

文章编号: 1007-4627(2004)02-0083-03

多体体系输运理论——反常扩散*

卓益忠

(中国原子能科学研究院, 北京 102413)

摘要: 主要介绍最近在多体体系输运理论的一些模型和动力学等工作, 特别是一些有关反常扩散方面的工作结果.

关键词: 输运理论; 反常扩散; 弹道扩散

中图分类号: O41 **文献标识码:** A

布朗运动是一种最简单的随机行为, 在自然界(物理、化学与生物等)中普遍存在, 并作为唯象的多体输运理论被广泛应用于描述原子核大振幅运动(核裂变、核融合). 布朗运动的模型的建筑基础是在对任意一个多体体系, 可以把一部分我们所关心的自由度作为系统来重点研究, 而把其余的自由度简单地看作热浴来处理. 布朗运动可以用朗之万方程或者福克-普朗克方程来描述. 我们曾经用布朗运动来研究核裂变做过若干工作.

1940 年, Kramers^[1] 第一次提出在相空间中的福克-普朗克方程, 用以描述化学反应的动力学过程. 在 20 世纪 70 年代末和 80 年代初, 开始将此方程用以研究核裂变, 我们是最早的研究者之一^[2]. 有关这方面的研究, 至今仍是一个活跃的领域. 在研究核裂变中, 一个核心问题是裂变速率的问题. 通常在数值模拟时, 裂变几率是按照鞍点的首通时间来计算, 但由此所计算的时间太短. 最近 Hofmann 等^[3] 建议用断点时的首通时间来计算. 我们发现在裂变过程中, 粒子在鞍点处振荡多次, 所以提出了用鞍点处的末通时间来计算裂变几率, 这个结果和 Kramers 定态结果比较一致^[4].

布朗运动模型把环境看作无限大的热浴, 用白噪声代表环境对系统的影响有很大的局限性. 因为在许多实际问题中, 环境不能简单地被看作为热浴, 噪声包含着环境对系统作用的全部信息, 因而它也不可能是简单的白噪声. 根据不同的环境, 噪声也不同, 扩散的行为也是多种多样的, 在无外力的情况下它可用位移均方差值与时间的关系表征:

$$\langle X^2(t) \rangle \sim t^\alpha \begin{cases} \alpha < 1, & \text{慢扩散} \\ \alpha = 1, & \text{正常扩散} \\ \alpha > 1, & \text{超扩散} \end{cases} \quad (1)$$

我们称布朗运动为正常扩散, 其它均为反常扩散. 愈来愈多的证据显示, 在许多领域存在着各种各样的反常扩散.

扩散行为决定于环境的性质, 其物理意义可以用广义朗之万方程(GLE)来阐明:

$$\dot{X}(t) = - \int_0^t \eta(t-t') \dot{x}(t') dt' + \epsilon(t), \quad (2)$$

其中 $\epsilon(t)$ 是一般的噪声, $\langle \epsilon(t) \epsilon(t') \rangle = k_B T \eta(t-t')$, $\eta(t)$ 是摩擦记忆项, 其 Fourier 展开

$$\eta(t) = \int \rho(\omega) \cos(\omega t) d\omega. \quad (3)$$

其中 $\rho(\omega)$ 是噪声谱密度, 它决定噪声的性质, 通常采用 Debye 谱的形式, 即

$$\rho(\omega) = C, \quad \omega < \Omega. \quad (4)$$

当 $\Omega \rightarrow \infty$ 时则为白噪声: $\eta(t) \sim \delta(t)$.

近来许多研究者取 $\rho(\omega) \sim \omega^{-1}$, 得到 $\langle X^2(t) \rangle \sim t^\alpha$ 的一般公式. 我们最近提出一个广谱形式

$$\rho(\omega) = k_B T \frac{2\eta_0 \tau_1^2 \omega^2}{(1 + \tau_1^2 \omega^2)(1 + \tau_2^2 \omega^2)}, \quad (5)$$

其中, τ_1 和 τ_2 是两个关联时间, η_0 是摩擦系数. 根据这个谱密度, 我们得到位移均方差值与时间的关

收稿日期: 2004 - 02 - 09; 修改日期: 2004 - 03 - 15

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10075007, 10175095, 10235020)

作者简介: 卓益忠(1932-), 男(汉族), 福建罗源人, 研究员, 从事原子核物理及生物物理理论研究.

系形式

$$\langle X^2(t) \rangle \sim D_N t + D_B t^2. \quad (6)$$

在时间比较小时是正常扩散, 当时间很大时, 渐进行为是弹道扩散^[5], 如图 1 所示.

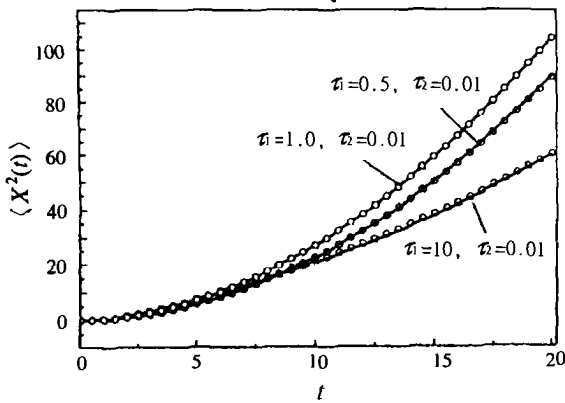


图 1 位移均方差值与时间的关系

用这种噪声研究了闪烁棘轮马达, 发现可期望作为高效率的分子马达的一种机制. 此外, 有人在生物实验上设计了粒子在二维“细菌热浴”中的扩散^[6], 当细菌的运动具有相干结构的时候, 可以得到弹道扩散($t < t_c$), 而在 $t > t_c$ 时相干结构消失, 这时变为正常扩散, 如图 2 所示, 其中不同曲线对应于不同半径粒子的结果. 如果开始没有相干结构, 后面形成相干结构, 就是我们理论所给出的特征.

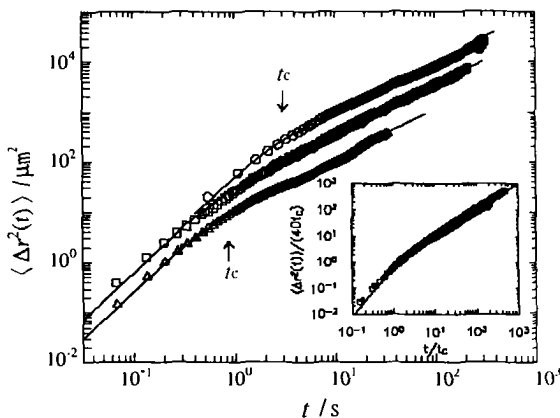


图 2 粒子在二维“细菌热浴”中的扩散的实验^[6]

上面主要是模型方面的工作, 但有关布朗运动的微观动力学基础的研究还大多只停留在用无穷多谐振子来表征热浴, 同时热浴与系统的耦合也只考虑是线性的. 我们在很久以前就提出热浴可以是任意的, 耦合是非线性的, 并且用时间投影算符方法

得到了一些一般的耦合主方程的理论框架^[7]. 最近进行了数值方面的研究^[8], 我们用 Fermi-Paster-Ulam 模型作为热浴, 用一个谐振子来代表系统, 并且引进了非线性耦合, 研究在有限自由度下系统随时间演化的动力学过程. 体系的哈密顿 H 可以包括下面 3 部分

$$H = H_{\text{col}} + H_e + H_{\text{coup}}, \quad (7)$$

其中 H_{col} , H_e 和 H_{coup} 分别为系统、环境及它们之间耦合的哈密顿量:

$$H_{\text{col}} = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 q^2, \quad (8)$$

$$H_e = \sum_{i=1}^{N_d} \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i=2}^{N_d} W(q_i - q_{i-1}) + W(q_{N_d}),$$

$$W(q) = \frac{q^4}{4} + \frac{q^2}{2}, \quad (9)$$

$$H_{\text{coup}} = \lambda \{q^2 - q_0^2\} \{q_0^2 - q_{1,0}^2\}. \quad (10)$$

我们发现耗散过程应分 dephasing, relaxation 和 thermal equilibrium 3 个阶段, 可用 Tsallis 熵

$$S_\alpha^c = \frac{1 - \int \rho(t)^{\alpha} dq dp}{\alpha - 1} \quad (11)$$

来描述^[9], $\alpha = 1$ 时, Tsallis 熵回到 Boltzmann-Gibbs 熵.

第一个阶段是描述系统的能量耗散, 如图 3 所示. 从图中可以看到, 环境的自由度 N_d 很小时, 只

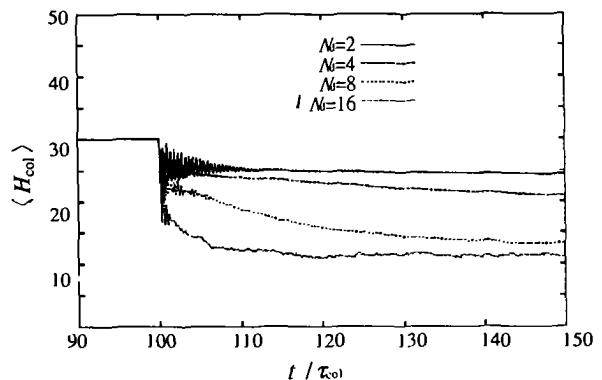


图 3 平均系统能量 $\langle H_{\text{col}} \rangle$ 随时间的演化过程

有第一阶段起作用, 随着环境自由度的增加, 第一阶段时间越来越短, 当环境自由度大于 16 时, 第一阶段不明显了.

图 4 是熵随时间的演化过程, 当环境自由度是

2 和 4 时, 熵随时间呈指数上升达到饱和, 当环境

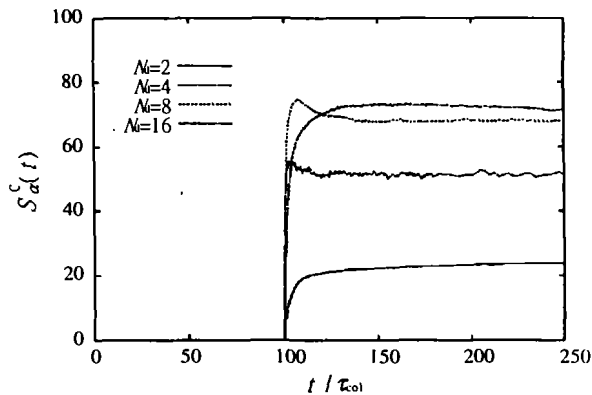


图 4 熵随时间的演化过程

自由度为 8 和 16 时, 开始熵随时间呈指数上升, 很快又线性下降达到饱和, 下降代表非平衡弛豫过程.

参 考 文 献:

- [1] Kramers H A. *Physica*, 1940, 7: 284.
- [2] 吴锡真, 卓益忠. 原子核物理(1978 年会议资料选编), 北京: 原子能出版社, 1978, 105; 吴锡真, 卓益忠. 高能物理与核物理, 1980, 4: 113; Wu X Z, Zhuo Y Z. *Chin Phys*, 1981, 1: 671.
- [3] Hofmann H, Ivanyuk F A. *Phys Rev Lett*, 2003, 90: 132701-1.
- [4] Bao J D, Zhuo Y Z, Jia Y. to be published in *Phys Rev C*.
- [5] Bao J D, Zhuo Y Z. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 138104-1.
- [6] Wu X L, Albert L. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 3 017.
- [7] 卓益忠, 吴锡真. 高能物理与核物理, 1979, 3: 501; Fumihiko Sakata, Masayuki Matsuo, *et al.* *Ann Phys (N Y)*, 1989, 194: 30.
- [8] Yan Shiwei, Sakata Fumihiko, Zhuo Yizhong. *Phys Rev*, 2002, E65: 031111-1.
- [9] Tsallis C. *J Stat Phys*, 1988, 52: 479.

Transport Theory for Many-body System——Anomalous Diffusion*

ZHUO Yi-zhong

(China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

Abstract: In this paper, we introduce some of our recent works on the models and dynamics of transport theory for many-body system, which show the characteristic features of anomalous diffusion.

Key words: transport theory; anomalous diffusion; ballistic diffusion

* Foundation Item: National Natural Science Foundation of China (10075007, 10175095, 10235020)