_2 | x_3, t_3)$$

Markov 过程中, Smoluchowski-Chapman-Kolmogorov 方程。

$x_1 \rightarrow$  其他取值总概率  $[1 - \tau \int W(x_1, x) dx]$  即是不发生跃迁的概率。  
 $\therefore [1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1 - x_2)$  是不跃迁到  $x_2$  的概率。跃迁到  $x_2$  的概率是  $\tau \int W(x_1, x) \delta(x_1 - x_2) dx$ 。  
 $[1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1 - x_2)$  是不发生到其他  $x_2$  值, 保持到  $x_2 = x_1$  的概率, 与  $\tau \int W(x_1, x) \delta(x_1 - x_2) dx$  为  $x_1 = x_2$  和  $x_1 \neq x_2$  概率之和。

$$\begin{aligned} P(x_1, t | x_2, t+\tau) &= [1 - \tau \int W(x_1, x) dx] \delta(x_1 - x_2) + \tau \int W(x_1, x) \delta(x_1 - x_2) dx \\ &= \delta(x_1 - x_2) - \tau \int W(x_1, x) \delta(x_1 - x_2) dx + \tau \int W(x_1, x) \delta(x_1 - x_2) dx \\ &= \int P(x_1, t) W(x_1, x_2) - \int P(x_2, t) W(x_2, x_1) dx_1 \\ &= \int [W(x_1, x_2) P(x_1, t) - P(x_2, t) W(x_2, x_1)] dx_1 \end{aligned}$$

Master eq.

定义 Markov chain, 我们考虑  $P_1(x, t_1)$  随时间变化。显然, 在 Markov

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P(x, t+\tau) - P(x, t)}{\tau}$$

$$\frac{\partial P(x_2, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int P(x_1, t) [P(x_2, t+\tau | x_1, t) - P(x_2, t | x_1, t)] dx_1$$

由  $P(x_2, t+\tau) = \int P(x, t) P(x_2, t+\tau | x, t) dx$

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \int P(x, t) [P(x, t+\tau | x, t) - P(x, t | x, t)] dx$$

$$\text{又 } \tau=0, P(x_2, t) = \int P(x, t) P(x_2, t | x, t) dx$$

$$\Rightarrow P(x_2, t | x, t) = \delta(x - x_2)$$

记  $W(x_1, x_2)$  为  $t \rightarrow t+\tau$  time interval,  $x$  取值从  $x_1$  到  $x_2$  的跃迁中单位时间的跃迁概率密度。  
 $\therefore$  则  $\tau \int W(x_1, x) dx$  是  $\tau$  间隔由  $x_1$

主方程第一次表示从其他状态跃迁到  $x_2$  的总概率密度; 第二次表示从  $x_1$  跃迁到  $x_2$  的总概率密度。在微扰中, 微扰引起的跃迁一阶力方程, 也未涉及非平衡态过程。是普遍。

下面举一例子: 对一孤立系统 (F. Schwabl Stat. Mech. §10.4)

$$H = H_0 + V, \quad H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad F |n\rangle = F_n |n\rangle$$

$F |n\rangle = F_n |n\rangle$  是守恒量。V 是微扰哈密顿量。

$U(t)$  是时间演化算符

$$\begin{aligned} P(t+\tau) &= \sum_i W_i(t) U(t) |i\rangle \langle i| U^\dagger(t) \quad (\sum_i |i\rangle \langle i| = 1) \\ &= \sum_{i,j,k} W_i(t) |i\rangle \langle j| U(t) |j\rangle \langle k| U^\dagger(t) \\ &= \sum_{i,j,k} W_i(t) |i\rangle \langle k| U_{j,i}(t) U_{k,j}^*(t) \end{aligned}$$

$$U_{j,i}(t) \equiv \langle j | U(t) | i \rangle$$

取随机相近似, 即忽略非对角项贡献,  
 $P(t+\tau) \approx \sum_i \sum_j W_i(t) |i\rangle \langle j| U_{j,i}(t) U_{j,i}^*(t)$

$$\equiv \sum_j W_j(t+\tau) |j\rangle \langle j|$$

$$\text{即 } W_j(t+\tau) = \sum_i W_i(t) |U_{ji}(\tau)|^2$$

$$\therefore W_j(t+\tau) - W_j(t) = \sum_i (W_i(t) - W_j(t)) |U_{ji}(\tau)|^2$$

(  $\because \sum_i |U_{ji}(\tau)|^2 = 1$  ) (  $i=j, |U_{ii}(\tau)|^2$  不出项 )

即  $|U_{ji}|^2_{j \neq i}$ , 用微扰论, (Fermi Golden rule)

$$|U_{ji}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\sin W_{ji} \tau/2}{W_{ji}/2} \right)^2 | \langle j | V | i \rangle |^2$$

$$\approx \tau \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) | \langle j | V | i \rangle |^2$$

$$W_{ji} = E_i - E_j / \hbar \quad (\text{即 } \frac{E_i - E_j}{\hbar} \gg \frac{1}{\tau})$$

$$(\approx (E_i - E_j) \tau \ll 1, \tau \gg 1/\Delta E \quad \Delta E \text{ 是带宽})$$

$$\text{即 } \frac{W_j(t+\tau) - W_j(t)}{\tau} \Big|_{\tau \rightarrow 0} = \frac{dW_j(t)}{dt}$$

$$\sum_i (W_i(t) - W_j(t)) \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_j) | \langle j | V | i \rangle |^2$$

得:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} W(x,z) P(x,t) dz$$

$$- \int z \frac{\partial}{\partial x} [W(x,z) P(x,t)] dz + \frac{1}{2} \int z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} [W(x,z) P(x,t)] dz$$

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} W(x,z) P(x,t) dz$$

$$\parallel \int_{-\infty}^{+\infty} W(x,z') P(x,t) d(-z')$$

$$\therefore \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_1(x) P(x,t)] = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\alpha_2(x) P(x,t))$$

$$(\alpha_n(x) = \int z^n W(x,z) dz \text{ — } n \text{ 级矩})$$

Fokker-Planck eq.

如果  $\alpha_1(x) = 0, \alpha_2(x) = \text{const}$ . 则 F-P 方程

描述了 ~~扩散方程~~ Brownian motion 的扩散方程.

这里  $\sum_i$  表示对  $E_i$  和  $F_i$  求和.

$$\sum_{E_i} \rightarrow \int dE_i \rho(E_i). \quad \rho(E_i) = \text{DOF}$$

$$\text{则 } \frac{dW_{E_i F_i}(t)}{dt} = \sum_{F_j} (W_{F_j F_i} - W_{E_i F_j})$$

$$\left( \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_j) | \langle E_j F_j | V | E_i F_i \rangle |^2 \right)$$

$$P_{E_j F_j} \rightarrow P_{E_j}(F_j, E_i)$$

§8.1.2 Fokker-Planck eq.

例子例如  $x$  可以连续取值,  $W(x', x)$  是随

$|x' - x|$  很快衰减. 取  $z = x' - x$

$$\text{是 d.o.f.}, W(x', x) = W(x+z, x)$$

$$= W\left(\frac{x+x'}{2}, x' - x'\right) \approx W(x', -z)$$

$$\text{于是 } \frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \int [W(x', x) P(x', t) - W(x, x') P(x, t)] dx'$$

$$= \int [W(x-z, z) P(x-z, t) - W(x, -z) P(x, t)] dz$$

$$\text{展开 } W(x-z, z) P(x-z, t) = W(x, z) P(x, t) - z \frac{\partial}{\partial x} [W(x, z) P(x, t)] + \frac{1}{2} z^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} [W(x, z) P(x, t)] + \dots$$