

时间反演对称和非平衡统计定常态 (II)

周光召 苏肇冰

(中国科学院理论物理研究所)

1980年8月2日收到

提 要

本文是从微观量子统计理论出发讨论非平衡统计定常态的时间反演对称性质的第二部份。本文应用文献[1]的结果对非平衡统计定常态的普遍性质进行较为系统的讨论。对于具有时间反演对称的非平衡统计定常态,证明了广义(自由能)势函数的存在性;导出了涨落耗散定理的 Rayleigh-Jeans 极限形式;推广了局部热平衡假设下的 Onsager 倒易关系;导得了序参量-守恒荷密度普遍方程 (TDGL) 的“可逆-不可逆”运动分解形式。

一、引 言

本文的目的是将文献[1]所得的主要结果,用来较为系统地讨论具有时间反演对称的非平衡统计定常态(以下简称 NESS)的一些普遍性质。所有的讨论是在闭路格林函数(以下简称 CTPGF)^[1]的理论框架中进行的。

在第二节,我们将首先证明在时间反演对称的统计定常态上序参量广义势函数的存在性。然后,利用势条件,进一步求得在时间反演对称的 NESS 上涨落耗散定理(以下简称 FDT)的 Rayleigh-Jeans 极限(即 $\omega \rightarrow 0$ 极限)。

在统计定常态附近,弛豫矩阵 $\gamma_{\alpha\beta}$ 、扩散矩阵 $\sigma_{\alpha\beta}$ 和响应矩阵 $\mathcal{L}_{\alpha\beta}^{\dagger}$ 分别描写了序参量的弛豫、统计涨落和守恒流矢量对外力的响应。在第三节,我们将分别求出他们所满足的时间反演对称关系;并且,将热平衡态附近的 Onsager 线性理论推广到 NESS 附近。

在第四节,我们通过对于弛豫逆矩阵 $\gamma_{\alpha\beta}^{-1}$ 性质的探讨,得到了序参量及守恒荷密度方程(即所谓的含时间 Ginzburg-Landau 方程,简称 TDGL)的一个普遍形式。证明了弛豫逆矩阵的对称组合正比于扩散矩阵 $\sigma_{\alpha\beta}$,它描述了序参量的不可逆运动;弛豫逆矩阵的反对称组合,与序参量微观算符对易子的统计平均有关,它反映了序参量的可逆运动。

这里顺便指出,临界动力学中,涨落起重要作用,为了在半唯象理论中考虑涨落的影响,序参量常常被取作为随机变量,满足受随机力驱动的随机微分方程,即朗之万方程。在流行的文献中,常把朗之万方程扣除随机力剩下的部份称之为“TDGL”。尽管我们在文献[2]中也曾证明,在单圈图近似下,朗之万方程可被表示成

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial t} = -\gamma_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_{\beta}} + \xi_{\alpha}, \quad (1.1)$$

其中 ξ_{α} 是高斯随机力,满足关系

$$\langle \xi_{\alpha}(t_1) \xi_{\beta}(t_2) \rangle = 2\sigma_{\alpha\beta} \delta(t_1 - t_2). \quad (1.2)$$

(1.1) 式扣除随机力 ξ_i 以后, 与 CTPGF 序参量方程 (2.4) 式具有相同的形式. 但是这两者之间是有原则性差别的. 在朗之万方程中, 序参量被指定为随机变量, 各种统计涨落隐含在随机变量之中; 去掉随机力 ξ_i , 相当于取了树图近似. 而我们讨论的 CTPGF 中的序参量方程, 是序参量(或守恒荷密度)微观算符统计平均值所满足的普遍方程, 原则上包含了所有高阶统计涨落; 相对于前者, 它相当于一个重正化以后的方程.

二、势条件和涨落-耗散定理

非平衡统计定常态的一个重要问题是是否存在一个序参量的势函数, 它确定序参量在定常态和定常态附近的行为? 在 CTPGF 的语言中, 我们曾给出了在定常态附近序参量及守恒荷密度的普遍方程为^[2,3]

$$\gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial Q_\beta(t)}{\partial t} = \frac{\delta \Gamma}{\delta Q_\alpha(t_+)} \Big|_{Q(t_+)=Q(t_-)=Q(t)} + J_\alpha(t), \quad (2.1)$$

其中所有泛函宗量 $Q_\beta(\tau)$ 都取在缓变时刻 t . 同时我们也证明了: 如果势条件

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}[t, \omega = 0; Q, \lambda] = 0 \quad (2.2)$$

得到满足, 就存在一个势函数 $F[t; Q, \lambda]$, 有

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta Q_\alpha(t_+)} \Big|_{Q(t_+)=Q(t_-)=Q(t)} = - \frac{\delta F}{\delta Q_\alpha(t)}. \quad (2.3)$$

而 (2.1) 式可写为

$$\gamma_{\alpha\beta} \frac{\partial Q_\beta(t)}{\partial t} = - \frac{\delta F}{\delta Q_\alpha(t)} + J_\alpha(t). \quad (2.4)$$

我们常将 (2.4) 式称为 TDGL.

对于 NESS, (2.2) 式与 t 无关. 利用文献 [1] 的结果, 容易证明 (2.2) 式. 即: 对文献 [1] 中 (3.41) 式和 (3.42) 式作傅里叶变换, 并取 $\omega = 0$ 分量, 再与文献 [1] 中 (3.40) 式比较, 就得到

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}[\omega = 0; Q, \lambda] = 0. \quad (2.5)$$

如果在 (2.1) 式中忽略除了 $Q_\alpha(t)$ 以外其他对时间的缓慢依赖, 那么显然 (2.5) 式就是势条件, 且势函数

$$F = F[Q, \lambda] \quad (2.6)$$

不再显含 t . 否则, 还需对系统作一“局部时间反演对称”假设: 在每一个缓变的宏观短微观长的时间间隔内, 系统满足定常态时间反演对称性质. 对于这样的系统, (2.5) 式就过渡到 (2.2) 式: 势条件得到满足.

现在, 我们来讨论 NESS 的涨落耗散定理. 从 CTPGF 的理论框架来看, 二阶推迟和超前格林函数(或顶点函数)描述了准粒子的能谱和耗散. 二阶关联函数(或顶点函数)描述了准粒子的统计分布, 在古典极限的语言中即系统的统计涨落. 所以关联格林函数的 Dyson 方程, 对于弱不均匀系统描述了准粒子的输运^[3,5,6], 对于统计定常态, 则给出了涨落和耗散的联系, 即 FDT.

按照文献 [3,6] 对于关联格林函数引入 $\mathcal{N}_{\alpha\beta}(t_1, t_2; Q(\tau), \lambda)$, 在统计定常态重新写

下文献 [1] 中 (3.23) 式, 有

$$G_{\alpha\beta}^c(\omega; Q, \lambda) = G_{\alpha\gamma}^R(\omega; Q, \lambda) \mathcal{N}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) - \mathcal{N}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) G_{\gamma\beta}^A(\omega; Q, \lambda), \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta}^c(\omega; Q, \lambda) &= \Gamma_{\alpha\beta}^R(\omega; Q, \lambda) \mathcal{N}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) - \mathcal{N}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) \Gamma_{\gamma\beta}^A(\omega; Q, \lambda) \\ &= -\mathcal{D}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) \mathcal{N}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) + \mathcal{N}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) \mathcal{D}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) \\ &\quad - i(\mathcal{A}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) \mathcal{N}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) \\ &\quad + \mathcal{N}_{\alpha\gamma}(\omega; Q, \lambda) \mathcal{A}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda)), \end{aligned} \quad (2.8)$$

其中 $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ 与准粒子占据数分布有关. 在平衡态

$$\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda) = \mathcal{N}^{eq}(\omega) \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.9)$$

$$\mathcal{N}^{eq}(\omega) = \text{cth} \frac{\omega}{2T}, \quad (2.10)$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{N}^{eq}(\omega) = \frac{2T}{\omega}, \quad (2.11)$$

其中 T 是平衡态温度. 将 (2.10) 和 (2.11) 式分别代入 (2.7) 和 (2.8) 式, 就可以分别得到平衡态 FDT 的量子形式和相应的 Rayleigh-Jeans 极限^[7]

$$\Gamma_{\alpha\beta}^c(\omega; Q, \lambda) = \text{cth} \frac{\omega}{2T} (\Gamma_{\alpha\beta}^R(\omega; Q, \lambda) - \Gamma_{\alpha\beta}^A(\omega; Q, \lambda)) \quad (2.12)$$

和

$$i\Gamma_{\alpha\beta}^c(\omega = 0; Q, \lambda) = 4T a_{\alpha\beta}, \quad (2.13)$$

其中 $a_{\alpha\beta}$ 是弛豫矩阵 $\gamma_{\alpha\beta}$ 的对称部分. 对格林函数 G 也有与 (2.12), (2.13) 式相对应的平衡态 FDT 表达式.

我们这里的主要兴趣是在具有时间反演对称的 NESS 上, 利用势条件 (2.5) 式, 求得 Rayleigh-Jeans 极限下 FDT 的形式.

既然我们感兴趣的主要是低频行为, 先讨论 $\mathcal{N}_{\alpha\beta}$ 在 $\omega \rightarrow 0$ 时的极限行为. 如果

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{N}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda) \sim \text{有限}, \quad (2.14)$$

那么, 在 (2.8) 式中 令 $\omega \rightarrow 0$, 并对矩阵元求迹, 考虑到 (2.5) 式和 (2.14) 式, 就有

$$i \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha\alpha}^c(\omega = 0; Q, \lambda) = 0. \quad (2.15)$$

从文献[8]可以知道, $i\Gamma_{\alpha\alpha}^c(\omega; Q, \lambda) \sim$ 系统的量子涨落; 所以, 对于稳定的统计定常态, 将要求 (2.15) 式左端是正定的 (从另一个角度上来看, 如果对系统的密度矩阵作无规相位近似, 或者当系统扩散矩阵 $\sigma_{\alpha\beta}$ 是正定的条件下, 都容易证明 (2.15) 式左端正定), 即 (2.15) 式不能成立. 所以, 有

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{N}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda) \rightarrow \frac{2}{\omega} T_{\alpha\beta}^{\text{eff}}(Q, \lambda), \quad (2.16)$$

其中 $T_{\alpha\beta}^{\text{eff}}$ 可看作有效温度的推广. 这样, (2.8) 式的低频极限为

$$\Gamma_{\alpha\beta}^c(\omega = 0; Q, \lambda) = -2i(a_{\alpha\gamma} T_{\gamma\beta}^{\text{eff}} + T_{\alpha\gamma}^{\text{eff}} a_{\gamma\beta}), \quad (2.17)$$

$$\mathcal{D}_{\alpha\beta}(\omega = 0; Q, \lambda) T_{\beta\gamma}^{\text{eff}} - T_{\alpha\beta}^{\text{eff}} \mathcal{D}_{\beta\gamma}(\omega = 0; Q, \lambda) = 0. \quad (2.18)$$

在求得 (2.17) 式的过程中, 我们又利用了势条件 (2.5) 式, 才有

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda)}{\omega} = \frac{\partial \mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} = a_{\alpha\beta}. \quad (2.19)$$

(2.17) 式就是 Rayleigh-Jeans 极限下 FDT 的一般形式. 在我们遇到的一些实际问题中, 常有

$$T_{\alpha\beta}^{\text{eff}} = T^{\text{eff}} \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.20)$$

这时, FDT (2.17) 式成为

$$i\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{C}}(\omega = 0; Q, \lambda) = 4T^{\text{eff}} a_{\alpha\beta}(Q, \lambda). \quad (2.21)$$

在 Rayleigh-Jeans 极限下, 也可将 (2.16) 式作为 $\mathcal{N}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda)$ 的近似表达式. 将它代入到 (2.7) 式, 按照 (2.20) 式, 再作傅里叶变换回到 t 表象, 就得到 FDT 的一个等价形式

$$i \frac{\partial G^{\text{C}}}{\partial t} = 2T^{\text{eff}}(G^{\text{R}} - G^{\text{A}}). \quad (2.22)$$

(2.22) 式即是临界动力学文献中常用的形式^[9].

三、广义 Onsager 关系

从 TDGL (2.4) 式看到, 弛豫矩阵 $\gamma_{\alpha\beta}$ 描述了序参量的弛豫. 按照文献 [1] 中 $\gamma_{\alpha\beta}$ 的定义 (3.24) 式, 以及对时间反演对称关系 (3.41) 式的傅里叶变换作微分 $\partial/\partial\omega$, 再利用二阶顶点函数的基本性质

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{R}}(\omega; Q, \lambda) = \Gamma_{\beta\alpha}^{\text{A}}(-\omega; Q, \lambda). \quad (3.1)$$

容易证明弛豫矩阵的时间反演对称关系为

$$\gamma_{\alpha\beta}(Q, \lambda) = \varepsilon_{\alpha}\varepsilon_{\beta}\gamma_{\beta\alpha}(\varepsilon Q, \varepsilon\lambda). \quad (3.2)$$

福克-普朗克方程的扩散系数 $\sigma_{\alpha\beta}$ 描写了统计定常态的统计涨落, 在文献 [2] 中证明了它的 CTPGF 表示为

$$\sigma_{\alpha\beta}(Q, \lambda) = \frac{i}{2} \gamma_{\alpha\alpha'}^{-1} \Gamma_{\alpha'\beta'}^{\text{C}}(\omega = 0, Q, \lambda) \gamma_{\beta'\beta}^{\text{T}-1}, \quad (3.3)$$

其中 T 表示矩阵的转置. 按照文献 [1] 中的 (3.23) 式和时间反演对称关系 (3.37), (3.41), (3.42) 式以及势条件, 即本文 (2.5) 式, 容易证得

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{C}}(\omega = 0; Q, \lambda) = \varepsilon_{\alpha}\varepsilon_{\beta}\Gamma_{\alpha\beta}^{\text{C}}(\omega = 0; \varepsilon Q, \varepsilon\lambda). \quad (3.4)$$

将 (3.2) 和 (3.4) 式代入 (3.3) 式, 并且当 $\gamma_{\alpha\beta}(Q, \lambda)$ 是对称的条件下, 就有

$$\sigma_{\alpha\beta}(Q, \lambda) = \varepsilon_{\alpha}\varepsilon_{\beta}\sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon Q, \varepsilon\lambda). \quad (3.5)$$

在一般情形下, $\gamma_{\alpha\beta}(Q, \lambda)$ 不对称, 则再考虑到 FDT (2.21) 式和文献 [1] 中 (3.25) 式, 也容易证得 (3.5) 式. 这即是首先由 Van Kampen 等人^[4] 得到的扩散系数时间反演对称关系.

NESS 还有一个性质是对外力作用的线性响应. 将 \hat{Q}_{α} : $\alpha = 1, 2, \dots, n$ 中的守恒荷密度算符分离出来, 并将它的空间坐标显写出来, 记为 $\hat{Q}_r(\mathbf{x}, t)$, $r = 1, 2, \dots, m$. 将与它相耦合的外参量也从 J_{α} : $\alpha = 1, 2, \dots, n$ 中分离出来, 相应地记为 $\delta J_r(\mathbf{x}, t)$, 并取它为一级小量. 其他外参量仍记为 J , 看作是定常态上恒定不变的物理外源. 这时, 具有时间反演对称的 NESS 由哈密顿量 $\hat{H}[J]$ 和密度矩阵 $\hat{\rho}(\lambda, J)$ 所描述, 它们分别满足文献 [1] 中 (2.9) 和 (2.24) 式; 而守恒荷密度 $Q_r(\mathbf{x}, t)$ 与相应外参量的耦合被处理作对于定常态

的微扰. 设 $\hat{j}_i(\mathbf{x}, t)$ 是与守恒荷密度 $Q_r(\mathbf{x}, t)$ 相对应的流矢量密度算符, 满足海森堡算符守恒方程

$$\frac{\partial \hat{Q}_r(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \hat{j}_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x^i} = 0, \quad (3.6)$$

其中 $i = 1, 2, 3$ 标记空间分量. 按照 CTPGF 的一般理论, 在定常态附近, 流密度矢量对于外参量 $\delta J_r(\mathbf{x}, t)$ 的线性响应可表示为^[3]

$$\delta \langle \hat{j}_i(\mathbf{x}, t) \rangle = -i \int d^4y \operatorname{Tr} \{ \hat{\rho}(\lambda, J) \vartheta(t_x - t_y) [\hat{j}_i(\mathbf{x}), \hat{Q}_i(\mathbf{y})] \} \delta J_i(\mathbf{y}), \quad (3.7)$$

$$\langle \hat{j}_i(\mathbf{x}) \rangle = \operatorname{Tr} \{ \hat{\rho}(\lambda, J) \hat{j}_i(\mathbf{x}) \}. \quad (3.8)$$

(3.7) 式中的 $\operatorname{Tr} \{ \cdots \}$ 因子与外力无关, 它是 4 维平移不变的. 定义流密度算符的统计格林函数

$$G_{rr}^{Rii}(x - y; J, \lambda) = -i \operatorname{Tr} \{ \hat{\rho}(\lambda, J) \vartheta(t_x - t_y) [\hat{j}_i(\mathbf{x}), \hat{j}_i(\mathbf{y})] \}, \quad (3.9)$$

并且在相互作用拉氏密度中, $\delta J_r(\mathbf{x})$ 相当于一种外界作用力的位势, 它随 \mathbf{x} 缓变, 取

$$-\nabla \delta J_r(\mathbf{x}, t) = \mathbf{X}_r = \text{常数} \quad (3.10)$$

作为外力. 这样, 利用 (3.6), (3.10) 和 (3.9) 式的因果表示 (Lehmann 表示)^[3], 容易将 (3.7) 式化为

$$\delta \langle \hat{j}_i(\mathbf{x}) \rangle = -\mathcal{L}_{rr}^{ii}(J, \lambda) X_r^i, \quad (3.11)$$

其中

$$\mathcal{L}_{rr}^{ii}(J, \lambda) = \frac{1}{i} \frac{\partial G_{rr}^{Rii}(p_0, \mathbf{p})}{\partial p_0} \Big|_{\substack{p_0=0 \\ \mathbf{p}=0}} \quad (3.12)$$

是按照文献 [1] 中 (3.27) 方式定义的流密度算符的响应矩阵.

容易论证, 薛定谔绘景中的流密度算符 $\hat{j}_i(\mathbf{x})$ 在时间反演下的变换为

$$\hat{j}_i(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{R} \hat{j}_i(\mathbf{x}) \hat{R}^\dagger = -\varepsilon_{rr} \hat{j}_i(\mathbf{x}). \quad (3.13)$$

考虑到 (3.13) 式和文献 [1] 中 (2.8) 式相当, (3.9) 和 (3.12) 式分别与文献 [1] 中 (3.9) 和 (3.27) 式相当, 采取对于 $r_{\alpha\beta}$ 求证 (3.2) 式完全相类似的步骤, 容易证明

$$\mathcal{L}_{rr}^{ii}(J, \lambda) = \varepsilon_r \varepsilon_r \mathcal{L}_{rr}^{ii}(\varepsilon J, \varepsilon \lambda). \quad (3.14)$$

(3.11), (3.12) 和 (3.14) 式即是平衡态附近著名的 Onsager 倒易关系在时间反演对称 NESS 附近的推广. 一般文献上常常将 (3.2), (3.5) 和 (3.14) 式统称为广义 Onsager 关系.

四、弛豫逆矩阵的对称分解和 TDGL

如果忽略势函数对缓变时间的明显依赖, 即取 (2.6) 式成立, 那么按照文献 [1] 中 (3.5) 和 (3.38) 式以及本文 (2.3) 式, 我们有

$$\frac{\delta F[Q, \lambda]}{\delta Q_\alpha} = \varepsilon_\alpha \frac{\delta F[\tilde{Q}, \tilde{\lambda}]}{\delta \tilde{Q}_\alpha} \Big|_{\substack{\tilde{Q}=\varepsilon Q \\ \tilde{\lambda}=\varepsilon \lambda}} \quad (4.1)$$

再考虑到 (3.2) 式, 容易证明 TDGL (2.4) 式可化为

$$\frac{\partial Q_\alpha}{\partial t} = -\gamma_{(\alpha, \beta)}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} - \gamma_{[\alpha, \beta]}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} + J. \quad (4.2)$$

按 (4.1) 式,

$$\gamma_{(\alpha, \beta)}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} = \frac{1}{2} \left\{ \gamma_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} + \varepsilon_\alpha \left[\gamma_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} \right]_{\lambda \rightarrow \varepsilon\lambda}^{Q \rightarrow \varepsilon Q} \right\}, \quad (4.3)$$

$$\gamma_{[\alpha, \beta]}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} = \frac{1}{2} \left\{ \gamma_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} - \varepsilon_\alpha \left[\gamma_{\alpha\beta}^{-1} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} \right]_{\lambda \rightarrow \varepsilon\lambda}^{Q \rightarrow \varepsilon Q} \right\}, \quad (4.4)$$

其中

$$\begin{aligned} \gamma_{(\alpha, \beta)}^{-1} &= \frac{1}{2} (\gamma_{\alpha\beta}^{-1} + \gamma_{\beta\alpha}^{-1}), \\ \gamma_{[\alpha, \beta]}^{-1} &= \frac{1}{2} (\gamma_{\alpha\beta}^{-1} - \gamma_{\beta\alpha}^{-1}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

(4.3) 式对应于通常福克-普朗克方程理论中的不可逆驱动项, (4.4) 式对应所谓的可逆驱动项^[4]. 有趣的是在时间反演对称 NESS 的 CTPGF 描述中, 它们分别被弛豫逆矩阵 γ^{-1} 的对称组合和反对称组合所对应.

先来考察 $\gamma_{\alpha\beta}^{-1}$ 的对称组合

$$\gamma_{(\alpha, \beta)}^{-1} = \gamma_{\alpha\alpha'}^{-1} \gamma_{(\alpha', \beta')} \gamma_{\beta'\beta}^{-1}. \quad (4.6)$$

按照文献 [1] 中 (3.25) 式, FDT (2.21) 式和 (3.3) 式, 即可将 (4.6) 式化为

$$\gamma_{(\alpha, \beta)}^{-1} = -\frac{1}{2T_{\text{eff}}} \sigma_{\alpha\beta}. \quad (4.7)$$

(4.7) 式说明描述系统不可逆运动的 γ^{-1} 的对称组合正比于系统的扩散系数, 它的比例系数是两倍有效温度的倒数.

对于 γ^{-1} 的反对称组合, 情况稍复杂一些. 如所周知, 时间平移不变的推迟和超前格林函数的傅里叶变换满足如下的 Lehmann 表示:

$$G_{\alpha\beta}^R(\omega; Q, \lambda) = \int \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{G_{\alpha\beta}^{-+}(\omega'; Q, \lambda) - G_{\alpha\beta}^{+-}(\omega'; Q, \lambda)}{\omega' - \omega - i\eta}, \quad (4.8)$$

$$G_{\alpha\beta}^A(\omega; Q, \lambda) = \int \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{G_{\alpha\beta}^{-+}(\omega'; Q, \lambda) - G_{\alpha\beta}^{+-}(\omega'; Q, \lambda)}{\omega' - \omega + i\eta}, \quad (4.9)$$

其中 G^R, G^A, G^{-+}, G^{+-} 分别由文献 [1] 的 (3.8), (3.10), (3.19) 和 (3.20) 式所确定的格林函数的傅里叶变换给出; 并且, 我们按照文献 [1] 中 (3.3) 和 (3.5) 式的方式将格林函数对 J 的依赖换成对于 Q 的依赖. 对于 (4.8) 和 (4.9) 式, 取 $\omega \rightarrow \infty$ 的极限, 就得到 $G^{R, A}$ 的渐近条件

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega G_{\alpha\beta}^R(\omega; Q, \lambda) = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega G_{\alpha\beta}^A(\omega; Q, \lambda) = if_{\alpha\beta}, \quad (4.10)$$

其中

$$f_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta}(Q, \lambda) = \int \frac{d\omega}{2\pi} (G_{\alpha\beta}^{-+}(\omega; Q, \lambda) - G_{\alpha\beta}^{+-}(\omega; Q, \lambda)) \quad (4.11)$$

$$\stackrel{J=0}{=} \frac{1}{i} \text{Tr} \{ \hat{\rho}_0(\lambda) [\hat{Q}_\alpha(t_1), \hat{Q}_\beta(t_2)] \}_{t_1=t_2}. \quad (4.12)$$

且按照格林函数的一般性质, 容易证明

$$f_{\alpha\beta} = -f_{\beta\alpha} = f_{\alpha\beta}^*. \quad (4.13)$$

利用文献 [1] 的 (3.21) 和 (3.22) 式, (4.10) 式也给出了 $\Gamma^{R,A}(\omega; Q, \lambda)$ 的渐近条件

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} f_{\alpha\gamma} \Gamma_{\gamma\beta}^R(\omega; Q, \lambda) = \lim_{\omega \rightarrow \infty} f_{\alpha\gamma} \Gamma_{\gamma\beta}^A(\omega; Q, \lambda) = i\omega \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.14)$$

根据 $\Gamma^{R,A}(\omega; Q, \lambda)$ 的因果性质^[3]和渐近条件 (4.14) 式, 我们可以对于

$$f_{\alpha\gamma} \mathcal{D}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) - \frac{1}{i} \omega \delta_{\alpha\beta}$$

和

$$f_{\alpha\gamma} \mathcal{A}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda)$$

写下一个减除一次的色散关系

$$\begin{aligned} f_{\alpha\gamma} \mathcal{D}_{\gamma\beta}(\omega; Q, \lambda) &= \frac{1}{i} \omega \delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha\gamma} \mathcal{D}_{\gamma\beta}(\omega = 0; Q, \lambda) \\ &+ \omega \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} p \frac{f_{\alpha\gamma} \mathcal{A}_{\gamma\beta}(\omega'; Q, \lambda)}{\omega'(\omega' - \omega)}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

对 (4.15) 式作微商 $\partial/\partial\omega$ 后再取 $\omega = 0$, 由文献 [1] (3.26) 式, 容易求得

$$f_{\alpha\gamma} d_{\gamma\beta} = \frac{1}{i} \delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha\gamma} \bar{\Delta}_{\gamma\beta}, \quad (4.16)$$

其中

$$\bar{\Delta}_{\alpha\beta} = \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} p \frac{\mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega'; Q, \lambda) - \mathcal{A}_{\beta\alpha}(\omega'; Q, \lambda)}{\omega'^2}. \quad (4.17)$$

在 (4.17) 式中, 我们利用了 $\mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda)$ 的普遍性质

$$\mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda) = -\mathcal{A}_{\beta\alpha}(-\omega; Q, \lambda). \quad (4.18)$$

按势条件 (2.5) 式和文献 [1] (3.25) 式, 有

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{A}_{\alpha\beta}(\omega; Q, \lambda) \rightarrow \omega a_{\alpha\beta}. \quad (4.19)$$

再考虑到 $a_{\alpha\beta}$ 关于 α, β 对称, 所以 (4.17) 式中积分收敛, 它确定的 $\bar{\Delta}_{\alpha\beta}$ 有限.

从 (4.16) 式中求解 $d_{\alpha\beta}^{-1}$, 得

$$d_{\alpha\beta}^{-1} = \{(I + if\bar{\Delta})^{-1}if\}_{\alpha\beta} = \{if(I + \bar{\Delta}if)^{-1}\}_{\alpha\beta}, \quad (4.20)$$

其中 f 和 $\bar{\Delta}$ 分别是 $f_{\alpha\beta}$ 和 $\bar{\Delta}_{\alpha\beta}$ 的矩阵符号. 将它代入 $r^{-1} = -(a - id)^{-1}$ 对 a 的展开式中, 容易求得

$$r_{[\alpha, \beta]}^{-1} = \{(I + if\bar{\Delta})^{-1}f\}_{\alpha\beta} + O(a^2). \quad (4.21)$$

$$\approx f_{\alpha\beta}. \quad (4.22)$$

在文献中 $r_{[\alpha, \beta]}^{-1}$ 通常被取作为 $f_{\alpha\beta}$, 但是从我们的讨论中可以看清, 这只是一个近似. 它不仅忽略了耗散的高阶效应, 而且也忽略了色散积分 $\bar{\Delta}_{\alpha\beta}$.

将 (4.7) 和 (4.22) 式代入 TDGL (2.4) 式, 并取 J 为零, 就得到 TDGL 的一个更为熟知的形式

$$\frac{\partial Q_\alpha}{\partial t} = \frac{1}{2T_{\text{eff}}} \sigma_{\alpha\beta} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta} - f_{\alpha\beta} \frac{\delta F}{\delta Q_\beta}. \quad (4.23)$$

对于许多实际问题, $Q_\alpha: \alpha = 1, 2, \dots, n$ 中的守恒荷密度记为 $Q_r: r = 1, 2, \dots, m$ 是

某一个李群的生成元,而其它的序参量则是这个李群的一个或多个线性不可约表示.在这种情况下,

$$f_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta}^r Q_r, \quad (4.24)$$

其中 $f_{\alpha\beta}^r$ 或者是李群的结构常数,或者是生成元的表示矩阵元.这时,TDGL (4.23)式和临界动力学文献中所用的“TDGL”,具有完全相同的形式.在更为一般的情况下,CTPGF 导出的 TDGL (4.23)式与临界动力学文献中所采用的形式有一些差别,我们将在以后进一步讨论这个问题.但是,正如我们在序言中已经指出的那样,通常福克-普朗克-朗之万理论中的“TDGL”是随机变量满足的随机微分方程.我们所得到的 CTPGF 理论中的 TDGL 则是序参量微观算符统计平均值所满足的普遍方程,原则上包含了所有的高阶统计涨落,因此这两种方程的形式在原则上可能是不一样的.

五、结 束 语

在这两篇文章中,作为一个非平衡微观量子统计理论,我们试图把 CTPGF 和微观可逆性原理结合起来,把平衡态附近的一些基本性质推广到了非平衡统计定常态附近,比较系统地对非平衡统计定常态附近的一些普遍性质进行了讨论.我们讨论了一类具有时间反演对称的统计定常态.它既可以是平衡态,也可以是非平衡定常态. CTPGF 的时间反演对称表述提供了一个统一讨论热平衡和非平衡定常态的可能性.在定常态上,我们既证明了序参量广义自由能势函数的存在性,也给出了广义涨落耗散定理在 Rayleigh-Jeans 极限下的一个表达式.我们得到了非平衡统计定常态附近推广的 Onsager 线性理论,也得到了描述序参量(守恒荷密度)非线性运动 TDGL 的一个普遍形式.这样,我们就从一个统一的微观理论框架得到了文献中用半唯象非平衡统计理论讨论临界动力学时赖以出发的方程和关系.

十分感谢郝柏林同志,他对这两篇文章的大部份内容和我们进行了深入的讨论.

参 考 文 献

- [1] 周光召、苏肇冰,物理学报 **30**(1981),164.
- [2] Zhou Guang-zhao, Su Zhao-bin, Yu Lu, Hao Bai-lin, ASITP-79003; 周光召、苏肇冰、郝柏林、于录,物理学报, **29**(1980), 961. 周光召、郝柏林、于录,物理学报, **29**(1980),969.
- [3] 周光召、苏肇冰,统计物理进展,第五章,科学出版社,即将出版.
- [4] N. Van Kampen, *Physica*, **23**(1957), 707, 816; U. Uhlhorn, *Arkiv foer Fysik*, **17**(1960), 361; R. Graham, H. Haken, *Z. Phys.*, **243**(1971), 289; **245**(1971), 141.
- [5] L. Kadanoff, G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* Benjamin N. Y. (1962); D. Dubois, In "Lectures in Theoretical Physics," Vol. IXC, eds. W. Brittin, et al., Gordon and Breach, N. Y. (1961).
- [6] 周光召、苏肇冰,高能物理与核物理, **3**(1979),314.
- [7] R. Kubo, *Rep. Progr. Phys.*, **29**(1966), 255.
- [8] 周光召、苏肇冰,物理学报, **29**(1980), 618.
- [9] 例如 S. K. Ma, G. Mazenko, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 4077; C. DeDominicis, L. Peliti, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 353.

TIME REVERSAL SYMMETRY AND NON-EQUILIBRIUM STATISTICAL STATIONARY STATES (II)

ZHOU GUANG-ZHAO SU ZHAO-BIN

(Institute of theoretical Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

This is the 2nd part of our discussion on time reversal symmetry applied to the non-equilibrium statistical stationary states (NESS) from a microscopic quantum statistical point of view. With the application of the main results of I, a systematic investigation on the general properties of the NESS is given. For systems invariant under time reversal, the existence of a generalized potential and the fluctuation-dissipation theorem in the low frequency limit are established in the NESS. The Onsager's reciprocity relations for the local thermodynamical equilibrium systems are also generalized to that for the NESS invariant under time reversal symmetry. Finally, the time dependent Ginzburg-Landau equations for order parameters and conserved densities have been expressed in a general form with time irreversible and reversible parts similar to that met in the literatures studying critical dynamics.