

Poisson 括号方法及其在准晶、液晶和一类软物质中的应用¹⁾

范天佑²⁾

(北京理工大学物理学院, 北京 100081)

摘要 对凝聚态物理学中的 Poisson 括号及有关 Lie 群和 Lie 代数方法做了介绍. 同时介绍了在准晶、液晶和一类软物质研究中的应用. 不仅介绍了推导以上物质的流体动力学方程或弹性-流体动力学方程, 也讨论了某些方程的解, 这种解还揭示了国外著名权威的经典解的错误.

关键词 Poisson 括号, 准晶, 液晶, 软物质, 运动方程, 解析解

中图分类号: O469 文献标识码: A DOI: 10.6052/0459-1879-12-346

引言

Poisson 括号在经典力学和量子力学中都有重要应用. 经典力学使用的 Poisson 括号被称为经典 Poisson 括号, 量子力学中使用的 Poisson 括号被称为量子 Poisson 括号, 两者既有区别, 又有联系. 前苏联物理学家 Landau 和他的学派, 在许多领域包括流体力学在内有重大贡献^[1], 在 20 世纪 30 年代以后, 为了研究低温超流等问题, 把这两种既有区别, 又有联系的 Poisson 括号方法加以发展^[2-3], 创造了凝聚态物理学的 Poisson 括号方法. 与此相联系, 又提出了广义的流体动力学“Hydrodynamics”概念^[4], 把弹性、普通流体、低温超流体、铁磁体和反铁磁体、晶体、液晶等复杂体系及其缺陷问题在一定的意义上, 归结为广义的“Hydrodynamics”问题. 他们还把它同 Lie 群和 Lie 代数相结合, 同时又指出和杨振宁-Mills 规范场的联系^[5-6]. 美国的凝聚态物理学的学派也发展了广义的“Hydrodynamics”研究^[7], 用的方法与 Landau 学派有所不同, 他们也讨论了晶体、液晶和普通流体问题. 1984 年准晶的发现被报导之后, 立即有物理学家把它也纳入广义的“Hydrodynamics”问题^[8]. 这一研究趋势还在发展. 尤其软物质的研究正在快速发展, 用凝聚态物理学的 Poisson 括号方法和广义的“Hydrodynamics”处理, 有可能打开

一些新局面. 本文主要对凝聚态物理学的 Poisson 括号方法在准晶、液晶和一类软物质研究中的应用, 做具体介绍. 一方面介绍了推导以上物质的流体动力学方程或弹性-流体动力学方程; 另一方面也讨论了某些方程的化简和求解, 其中包括揭示了国外著名权威的经典解的错误, 同时提出了一类软物质的唯象模型和这类软物质准晶的方程和得到有关的数学解.

1 凝聚态物理学的 Poisson 括号

虽然若干凝聚态物质的运动方程, 可以用动量、角动量、质量(电荷, 粒子数)、能量、旋量守恒定律去推导(如文献[1]). 但是由于出现对称性破缺, 或推导太复杂, 有些问题, 例如准晶流体动力学方程直接由守恒定律去推导就不可能实现, 需要用前述凝聚态物理学的 Poisson 括号去推导. 软物质问题更复杂, 在对它们提出简化物理模型后, 也不妨用凝聚态物理学的 Poisson 括号去推导其相关方程. 为此, 不得不去涉及与此有关的领域. 当然本文尽量让介绍通俗简短. 应该指出, 凝聚态物理学的 Poisson 括号是一个相当广泛的论题, 这里只局限在准晶、液晶和一类软物质的流体动力学或弹性-流体动力学研究方面.

2012-12-06 收到第 1 稿, 2013-03-20 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目(11272053, 10672022, 10372016, K19972011).

2) 范天佑, 教授, 主要研究方向: 力学、准晶学和有关数学方法. E-mail: tyfan2013@163.com

Poisson 括号来自经典分析力学, 即 2 个力学量 f, g 有如下关系

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right) \quad (1)$$

称为这 2 个量的 Poisson 括号, 其中 p_i, q_i 为正则动量和正则坐标.

在经典统计物理学中, Poisson 括号有重要应用. 式 (1) 被称为经典 Poisson 括号.

之所以称式 (1) 为经典 Poisson 括号, 是因为在量子力学中以下面对易关系

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (2)$$

为基础建立 Poisson 括号, 其中 \hat{A}, \hat{B} 代表 2 个算子, 例如 \hat{A} 代表坐标算子 x_α , \hat{B} 代表动量算子 p_β , 那么

$$[x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, [x_\alpha, x_\beta] = \mathbf{0}, [p_\alpha, p_\beta] = \mathbf{0} \quad (3)$$

其中 $i = \sqrt{-1}$, $\hbar = h/2\pi$, h 代表 Planck 常数, $\delta_{\alpha\beta}$ 代表单位张量. 方程 (3) 被称为量子 Poisson 括号. 在量子力学中力学量都用算子代表, 方程 (3) 对一般的算子都成立.

量子 Poisson 括号与经典 Poisson 括号存在内在联系, 即

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{i[\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}]}{\hbar} = \{A, B\} \quad (4)$$

这是量子力学熟知的结果.

Landau^[2] 在推导超流的流体动力学方程时, 采用了量子 Poisson 括号到经典 Poisson 括号的极限过渡 (4). 他把质量密度和动量做如下展开

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha m_\alpha \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}) \quad (5)$$

$$\hat{g}_k(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \hat{p}_k^\alpha \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}) \quad (6)$$

它们的量子 Poisson 括号为

$$\left. \begin{aligned} [\hat{\rho}(\mathbf{r}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_2)] &= \mathbf{0} \\ [\hat{p}_k(\mathbf{r}_1), \hat{\rho}(\mathbf{r}_2)] &= i\hbar \hat{\rho}(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ [\hat{p}_k(\mathbf{r}_1), \hat{p}_l(\mathbf{r}_2)] &= \\ & i\hbar (\hat{p}_l(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) - \hat{p}_k(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2)) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

其中, $\nabla_k(\mathbf{r}_1)$ 代表求导对坐标 \mathbf{r}_1 进行, $\nabla_l(\mathbf{r}_2)$ 代表求导对坐标 \mathbf{r}_2 进行.

利用了量子 Poisson 括号到经典 Poisson 括号的极限过渡 (4), 由式 (7) 可以得到经典 Poisson 括号如下

$$\left. \begin{aligned} \{p_k(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_2)\} &= \rho(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ \{p_k(\mathbf{r}_1), p_l(\mathbf{r}_2)\} &= \\ (p_l(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) - p_k(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2)) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

与上面的讨论相似, 铁磁体与反铁磁体的磁运动方程, 也可以用 Poisson 括号讨论. 铁磁体的运动状态的“流体动力学”近似, 可以用旋量密度算子描写, 把它做 Landau 展开

$$\hat{s}(\mathbf{r}) = \sum_\alpha \hat{S}_\alpha \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}) \quad (9)$$

那么有对易关系

$$[s^\alpha(\mathbf{r}_1), s^\beta(\mathbf{r}_2)] = i\hbar \exp(\alpha\beta v) s^\nu(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (10)$$

这是量子 Poisson 括号. 由量子 Poisson 括号到经典 Poisson 括号的极限过渡 (4), 得到

$$\{s^\alpha(\mathbf{r}_1), s^\beta(\mathbf{r}_2)\} = -\exp(\alpha\beta v) s^\nu(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (11)$$

根据 Liouville 方程 (第 2 节介绍), 可以得到旋量运动方程. 由于本文仅限于讨论准晶, 液晶和一类软物质, 旋量运动方程就不再介绍了. 这一工作为 Landau 等^[3] 开创.

2 在固体准晶研究中的应用

准晶是一种新发现的复杂凝聚态体系, 它最先在二元与三元合金中发现, 被称为固体准晶. 5, 8, 10 和 12 次对称的固体准晶存在两类不同的元激发: 声子 u_i 和相位子 w_i . 把声子位移场 u_i 和相位子位移场 w_i 也做 Landau 展开, 有

$$u_k(\mathbf{r}) = \sum_\alpha u_k^\alpha \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}) \quad (12a)$$

$$w_k(\mathbf{r}) = \sum_\alpha w_k^\alpha \delta(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}) \quad (12b)$$

利用了量子 Poisson 括号到经典 Poisson 括号的极限过渡 (4), 由式 (12) 可以得到经典 Poisson 括号如下

$$\{u_k(\mathbf{r}_1), g_l(\mathbf{r}_2)\} = (-\delta_{kl} + \nabla_l(\mathbf{r}_1) u_k) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (13)$$

$$\{w_k(\mathbf{r}_1), g_l(\mathbf{r}_2)\} = (\nabla_l(\mathbf{r}_1) w_k) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (14)$$

有关准晶问题的推导是 Lubensky 等^[8] 进行的. 显然式 (13) 与式 (14) 很不相同, 这揭示了相位子与声子

在流体动力学意义上的不同,下面还将介绍由这一不同导致的其他一些相关公式的不同.

为了推导准晶的运动方程,还需要其他有关知识.下面方程

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma \Psi(\mathbf{r}, t) + F_s \quad (15)$$

是统计物理学中的 Langevin 方程,其中 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是某一力学量, Γ 量代表阻力, F_s 为随机力.它描写一种随机过程. Ginzburg 与 Landau 把式 (15) 推广到多变量情形

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & - \sum_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}, t)} + (F_s)_\alpha = \\ & - \Gamma_{\alpha\beta} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}, t)} + (F_s)_\alpha \end{aligned} \quad (16)$$

式 (16) 的右端去掉了求和号,表示重复下标即自动求和, $H = H[\Psi(\mathbf{r}, t)]$ 是体系的能量泛函,即 Hamilton 量, $\frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}, t)}$ 代表 $H = H[\Psi(\mathbf{r}, t)]$ 对力学量 $\Psi_\beta(\mathbf{r}, t)$ 求变分, $\Gamma_{\alpha\beta}$ 为阻力矩阵元素 (或称耗散运动学系数矩阵元素),其他量的物理意义同上.方程 (16) 是一种广义 Langevin 方程,还可以作更普遍地推广.首先宏观量 $\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ 可以看作微观量 $\Psi_\alpha^\mu(\mathbf{r}, \{q^\alpha\}, \{p^\alpha\})$ 的热力学平均值,即

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi_\alpha^\mu(\mathbf{r}, \{q^\alpha\}, \{p^\alpha\}) \rangle \quad (17)$$

其中, p^α, q^α 中为正则动量和正则坐标,微观量遵循 Liouville 方程

$$\frac{\partial \Psi_\alpha^\mu}{\partial t} = \{H^\mu, \Psi_\alpha^\mu\} \quad (18)$$

式中, $H^\mu(\{q^\alpha\}, \{p^\alpha\})$ 为子系统的 Hamilton 量.在 d 维空间中,宏观量 $\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ 对时间的偏导数

$$\frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

包含若干项,其中有一项为

$$- \int \{ \Psi_\beta(\mathbf{r}'), \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' \quad (19)$$

另一项为

$$\int \frac{\delta \{ \Psi_\beta(\mathbf{r}'), \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \}}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' \quad (20)$$

联立式 (19) 和式 (20),那么式 (16) 就推广为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & - \int \{ \Psi_\beta(\mathbf{r}'), \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' + \\ & \int \frac{\delta \{ \Psi_\beta(\mathbf{r}'), \Psi_\alpha(\mathbf{r}) \}}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \Gamma_{\alpha\beta} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}, t)} + (F_s)_\alpha \end{aligned} \quad (21)$$

即普遍的广义 Langevin 方程,其中 $d^d r' = dV$ 代表 d 维空间中积分的微体积元.此方程是下面推导准晶流体动力学方程的一个基础.

Lubensky 等把 Poisson 括号 (8), (13) 和 (14) 代入方程 (21) 推导的固体准晶流体动力学方程,共 4 组方程:质量守恒方程、动量守恒方程、声子耗散 (弛豫) 方程和相位子耗散 (弛豫) 方程.其中质量守恒方程与普通流体力学得到的完全一样,动量守恒方程与普通流体力学得到的 Navier-Stokes 方程相比,要广泛一些,可以称为广义 Navier-Stokes 方程,或者修正 Navier-Stokes 方程,推导很复杂.本文将放在最后详细讨论.先讨论声子耗散方程和相位子耗散方程.

首先考虑声子弛豫方程的推导.

这里取式 (21) 中的

$$\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = u_i(\mathbf{r}, t), \Psi_\beta(\mathbf{r}', t) = g_j(\mathbf{r}', t)$$

由于式 (21) 右端的第 2 项的计算结果是 0,而为简单起见,第 4 项 (随机项) 暂不考虑,那么

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & - \int \{ u_i(\mathbf{r}'), g_j(\mathbf{r}') \} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \\ & \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{r}, t)} \end{aligned}$$

将式 (13) 代入上式右端的积分中,有

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = & \int (-\delta_{ij} + \nabla_j(\mathbf{r}) u_i) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{g_j(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} d^d r' + \\ & \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{r}, t)} = \\ & -V_j \nabla_j(\mathbf{r}) u_i - \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{r}, t)} + V_i \end{aligned} \quad (22)$$

式中, Γ_u 为声子耗散 (或运动学) 系数,推导中用到 Hamilton 量如下

$$\left. \begin{aligned} H = H[\Psi(\mathbf{r}, t)] = & \int \frac{\mathbf{g}^2}{2\rho} d^d r + \\ & \int \left[\frac{1}{2} A \left(\frac{\delta \rho}{\rho_0} \right)^2 + B \left(\frac{\delta \rho}{\rho_0} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \right] d^d r + F_{el} = \\ & H_{kin} + H_{density} + F_{el} \\ & F_{el} = F_u + F_w + F_{uw}, \mathbf{g} = \rho \mathbf{V} \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

其中,式 (23) 右端的第 3 项,代表声子变形能,相位子变形能和声子-相位子耦合变形能,它们分别为

$$\left. \begin{aligned} F_u &= \int \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} d^d r \\ F_w &= \int \frac{1}{2} K_{ijkl} w_{ij} w_{kl} d^d r \\ F_{uw} &= \int (R_{ijkl} \varepsilon_{ij} w_{kl} + R_{klij} w_{ij} \varepsilon_{kl}) d^d r \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

C_{ijkl} 为声子弹性常数, K_{ijkl} 为相位子弹性常数, R_{ijkl}, R_{klij} 为声子-相位子耦合弹性常数, 相应的声子与相位子应变张量分量分别为

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad w_{ij} = \frac{\partial w_i}{\partial x_j} \quad (25)$$

并且声子应力张量和相位子应力张量在这里为

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijkl} \varepsilon_{kl} + R_{ijkl} w_{kl} \\ H_{ij} &= K_{ijkl} w_{kl} + R_{klij} \varepsilon_{kl} \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

现在考虑相位子弛豫方程的推导.

这里取式 (21) 中的 $\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = w_i(\mathbf{r}, t)$, $\Psi_\beta(\mathbf{r}', t) = g_j(\mathbf{r}', t)$, 和上面一样, 可以不计右端的第 2 项与第 4 项, 把式 (24) 代入, 那么

$$\frac{\partial w_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = - \int \left\{ w_i(\mathbf{r}'), g_j(\mathbf{r}') \right\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{r}, t)}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= - \int \{g_i(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t)\} \frac{\delta H}{\delta \rho(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \int \{g_i(\mathbf{r}, t), g_j(\mathbf{r}', t)\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \\ &\int \{g_i(\mathbf{r}, t), u_j(\mathbf{r}', t)\} \frac{\delta H}{\delta u_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \int \{g_i(\mathbf{r}, t), w_j(\mathbf{r}', t)\} \frac{\delta H}{\delta w_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' \\ &\int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)\}}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' - \Gamma_g \frac{\delta H}{\delta g_i(\mathbf{r}, t)}, \quad \Gamma_g = \eta_{ijkl} \end{aligned} \quad (29)$$

其中右端的第 1 个积分经过计算为

$$\begin{aligned} \int \{g_i(\mathbf{r}), \rho(\mathbf{r}')\} \frac{\delta H}{\delta \rho(\mathbf{r}', t)} d^d r' &= \int \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta(H_{\text{kin}} + H_{\text{density}})}{\delta \rho(\mathbf{r}', t)} d^d r' = \\ \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{\delta(H_{\text{kin}} + H_{\text{density}})}{\delta \rho(\mathbf{r}', t)} d^d r' &= \\ \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{density}}}{\delta \rho} \right) + \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \left(-\frac{\mathbf{g}^2}{2\rho^2} \right) &= \rho(\mathbf{r}) \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{density}}}{\delta \rho} \right) - g_j \nabla_i V_j \end{aligned}$$

将式 (12b) 代入上式右端的积分中, 有

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \\ \int \nabla_j(\mathbf{r}) w_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{g_j(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} d^d r' + \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{r}, t)} &= \\ -V_j \nabla_j(\mathbf{r}) w_i - \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{r}, t)} & \end{aligned} \quad (27)$$

式中 Γ_w 为相位子耗散系数, 推导中也用到由式 (23) 定义的 Hamilton 量.

比较方程 (22) 与 (27), 发现两者在流体动力学的意义上很不相同, 因为声子对时间的导数与速度成正比, 而相位子对时间的导数与速度无关, Lubensky 等认为声子代表波传播, 相位子代表扩散. 在物理上声子描写晶格振动, 这种振动会以波的形式传播. 相位子描写原子的局部重排, 而对空间位置的变化极不敏感, 弛豫时间很长, 这正是扩散运动的特点. 在群表示理论上, 声子和相位子属于点群的不同不可约表示, 例如声子矢量可以和空间坐标矢量一样的变换, 而相位子矢量则不可能.

将式 (8) 代入方程 (21), 用和以上相类似的推导, 可以得到质量守恒定律的表达如下

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla_i(\mathbf{r}) \rho V_i \quad (28)$$

动量守恒方程的推导比较长一些. 把 Poisson 括号 (8) 代入方程 (21), 计算用到动量 $g_j = \rho V_j$, 质量密度 ρ , 声子 u_i 和相位子 w_i , 这表明方程 (21) 右端的被积函数同时用到 Poisson 括号 (8), (13) 和 (14), 也就是

类似地, 第 2 至第 4 个积分可以得出来, 而第 5 个积分为 4 项求和, 即

$$\int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)\}}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{r}', t)} d^d r' = \int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t)\}}{\delta \rho(\mathbf{r}', t)} d^d r' + \int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), g_j(\mathbf{r}', t)\}}{\delta g_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' +$$

$$\int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), u_j(\mathbf{r}', t)\}}{\delta u_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' + \int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), w_j(\mathbf{r}', t)\}}{\delta w_j(\mathbf{r}', t)} d^d r'$$

其右端共含 4 项, 其中第 3 项的计算经过和结果为

$$\int \frac{\delta \{g_i(\mathbf{r}, t), u_j(\mathbf{r}', t)\}}{\delta u_j(\mathbf{r}', t)} d^d r' = \int \frac{\delta \{\delta_{ij} - \nabla_i(\mathbf{r}')u_j(\mathbf{r}', t)\}}{\delta u_j(\mathbf{r}', t)} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d^d r' =$$

$$\int \nabla_i(\mathbf{r}') \frac{\delta u_j(\mathbf{r}', t)}{\delta u_j(\mathbf{r}', t)} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d^d r' = \int (\nabla_i(\mathbf{r}') 1) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d^d r' = 0$$

类似地, 得到第 4 项, 也是 0. 而第 1 项与第 2 项的和为 0. 然后经过一些简单的代数运算, 有

$$\frac{\partial g_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla_k(\mathbf{r})(V_k g_i) + \nabla_j(\mathbf{r})(\eta_{ijkl} \nabla_k(\mathbf{r}) V_l) -$$

$$(\delta_{ij} - \nabla_i u_j) \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{r}, t)} - \nabla_i w_j \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{r}, t)} -$$

$$\rho \nabla_i(\mathbf{r}) \frac{\delta H}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)}, \quad g_j = \rho V_j \quad (30)$$

其中 η_{ijkl} 是固体黏性应力张量

$$\sigma'_{ij} = \eta_{ijkl} \dot{\xi}_{kl}$$

中的黏性系数张量, 而

$$\dot{\xi}_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial V_k}{\partial x_l} + \frac{\partial V_l}{\partial x_k} \right)$$

代表固体黏性变形速度张量.

方程 (22), (24), (27) 和 (30) 就是固体准晶流体动力学的运动方程, 场变量为质量密度 ρ , 速度 V_i (或者动量 $g_i = \rho V_i$), 声子位移 u_i 和相位子位移 w_i .

以上方程为 Lubensky 等在 1985 年推导出来, 但是没有公布推导的细节. 他们的论文被广泛引用, 但是争论也不少^[9-12]. 这些方程非常复杂, 而且是变分-微分方程, 很难求解, 似乎从未见到过它们的任何解析解. 数值解表明^[13], 质量密度 ρ 的变化很小, 即 $\delta\rho/\rho \approx 10^{-10}$.

3 在液晶研究中的应用

液晶是另一类复杂的凝聚态物质, 是一种各向异性液体, 或液体-固体中间相.

液晶的流体动力学需要引进另外一个新的流体动力学参量, 即方向矢量, 也称为指向矢量 $\mathbf{n} =$

(n_x, n_y, n_z) . 由前面建立的 Poisson 括号方法, 可以得到与 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 有关的 Poisson 括号

$$\{p_k(\mathbf{r}_1), \mathbf{n}(\mathbf{r}_2)\} = -\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \nabla_k \mathbf{n} \quad (31)$$

利用这一结果, 可以同前面一样推导各种液晶的运动方程. 下面考虑 A 类层状液晶, 这时

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) \cong \left(\frac{\partial u_z}{\partial x}, \frac{\partial u_z}{\partial y}, 1 \right) \quad (32)$$

其中, u_z 代表声子在 z 方向的分量, z 方向是层状液晶的法线方向. 注意, 对 A 类层状液晶 $n_x \cong \frac{\partial u_z}{\partial x}$, $n_y \cong \frac{\partial u_z}{\partial y}$, $n_z \cong 1$, $\frac{\partial u_z}{\partial x} \ll 1$, $\frac{\partial u_z}{\partial y} \ll 1$, 所以方向矢量的模近似等于 1.

同时有与熵有关的 Poisson 括号

$$\{p_k(\mathbf{r}_1), s(\mathbf{r}_2)\} = s(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (33)$$

用和前面类似的方法, 可以得到连续性方程

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla_i(\mathbf{r})(\rho V_i) \quad (34)$$

和动量守恒方程

$$\frac{\partial g_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla_k(\mathbf{r})(V_k g_i) + \nabla_j(\mathbf{r})(\eta_{ijkl} \nabla_k(\mathbf{r}) g_j +$$

$$\sigma_{ij}^{(e)}(\mathbf{r})), \quad g_j = \rho V_j \quad (35)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xx}^{(e)} &= \sigma_{yy}^{(e)} = K_1 \nabla^2 \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \sigma_{zz}^{(e)} &= \rho_0 B' \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \sigma_{zx}^{(e)} &= \sigma_{xz}^{(e)} = -K_1 \nabla^2 \frac{\partial u_z}{\partial x} \\ \sigma_{zy}^{(e)} &= \sigma_{yz}^{(e)} = -K_1 \nabla^2 \frac{\partial u_z}{\partial y} \\ \sigma_{xy}^{(e)} &= \sigma_{yx}^{(e)} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

代表弹性应力张量的分量, $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$, $B' = B - C^2/A$, A, B, C 和 K_1 为层状液晶的材料模量. 同时得到声子弛豫方程

$$\frac{\partial u_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\Gamma_u \frac{\partial \sigma_{zi}^{(e)}}{\partial x_i} + V_z \quad (37)$$

和熵守恒方程

$$\frac{\partial s(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla_i(\mathbf{r}) \left(sV_i + \frac{q_i}{T} \right) \quad (38)$$

其中, Γ_u 用为声子耗散 (或运动学) 系数, $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$ 为热流密度矢量, T 为温度, 并且 $q_i = -\kappa_{ij}\partial T/\partial x_j$, κ_{ij} 代表导热系数张量.

对柱状液晶, 也可以得到类似结果, 只是在柱状液晶情形指向矢量为

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z) = \left(\frac{\partial u_x}{\partial z}, \frac{\partial u_y}{\partial z}, 0 \right)$$

这里的结果同文献 [1, 7, 14] 是一致的, 但是这里不仅推导简单了许多, 并且符号也简化和规范了许多, 原始文献的推导极为冗长, 而且符号很混乱.

4 在一类软物质和软物质准晶中的应用

软物质是新近蓬勃发展的物理学与化学的分支学科, 与生物学关系也很密切. 文献 [15] 用模拟方法最先提出在胶体中可能存在准晶. 最近在许多软物质中发现了 12 次对称和 18 次对称准晶^[16-20], 这是两个新学科——软物质与准晶交叉的学科, 意义深远.

软物质种类很多. 根据其主要特点, 对某些软物质, 从宏观角度考虑, 认为它是一种液体-固体中间相, 或各向异性液体. 如果假定

$$\rho = \text{const} \quad (39)$$

(当然这一假定并不是必须的), 问题可以得到简化. 同时 18 次对称准晶的发现, 突破了原先发现的 5 次、8 次、10 次和 12 次对称准晶的理论框架, 从对称性原理出发, 必须引进“六维镶嵌空间”概念^[21], 这样导致 3 类不同的元激发: 声子 u_i 和第一相位子 v_i 以及第二相位子 w_i . 而第一相位子 v_i 具有 Poisson 括号

$$\{v_k(\mathbf{r}_1), g_l(\mathbf{r}_2)\} = (\nabla_l(\mathbf{r}_1)v_k) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (40)$$

这个结果同第 2 节中的有关 Poisson 括号 (14) 相类似, 同时考虑式 (39), 可以得到 18 次对称软物质准

晶的流体动力学方程如下^[22]

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial V_i}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \nabla V_i &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} + \sigma'_{ij}) \\ \frac{\partial V_j}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla u_i + \Gamma_u \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - V_i &= 0 \\ \frac{\partial v_i}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla v_i + \Gamma_v \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial w_i}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla w_i + \Gamma_w \frac{\partial H_{ij}}{\partial x_j} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijkl}\varepsilon_{kl} + r_{ijkl}v_{kl} + R_{ijkl}w_{kl} \\ \tau_{ij} &= T_{ijkl}v_{kl} + r_{klij}\varepsilon_{kl} + G_{ijkl}w_{kl} \\ H_{ij} &= K_{ijkl}w_{kl} + R_{klij}\varepsilon_{kl} + G_{klij}v_{kl} \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

这里声子与第一和第二相位子不耦合, 所以

$$r_{ijkl} = R_{ijkl} = 0 \quad (43)$$

又有

$$\sigma'_{ij} = -p\delta_{ij} + \left(2\eta\dot{\xi}_{kl} - \frac{2}{3}\zeta\dot{\xi}_{kk}\delta_{ij} \right) + \zeta\dot{\xi}_{kk}\delta_{ij} \quad (44)$$

p 代表流体压力, η 为流体第一黏性系数, ζ 为流体第二黏性系数, $\dot{\xi}_{kl}$ 由方程 (30) 定义.

12 次对称软物质准晶的运动方程则比 18 次对称准晶简单一些, 有

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial V_i}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \nabla V_i &= \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} + \sigma'_{ij}) \\ \frac{\partial V_j}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla u_i + \Gamma_u \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - V_i &= 0 \\ \frac{\partial w_i}{\partial t} + \mathbf{V} \nabla w_i + \Gamma_w \frac{\partial H_{ij}}{\partial x_j} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

声子应力张量和相位子应力张量为式 (26) 定义, 但是这里因为声子与相位子不耦合, 所以式 (26) 中的耦合弹性系数在这里

$$R_{ijkl} = 0 \quad (46)$$

显然, 这种软物质是一种很特殊的软物质, 与寻常研究者所讨论的一般其他的软物质不同, 本文仅考虑这一类软物质.

5 方程的化简和求解举例

以上推导得到基本方程, 十分重要, 但是仅仅为解决问题的第一步. 接下来, 方程的化简和求解同样重要, 而且难度更大.

5.1 固体准晶位错解

准晶的位错是准晶理论中最重要的问题之一. 这一问题的求解难度很大. 下面选择最重要的准晶位错问题, 进行讨论.

5.1.1 二维十次对称准晶位错解

二维准晶的位错, 假设位错线穿透 z 方向 (十重对称轴的方向), 具有 Burgers 矢量 $\mathbf{b} = (b_1^{\parallel}, b_2^{\parallel}, b_3^{\parallel}, b_1^{\perp}, b_2^{\perp}, 0)$, $b_1^{\parallel}, b_2^{\parallel}, b_3^{\parallel}$ 代表声子 Burgers 矢量的分量, $b_1^{\perp}, b_2^{\perp}, 0$ 代表相位子 Burgers 矢量的分量. 如果仅考虑位错静力学, 可以不考虑速度场, 即假定 $V_x = V_y = 0$, 方程 (22), (24), (27), (28) 化成

$$\nabla^2 \nabla^2 \nabla^2 \nabla^2 F = 0 \tag{47}$$

$$\nabla^2 u_z = 0 \tag{48}$$

其中第 1 个方程为 8 阶偏微分方程, 其中的 F 为位移势, 描写 u_x, u_y, w_x, w_y (它们相互耦合) 的平衡, 为了求解它, 必须提出 4 个边界条件; 第 2 个方程为 2 阶偏微分方程, 描写 u_z 的平衡, 为了求解它必须提出一个边界条件. 以上方程的总阶数为 10 阶. 它们的边值问题, 用 Fourier 分析或复分析, 得到解为 [23-24]

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{b_1^{\parallel}}{2\pi} \left[\arctan\left(\frac{y}{x}\right) + \frac{(L+M)K_1}{(L+M)K_1 + (MK_1 - R^2)} \frac{xy}{r^2} \right] + \\ &\quad \frac{b_1^{\perp} k_0}{2\pi c_2} \left(\frac{xy}{r^2} - \frac{c_1 - c_2}{2c_1} \frac{2xy^3}{r^4} \right) \\ u_y &= \frac{b_1^{\parallel}}{2\pi} \left[-\frac{(MK_1 - R^2)}{(L+M)K_1 + (MK_1 - R^2)} \ln \frac{r}{a} + \right. \\ &\quad \left. \frac{(L+M)K_1}{(L+M)K_1 + (MK_1 - R^2)} \frac{y^2}{r^2} \right] + \\ &\quad \frac{b_1^{\perp} k_0}{2\pi c_2} \left[-\frac{xy}{r^2} + \frac{c_1 - c_2}{2c_1} \frac{y^2(x^2 - y^2)}{r^4} \right] \\ w_x &= \frac{b_1^{\parallel}}{2\pi} \frac{(L+M)K_1}{(L+M)K_1 + (MK_1 - R^2)} \frac{2x^3y}{r^4} + \\ &\quad \frac{b_1^{\perp}}{2\pi} \left[\arctan \frac{y}{x} + \frac{c_0 k_0}{2c_1 c_2} \frac{xy(3x^2 - y^2)(3y^2 - x^2)}{3r^6} \right] \end{aligned} \right\} \tag{49a}$$

$$\left. \begin{aligned} w_y &= \frac{b_1^{\parallel}}{2\pi} \frac{(L+M)K_1}{(L+M)K_1 + (MK_1 - R^2)} \frac{2x^2y^2}{r^4} + \\ &\quad \frac{b_1^{\perp}}{2\pi} \left[\left(1 - \frac{L+2M}{2c_1} - \frac{M}{2c_2} \right) \ln \frac{r}{a} + \right. \\ &\quad \left. \frac{c_0 k_0}{2c_1 c_2} \frac{y^2(3x^2 - y^2)^2}{3r^6} \right] \end{aligned} \right\} \tag{49b}$$

这里仅考虑了 b_1^{\parallel} 和 b_1^{\perp} 方的作用, 其余的可以类似得到, 其中有关常数就不列出了. 方程 (48) 的解为

$$u_z = \frac{b_3^{\parallel}}{2\pi} \theta, \quad \theta = \arctan \frac{y}{x} \tag{50}$$

5.1.2 三维准晶位错解

考虑三维二十面体准晶的位错, 假设位错线穿透 z 方向 (五重对称轴的方向), $\mathbf{b} = (b_1^{\parallel}, b_2^{\parallel}, b_3^{\parallel}, b_1^{\perp}, b_2^{\perp}, b_3^{\perp})$, $b_1^{\parallel}, b_2^{\parallel}, b_3^{\parallel}$ 代表声子 Burgers 矢量的分量, $b_1^{\perp}, b_2^{\perp}, b_3^{\perp}$ 代表相位子 Burgers 矢量的分量. 这时, 如果仅考虑位错静力学, 可以不考虑速度场, 即假定 $V_x = V_y = V_z = 0$, 方程 (22), (24), (27) 和 (28) 化成

$$\nabla^2 \nabla^2 \nabla^2 \nabla^2 \nabla^2 F = 0 \tag{51}$$

其中, F 为位移势, 描写 $u_x, u_y, u_z, w_x, w_y, w_z$ (它们相互耦合) 的平衡, 以上方程的总阶数为 12 阶. 求解它, 必须提出 6 个边界条件. 针对 Burgers 矢量的第 1 和第 4 个分量, 用 Fourier 方法或者复分析方法, 得到 [23,25]

$$\left. \begin{aligned} u_x &= \frac{1}{2\pi} \left(b_1^{\parallel} \arctan \frac{y}{x} + c_{12} \frac{xy}{r^2} + c_{13} \frac{xy^3}{r^4} \right) \\ u_y &= \frac{1}{2\pi} \left[-c_{21} \ln \frac{r}{r_0} + c_{22} \frac{y^2}{r^2} + c_{23} \frac{y^2(y^2 - x^2)}{2r^4} \right] \\ u_z &= \frac{1}{2\pi} \left(-c_{31} \arctan \frac{y}{x} + c_{32} \frac{xy}{r^2} + c_{33} \frac{xy^3}{r^4} \right) \\ w_x &= \frac{1}{2\pi} \left(b_1^{\perp} \arctan \frac{y}{x} + c_{42} \frac{xy}{r^2} + c_{43} \frac{xy^3}{r^4} \right) \\ w_y &= \frac{1}{2\pi} \left[-c_{51} \ln \frac{r}{r_0} + c_{52} \frac{y^2}{r^2} + c_{53} \frac{y^2(y^2 - x^2)}{2r^4} \right] \\ w_z &= \frac{1}{2\pi} \left(-c_{61} \arctan \frac{y}{x} + c_{62} \frac{xy}{r^2} + c_{63} \frac{xy^3}{r^4} \right) \end{aligned} \right\} \tag{52}$$

相应 Burgers 矢量的其他分量的解, 可以类似地得到, 这里常数 c_{ij} 由 b_1^{\parallel} 和 b_1^{\perp} 以及材料常数组成, 太冗长, 不一一列出, 有关细节可以见文献 [25].

5.2 A 类层状液晶位错解

考虑 A 类层状液晶的螺型位错, 假设位错线穿透 z 方向, 具有 Burgers 矢量 $\mathbf{b} = (0, 0, b)$. 这时, 如果

仅考虑位错静力学, 可以不考虑速度场, 即 $V_z = 0$, 方程 (34), (35), (37), (38) 化成

$$\left(B' \frac{\partial^2}{\partial z^2} - K_1 \nabla^2 \nabla^2 \right) u_z = 0 \quad (53)$$

描写 u_z 的平衡, 方程的阶数为 4 阶. 由于在 z 方向物理和几何均匀, 那么 $\partial/\partial z = 0$, 因而方程化成

$$\nabla^2 \nabla^2 u_z = 0 \quad (54)$$

这仍然是一个 4 阶偏微分方程. 求解它, 必须提出 2 个边界条件. 这个方程比式 (47) 和 (49) 简单得多, 它的位错问题也比前两种位错问题简单的多. 但是这个问题的解由 de Gennes 等^[14], Kleman^[26], Pershan 等^[27] 约 40 年前就给出过的, 为

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta, \quad \theta = \arctan \frac{y}{x} \quad (55)$$

很遗憾, 这个解却是错误的! Landau 等^[1] 的书中也介绍了 de Gennes 等^[14] 的解, 也未发现他们的错误. 由这个解得到所有应力都为 0, 即

$$\sigma_{ij} = 0, \quad i, j = 1, 2, 3$$

这自然是荒谬的. 为什么那么多权威专家得到的解是错误的? 因为他们的错误来自对偏微分方程边值问题的不了解. 现在求的是 4 阶偏微分方程 (54) 的解, 可是他们却用 2 阶方程 (48) 的解 (50) 代替方程 (54) 的解. 由于 2 阶方程 (48) 只能有 1 个边界条件, 虽然 (50) 或 (55) 满足了这 1 个边界条件, 但是 4 阶偏微分方程 (54) 必须有 2 个边界条件, 以上著名专家没有注意另外 1 个边界条件. 这个边界条件不是显式的, 它是 1 个自然边界条件, 即: 能量最小条件. 虽然对解 (55) 的问题和错误早就有人发现, 一直也有人在研究, 就是未能改正.

Fan 和 Li^[28] 注意到这一问题并且进行了仔细分析, 得到

$$\left. \begin{aligned} u_z &= \frac{b}{2\pi} (F + D_1 r \sin \theta) \theta \\ \theta &= \arctan \frac{y}{x}, \quad F = 1 \end{aligned} \right\} \quad (56)$$

$$\left. \begin{aligned} u_x^{(0)}(x, y) &= -(L + M) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \{ -|\xi| [B_1(\xi) + B_2(\xi)y] \exp(-|\xi|y) + |\xi| [B_3(\xi) + B_4(\xi)y] \exp(|\xi|y) \} \exp(-i\xi x) d\xi \\ u_y^{(0)}(x, y) &= -(L + 3M) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \{ [B_1(\xi) + B_2(\xi)y] \exp(-|\xi|y) + [B_3(\xi) + B_4(\xi)y] \exp(|\xi|y) \} \exp(-i\xi x) d\xi \end{aligned} \right\} \quad (60)$$

$$D_1 = \frac{-\frac{8}{3}\pi\alpha}{(R_0 + r_0) \left(\frac{\pi\alpha\beta}{4} + \frac{b^2 K_1}{8\pi} \right) \ln \frac{R_0}{r_0} + \frac{\pi}{320} \alpha \gamma (R_0 - r_0)} \quad (57)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \left(\frac{b}{2\pi} \right)^4 \rho_0 B' \\ \beta &= 2 + \frac{32\pi^2}{3} \\ \gamma &= 75 - 160\pi^2 + 256\pi^4 \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

其中, b 为 Burgers 矢量的模 (即大小值), $\rho_0 B'$ 的意义见 (36). 这个解才是正确的解.

5.3 软物质准晶解

软物质准晶发现较晚, 它的解似乎尚未见到. 这里考虑 12 次对称软物质准晶在静力学情形下的解, 见文献 [22], 这也许是软物质准晶第一个解. 对软物质, 即使在静力学情形, 速度场也必须考虑. 这时的解分为:

(1) 流体速度场和压力场解

$$\left. \begin{aligned} V_y(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{V}_y(\xi, y) \exp(-i\xi x) d\xi \\ V_x(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{V}_x(\xi, y) \exp(-i\xi x) d\xi \\ p(x, y) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{p}(\xi, y) \exp(-i\xi x) d\xi \\ \bar{V}_y(\xi, y) &= A_1(\xi) \exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \frac{1}{\eta\Gamma_u}}\right) y + \\ &\quad A_2(\xi) \exp\left(\sqrt{\xi^2 + \frac{1}{\eta\Gamma_u}}\right) + \\ &\quad A_3(\xi) \exp(-|\xi|y) + A_4(\xi) \exp(|\xi|y) \\ \bar{V}_x(\xi, y) &= -\frac{i}{\xi} \bar{V}'_y(\xi, y) \\ \bar{p}(\xi, y) &= -\frac{i}{\xi} \left[i \frac{\eta}{\xi} \left(\frac{d^2}{dy^2} - \xi^2 \right) - i \frac{1}{\Gamma_u \xi} \right] \bar{V}'_y(\xi, y) \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

其中, $A_1(\xi), A_2(\xi), A_3(\xi), A_4(\xi)$ 为待定函数, 由边界条件确定.

(2) 声子场解

其中, $B_1(\xi), B_2(\xi), B_3(\xi), B_4(\xi)$ 为待定函数, 由边界条件确定. 式 (59) 是声子场的齐次解, 加上非齐次解, 才是完全解

$$\left. \begin{aligned} u_x^{(1)}(x, y) &= u_x^{(0)}(x, y) + u_x^*(x, y) \\ u_y^{(1)}(x, y) &= u_y^{(0)}(x, y) + u_y^*(x, y) \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

(3) 相位子场解

$$\left. \begin{aligned} w_x(x, y) &= -(K_1 + K_3) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \{-|\xi| [C_1(\xi) + C_2(\xi)y] \exp(-|\xi|y) + |\xi| [C_3(\xi) + C_4(\xi)y] \exp(|\xi|y)\} \exp(-i\xi x) d\xi \\ w_y(x, y) &= -(2K_1 + K_2 + K_3) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \{\xi^2 [C_1(\xi) + C_2(\xi)y] \exp(-|\xi|y) + [C_3(\xi) + C_4(\xi)y] \exp(|\xi|y)\} \exp(-i\xi x) d\xi \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

其中, $C_1(\xi), C_2(\xi), C_3(\xi), C_4(\xi)$ 为待定函数. 这个解是软物质准晶的第一个解. 这个解揭示了软物质的物理参量 $\eta\Gamma_u$ 的作用, 流体耗散系数与固体耗散系数以乘积的形式出现对物理过程起作用.

6 结论与讨论

凝聚态物理学的 Poisson 括号方法在推导复杂的物质体系的运动方程方面很有效. 本文针对准晶, 液晶和一类软物质运动方程的推导, 做了若干介绍, 其中关于软物质和软物质准晶的结果为首次报导. 推导方程仅仅是解决问题的第一步, 方程的化简和求解同样重要, 也许难度更大, 这里介绍了准晶, 液晶和软物质准晶的解析解, 其中液晶的解, 分析了许多权威给出的经典解的错误, 同时给出了正确的解. 软物质准晶的方程和解都是第一次报导. 这些方程连同固体准晶流体动力学的方程一样, 在数学物理领域是新发现, 同时从数学物理的角度考虑, 它们的边值条件和可解性问题, 还存在巨大的原则性困难. 绝大部分尚未能求解, 现在用数值方法求解正在探索中, 在作者关于准晶弹性的新版著作中介绍了有限差分的格式和部分数值结果.

凝聚态物理学的 Poisson 括号方法同 Lie 群存在内在的联系, 群论方法具有更大的普遍性, 并且可以同其他方法 (如杨振宁-Mills 规范场) 联系起来. 由于篇幅限制, 只在附录中做了简单介绍.

由于自然界存在对称性破缺, 以前建立的守恒定律并不都是有效. 有人认为 (包括一部分教科书和课堂讲授), 守恒定律加上本构关系就能构成宏观连续力学的全部方程组, 就能解决宏观连续力学的全部问题, 其实这一观点未必正确. 与时俱进的做法应该是, 连续力学的研究不妨把守恒定律和对称性破缺原理结合起来考虑. 伟大的前苏联理论物理学家 Landau 提出的称性破缺原理, 最初用于凝聚态物理

(低温超流), 很快在基本粒子物理学得到应用, 弱相互作用宇称不守恒就是一个成功的例证. 接着, 在低温超导, 液晶和准晶中得到成功的应用. 同这些成功的应用相关发展起来的 Poisson 括号方法对发展连续力学, 也许会有启发. 当然对称性破缺原理, 并不那么容易被人们接受. 例如, 诺贝尔获奖者 Pauling^[29] 在准晶发现报导^[30] 后, 就在 *Nature* 上发表论文, 否定准晶存在, 由于他的观点没有实验支持, 争论很快终止, 而准晶的研究蓬勃发展起来^[31-32].

致谢 感谢美国 Pennsylvania 大学物理系著名液晶, 准晶和软物质专家 Prof. Lubensky TC 的讨论和指教. 也感谢德国洪堡基金会 (Alexander von Humboldt Foundation) 2001, 2002, 2003 和 2010 年的资助, 使作者访问了 Halle 的 Max-Planck 微结构物理学研究所和 Stuttgart 大学理论物理研究所, 同 Prof. Messerschmidt U, Prof. Trebin AR 和 Dr. Walz C 进行了有益的讨论. 最后感谢中国科学院大学马中麒教授有益的讨论.

参 考 文 献

- Landau LD, Lifshitz ME. Fluid Mechanics, Theory of Elasticity. Oxford: Pergamon, 1988
- Landau LD. Theory of superfluidity of He II. *Journal of Physics-USSR*, 1941, 5: 71-90
- Landau LD, Lifshitz EM. Zur Theorie der Dispersion der magnetische Permeabilität der ferromagnetische Körpern. *Physik Zeitschrift fuer Sowjetunion*, 1935, 8(2): 158-164
- Dzyaloshinskii IE, Volovick GE. Poisson brackets in condensed matter physics. *Ann Phys (New York)*, 1980, 125(1): 67-97
- Dzyaloshinskii IE, Volovick GE. On concept of local invariance in the spin glass theory. *J de Physique*, 1978, 39(6): 693-700
- Volovick GE. Additional localized degrees of freedom in spin glasses. *Zh Eksp Teor Fiz*, 1978, 75(7): 1102-1109
- Martin PC, Parodi O, Pershan PS. Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids. *Phys Rev A*, 1972, 6(6): 2401-2420

- 8 Lubensky TC, Ramaswamy S, Toner J. Hydrodynamics of icosahedral quasicrystals. *Physical Review B*, 1985, 32(11): 7444-7452
- 9 Rochal SB, Lorman VL. Minimal model of the phonon-phason dynamics in icosahedral quasicrystals and its application to the problem of internal friction in the i-AlPdMn alloy. *Physical Review B*, 2002, 66(14): 144204
- 10 Khannanov SK. Dynamics of elastic and phason fields in quasicrystals. *Physics of Metals and Metallography*, 2002, 93(5): 397-403
- 11 Coddens G. On the problem of the relation between phason elasticity and phason dynamics in quasicrystals. *European Physical Journal B*, 2006, 54(1): 37-65
- 12 Fan TY, Wang XF, Li W, et al. Elasto-hydrodynamics of quasicrystals. *Philosophical Magazine*, 2009, 89(6): 501-512
- 13 Walz C. Zur Hydrodynamik in Quasikristallen. Diplom-Arbeit, Germany: University of Stuttgart, 2003
- 14 de Gennes PD, Prost J. The Physics of Liquid Crystals. Clarendon: Oxford University Press, 1993
- 15 Denton AR, Loewen H. Stability of colloidal quasicrystals. *Phys Rev Lett*, 1998, 81(2): 469-472
- 16 Fischer S, Exner A, Zielske K, et al. Colloidal quasicrystals with 12-fold and 18-fold diffraction symmetry. *Proceeding of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2011, 108(5): 1810-1814
- 17 Zeng X, Ungar G, Liu Y S, et al. Supramolecular dendritic liquid quasicrystals. *Nature*, 2004, 428: 157-160
- 18 Takano K. A mesoscopic Archimedean tiling having a new complexity in an ABC star polymer. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 2005, 43(18): 2427-2432
- 19 Hayashida K, Dotera T, Takano A, et al. Polymeric quasicrystal: Mesoscopic quasicrystalline tiling in ABC star polymers. *Physical Review Letters*, 2007, 98(19): 195502
- 20 Talapin VD, Elena V, Shevchenko EV, et al. Quasicrystalline order in self-assembled binary nanoparticle superlattices. *Nature*, 2009, 461: 964-967
- 21 Hu CZ, Ding DH, Yang WG, et al. Possible two-dimensional quasicrystal structures with a six-dimensional embedding space. *Physical Review B*, 1994, 49(14): 9423-9427
- 22 Fan TY. Elasto-/ hydro-dynamics of quasicrystals with 12- and 18-fold symmetries in some soft matters. *Arxiv.org*, 1210.238, 2012
- 23 Fan TY. Mathematical Theory of Elasticity of Quasirystals and Its Applications. Beijing: Science Press/Heidelberg, Springer-Verlag, 2010
- 24 Li XF, Fan TY. New method for solving plane elasticity of quasicrystals. *Chin Phys Lett*, 1998, 18(4): 218-220
- 25 Zhu AY, Fan TY, Guo LH. Elastic field for a straight dislocation in an icosahedral quasicrystal. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, 19: 236216
- 26 Kleman M. Linear theory of dislocations in a smectic A. *Journal de Physique*, 1974, 35(3): 595-600
- 27 Pershan PS. Dislocation effects in smectic-A liquid crystals. *Journal of Applied Physics*, 1974, 45(4): 1590-1599
- 28 Fan TY, Li XF. The stress field and energy of screw dislocation in smectic A liquid crystals and on the mistakes of the classical solution. *Chinese Physics B*, 2013, in press.
- 29 Pauling L. Apparent icosahedral symmetry is due to directed multiple twinning of cubic crystals. *Nature*, 1985, 317: 512-514
- 30 Shechtman D, Blech I, Gratias D, et al. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical Review Letters*, 1984, 53(20): 1951-1953
- 31 范天佑. 准晶数学弹性理论和某些有关研究的进展 (上). 力学进展, 2012, 42(5): 501-521 (Fan Tianyou. Development on mathematical theory of elasticity of quasicrystals and some relevant topics. *Advances in Mechanics*, 2012, 42(5): 501-521 (in Chinese))
- 32 范天佑. 准晶数学弹性理论和某些有关研究的进展 (下). 力学进展, 2012, 42(6): 675-691 (Fan Tianyou. Development on mathematical theory of elasticity of quasicrystals and some relevant topics. *Advances in Mechanics*, 2012, 42(6): 675-691)

(责任编辑: 周冬冬)

附录: 利用 Lie 群和 Lie 代数概念推导有关方程

上面的推导表明, Poisson 括号的结果 (8), (13) 和 (14) 十分重要. 这些结果也可以用 Lie 群概念推导出来, 下面做简单介绍.

Lie 群是一种连续群. 因为前面介绍的动量算子是运动群的生成元, 旋量算子是旋量空间旋转群的生成元, 量子 Poisson 括号同 Lie 群有密切的内在联系, 所以文献 [4] 提出所谓“群 Poisson 括号”概念.

假设 g 是群 G 的一个元素, 它与 m 个实的连续参量 α_i 有关, 即

$$g(\alpha_i) \in G, \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (\text{A1})$$

\mathbb{R} 代表实空间.

符号“ \cdot ”把 2 个元素 $a(\alpha_i)$ 与 $b(\beta_i)$ 联系起来, 给出另一

个元素 $c(\gamma_i) \in G$

$$c(\gamma_i) = a(\alpha_i) \cdot b(\beta_i), \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (\text{A2})$$

对于连续变化的参量, 存在

$$\gamma_i = \varphi_i(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) \quad (\text{A3})$$

如果 φ_i 是 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ 单值解析函数, 这种连续群为 Lie 群. 有关单值解析函数的概念, 见任何一本复变函数的书.

取一个参量 α_i 以及恒元素 E , 那么 $\alpha_i(E) = 0$. Lie 群的无穷小生成元 L_i , 可以用下式的偏导数表示

$$L_i = i \frac{\partial a(\dots, \alpha_i, \dots)}{\partial \alpha_i} \Big|_{\alpha_i=0} \quad (\text{A4})$$

群元素 a 可以用下列展开式表示

$$a(\dots, \alpha_i, \dots) = E(\dots, 0, \dots) + \alpha_i L_i + O(\alpha_i^2) \quad (\text{A5})$$

Lie 群的无穷小元素在这类群中具有重要意义. Lie 群的元素可以用矩阵表示. 假设矩阵 $D(A)$ 是群 G 的元素的表示矩阵. 无穷小元素 $A(\alpha)$ 的参量为无穷小量 α_i . 矩阵 $D(A)$ 可以做如下展开

$$D(A) = 1 - i \sum_{j=1}^N \alpha_j I_j \tag{A6}$$

又

$$I_j = i \frac{\partial D(A)}{\partial \alpha_j} \Big|_{\alpha_j=0} \tag{A7}$$

N 个 I_j 称为表示的生成元. Lie 代数通过群的生成元之间的对易关系

$$[L_i, L_j] = C_{ij}^k L_k, \quad i, j, k = 1, 2, \dots, m \tag{A8}$$

构建, C_{ij}^k 称为结构常数. Lie 代数的反对称性, 线性性质以及 Jacobi 恒等关系如下

$$[L_i, L_j] = -[L_j, L_i] \tag{A9}$$

$$[\alpha L_i + \beta L_j, L_k] = \alpha [L_i, L_k] + \beta [L_j, L_k], \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \tag{A10}$$

$$[L_i, [L_j, L_k]] + [L_k, [L_i, L_j]] + [L_j, [L_k, L_i]] = 0 \tag{A11}$$

在弹性和流体动力学中使用的坐标变换

$$x^k \rightarrow x^k + u^k(\mathbf{r}) \tag{A12}$$

是一种运动群. 注意, 这里 x^k 代表逆变矢量, 相反, x_i 代表协变矢量. 前面提到有关物理量同群代数有密切联系, 因为动量算子是运动群的生成元, 旋量算子是旋量空间旋转群的生成元, 物理场变量 a, b, c, \dots 与变换群元素 A, B, C, \dots 之间可以建立某种关联

$$\{a, b, c, \dots\} \rightarrow \{A, B, C, \dots\} \tag{A13}$$

代数元素 A 可以由下列线性表示给出

$$A = \sum_{g \in G} A(g)g, \quad A(g) \in \mathbb{R} \tag{A14}$$

这里 $A(g)$ 可以理解为展开式的系数. 注意, 这里的求和号仅限于离散群, 而对于 Lie 群求和需要用积分代替, 因为在这种情形, 群元素为连续变化.

假设 A 可以按下式

$$A \rightarrow gAg^{-1} \tag{A15}$$

变换. 假设 δg 是一个无穷小变换, 若 $g = 1 + \delta g$, 那么线性近似为

$$A \rightarrow A + \delta A \tag{A16}$$

而

$$\delta A = [\delta g, A] \tag{A17}$$

无穷小变换 δg 可以用无穷小局域变换“角度” $\alpha^k(\mathbf{r})$ 和局域变换群的生成元的 $L^k(\mathbf{r})$ 函数去表示, 例如

$$\delta g = \frac{i}{\hbar} \int \alpha^k(\mathbf{r}) L^k(\mathbf{r}) d^d \mathbf{r} \tag{A18}$$

其中, $i = \sqrt{-1}$, $\hbar = h/(2\pi)$, h 为 Planck 常数.

对于运动群, 取 $\alpha^k(\mathbf{r}) = u^k(\mathbf{r})$, 其生成元为动量算子, 那么由式 (A17) 与式 (A18) 有

$$\delta A(\mathbf{r}) = \frac{i}{\hbar} \int \alpha^k(\mathbf{r}') [L^k(\mathbf{r}'), A(\mathbf{r})] d^d \mathbf{r}' \tag{A19}$$

这个方程表明 δA 是无穷小局域变换“角度” $\alpha^k(\mathbf{r})$ 的线性泛函, 相应的变分为

$$\frac{\delta A(\mathbf{r})}{\delta \alpha^k(\mathbf{r}')} = \frac{i}{\hbar} [L^k(\mathbf{r}'), A(\mathbf{r})] \tag{A20}$$

量子力学到经典力学的极限过渡为

$$\frac{\delta \hat{A}}{\delta \alpha} = \frac{i}{\hbar} [\hat{L}, \hat{A}] \rightarrow \frac{\delta A}{\delta \alpha} = \{L, A\} \tag{A21}$$

再重复一下, 在量子力学中 \hat{L}, \hat{A} 代表算子, 在经典力学中 L, A 代表场变量. 这样式 (A21) 右端的公式不妨改写成

$$\frac{\delta a}{\delta \alpha} = \{l, a\} \tag{A22}$$

其中, a 可以代表流体动力学的任何场变量 a, b, c, \dots , l 代表它们所属的生成元 $l^k(\mathbf{r})$, 所以由式 (A22) 有

$$\frac{\delta a(\mathbf{r})}{\delta \alpha^k(\mathbf{r}')} = \{l^k(\mathbf{r}'), a(\mathbf{r})\} \tag{A23}$$

进而

$$\left. \begin{aligned} \frac{\delta l^m(\mathbf{r})}{\delta \alpha^k(\mathbf{r}')} &= \{l^k(\mathbf{r}'), l^m(\mathbf{r})\}, \{a, a\} = \{a, b\} = \{b, b\} = 0 \\ \frac{\delta l^m(\mathbf{r})}{\delta \alpha^k(\mathbf{r}')} &= \{l^k(\mathbf{r}'), l^m(\mathbf{r})\}, \{a, a\} = \{a, b\} = \{b, b\} = 0 \end{aligned} \right\} \tag{A24}$$

因为在有限温度下, Hamilton 量在普通的热力学范围内可以表示成

$$H = \int \varepsilon(\mathbf{p}, \rho, s) d^d \mathbf{r}$$

$$d\varepsilon = V^k dp_k + \mu d\rho + T ds$$

其中, ε 为能量密度, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ 为动量, ρ 为质量密度, s 代表熵, $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$ 为速度, μ 代表化学势, T 为绝对温度. 有

$$\left. \begin{aligned} \delta p_k &= -u^l \nabla_l p_k - p_k \nabla_l u^l - p_k \nabla_l u^l \\ \delta \rho &= -u^l \nabla_l \rho - \rho \nabla_k u^k \\ \delta s &= -u^l \nabla_l s - s \nabla_k u^k \end{aligned} \right\} \tag{A25}$$

由式 (A24) 和式 (A25) 得到

$$\left. \begin{aligned}
 \{p_k(\mathbf{r}_1), \rho(\mathbf{r}_2)\} &= \frac{\delta \rho(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} = -\frac{\delta u^l(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} \nabla_l(\mathbf{r}_2) \rho(\mathbf{r}_2) - \rho(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2) \frac{\delta u^l(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} = \\
 &-\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2) \rho(\mathbf{r}_2) - \rho(\mathbf{r}_2) \nabla_k(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \\
 &-\nabla_k(\mathbf{r}_2) \rho(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\rho(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \rho(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\
 \{p_k(\mathbf{r}_1), p_l(\mathbf{r}_2)\} &= \frac{\delta p_l(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} = -\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \nabla_k(\mathbf{r}_2) p_l(\mathbf{r}_2) - p_k(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \\
 &p_l(\mathbf{r}_2) \nabla_k(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -p_k(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \nabla_k(\mathbf{r}_2) p_l(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \\
 &p_l(\mathbf{r}_1) \nabla_k(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - p_k(\mathbf{r}_2) \nabla_l(\mathbf{r}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{A26})$$

这和正文部分用凝聚态物理学 Poisson 括号所得结果 (8) 完全一样. 这是文献 [4] 的结果.

把以上方法用到准晶, 对出现了新的流体动力学量 u_i 和 w_i 有 Poisson 括号

$$\begin{aligned}
 \{u_k(\mathbf{r}_1), g_l(\mathbf{r}_2)\} &= \frac{\delta u_l(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} = \\
 &(-\delta_{kl} + \nabla_l(\mathbf{r}_1) u_k) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (\text{A27})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \{w_k(\mathbf{r}_1), g_l(\mathbf{r}_2)\} &= \frac{\delta w_l(\mathbf{r}_2)}{\delta u^k(\mathbf{r}_1)} = \\
 &(\nabla_l(\mathbf{r}_1) w_k) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (\text{A28})
 \end{aligned}$$

这与 Lubensky 等^[8] 直接用凝聚态物理学 Poisson 括号得到

的式 (13) 和式 (14) 也一致.

对于液晶, 出现了新的流体动力学量, 方向矢量或指向矢量 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$, 可以类似地得到相应的 Poisson 括号. 进而, 对 A 类层状液晶

$$n_x \cong \frac{\partial u_z}{\partial x}, \quad n_y \cong \frac{\partial u_z}{\partial y}, \quad n_z \cong 1$$

进一步的推导就更容易. 对柱状液晶, 情况类似.

这种结果, 表明了群论方法的有效性. 文献 [4] 还证明, 有了以上结果, 再使用 Liouville 方程 (例如式 (18)), 就可以得到许多复杂体系有关的运动方程, 这和本文正文部分介绍的结果一致.

POISSON BRACKET METHOD AND ITS APPLICATIONS TO QUASICRYSTALS, LIQUID CRYSTALS AND A CLASS OF SOFT MATTER¹⁾

Fan Tianyou²⁾

(School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract This paper gives an introduction on the Poisson bracket method in condensed matter physics, Lie group and Lie algebra and their some applications to quasicrystals, liquid crystals and a class of soft matter. It introduces not only derivation on hydrodynamic or elasto-hydrodynamic equations of the materials, but also solutions of relevant equations, some among them explore the mistakes of well-known classic solutions, in addition, the equations and solutions on soft matter quasicrystals are observed for the first time.

Key words Poisson brackets, quasicrystals, liquid crystals, soft matter, equations of motion, analytic solutions

Received 6 December 2012, revised 20 March 2013.

1) The project was supported by the National Natural Science Foundation of China (11272053, 10672022, 10372016, K19972011).

2) Fan Tianyou, professor, research interests: mechanics, quasicrystals and some relevant applied mathematics. E-mail: tyfan2013@163.com