

# 非平衡态统计力学研究的最新进展

柴立和

统计力学是从物质的微观结构出发，即从组成物质的原子、分子等微观粒子的运动及相互作用出发，去研究物质宏观性质的一门科学。统计力学的发展至今已经有 150 年的历史，对应平衡态的统计力学，我们从经典的麦克斯韦-玻尔兹曼统计开始，发展到了吉布斯的系综统计理论，平衡态统计力学已形成了一门异常完美的科学体系。以费米-狄拉克统计和玻色-爱因斯坦统计为主的量子统计理论、相变和临界现象的标度理论（以重整化群理论为核心）是平衡态统计力学分支上结成的丰硕果实。总之，撇开统计力学的基础问题（如遍历性和不可逆性起源）不谈，对平衡态的经典系统和量子系统，我们都已经可以从微观统计意义上至臻完善地进行描述。在此基础上发展出来的应用已遍布物理、化学、生命、材料等几乎所有科学和工程领域。

不过在自然界我们遇到的现象和过程几乎都是非平衡的和不可逆的，而平衡态仅仅是理想的、局部的、特殊的极限情况，只有非平衡才是绝对的、整体的、普遍的。为了彻底地深刻了解自然现象，我们就必须直面非平衡现象。

统计力学被李政道先生称为物理学中最美 的理论之一。对于平衡统计力学，由最可几原理这个唯一的假设，我们便可以从微观层次上导出平衡状态所有的宏观物性。但是我们遇到的更多的是不平衡、不可逆的耗散过程，不过令人惊讶的是对非平衡现象的研究至今都还没有统一的方法，这也赋予了非平衡热力学和非平衡统计力学至今还朝气蓬勃的生命力。对于这些非平衡和不可逆过程我们可不可以也建立起一套统一的微观的统计力学描述，以揭示这些不平衡、不可逆耗散过程的深刻微观机理呢？为了回答这个问题，有必要对统计力学的整个发展概况，特别是近几十年统计力学的发展及现状进行一番分析。

不难发现，如今的统计力学已发展成了一个层层联系的枝繁叶茂的复杂网络，破解这些网络结点的起源及其发展经过的路径，即理清它的来源，并且预测它将要连到哪儿是一个非常重要而艰巨的任务。让我们试着展开论述吧。

对非平衡和不可逆现象进行的宏观热力学研究和统计力学描述几乎与研究平衡现象的平衡热力学和平衡统计力学有着相同的历史。非平衡统计力学发展大体上是沿着两条线路展开的：

(1)玻尔兹曼式的框架。这方面有几个里程碑式的成就，一个里程碑式是 20~30 年代玻尔兹曼方程的 Chapman-Enskog 展开求解，第二个里程碑主要是玻尔兹曼动力学方程的一般化，40 年代末，以伊万(Yvon)的研究工作为先导，之后，柯克伍德(Kirkwood)、玻恩(Born)、格林(Green)以及玻格留波夫(Bogoliubov)的著作接踵而来，他们的工作形成了著名的 BBGKY 系列，大大促进了非平衡统计力学的发展，而后在此基础上，六七十年代以 Prigogine、Balescu 等为代表的工作又导致了一系列的不可逆现象统一理论。

玻尔兹曼式的框架下统计力学发展的另一条路线就是把布朗运动的一般化的随机动力学理论的建立。以本世纪初爱因斯坦对布朗运动的处理为发端，这方面有代表性的工作是 20 世纪头二三十年的经典布朗运动理论、随机行走理论、主方程和 Fokker-Planck 方程等随机理论。发展出了涨落耗散定律(20 年代)、Onsager 倒易关系(30 年代)、Kubo 响应理论(50 年代)等。

(2)吉布斯系综理论的非平衡扩展。这方面主要有，基于最大信息熵的统计理论(50 年代)、非平衡统计算符方法(60 年代)和 SRB (Sinai-Ruelle-Bowen) 测度理论(70 年代)等。这些方法是经典吉布斯系综方法的向非平衡问题的推广，往往具有较严格数学基础。Jaynes, Zubarev, Zwanzig, Sinai 和 Ruelle 等做出了重要的贡献。

当然历史上玻尔兹曼方法和吉布斯方法在处理平衡统计问题时就被证明是一致的，这意味着沿着它们的思路发展出的非平衡统计力学框架也是紧密联系而不断地交叉着。但这两种方法各有自己的特色和优缺点。

非平衡系统依照其偏离平衡态的程度，可以划分为近平衡态和远平衡态。目前的研究主要集中在偏离平衡态不远的近平衡态，处于平衡状态附近的

近平衡系统的主要趋向是向平衡状态过渡，其表现出来的主要非平衡过程是弛豫、输运和涨落等。因此近平衡统计力学主要研究内容包括讨论向平衡态的趋近、熵随时间的变化、从微观上导出输运系数及输运过程等，这方面研究的核心是不可逆现象的起源，也即时间箭头的单向性。在上面介绍的两个框架内已有大量的公认的理论成果，尽管数学处理仍是比较复杂，但这方面的理论逐步发展和完善，体系已趋于成熟。

近三四十年来，人们开始关注远离平衡态的物理系统，非平衡相变、耗散结构、协同学、湍流、分形和混沌、渗流等现象就是其中比较活跃的研究领地，取得了很大的进展。特别是耗散结构理论为远离平衡态的宏观结构形成提供了一定的宏观和微观统计解释，从微观或介观角度分析了涨落在有序结构形成中的作用。如同通常的平衡统计力学是平衡热力学的理论基础一样，非平衡统计力学是非平衡热力学的理论基础。可以说，近平衡的统计理论是为宏观输运现象和不可逆热力学过程提供了微观解释。同理，远离平衡态的统计理论应为远离平衡态的宏观输运现象和远离平衡态的自组织过程提供微观解释。不过，由于远离平衡态时局域平衡假设的先天缺陷和扰动方法的失效，而且远离平衡态的统计力学必须面对大自由度或无穷自由度的非线性动力学问题，这使得问题求解变得困难得多。统计力学在这方面的任何进展都是非常艰难的，这也成了本文以它为重点讨论对象的原因。

应该说，不可逆的起源（主要指趋向平衡态）目前仍没有得到很好的解决，因此它仍是一个很重要的研究方向。下面我们主要讨论远离平衡态的统计力学理论进展，这是一个关于有序结构起源的基础研究。与经典的非平衡统计力学不同的是它是针对远离平衡态的开放系统，趋向的往往是非平衡定态，这是大自由度或无穷自由度动力系统的吸引子，此吸引子代表了宏观有序结构。目前这方面的研究，还是从非线性动力学研究得较多，从热力学和非平衡统计角度研究得较少，这带来了动力系统理论和数值计算方面的很多问题，如何决定动力系统的稳定性、如何保证计算的稳定性和可靠性等。我们认为，大自由度或无穷自由度的非线性动力学必须借助统计力学才能取得成功，无疑统计力学在这方面的进展将会提出关于复杂系统自组织现象的全新的数学

结构，正如弦理论物理带来的数学革命一样。历史上的自组织临界性理论、NK模型、神经网络动力学、组合优化和模拟退火优化等都是统计力学与非线性动力学成功结合的范例。希望本文的工作能唤起更多的热力学和非平衡统计力学方面的研究工作，以促使非平衡物理学理论框架的真正完善。

### 近年来非平衡态统计力学研究的几个重点

为了实现从热力学和非平衡统计力学研究组织和结构起源的目标，必须把非平衡统计的研究从近平衡推广到远平衡。70年代以来，科学家们已经在多个方面展开了较为成功的深入研究，这个阶段研究的几个明显特征是：混沌和分形对统计力学的影响巨大，计算机的应用大大增强，统计力学的研究扩展到生命、经济、甚至社会等广大领域。显然统计力学在这方面的发展和运用，不仅可以了解不平衡、不可逆的耗散过程的深刻微观机理，还可以揭示大自然信息、组织、结构的微观起源。

为了研究远离平衡态组织和结构的微观动力学起源，一个显而易见的思路是纵深拓展上面提到的经典非平衡统计力学的框架以能处理远离平衡态的问题。即一方面是沿推广吉布斯系综方法角度，它试图建立非平衡状态下的广义巨正则系综，可用来描述非经典的远平衡开放耗散系统。另一方面是从理论上对经典玻尔兹曼动力学方法的进一步推广。对玻尔兹曼方程的进一步研究试图揭示远离平衡态的关于组织、结构的起源。70年代以来是解析方法和计算机方法相结合的时代，这两方面的进展都在一定的层面上结合了计算方法的进展，理论上融入了一些处理多尺度问题的重整化方法。就目前的研究来看，在拓展经典非平衡统计力学的框架的路上，科学家们在理论意义上并没有取得比经典非平衡统计力学的研究更多的认识，人们也没有发展出新的显式动力学方程。鉴于远平衡的特殊性质，若没有较大的思路创新，这方面的根本进展是相当困难的。

鉴于这方面的困难，科学家们发展出不少新的有效方法，并在一定程度上取得了进展。现以思路脉络为主线，把几个典型方面的研究分类综述如下：

(1)随机统计力学。这方面的工作主要是沿着玻尔兹曼式的框架展开的。从经典的布朗运动、随机行走、主方程、Fokker-Planck方程出发，逐渐推广了一套处理从近平衡到远平衡、从封闭系统到开放系统、从线性系统到非线性系统、从经典系统到量子系统

的随机方法。发展出了随机微分方程、离散随机过程、场理论方法、重整化方法等，研究了广泛意义的复杂系统，揭示了很多新现象，如标度性、乘法噪声、逃逸、复杂斑图等。上世纪 80 年代以来，借助于计算机模拟，科学家们提出和发展了受限扩散聚集生长模型(DLA)、耦合格子映像法(CLM)、元胞自动机模拟(CA)，自组织临界性(SOC)等这些基于随机水平上的理论描述。随机描述被证明是处理复杂系统的多组元相互作用的一种非常成功的方法，能揭示微观相互作用如何导致宏观有序行为。不过目前大部分研究还是借助计算机模拟来展开，理论上尽管有构造随机势作为目前研究的一个亮点，但进展是非常有限的。

经典统计力学强调更多的是从微观粒子到宏观现象(如 N-S 方程)的模型，随机统计力学强调的是从随机动力学到宏观现象的模型。宏观非线性扩散方程和不可压缩的流体力学方程是通过许多微观守恒律建立的。对于表面生长、集聚、颗粒流等现象，随机动力学更合适。于是在随机统计力学描述中，粒子的真实动力学被放弃，代之以简单的碰撞规则。随着人们把统计力学的研究对象从物理系统(气体、液体、固体)拓展到非物理系统，随机统计力学看来更有优势拓展经典的统计力学理论(针对粒子)以描述意义相当广泛的复杂系统，随机统计力学把经典统计中的粒子(主要是力学意义上的)广义化、普适化甚至智能化。在计算机模拟上，人们从分子动力学开始，相应提出了 CA 方法、格子气方法、格子玻尔兹曼方法等。不过目前大量的工作仅仅停留在研究计算机算法方面，试图扩展经典统计力学的理论研究工作还很少。仅有少量的工作(如关于格子气、动态 Ising 模型等)涉及到统计力学理论问题，提出了一些对应于平衡态临界现象中的动力学标度理论，但往往是考虑近平衡和趋向平衡的问题，远离平衡态的研究几乎很少开展。

随机统计力学是介于微观和宏观之间的一种描述方法，它克服了纯微观描述的复杂性，又能揭示宏观现象的细节，并能克服局域平衡假设的障碍。它是目前看来比较有希望的描述非平衡系统的方法，通过这种描述能从一定程度上帮助人们认识临界点的涨落引起的自组织结构的微观起源。鉴于复杂系统的多样性，科学家们又急于要开辟新的疆土，超越经典统计力学的思路去发展远离平衡态的统计力学

(事实上大多数情况下也必须这么做，如若从第一原理上阐述湍流，可能还需要几百年的时间)，随机水平上的方法是可以开展广义统计力学的一个重要途径。不过随机统计力学的缺陷是它还只能算是半动力学的方法，未来的研究应努力从理论上揭示微观与介观的联系，以真正实现从微观动力学(Liouville 方程)到宏观行为(如 N-S 方程)的统一。

(2) 基于复杂动力系统的统计力学。这方面的研究基本上是沿着吉布斯系综的框架展开的，它起始于六七十年代混沌动力学和分形理论的进展，并结合了传统符号动力学、遍历理论、动力系统理论等方面的知识。这方面的研究往往是从严格的数学基础上出发的。

70 年代以来，人们开始把混沌动力学观点和理论引入到统计力学的研究。Gallavotti 和 Cohen 提出了混沌假设，Sinai-Ruelle-Bowen 随之建立起 SRB 测度。对混沌动力学的研究产生了 Lyapunov 指数、熵、维数、热力学形式类比等概念，一个自然的问题是如何从确定性的混沌中导出统计力学，导出扩散系数，并确定其与 Lyapunov 指数、熵、维数等的联系。目前已探讨了宏观输运系数和反映微观混沌行为的 Lyapunov 指数(动力学轨道的分离)及 Kolmogorov-Sinai 熵(动力学轨道的混合)之间的关系。经典吉布斯系综的这种推广从某种意义上提供了研究远离平衡态问题的一个重要方法。目前对有高斯型调温器的 Lorentz 气耗散系统(粒子受牛顿力和调温器的非牛顿力的共同作用)的研究成果已经解释了周期性轨道如何导致输运特性，进一步粗粒化也就可能建立微观动力学与随机动力学之间的联系。

可以说，目前非线性动力系统或者说混沌系统的统计力学研究是近 20 年来最热门的课题之一。混沌动力学、Nose-Hoover 力学、涨落定律和稳定态热力学等已成为炙手可热的课题，它也大大扩展了统计力学的内涵。实际系统的动力学往往是无穷自由度的问题，这导致理论解析的困难和数值计算的相当费时，作为妥协，人们代之以对低维的简单非线性动力系统进行统计力学研究。这方面的工作近来也开始向随机统计力学靠近。从一般动力学意义上讨论统计力学问题，赋予这种研究从物质系统转向非物质系统的强大生命力。这种统计分析不同于经典的对粒子的轨迹进行统计(Langevin 方程)，它是采用相空间的办法(Liouville 方程)。人们用这种方法

可以导出扩散系数，进行非平衡统计力学分析，证明 Onsager 倒易关系和涨落耗散关系、可以计算熵和熵产生等，这意味着可以对平衡态和非平衡态进行统一描述。

由于远离平衡态的开放系统趋向的往往是非平衡定态，关于非平衡定态及趋向非平衡定态的研究是一个引起大家广泛兴趣的问题。这类现象的统计与一般的非平衡统计有很大的差别，它是针对远离平衡态的开放系统，靠外界能量的输入维持非平衡定态，于是人们提出很多理想化的方法，“热库”和“热调器”方法等就是典型的方法，它们不仅是一个重要的数学工具，也有着深刻的物理意义，Hoover, Evans 等在这方面作出了杰出的贡献。Klages 从随机边界条件的角度考虑建立“热调器”。一旦建立了非平衡定态的统计力学理论，我们就可以计算非平衡涨落与可测量的热力学量之间的关系，这对于实际应用非常重要。另外，向平衡态趋近和非平衡稳定态趋近的分布函数都具有分形状的奇异函数这方面研究是一个重大发现。

总之，这方面的研究试图从原子、分子、相空间单元等微观动力学角度统一建立平衡和非平衡统计力学的严格基础，它促使了人们对统计力学严格数学基础的重新审视，具有重大意义，缺陷是目前这方面的研究还只是针对小自由度的系统。

(3) 基于最大信息熵原理的统计力学。这方面的研究基本上也是沿着吉布斯系综的框架展开的。50 年代，Neumann 和 Shannon 由玻尔兹曼熵出发，把熵引入信息论，提出了所谓的信息熵，不久，Jaynes 提出了最大信息熵原理：任何统计分布必须使约束条件下的熵最大。据此原理，可以导出平衡态的所有吉布斯系综分布。利用这个原理可以发展出一套定量求解问题的技术方法，其基本思路是：先建立所求问题的概率描述，问题的随机特征用概率分布来表示，每种概率分布对应着一个信息熵值，该值的大小就表示不确定度的大小，再利用约束下的极值求解方法导出最佳分布。

最大信息熵方法使信息论知识与统计物理知识实现了连通，也使熵概念和熵理论可以走向热力学以外的广阔领域，逐渐发展成为一套处理由于数据或条件不充分造成的不适定问题标准方法之一。由于是从信息的角度出发，它可以任意推广到非平衡状态(包括远离平衡态)，而且对非平衡状态的描述

还特别方便。它可以描绘时空不均匀结构。从原理上来看，复杂系统存在非线性、随机性和复杂性等因素，处理不适定问题的最大信息熵方法的产生也是历史的必然，是有深刻的时代背景和历史根源的。

最大信息熵原理应用范围非常广泛，目前它已渗透到物理学以外的如气象学、天文学、生物学、社会学和经济学等诸多领域。尽管它在原理上适合处理远离平衡态的关于组织和结构的问题，但它的应用目前也更多地局限在信息处理方面，如频谱分析和图像恢复等。在关于组织和结构起源的动力学机制方面，最大信息熵方法也不能带来更多的发现。经典统计基于的是等概率原理（包括玻尔兹曼的最可几方法和吉布斯的系综统计法），最大信息熵方法基于的是最大信息熵原理。目前来看，这种导出统计分布的方法还不能认为具有统计力学的严格基础，它的物理意义仍在探索之中。其实，因为平衡态吉布斯系综的物理意义也是不平庸的，更不用说最大信息熵方法试图推广的非平衡态系综了。看来，最大信息熵原理若要在原理上和应用上获得更大的进展和突破，还需要在物理意义和哲学思想上扫清障碍。

(4) 非广延性统计力学。这方面的研究基本上是沿着修正经典玻尔兹曼-吉布斯统计中的熵的微观表述展开的。这种方法起源于分形、多重分形、迭代函数系统、符号动力学等方面的研究。80 年代末，Tsallis 受多重分形的启发，从新的角度出发重新定义了熵的概念，即 Tsallis 熵， $S_q = -k \left(1 - \sum_R P_R^q\right)/(1-q)$ ，在  $q \rightarrow 1$  时， $S_q$  就恢复到玻尔兹曼-吉布斯-申农熵（以下简称玻尔兹曼熵）的标准形式， $-k_B \sum_R P_R \ln P_R$ 。Tsallis 熵具有非广延性，它适合描述长程相互作用的系统和具有分形结构的系统等，由此发展出的统计被称为非广延性统计力学，也称 Tsallis 统计。它已在湍流、反常扩散、天体物理和经济学等许多领域中获得重要应用。Tsallis 熵与玻尔兹曼熵的本质区别在于对微观构型的不同理解。玻尔兹曼熵默认微观构型从一种状态变到另一种状态是等概率的（这种观点曾于 1910 年被爱因斯坦质疑过）；而 Tsallis 熵认为微观构型从一种状态变到另一种状态是沿有选择的复杂分形路径。这种复杂分形路径对于复杂系统（通常表现出混沌边缘性、自组织临界性等）来说，往往是无可置疑的事实，非广延性统计力学也因此获得了广泛的应用。

此被认为是关于复杂系统的统计力学。

非广延性统计力学超越了混沌动力系统统计力学中的热力学比拟描述法，从某种程度上赋予了新定义熵的物理意义，并且可以统一描述平衡和非平衡系统。不过目前除了结合一些实际复杂系统(如湍流)的研究外，它还是建立在一些对理想化的动力学的研究(如 Baker 映射变换)的基础上，这决定了它的微观动力学机理仍然相当缺乏(尽管目前有几个随机水平上的描述)。从某种程度上来讲，它对物质的结构和组织仍然仅是描述性的。目前对这套方法仍然存在着较大的分歧。赞成者认为它弥补了爱因斯坦对玻尔兹曼统计的指责，填补了玻尔兹曼-吉布斯分布不能描述的现象；反对者认为，新形式的熵仅仅是数据的一种新拟合方式，不具有任何新的物理意义。存在这种分歧一点也不为怪，100 多年来，熵概念充满着争论，这个曾经给玻尔兹曼带来极大荣耀的概念(公式  $S=k\ln W$  自 1933 年起就刻在其墓碑上，其重要性被认为不亚于爱因斯坦的公式  $E=mc^2$ )，但它也给他带来了悲剧(1906 年的自杀)。不过，赞成者和反对者都认为，对新形式熵的理解关键在如何理解和计算新引入的参数  $q$ 。目前，参数  $q$  的计算和含义还只是在个别的例子如湍流的研究中有些进展，看来只有让时间来检验 Tsallis 熵的含义和价值了。

为了轮廓和脉络清晰起见，以上从四个方面对非平衡统计力学的最新进展状况进行了分析，当然它们不是完全独立的，而是相互交叉的，不同的研究方法之间经常异花授粉而结出硕果。不同研究体系之间经常深入到对方的后花园，寻找创造机会。

总之，目前的现状是，我们的有严格数学基础的统计理论还是建立在低维动力系统理论的基础上，尽管低维动力系统(混沌动力学)的统计理论提供了不少启发，但低维系统的统计与高维系统的统计之联系目前还相当不明朗。我们必须直接面对多自由度乃至无穷自由度动力学系统来建立统计力学理论，显然在这条线路上已有些进展，如自组织临界性(SOC)作为非平衡态统计力学的一个分支已经建立起来了，当然它还缺乏严格的热力学和数学基础。毋庸置疑的是，对复杂系统中具有无穷自由度系统的自组织层次结构的起源必须借助统计力学才能弄清楚。只有针对无穷自由度的统计理论建立起来了，我们才能像玻尔兹曼和吉布斯平衡态统计力学一样去

处理问题。

### 统计力学的应用及发展思路

目前统计力学的概念和方法(如标度、临界现象、自组织临界性、分形和动力系统的混沌等)已经在经济、生物、生态、复杂网络、优化(模拟退火)、神经网络等复杂系统领域的研究中获得了广泛的应用。这种应用不仅体现在概念上，也体现在方法上。不过可以说，目前的这些应用大多数还只是仿统计力学的，还谈不上是标准的严格统计力学。不过，这种应用和发展也是合理的：对自然的提问可以从不同的层次去考虑，也就是为了理解自然现象，我们首先要考虑的问题是：我们究竟需要从什么层次和水平上去了解动力学问题？某个水平以下的层次对我们是不是必要(从实验的角度上来说，它是否是可以用实验来测量的)？

对于复杂系统，目前尚未发展出从微观到宏观的理论，也没有从子系统的相互作用出发构建出来的普适统计力学理论。目前在看来毫不相干的领域都在运用统计力学的方法，经济学的股票市场、社会交通流、生物学和生态学中反复发现了类似的标度现象，这是否在提醒人们——这难道仅仅是表象而不值得人们去探索其中的本质吗？这里面是否蕴含着统计力学的一个全新的原理？或者需要发展一套全新的统计力学的方法？

众所周知，牛顿力学方程(或与之等价的 Liouville 方程)加上分子混沌假设发展出了玻尔兹曼动力学方程；牛顿力学方程加上随机力发展出了 Langevin 方程和相应的 Fokker-Planck 方程，动力学加上纯概率规则发展了随机行走理论，能显示确定性混沌的低维动力学映射代替真实力学发展出了混沌统计理论。这些理论与经典的玻尔兹曼动理论在某种程度上是完全等价的。

这些统计力学理论的发展方法启示我们似乎应找到动力学的新概率替代方法，从而发展出真正的复杂系统的严格统计理论。当前有不少努力，如活性行走理论和活性布朗粒子理论等均取得了一定的成绩；复杂适应系统理论(CAS)和基于主体的模拟(ABS)等发展出的统计力学都是经典统计力学中微观粒子结合了达尔文的适应和进化的智能个体，它们都提供了复杂系统的真实漫画，目前看来还是相当不错的策略。不过，当前的这些发展主要还是局限在模拟上，还没有发展出具有严格数学基础的理论。

# 纳米金属材料的研究进展及战略地位

陈晓亮 易学华 邓春花

## 纳米材料的含义及其发展背景

纳米是一种长度单位,1 纳米等于  $10^{-9}$  米(即十亿分之一米)。当物质处于纳米级(1~100nm)时,因其独特的结构使之表现出光、电、热、磁和生物活性等特殊功能,人们将这些特殊功能应用于传统工业领域,以改进产品性能、提高质量和降低成本。这种既具不同于原来组成的原子、分子,也不同于宏观物质的特殊性能构成的材料,即为纳米材料。如果仅仅是尺度达到纳米,而没有特殊性能的材料,也不能叫纳米材料。过去,人们只注意原子、分子或者宇宙空间,常常忽略这个中间领域,而这个领域实际上大量存在于自然界,只是以前没有认识到这个尺度范围的性能。第一个真正认识到它的性能并引用纳米概念的是日本科学家,他们在 20 世纪 70 年代用蒸发法制备超微离子,并通过研究它的性能发现:一个导电、导热的铜、银导体做成纳米尺度以后,它就失去原来的性质,表现出既不导电、也不导热。磁性材料也是如此,像铁钴合金,把它做成大约 20~30nm 大小,磁畴就变成单磁畴,它的磁性要比原来高 1000 倍。80 年代中期,人们就正式把这类材料命名为纳米材料。

40 多年以前,科学家们就认识到实际材料中的无序结构是不容忽视的。许多新发现的物理效应,诸如某些相转变、量子尺寸效应和有关的传输现象等,

以现有的理论为基础发展出新的热力学和统计力学理论应是将来几十年的主要任务,那也将会是人类智力觉醒的伟大时代。

复杂性科学的研究核心是提出新的统计理论。大自然关于组织和结构起源的动力学机制的阐明都迫切需要非平衡统计理论的完善。尽管统计力学的概念已被广泛用到远离平衡态的现象和过程的分析,以试图揭开复杂系统有序结构形成的微观动力学机理,但人们借用的更多的是现有统计力学的概念和方法,实质性的进展相对较少。

远离平衡态的统计力学不同于平衡态统计力学,也不同于近平衡态统计力学。在远离平衡态,我们必须面对变化的构型(Configuration)几率空间,

只出现在含有缺陷的有序固体中。事实上,如果多晶体中晶体区的特征尺度(晶粒或晶畴直径或薄膜厚度)达到某种特征长度时(如电子波长、平均自由程、共格长度、相关长度等),材料的性能将不仅依赖于晶格原子的交互作用,也受其维数、尺度的减小和高密度缺陷控制。有鉴于此,HGleitCr 认为,如果能够合成出晶粒尺寸在纳米量级的多晶体,即主要由非共格界面构成的材料[例如,由 50% 体积的非共植晶界和 50% 体积的晶体构成],其结构将与普通多晶体(晶粒大于 1mm)或玻璃(有序度小于 2nm)明显不同,称之为“纳米晶体材料”。后来,人们又将晶体区域或其他特征长度在纳米量级范围(小于 100nm)的材料广义定义为“纳米材料”或“纳米结构材料”。由于其独特的微结构和奇异性能,纳米材料引起了科学界的极大关注,成为世界范围内的研究热点,其领域涉及物理、化学、生物、微电子等诸多学科。

## 纳米金属材料

“纳米金属”是利用纳米技术制造的金属材料,具有纳米级尺寸的组织结构,在其组织中也包含着纳米颗粒杂质。在金属材料生产中利用纳米技术,有可能将材料成分和组织控制得极其精密和细小,从而使金属的力学性能和功能特性得到飞跃的提高。铝系纳米金属是一类最典型的纳米金属,采取纳米技术生产的在铝结晶中分散准晶粒的铝合金,具有

而在平衡统计理论或近平衡统计理论中,构型空间都是事先决定好了的,这意味着我们面临着突破牛顿、爱因斯坦、玻尔、玻尔兹曼、吉布斯等的巨大挑战。

我们需要的是从实质意义上建立起远离平衡态统计力学,这样才能真正理解复杂系统有序结构的微观动力学起源。我们认为未来的发展方向是通过沟通远离平衡态复杂系统中不同层次的非平衡统计规律的研究,建立起新的非平衡统计演化方程。只有这样,才能从微观动力学上了解生命(复杂物质系统)、道德(意识形态)、莎士比亚戏剧(大脑),这将是未来几十年人类智力所面临的巨大挑战。

(天津大学环境科学与工程学院 300072)

现代物理知识