第 38 卷 第 10 期　　物 理 学 报　　Vol. 38, No. 10
1989 年 10 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Oct., 1989

非平衡涨落问题的微观唯象分析理论(II)

物理系统中的非平衡涨落与由信息理论所求得的热传导精确结果的比较

李 富 斌
淮北煤炭师范学院物理系

1988 年 12 月 7 日收到

本文将文献[10]所建立的非平衡涨落统计的微观唯象分析理论与对一般的涨落-耗散表示式的修正方法，直接应用于一、二与三维光子热传导与金属中的电子热传导的研究中，并将所得结果与由信息理论方法所建立的线性谐振子链的非平衡涨落的精确模型所求得的精确结果进行了比较，两者相当符合。从而证实了文献[10]所建立的非平衡涨落统计的微观唯象分析理论是正确的。

一、某些物理系统中的非平衡涨落

将由文献[10]导出的(25)—(27)式在小温度梯度的情形下应用于某些具体的物理系统．特别是要用文献[10]的理论来研究热传导的两种模型：一是低温下固体电介质中的光子输运过程；另一是室温下金属中的电子热输运过程．

为使问题得到进一步简化，我们的研究将只限于与温度梯度平行的热涨落．在此种情形下，要求得横向热涨落的相应表示式并不困难．对于小温度梯度的情形，我们可将 $[1+A(\nabla T)_0^2]$ 项扩展到 $(\nabla T)_0^2$ 的第一阶，并通过文献[10]的(25)—(27)式导出下式：

$$\langle\delta_u\delta_u\rangle = k_B c T^2\left\{1-\lambda^2 c T^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 a}{\partial u^2}\right)-\frac{1}{a}\left(\frac{\partial a}{\partial u}\right)^2\right](\nabla T)_0^2\right\}, \tag{1}$$

$$\langle\delta_q\delta_q\rangle = k_B c T^2\tau^{-1}v^{-1}\left[1+\lambda^2 c T^2\left(\frac{1}{a}\right)\left(\frac{\partial a}{\partial u}\right)^2(\nabla T)_0^2\right], \tag{2}$$

$$\langle\delta_u\delta_q\rangle = k_B\lambda^2 c T^4\tau^{-1}v^{-1}\left(\frac{\partial a}{\partial u}\right)(\nabla T)_0\left\{1-\lambda^2 c T^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 a}{\partial u^2}\right)-\frac{1}{a}\left(\frac{\partial a}{\partial u}\right)^2\right](\nabla T)_0^2\right\}. \tag{3}$$

下面为了作出具体说明，我们在研究如上所述的物理系统中，对出现在(1)，(2)式中的系数 $a=\tau v/\lambda T^2$ 的计算公式采用了简化的微观表示式．

1. 固体电介质中的热涨落

按照通常的初等动力学方法，并在其弛豫时间近似内，热传导率由下式给出：

$$\lambda = \frac{1}{d}\rho c c_0^2 \tau, \tag{4}$$

其中 c 是每单位质量的比热，c_0 是其平均速度，τ 是平均碰撞时间．在光子输运的情形下，依照 Debye 近似，光子的比热是已知的，光子平均速度 c_0 与线性光子的色散关系 $\omega = c_0 k_B$ 有关，ω 是其角频率，k 是光子的波矢量．1966 年，Guyer 与 Krumhansl 从纯粹的三维光子场的线性 Boltzmann 方程出发，求得了如下形式的热通量的连续性方程[1]：

$$\frac{\partial \boldsymbol{q}}{\partial t} + \frac{1}{3} c_0^2 \rho c \nabla T + \left[\tau_s^{-1} - \frac{1}{5}\tau_N c_0^2 (\nabla^2 + 2\nabla\nabla\cdot)\right]\boldsymbol{q} = 0, \tag{5}$$

其中 τ_s 是受阻碰撞的弛豫时间，在反转散射与杂质散射中都会发生受阻碰撞．τ_N 是标准碰撞的弛豫时间，标准碰撞即动量守恒的碰撞．当标准碰撞占优势时，即当 $\tau_N \to 0$ 时，方程（5）便可简化为 Maxwell-Cattaneo 方程即文献［10］中的（7）式，并且表示出现在（7）式中的热通量的弛豫时间在此种环境下的确等于出现在热导率表示式（4）中的平均碰撞时间．在弛豫时间 τ 的精确计算中就包含了计算其热导率的物理实质和复杂性，而其中的 c_0 和 c 均由一般的平衡态理论给出．但是在我们所研究的问题中，我们最关心的还是关系式 $a = \tau v/\lambda T^2$ 的整体数值．因此，我们就有可能迴避计算 τ 的复杂性．

在低温时，依照 Debye 模型，光子比热应正比于 T^d，其中 d 是其点阵的维数[2]，因此，（1）—（3）式中的（$\partial a/\partial u$）和（$\partial^2 a/\partial u^2$）项可以写成下式：

$$\partial a/\partial u = -(d+2)a/cT,$$
$$\partial^2 a/\partial u^2 = (d+2)(2d+3)a/c^2T^2. \tag{6}$$

当将（6）式引入（1）—（3）式中，并采用由 $l = c_0\tau$ 所定义的平均自由程 l，便可求得如下的结果：

$$\langle \delta_u \delta_u \rangle = k_B c T^2 \left[1 + \frac{1}{2d}(d+2)(l/T)^2(\nabla T)_0^2\right], \tag{7}$$

$$\langle \delta_q \delta_q \rangle = k_B \lambda T^2 \tau^{-1} v^{-1} \left[1 + \frac{1}{d}(d+2)^2(l/T)^2(\nabla T)_0^2\right], \tag{8}$$

$$\langle \delta_u \delta_q \rangle = -(d+2)k_B \lambda T(\nabla T)_0 \left[1 + \frac{1}{2d}(d+2)(l/T)^2(\nabla T)_0^2\right]. \tag{9}$$

尤其是（8）式给出了对通常的 Landau-Lifshitz（19）式（见文献［10］）在低温时的非平衡修正[10]．还应值得注意的是，文献［10］的（25）—（27）式曾预言了当 $(\nabla T)_0^2 = -A^{-1}$ 时会出现无穷大涨落．在光子热传导的情形下，这个临界温度梯度 $(\nabla T)_0^2$ 便为

$$(\nabla T)_0^2 = 2d(d+2)^{-1}(T/l)^2. \tag{10}$$

当

$$q_0^2 = \frac{2}{d}(d+1)^2(d+2)^{-1}u^2 c_0^2 \rho^2 \tag{11}$$

时，借助于热通量 $q_0 = -\lambda(\nabla T)_0$ 和每单位质量的内能 u 以及速度 c_0，便可求得这个临界温度梯度值．

2. 金属中的热涨落

对于有实际意义的其它刚体热传导系统，一般要采用固态金属的微观模型来加以研究．在室温下的金属中，由于由电子所携带的热通量占所有粒子所携带的总热通量的绝大部分，故可将点阵光子的输运加以忽略．在此种情形下，热导率可由(4)式给出，其中 $c_0=v_F$，v_F 是金属中电子的 Fermi 速度，c 是每单位质量的电子比热

$$c=\frac{\pi^2}{2}\frac{k_B^2T}{m\varepsilon_F}, \tag{12}$$

其中 ε_F 是 Fermi 能，m 是电子质量．如同在研究低温时的光子输运情形一样，我们可以证明文献[10](7)式中的弛豫时间等于本文(4)式中的平均碰撞时间．的确，从弛豫的 Boltzmann 方程出发，便可求出如下的复式热导率 $\lambda(\omega)$：

$$\lambda(\omega)=\left(\frac{\pi^2}{3}\right)\left(\frac{n}{m}\right)k_B^2T\tau(1+i\omega\tau)^{-1}, \tag{13}$$

其中 ω 是其微扰的角频率 n 是电子数密度．(13)式较文献[10](7)式的 Fourier 镜像更精确，由(13)式证明了文献[10](7)式中的弛豫时间与本文(4)式中的平均碰撞时间是相等的．所以，我们可由这个微观表示式(10)求得参数 a 的导数值，即

$$\partial a/\partial u=-3a/cT,\quad \partial^2a/\partial u^2=15a/c^2T^2, \tag{14}$$

从而，由下式可给出表示涨落的(1)—(3)式的二阶矩：

$$\langle\delta_u\delta_u\rangle=k_BcT^2\left[1+\frac{1}{2}(l'/T)^2(\nabla T)_0^2\right], \tag{15}$$

$$\langle\delta_q\delta_q\rangle=k_B\lambda T^2\tau^{-1}v^{-1}[1+3(l'/T)^2(\nabla T)_0^2], \tag{16}$$

$$\langle\delta_u\delta_q\rangle=-3k_B\lambda T(\nabla T)_0\left[1+\frac{1}{2}(l'/T)^2(\nabla T)_0^2\right]. \tag{17}$$

其中 l' 是由 $l'=v_F\tau$ 所定义的平均自由程．在此种情形下，当其热通量达到其临界值

$$q_0^2=\frac{8}{9}v_F^2u^2\rho^2, \tag{18}$$

时，便可由文献[10](25)—(27)式导出无穷大涨落．

对于金属来说，当其样品受到电场的作用时，则可按与上述相类似的方法求得对描述电流涨落的经典 Nyquis 公式的非平衡修正[3]．在此种情形下，如果按照一级近似，将由图解法中的某些发散所产生的热效应加以忽略，则由上述方法所求得的结果在性质上就类似于由非平衡图解展开所求得的微观结果[11]．

二、与精确结果的比较

至今，我们所涉及的假定在平衡态时被证明是正确的，但在非平衡态时，这些假定却缺乏其坚固的基础．在我们的理论中不管是否考虑了非零平均热通量，但究其结果却可描述非平衡的特征． 这种理论正是建立非平衡涨落理论的稳固基础所需要的．事实上，作为非平衡热力学涨落的精确统计理论应当依据兼容于每个宏观态的非平衡微观态的定

义和计算.

这里，我们将文献[10]的结果与由信息理论按照线性谐振链所描述的热传导的结果进行比较，并发现这两种结果基本上一致．其实质是这两种结果与统计结果相一致．从而在对我们一开始所作的有关非平衡涨落的假定的适用性和局限性暂时还缺乏更直接更严密的证明的情况下，增强了我们对使用这些假定的信心.

对于某些非平衡过程，我们可将其描述为研究系统对于外界机械扰动的响应过程，也可将出现的另一些非平衡过程解释为由热扰动所导致的，即这些非平衡过程的发生是由于系统内部的不均匀性所造成的．对于前一类非平衡过程的统计分析一般是在某一初始时刻的统计平衡的条件下依据对其机械扰动的动力学解释．但是对其热扰动的分析就较为困难，这是因为热扰动并不能直接归属任何的扰动哈密顿量．为了对这些点阵热扰动进行有效的描述，许多学者均曾提出过许多不同的方法．其中有些学者曾试图建立一种非平衡系综理论，这种理论平行于 Gibbs 将平衡态表示为系统的宏观条件的处理方法[4-7]．最简单的方法是依据信息理论而建立的相应于非平衡统计系综的方法．1979 年 Miller 与 Larson 曾用此种方法对线性谐振链进行过分析[8]．我们也可用文献[10]的理论来研究线性谐振链这个最为简单的问题，但所涉及的计算却很复杂，而且线性谐振链事实上具有一个无穷大热导率．对有限长度的线性谐振链中的稳定热流的某些分析要涉及到邻域附近的粒子间的互作用[9]，还要涉及到与每个端点相接触的具有不同温度的热容器，而且所导出的热通量正比于不同的温度但又依赖于谐振链的长度．在 Miller 与 Larson 的分析中，他们通过谐振链端是与一个环形相连接的假定而避免了这种复杂性．对于这样的一个热能"超导体"来说，就需要用非平衡态来描述这种没有边界的热容器．在此种情形下，热通量本身就是一个运动常数，可加以选择，而且将恒定不变的总能量 E 可作为宏观态的一个参数来看待.

如果固定环的质心的位置和速度，则其系统的宏观态便可通过总能量 E 和热通量 Q 的系综平均值来确定

$$E = \langle H\rangle,\ Q = \langle J\rangle, \tag{19}$$

其中 H 是系统的总哈密顿量，而 J 则是微观热通量算子．借助于(19)式，则其几率分布函数 p 就可通过对 Shannon 熵

$$S = -k_B\int p\ln(ph^{1-N})d\Gamma \tag{20}$$

求极大值而求得．其中 $d\Gamma$ 是微分体元，h 是 Planck 常数，N 是系统内的粒子数．按照这种方法，便可求得如下的无量纲的配分函数 z：

$$z = h^{1-N}\int\exp(-\beta H - \gamma J)d\Gamma, \tag{21}$$

对于不确定乘子 β 和 γ 的选择，必须要满足(19)式所示的约束．β 和 γ 可由如下的方程求得:

$$E = \langle H\rangle = -\partial\ln z/\partial\beta,\ Q = \langle J\rangle = -\partial\ln z/\partial\gamma \tag{22}$$

通过求解方程(22)并完成其相应的积分，便可最终求出 z，β 和 γ 的表示式，即

$$z = [\varepsilon(1 - x^2)]^N, \tag{23}$$

$$\beta = \varepsilon^{-1}(1+x^2)(1-x^2)^{-1}, \tag{24}$$

$$\gamma = -(N/\varepsilon)2x(1-x^2)^{-1}, \tag{25}$$

其中 ε 是单个粒子的平均能量，$\varepsilon = E/N$，x 是相对热通量，$x = Q/\varepsilon$. 当 $x = 0$ 时，便可求得一般的平衡结果. 当 x^2 不等于零但又很小时，我们发现，在(24)式中由 $\theta=(k_B\beta)^{-1}$ 所定义的广义非平衡温度因非零热通量的存在而表现出某些修正. 的确，当热通量 Q 的值很小时，便可将(24)式重新写为

$$\theta^{-1} = T^{-1} + 2T^{-1}(Q/\varepsilon)^2, \tag{24}$$

可将(24)′式与文献[10]中所求得的唯像方程(9)进行比较，或者可与比方程(9)更为具体的表示式进行比较. 在固体电介质处于低温的情形下，依据(6)式，便可将(24)′ 式进一步简化为

$$\theta^{-1} = T^{-1} + \frac{d(d+2)}{2T(d+1)^2}\left(\frac{q}{c_0 u\rho}\right)^2, \tag{26}$$

按照由 Miller 和 Larson 所建立的模型，$c_0 = 1$，且其邻域附近的距离 a 为 $a = 1$，所以，每单位长度的能量就是 ρu；又由于在每单位长度上只存在一个粒子，所以，在一维情形下，每单位长度的能量 ρu 就可用每个粒子的能量 ε 来表示. 当我们像 Miller 和 Larson 那样去研究高温极限下的一维谐振链时，便可将(26)式中所出现的数值因子均可约化为 1，且在此谐振链中，比热是一个常数. 但是在此种情形下，由于我们不能将文献[10](7)式中的弛豫时间与(4)式中的平均碰撞时间视为同一，所以，(24)′ 与 (26) 式中的数值系数就不能相比较. 但我们却发现，(24)′与(26)式却接近平行，所以在非平衡态中，无论是从宏观的观点还是从微观的观点去看，其局域平衡温度仅仅是对一个更为复杂的“温度”的一级近似.

依据由(23)式所示的配分函数表示式，就不难求得非平衡涨落中能量与热通量涨落的二阶矩

$$\langle(\delta E)^2\rangle = \partial^2 \ln z/\partial\beta^2 = N\varepsilon^2(1+x)^2/(1-x)^4, \tag{27}$$

$$\langle(\delta Q)^2\rangle = \partial^2 \ln z/\partial\gamma^2 = \frac{\varepsilon^2}{2N}\frac{(1+4x^2-x^4)}{(1-x^2)}, \tag{28}$$

$$\langle(\delta E)(\delta Q)\rangle = -\frac{2N\varepsilon^2 x}{(1-x^2)}, \tag{29}$$

这些表示式都可与文献[10]中所求得的唯像结果(25)—(27)式相比较. 应该注意到，在这两种情形下，当 $Q = 0$ 时，我们会再次发现能量涨落的经典结果与热涨落的表示式是联立的，而其能量-热通量的相关却为零. 在一个稳定的非平衡态中，由非零的平均热通量会产生一个正比于平均热通量的能量-热通量相关关系，并且会在能量-能量和热量-热量涨落中引入某些修正量. 最后，当其热通量接近一个极限值时，通过将 (27)—(29) 式与(25)—(27)式[10]进行比较，便可发现扩散涨落的共同特征. 在(27)—(29)式中，这个极限值已达到 $x^2 = 1$. 在微观模型中，当接近其最大能通量时，则其系综数目便凝聚成一个宏观态，已消失的再生力会重新产生位移[8]. 作为这种研究的一个结论是：在其临界点时，涨落就会扩散. 然而，他们对此结论的物理意义却无法作出任何解释. 这与我们所建立的理论模型的预言却有所不同.

通过上述比较，使我们更加确认文献[10]对非平衡涨落的微观唯象分析的某些观点是正确的．由非平衡熵的存在对热通量的依赖可以看出其统计基础是与其非平衡系综相关的．在非平衡系综中，能量和热通量的涨落与非平衡熵相关，而且能量涨落也与经典理论中的平衡熵有关．这种由不同方法所得结论的基本一致性就暗示出在我们的非平衡涨落的唯像理论体系中，的确包含了某些物理学特征．

[1] R. A. Guyer, J. A. Krumhansl, *Phys. Rev.*, 148(1966), 766.
[2] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, New York, (1976).
[3] G. H. Wannier, Statistical Physics, Wiley, New York, (1966), p. 440.
[4] D. N. Zubarev, Nonequilibrium Statistical Mechanics, Consultants Bureau, London, (1974).
[5] J. A. McLennan, *Phys. Fluids*, 3(1960), 493.
[6] B. Robertson, *Phys. Rev.*, 144(1966), 151.
[7] R. M. Nisbet, W. S. C. Gurney, *Phys. Rev.*, A10(1974), 720.
[8] B. N. Miller, P. Larson, *Phys. Rev.*, A20(1979), 1717.
[9] Z. Reider, J. L. Lebowitz, E. Lieb, *J. Math. Phys.*, 8(1967), 1073.
[10] 李富斌，物理学报，38(1989).
[11] A. M. S. Tremblay, B. Patton, P. C. Martin, *Phys. Rev.*, A19(1979), 1721.

THE MICROSCOPIC PHENOMENOLOGICAL THEORY OF ANALYSIS FOR THE PROBLEM OF NONE-QUILIBRIUM FLUCTUATIONS (II)

NONEQUILIBRIUM FLUCTUATIONS OF SOME PHYSICAL SYSTEMS AND COMPARISON WITH EXACT RESULTS FOR HEAT CONDUCTIONS OBTAINED FROM AN INFORMATION-THEORETICAL APPROACH

LI FU-BIN

Department of Physics, Huaibei Coal Teacher's College, Anhui

(Received 7 December 1988)

ABSTRACT

We apply the theory established in ref. [10] and the general results to treat heat fluctuations in dielectric materials, by considering the phonon heat conduction in one, two and three dimensions, as well as in metals, where we deal with electronic heat conduction. We compare our results with an exact solutions from an exact model for the nonequibrium fluctuations in a linear harmonic chain based on an information-theoretical approach. These solutions coincide reasonably. And so prove the theory presented in [10] is correct.