

流出现,和一般向列液晶相反, $\Delta x < 0$  为负值,所以这类液晶分子在磁场中的取向是分子长轴垂直于磁场。这个现象已被 Pohl 等实验所证实<sup>[6]</sup>,胆甾型液晶(胆甾醇衍生物)和部分溶致液晶的抗磁各向异性均为负值<sup>[11]</sup>。

然而,液晶分子结构中所含偶极矩大小和方向是与液晶抗磁各向异性无关。

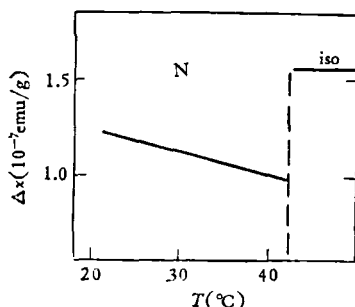


图8 MBBA 液晶抗磁各向异性与温度关系图

液晶抗磁各向异性  $\Delta x$  与环境温度相关,

随温度增加而减小(图8),在相变点有明显突跃。液晶的其他物理参数,如弹性常数、有序参数,亦和分子结构紧密相关,但目前还没有明确的解释,尚待研究。

### 参 考 文 献

- [1] G. Meier et al., *Application of Liquid Crystals*, Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, (1975), 9.
- [2] W. H. Dejeu et al., *Philips Technical Review*, **37**-5-6(1977), 131.
- [3] W. H. Dejeu and J. Van der Veen, *Phys. Lett.*, **44A**-4(1973), 227.
- [4] M. Shadt, *J. Chem. Phys.*, **56**-4(1972), 1494.
- [5] L. R. Pohe et al., *Phys. Lett.*, **60A**-5(1977), 421.
- [6] L. R. Pohe et al., *Phys. Lett.*, **65A**-2(1978), 169
- [7] G. Heppka et al., *Z. Naturforsch.*, **A31**-12(1976), 1700.
- [8] M. Bock et al., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **45**-3 4(1978), 221.
- [9] A. Ballar et al., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **42**-3-4 (1978), 230.
- [10] Gerald R. Van Hecke et al., *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **45**-1-2(1978), 1.
- [11] E. Sackmann et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **89** 23 (1976), 5981.

## 非平衡统计计算方法简介

余 明 保

(焦作矿务局子弟学校)

一

一个处于热平衡状态的体系当受到外界如电场、磁场、温度差等的扰动时,将离开原来的平衡状态而处于非平衡状态,体系中将出现电流、热流、扩散流...等输运现象。若外界扰动不太大,这些流与外界扰动或“力”间的关系是线性的,即所谓线性非平衡过程。可以把统计热力学推广到线性非平衡过程,即热力学分支。

当外界扰动增强到一定阈值时,体系失稳,过渡到一种新的、有结构的状态,叫耗散结构。这方面的研究方兴未艾。

外界加于体系的扰动可分为力学性的和非力学性的。对力学性扰动,可以在哈密顿量中增加一个体系与外场的相互作用项来描述: $H = H_0 + H_i$ ,  $H_0$  是无扰动时体系的哈密顿量,

$$H_i = - \sum_i a_i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}, t)$$

是体系与外场  $\varphi_i(\mathbf{x}, t)$  的相互作用能,  $a_i(\mathbf{x})$  描

述体系本身的某种性质,如粒子的电量、磁矩等。在此情况下,人们感兴趣的是外场的存在与变化对体系产生的影响。例如,某个物理量、能量、极化向量、磁化强度等的平均值如何随外场的变化而变化。一般来说,知道了体系的初始状态,就可以根据上述哈密顿量 $H$ 求解刘维方程来决定体系的分布函数(经典体系)或统计算符(量子体系)的时间演变,从而计算出所求物理量平均值的时间变化。这就是响应理论<sup>[1]</sup>。若扰动较小, $H_1 \ll H_0$ ,取线性近似,即线性响应理论。根据涨落-耗散定理,响应由有关物理量在无扰动时的涨落决定。这使人们可以用统计力学原理来处理线性非平衡体系。

有些扰动不能归结为哈密顿量中的附加项,例如,由体系内部不均匀性所致的扰动,像温度差、密度差等。这类扰动叫热扰动,情况较为复杂,不同作者对它的处理方法颇为不同。

Боголюбов 等最先提出在非平衡体系中存在几个不同的弛豫时间。粒子间的碰撞时间 $t_1$ ,相应于粒子间相互作用的空间尺度;粒子碰撞后自由飞行的时间 $t_2$ ,相应于粒子的平均自由程;以及体系局部量的弛豫时间 $t_3$ ,相应于体系的宏观尺度。

长时间以来,人们用玻耳兹曼方程,在坐标-动量空间中研究稀薄气体分子分布函数的暂态演变。玻耳兹曼只考虑二体散射,在分子混沌的假定下写出了方程的碰撞项。事实上,若假定 $t_1 \ll t_2$ ,可以由刘维方程得到玻耳兹曼方程。若再假定 $t_2 \ll t_3$ ,则可用 Enskog 方法由玻耳兹曼方程导出流体方程,并计算出导热系数、粘滞系数等动力系数。

以玻耳兹曼方程为范例,人们广泛使用运动方程方法研究非平衡过程,包括接近平衡和远离平衡状态的体系。在推导运动方程时,对碰撞项通常只做最低级近似处理,认为引起碰撞的相互作用很弱,或认为它是高度定域化的。更一般的 master 方程也要求类似条件。这类方法的应用范围甚广,但应注意它是理想化的。Zwanzig 由刘维方程出发,利用投影算符技术,得到了广义的 master 方程,给出约化密度矩阵

的时间演变。它是严格的,但难于求解,用于具体问题时应做近似处理。

随机过程理论近年来发展很快,它起源于布朗运动的研究,且可追溯到爱因斯坦。他建立了布朗粒子迁移率和扩散系数间的关系。后来 Kirkwood 和 Green 假定随机过程是马尔科夫的,得到了动力系数和时间关联函数间的关系。Mori<sup>[2]</sup>使用投影算符方法研究布朗粒子的运动,得到广义朗之万方程,即在刘维空间中算符矢量的运动方程。这个方程是非马尔科夫的,含有一项无规力。当无规力弛豫较快而算符矢量弛豫较慢时,可做马尔科夫近似。Grabert<sup>[3]</sup>证明了 Mori 的广义朗之万方程与 Zwanzig 的广义 master 方程等价,它们可以互相变换,其间关系正如海森伯表象与薛定谔表象一样。

昂色格假定涨落的衰减遵循相应宏观变量的弛豫规律。考虑到运动方程的微观可逆性,他建立了动力耗散问题的倒易关系。后来,有人用他的方法构成了不可逆过程的热微扰理论,并研究了动力系数的时空色散性质。

假定在弱非平衡状态下,在宏观小,微观大的局部体积内,在 $t_2$ 时间尺度下,达到了平衡分布。它的表述形式类似于吉布斯分布,但参量是时间、空间坐标的函数。体系在建立了这种局部平衡分布后,在 $t_3$ 时间范围内,逐渐趋于宏观尺度的整体平衡分布,这个弛豫时间 $t_3$ 比建立局部平衡的时间 $t_2$ 长得多。Mori 以此局部平衡分布为初始条件,解刘维方程来求体系分布函数或统计算符的时间演进,再进而计算动力系数,后来他又用投影算符技术改进了他的结果。

由于体系内部不均匀性造成的某些输运过程也可以由外场产生,从而把热扰动看成是假设的赝力学扰动,而用线性响应理论来进行计算。这时,可以先计算体系对引起已知非平衡状态的赝力学扰动的敏感性,再利用涨落-耗散定理,并取扰动的零波矢、零频率极限来求动力系数或唯象系数。虽然用这种方法得到了合理的结果,但它带有明显的人为性质,而且并非任何热扰动都可以用力学扰动来比拟。

MacLennan 研究了一个开系<sup>[4]</sup>, 引入非守恒性外力来描述包围体系并与之接触的热源、粒子源和活塞对体系产生的影响, 得到一个分布函数。Зубарев 引入局部积分, 构成了体系的非平衡统计算符<sup>[5]</sup>, 其结果和 MacLennan 的相同。这类方法是吉布斯的平衡态统计系综在非平衡过程中的自然推广。

此外, 还可以举出如双时格林函数, 用闭路积分表示的非平衡格林函数等方法。下面简单介绍非平衡统计算符方法。

## 二

为了研究热扰动引起的非平衡过程, Зубарев 主要依据以下两点, 设计了一个合理的非平衡统计算符。一是前述的 Боголюбов 等关于非平衡体系中存在着不同弛豫时间的概念, 二是吉布斯的平衡态统计系综方法, 并把后者推广到非平衡态。

考虑一个有任意初始分布的体系。开始时体系远离平衡态, 为描述此状态, 需要单粒子、双粒子以至多粒子的大量分布函数。这种状态很快过去, 分布函数很快整步化。当所有的分布函数可以用单粒子分布函数完全确定时, 体系达到运动学阶段, 相应于时间尺度  $t_2$ 。这时, 由刘维方程出发可得到单粒子分布函数的运动方程。在  $t_3$  的时间范围内, 描述体系状态的参量数目进一步减少, 即流体力学阶段。这时体系可用流体力学方程描述, 分布函数只通过参量而依赖于时间, 由局部平衡分布趋向平衡分布。

吉布斯由刘维方程出发, 构成了他的平衡态统计算符。按照刘维方程, 若统计算符只是运动积分——能量和粒子数的函数, 那么, 统计算符或分布函数的时间导数为零。

Зубарев 把这个方法推广来构成非平衡统计算符。考虑一个有  $l$  种组分的量子体系, 其宏观状态由逆温度  $\beta(\mathbf{x}, t) = 1/k_B T(\mathbf{x}, t)$ ,  $k_B$  是玻耳兹曼常数, 质心运动速度  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  和各组分的化学势  $\mu_i(\mathbf{x}, t)$  的时空分布决定。它们是

时空坐标的已知函数。或把这些参量场用简化符号  $\{F_m(\mathbf{x}, t)\}$  表示:

$$F_0(\mathbf{x}, t) = \beta(\mathbf{x}, t),$$

$$F_1(\mathbf{x}, t) = -\beta(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}(\mathbf{x}, t),$$

$$F_{i+1}(\mathbf{x}, t) = -\beta(\mathbf{x}, t) \left[ \mu_i(\mathbf{x}, t) - \frac{m_i}{2} V^2(\mathbf{x}, t) \right],$$

$$(m = 0, 1, \dots, l+1; i \geq 1).$$

和这些参量相对应的是以下基本力学量

$$\{P_m(\mathbf{x})\}: P_0(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x}), P_1(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x}),$$

$$P_{i+1}(\mathbf{x}) = n_i(\mathbf{x}),$$

即体系的能量密度、动量密度和各组分的粒子数密度。它们不显含时间, 但随系综的演变而间接依赖时间  $\tau$ :

$$P_m(\mathbf{x}, \tau) = e^{iH\tau/\hbar} P_m(\mathbf{x}) e^{-iH\tau/\hbar}.$$

我们假定这样选择的参量  $\{F_m(\mathbf{x}, t)\}$  可以完全决定体系的状态。

注意到前述的不同弛豫时间, 假定所考虑的体系已在较短时间  $t_2$  内达到了局部平衡分布, 体系通过参量  $F_m(\mathbf{x}, t)$  而依赖时间。我们在远大于  $t_2$  的时间范围  $t_3$  内求刘维方程

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] \quad (1)$$

的积分。这里  $\partial/\partial t$  指对出现在  $\rho$  中的参量  $F_m(\mathbf{x}, t)$  里的时间求导数。刘维方程对处于运动学阶段或流体力学阶段的体系均成立。

用下式定义当系综因体系哈密顿量  $H$  而随时间演进时, 乘积  $F_m(\mathbf{x}, t)P_m(\mathbf{x})$  的“不变部分”

$$B_m(\mathbf{x}, t) = e \int_{-\infty}^0 d\tau e^{e\tau} F_m(\mathbf{x}, t + \tau) P_m(\mathbf{x}, \tau), \quad (e \rightarrow 0), \quad (2)$$

这里积分变量  $\tau$  指因系综变化而间接依赖于时间,  $t$  指因参量  $F_m(\mathbf{x}, t)$  而直接依赖于时间, 在取热力学极限后再令  $e \rightarrow 0$ 。易于证明, (2) 是满足刘维方程的, 即

$$i\hbar \frac{\partial B_m(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = [H, B_m(\mathbf{x}, t)].$$

若取  $\rho$  为  $B_m(\mathbf{x}, t)$  的泛函, 那么  $\rho$  也满足刘维方程。我们取  $\rho$  为  $B_m$  的以下形式的泛函:

$$\rho(t) = Q^{-1} e^{-\sum_m \int d\mathbf{x} B_m(\mathbf{x}, t)}, \quad (3)$$

$Q^{-1}$  是归一化系数, 由  $T_r \rho = 1$  决定。把(2)代

入(3),分部积分,得

$$\rho(t) = Q^{-1} e^{-\sum_m \int d\mathbf{x} \{ F_m(\mathbf{x}, t) P_m(\mathbf{x}) - \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\sigma\tau} [ F_m(\mathbf{x}, t+\tau) \frac{\partial P_m(\mathbf{x}, t)}{\partial \tau} + \frac{\partial F_m(\mathbf{x}, t+\tau)}{\partial \tau} P_m(\mathbf{x}, \tau) ] \}} \quad (4)$$

这就是体系的非平衡统计算符。当  $\sigma \rightarrow 0$  时它满足刘维方程(1),描述体系的变化,而局部平衡分布  $\rho_l(t) = Q_l^{-1} e^{-\sum_m \int d\mathbf{x} F_m(\mathbf{x}, t) P_m(\mathbf{x})}$  不满足刘维方程,近似描述体系的变化。

也可以用取信息熵 (information entropy) 极值的条件得到非平衡统计算符的表达式。或者求解带边界条件的刘维方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho, H] = -\sigma(\rho - \rho_q),$$

得到如下形式的非平衡统计算符:

$$\rho(t) = \rho_q \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\sigma\tau} \rho_q(t + \tau, \tau), \quad \sigma \rightarrow 0, \quad (5)$$

这里  $\rho_q$  是准平衡分布,近似描述处于运动学阶段的体系。

还要求非平衡统计算符(4)满足以下条件

$$\langle P_m(\mathbf{x}) \rangle = \langle P_m(\mathbf{x}) \rangle_l, \quad (6)$$

即基本力学量  $P_m(\mathbf{x})$  对非平衡统计算符的平均值等于其对局部平衡统计算符的平均值。这对保证所选择的热力学参量  $F_m(\mathbf{x}, t)$  和与之相应的力学量  $\langle P_m(\mathbf{x}) \rangle$  间满足所需的热力学关系是充分的。

(4)式给出体系非平衡统计算符的一般形式,在不同问题中可根据具体情况加以改写。用前述不同方法得到的非平衡统计算符是等价的。

### 三

用非平衡统计算符方法可以方便地讨论许多非平衡问题。以下就处于流体力学阶段和运动学阶段的非平衡体系各举一例。

考虑前述体系中发生的输运过程。设此体系处于流体力学阶段,故可用理想流体的守恒

方程

$$\frac{\partial P_m(\mathbf{x})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_m(\mathbf{x}) = 0, \quad (7)$$

消去(4)式中的  $\partial P_m(\mathbf{x})/\partial t$ 。这里  $\mathbf{j}_m(\mathbf{x})$  ( $m = 0, 1, \dots, l+1$ ) 分别表示能流密度向量,胁强张量和各组分的粒子数流密度向量。在理想流体近似下,还可以把  $\partial F_m/\partial t$  用  $\nabla F_m$  表出:

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \beta = \beta \left( \frac{\partial \langle p(\mathbf{x}) \rangle}{\partial \langle H(\mathbf{x}) \rangle} \right)_{\langle n_i(\mathbf{x}) \rangle} \nabla \cdot \mathbf{v},$$

$$\frac{\partial \langle \beta \mu_i \rangle}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \langle \beta \mu_i \rangle$$

$$= -\beta \left( \frac{\partial \langle p(\mathbf{x}) \rangle}{\partial \langle n_i(\mathbf{x}) \rangle} \right)_{\langle H(\mathbf{x}) \rangle} \nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \frac{\langle H(\mathbf{x}) \rangle + \langle p(\mathbf{x}) \rangle}{\beta \langle \rho(\mathbf{x}) \rangle} \nabla \beta - \sum_i \frac{\langle n_i(\mathbf{x}) \rangle}{\beta \langle \rho(\mathbf{x}) \rangle} \nabla \langle \beta \mu_i \rangle,$$

式中  $\langle p(\mathbf{x}) \rangle$  和  $\langle \rho(\mathbf{x}) \rangle$  是压强和密度的平均值。把(7)和(8)代入(4),整理后,可把  $\rho$  的指数部分第二项写成“流”和“力”的积的形式:

$$\rho = Q^{-1} e^{-L-M}, \quad (9)$$

其中

$$L = \sum_m \int d\mathbf{x} F_m(\mathbf{x}, t) P_m(\mathbf{x}),$$

$$M = - \sum_m \int d\mathbf{x} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\sigma\tau} \mathbf{J}_m(\mathbf{x}, \tau) \cdot \mathbf{X}_m(\mathbf{x}, t + \tau). \quad (10)$$

$J_0$  是热流,  $J_1$  是粘滞流,  $J_{i+1}$  是不同组分的扩散流;  $\mathbf{X}_0 = \nabla \beta$ ,  $\mathbf{X}_1 = -\beta \nabla \mathbf{v}$ ,  $\mathbf{X}_{i+1} = -\nabla \langle \beta \mu_i \rangle$ , ( $i \geq 1$ ), 是因温度梯度、速度梯度和化学势梯度而表现出来的热力学“力”。由于这些“力”的存在,体系内出现了热力学“流”,即输运过程。

若这些“力”较小,  $M \ll L$ , 则可把  $\rho$  按  $M$  展开,只取到线性项,并用来取各“流”的平均值。所得结果是推迟的和非定域的。若进一步略去推迟性和非定域性,得各“流”和“力”间的线性关系:

$$\langle \mathbf{J}_n(\mathbf{x}) \rangle = \langle \mathbf{J}_n(\mathbf{x}) \rangle_l + \sum_k L_{nk} \mathbf{X}_k(\mathbf{x}, t), \quad (11)$$

其中

$$L_{nk}(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\sigma\tau} (\mathbf{J}_n(\mathbf{x}), \mathbf{J}_k(\mathbf{y}, \tau)), \quad (12)$$

是唯象系数或动力系数。

$$(P, Q) \equiv \int_0^1 d\lambda \langle P(e^{-\lambda Q} Q e^{\lambda Q} - \langle Q \rangle) \rangle$$

是量子关联函数。由(11)和(12)可以进而讨论各个具体的输运过程和动力系数。如热流为

$$\langle J_0(\mathbf{x}) \rangle = -L_{00} \left( \frac{\nabla T}{T^2} \right) - \sum_i L_{0i} \nabla \left( \frac{\mu_i}{T} \right),$$

第*i*组分的扩散流为

$$\langle J_i(\mathbf{x}) \rangle = -L_{i0} \left( \frac{\nabla T}{T^2} \right) - \sum_j L_{ij} \nabla \left( \frac{\mu_j}{T} \right)$$

等。以上结果是在理想流体近似,以及  $M \ll L$  的假定下得到的。动力系数(12)与用其他方法所得结果大致相同,有些结果则较好。这是可以预料的,因为在推导过程中,几种方法都是从刘维方程出发,假定分布函数只通过参量场依赖于时间,以及  $t_3 \gg t_2$ 。为得到更好的结果,可采用较细致的近似处理。ТИШЕНКО 引用推广的 Kawasaki-Gunton 投影算符,从非平衡统计算符中消去  $\partial F_m(\mathbf{x}, t)/\partial t$ , 得到关于不可逆流的非线性积分方程组以及输运关系,推广了(11)<sup>[6]</sup>。

对一个空间均匀,粒子间相互作用较弱的处于运动学阶段的非平衡体系,可以用如下的哈密顿量描述:  $H = H_0 + H_1$ 。  $H_0$  是自由粒子哈密顿量,  $H_1$  是粒子间相互作用哈密顿量,  $H_1 \ll H_0$ 。在一个不太短的时间范围  $t_2$  里,体系处于运动学阶段,可用一组量  $\langle P_k \rangle$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) 来描述。例如,可以取  $P_k = a_k^+ a_k$ , 这里,  $a_k^+$ 、 $a_k$  分别是动量为  $k$  的粒子的产生、消灭算符,则  $\langle P_k \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle$  是态  $k$  的分布函数。其运动方程为

$$\frac{\partial P_k}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [P_k, H_0] + \frac{1}{i\hbar} [P_k, H_1]. \quad (13)$$

此体系的非平衡统计算符由(4)给出。把(13)代入(4)并消去  $dF_m(\mathbf{x}, t)/dt$ , 整理后得

$$\rho = Q^{-1} e^{-A - B_1 - B_2},$$

$$A = \sum_k F_k(t) P_k,$$

$$B_1 = - \sum_k \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\tau} \frac{1}{i\hbar} \cdot [P_k(\tau), H_1(\tau)] F_k(t + \tau), \quad (14)$$

$$B_2 = - \sum_{k,i} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\tau} \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial F_k(t + \tau)}{\partial \langle P_i \rangle} \cdot \langle [P_i, H_1] \rangle^{t+\tau} P_k(\tau),$$

这里  $\langle \dots \rangle^{t+\tau}$  表示在时刻  $t + \tau$  对统计算符(4)所取的平均值。若  $H_1 \ll H_0$ , 则  $B_1, B_2 \ll A$ , 把算符  $\rho$  按  $B_1 + B_2$  展开,只取到线性项,并用以对(13)式第二项取平均,得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle P_k \rangle}{\partial t} &= S_k^{(0)} + S_k^{(1)} + S_k^{(2)}, \\ S_k^{(0)} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, H_0] \rangle, \\ S_k^{(1)} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [P_k, H_1] \rangle_q, \\ S_k^{(2)} &= - \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 d\tau e^{\tau} \left\langle \left[ H_1(\tau), [H_1, P_k] \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \hbar \sum_i P_i \frac{\partial S_k^{(1)}}{\partial \langle P_i \rangle} \right] \right\rangle_q, \quad (15) \end{aligned}$$

$\langle \dots \rangle_q$  是对运动学阶段的准平衡统计算符取平均。

例如,非理想量子气体的哈密顿量为

$$H = H_0 + H_1,$$

$$H_0 = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_k^+ a_k,$$

$$H_1 = \frac{1}{2v} \sum_{k_1, k_2, k'_1, k'_2} \phi(k_1 k_2 | k'_1 k'_2) a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ a_{k'_1} a_{k'_2},$$

$$k_1 + k_2 = k'_1 + k'_2,$$

$$\phi(k_1 k_2 | k'_1 k'_2) = \frac{1}{2} [U(k_1 - k'_1) \pm U(k_1 - k'_2)],$$

$$U(k) = \int \phi(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x}$$

是粒子间相互作用能的傅里叶分量。取

$$P_k = a_k^+ a_k = n_k,$$

易证  $[n_k, H_0] = S_k^{(0)} = S_k^{(1)} = 0$ , 再算出  $S_k^{(2)}$ , 得到量子气体的运动方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_k}{\partial t} &= - \sum_{k_1, k', k'_1} \omega(k k_1 | k' k'_1) [\bar{n}_k \bar{n}_{k_1} (1 \mp \bar{n}_{k'}) \\ &\quad \cdot (1 \mp \bar{n}_{k'_1}) - (1 \mp \bar{n}_k) (1 \mp \bar{n}_{k_1}) \bar{n}_{k'} \bar{n}_{k'_1}], \quad (16) \end{aligned}$$

其中  $\bar{n}_k = \langle n_k \rangle_q$ ,

$$\begin{aligned} \omega(k k_1 | k' k'_1) &= \frac{4\pi}{\hbar} |\phi(k k_1 | k' k'_1)|^2 \delta(k \\ &\quad + k_1 - k' - k'_1), \end{aligned}$$

正号为玻色子气体,负号为费米子气体。得到(16)式也就是给出了散射积分,与用其他方法所得结果一致<sup>[7]</sup>。

非平衡统计算符方法还广泛应用于其他非平衡过程,如弛豫过程、化学反应速率的计算<sup>[5]</sup>、布朗运动<sup>[8]</sup>、涨落的动力理论<sup>[9]</sup>、流体方程<sup>[6,10]</sup>等。

以上简单介绍了非平衡统计算符方法及其应用。算符(4)满足刘维方程,描述实际的非平衡过程。由于推导过程中只要求体系满足热力学极限,未做近似处理,因而所得结果(4)是严格的,应用范围较广,可描述处于运动学阶段或流体力学阶段的非平衡体系。另一方面,因为它所提供的是个一般的方法,对实际问题,还要根据具体情况把(4)加以改写,并做适当的近似处理,所得结果也与处理方法有关。

非平衡统计算符方法把吉布斯统计力学推

广到非平衡过程,至少在线性非平衡范围内如此<sup>[11]</sup>。至于在远离平衡态的非线性范围内是否有效,尚难断言,有待于今后的工作。

### 参 考 文 献

- [1] R. Kubo, *J. Phys. Soc., Japan*, **12**(1957), 570.
- [2] H. Mori, *Prog. Theo. Phys.*, **33**(1965), 424.
- [3] H. Grabert, *Z. Phys.*, **B, 26**(1977), 79.
- [4] J. A. MacLennan, Jr., *Phys. Fluids*, **4**(1961), 1319; *Advan. Chem. Phys.*, **5**(1963), 261.
- [5] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Consultants Bureau, (1974).
- [6] С. В. Тищенко, *ТМФ*, **26** (1976), 96.
- [7] Л. Р. Кадановф, Г. Ваум, *Quantum Statistical Mechanics*, (1962).
- [8] И. П. Борокин, Т. Н. Хазанович, *ТМФ*, **21** (1974), 130.
- [9] О. Г. Мишнев, *Изв. выс. учеб. завед., Физика*, No. 5, (180) (1977), 145.
- [10] М. Ф. Сергеев, *ТМФ*, **21**(1974), 402.
- [11] R. Kubo, *Prog. Theo. Phys., Supplement*, **64** (1978), 1.

## 波 导 气 体 激 光 器

程 泽 东

(成都电讯工程学院)

### 一、概 述

自从1971年贝尔实验室的P. W. Smith<sup>[1]</sup>作成第一台波导He-Ne激光器以来,波导气体激光器有了很大的发展<sup>[2-5]</sup>,特别是波导CO<sub>2</sub>激光器已经获得很宽的频率调谐范围,在激光通信、激光雷达、激光光谱学和污染检测等应用中是很有用的一种激光器。

在图1中画出了普通激光器和波导激光器的原理示意图。在普通的激光器中,光在两个反射镜之间完全按照自由空间的传播规律传播,而在波导激光器的两个反射镜之间的某些部分,光是在波导中传播的。因此,普通激光器谐振腔的理论对波导激光器已不适用。

波导激光器的工作物质有气体、液体、固体

物理

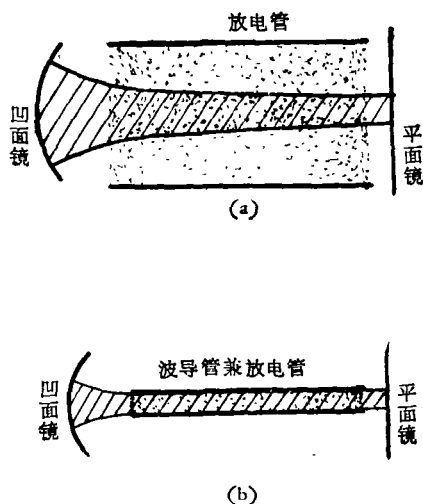


图1 波导激光器与普通激光器原理图  
(a) 普通气体激光器; (b) 波导气体激光器