研究简报

热库中振子弛豫过程的精确解

胡 岗
(北京师范大学物理系)

A. Grecos
(*Chimie-Physique II, Université Libre de Bruxelles, Belgium*)

1983 年 12 月 2 日收到

提 要

本文从 Von Neumanm 方程出发,求出了热库中振子跃迁几率的精确解. 在不作弱耦合近似情况下得到了平衡态分布的形式.

热库中振子的行为是二十多年来许多文献[1-6]讨论的内容. 几乎所有工作均采取了弱耦合近似. 精确计算的困难在于,温度 $T \neq 0$ 时人们需要处理多粒子以至无穷粒子问题.

传统的做法是首先对 Von Neumanm 方程通过投影结合弱耦合、马尔可夫近似得到马尔可夫型的主方程. 然后讨论主方程的解[1,2,4]. 本文从 Von Neumaum 方程出发,在二次量子化表象中导出振子几率分布的精确结果,在不采用任何近似情况下获得几率分布向平衡态弛豫和平衡态分布的具体形式.

系统的哈密顿量为

$$H = \omega_0 a^+ a + \int_0^\infty k a_k^+ a_k dk + \int_0^\infty (\lambda v_k a^+ a_k + \lambda v_k^* a a_k^+) dk, \tag{1}$$

其中声子和光子的产生、湮灭算符 a^+, a 和 a_k^+, a_k 均满足玻色对易关系.

考虑初始态

$$\rho(0) = \phi^{-1} \sum_{n=0}^\infty \sum_{q=0}^\infty \int \cdots \int_0^\infty c_n |n, k_1, \cdots, k_q\rangle\langle n, k_1, \cdots, k_q| e^{-\beta(k_1+\cdots+k_q)} dk_1 \cdots dk_q, \tag{2}$$

其中

$$\phi = \mathrm{Tr} e^{-\beta H^f}, \qquad H^f = \int_0^\infty k a_k^+ a_k dk,$$

$$|n, k_1, \cdots, k_q\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!q!}} (a^+)^n a_{k_1}^+ \cdots a_{k_q}^+ |0\rangle,$$

$$\langle n, k_1, \cdots, k_q| = \frac{1}{\sqrt{n!q!}} \langle 0|(a)^n a_{k_1} \cdots a_{k_q},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n = 1, \tag{2'}$$

$\beta = \frac{1}{kT}$，本文中我们直接把 β 叫作温度．显然场处于平衡态．

Von Neumanm 方程的形式解为

$$\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}. \tag{3}$$

本文仅讨论振子从一个对角态跃迁到另一个对角态的几率，在实际问题中正是这种几率分布具有最重要的意义． $W_{nn'}(t)$ 为振子从初始 n' 态在 t 时刻跃迁到 n 态的几率． 对 (3) 式求迹可得

$$W_{nn'}(t) = \phi^{-1}\sum_{qq'=0}^{\infty}\int\cdots\int_0^{\infty}\langle n, k_1,\cdots, k_q|e^{-iHt}|n', k_1',\cdots, k_{q'}'\rangle$$
$$\cdot\, e^{-\beta(k_1'+\cdots+k_{q'}')}\langle n', k_1',\cdots, k_{q'}'|e^{iHt}|n, k_1,\cdots, k_q\rangle dk dk'. \tag{4}$$

形式解 (4) 式是极为复杂的．首先传播子 $\langle n, k|e^{-iHt}|n', k\rangle$ 本身就是很多乘积项的求和，而 (4) 式又要对它们的函数进行多重积分和无穷项求和． 以下我们分三步对 (4) 式进行简化．首先利用玻色产生、湮灭算符的对易性质，多粒子传播子可以用单粒子传播子表示．然后把 (4) 式的复杂形式重新组织使其表示成不可约积分的一定函数，同时利用单粒子传播子把各级不可约积分计算出来．

由 (2′) 式和对易关系

$$[a^+, a] = -1, \qquad [a_k^+, a_{k'}] = -\delta(k-k'),$$
$$[a^+, a_k] = 0,$$

可以得出

$$\sqrt{n!n'!q!q'!}\,\langle n, k_1,\cdots, k_q|e^{-iHt}|n', k_1',\cdots, k_{q'}'\rangle = \delta_{n+q, n'+q'}\sum\prod_{i=1}^{n+q} G_{x_i y_{\nu_i}},$$

其中

$$x_i = \begin{cases} 1 & 1 \leqslant i \leqslant n, \\ k_{(i-n)} & n < i \leqslant n+q; \end{cases}$$
$$y_j = \begin{cases} 1 & 1 \leqslant j \leqslant n', \\ k'_{(j-n')} & n' < j \leqslant n'+q'. \end{cases} \tag{5}$$

取和号包括一切可能的结合，只要符合如下条件：

$$\text{当 } i \neq i' \text{ 时，} \nu_i \neq \nu_{i'}. \tag{6}$$

矩阵元 G_{xy} 的意义为

$$G_{11} = \langle 1|e^{-iHt}|1\rangle, \quad G_{1k'} = \langle 1|e^{-iHt}|k'\rangle,$$
$$G_{k1} = \langle k|e^{-iHt}|1\rangle, \quad G_{kk'} = \langle k|e^{-iHt}|k'\rangle. \tag{7}$$

利用复数共轭，可从 (5) 式直接得出传播子 $\langle n', k'|e^{iHt}|n, k\rangle$ 的形式．

在 (2) 式中，连续谱条件下，平衡态场的归一因子 ϕ 发散．在以下计算的中间过程我们先把发散积分看成有限，在最后步骤令这些量趋于无穷． 可以看到所有无穷项在计算的过程中互相抵消，结果是有限的． ϕ 值的计算如下．

定义不可约积分

$$\iint_0^\infty \langle k|k'\rangle e^{-\beta k'}\langle k'|k\rangle dkdk' = \delta_1,$$

$$\int\cdots\int_0^\infty \langle k_1|k_1'\rangle e^{-\beta k_1'}\langle k_1'|k_2\rangle\langle k_2|k_2'\rangle e^{-\beta k_2'}\cdots\langle k_n|k_n'\rangle e^{-\beta k_n'}\langle k_n'|k_n\rangle dkdk'$$
$$= \delta_n. \tag{8}$$

(以下 dk, dk' 都表示从 1 到 n 的各变量微分乘积）这类积分不可能被表示成两个或两个以上独立积分的乘积.

把 (5) 式(取 $t=0$, $n=n'=0$) 代入 (2) 式,可以得出(见附录)

$$\phi = \sum_{q=0}^\infty \int\cdots\int_0^\infty \langle k_1,\cdots,k_q|k_1',\cdots,k_q'\rangle e^{-\beta(k_1'+\cdots+k_q')}\langle k_1',\cdots,k_q'|k_1,\cdots,k_q\rangle dkdk'$$

$$= \sum_{q=0}^\infty \sum_{\varepsilon\nu\cdot m_\nu=q}\prod_{\nu=1}^{q}\frac{1}{m_\nu!}\left(\frac{\delta_\nu}{\nu}\right)^{m_\nu} = e^M,$$

$$M = \sum_{\nu=1}^\infty \frac{\delta_\nu}{\nu}. \tag{9}$$

定义含时间的不可约积分

$$u_1 = \int_0^\infty \langle 1|e^{-iHt}|k\rangle\langle k|e^{iHt}|1\rangle dk,$$

$$D_1 = \int_0^\infty \langle 1|e^{-iHt}|k\rangle e^{-\beta K}\langle k|e^{iHt}|1\rangle dk,$$

$$\alpha_1 = \int_0^\infty \langle k|e^{-iHt}|k'\rangle e^{-\beta k'}\langle k'|e^{iHt}|k\rangle dkdk',$$

$$u_n = \int\cdots\int\langle 1|e^{-iHt}|k_1\rangle\langle k_1|e^{iHt}|k_1'\rangle e^{-\beta k'}\langle k_1'|e^{-iHt}|k_2\rangle\cdots$$
$$\langle k_{n-1}'|e^{-iHt}|k_n\rangle\langle k_n|e^{iHt}|1\rangle dk_1\cdots dk_n dk_1'\cdots dk_{n-1}',$$

$$D_n = \int\cdots\int\langle 1|e^{-iHt}|k_1'\rangle e^{-\beta k_1'}\langle k_1'|e^{iHt}|k_1\rangle\cdots\langle k_{n-1}|e^{-iHt}|k_n'\rangle$$
$$\cdot e^{-\beta k_n'}\langle k_n'|e^{iHt}|1\rangle dk_1\cdots dk_{n-1}dk_1'\cdots dk_n',$$

$$\alpha_n = \int\cdots\int\langle k_1|e^{-iHt}|k_1'\rangle e^{-\beta k_1'}\langle k_1'|\cdots\langle k_n'|e^{iHt}|k_1\rangle dk_1\cdots dk_n dk_1'\cdots dk_n'. \tag{10}$$

复杂积分 (4)—(7) 式可表示为这三类不可约积分的乘积与和的形式. u_n, D_n 和 α_n 分别对应于

$$|1,k\rangle\langle 1,k| \to |0,k'\rangle\langle 0,k'|,$$
$$|0,k\rangle\langle 0,k| \to |1,k'\rangle\langle 1,k'|,$$
$$|0,k\rangle\langle 0,k| \to |0,k'\rangle\langle 0,k'|$$

跃迁的不可约过程(即不再经过 $|1,k\rangle\langle 1,k|$ 的中间态)对 k, k' 积分的结果. u_n 区别于 D_n 在于后者总有 $e^{-\beta k'}$ 相乘于传播子 $\langle 1|e^{-iHt}|k\rangle$ 和 $\langle k'|e^{iHt}|1\rangle$.

当 n 很大时,每个不可约积分的值是很难写出的,但它们的求和却可以给出,而这些求和将出现在最后的结果中. 例如

$$D(t)=\sum_{n=1}^{\infty}D_n, \tag{11}$$

利用关系

$$|1\rangle\langle 1|+\int_0^{\infty}|k\rangle\langle k|dk=I \tag{11'}$$

不难写出

$$D_n=\mu_n-\sum_{m=1}^{n-1}D_{n-m}\cdot\mu_m,$$

$$\mu_m=\int_0^{\infty}\langle 1|e^{-iHt}|k\rangle e^{-m\beta k}\langle k|e^{iHt}|1\rangle dk. \tag{12}$$

将 (12) 式代入 (11) 式得

$$D(t)=\mu(t)-D(t)\mu(t),\quad D(t)=\frac{\mu(t)}{1+\mu(t)}, \tag{13}$$

$$\mu(t)=\sum_{n=1}^{\infty}\mu_n=\int_0^{\infty}\langle 1|e^{-iHt}|k\rangle\frac{e^{-\beta k}}{1-e^{-\beta k}}\langle k|e^{iHt}|1\rangle dk. \tag{13'}$$

利用 (11′) 式可以建立 $u(t)$ 与 $D(t)$ 之间关系

$$u(t)=\sum_{n=1}^{\infty}u_n=1-R(t)[1-D(t)],$$

$$R(t)=\langle 1|e^{-iHt}|1\rangle\langle 1|e^{iHt}|1\rangle. \tag{14}$$

α_n 是发散的,反复利用关系 (11′) 式可将其发散部分分出

$$\alpha_n=\delta_n-\bar{\alpha}_n, \tag{15}$$

$\bar{\alpha}_n$ 为有限量.

采用附录中完全相同的方法可以求出

$$W_{00}(t)=e^{\alpha(t)}\cdot\phi^{-1}, \tag{16}$$

$$\alpha(t)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_n}{n}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\delta_n}{n}-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\bar{\alpha}_n}{n}$$

$$=M-\bar{\alpha}(t), \tag{17}$$

从而得出

$$W_{00}(t)=e^{-\overline{\alpha(t)}}. \tag{18}$$

同理可以导出

$$W_{n0}(t)=[D(t)]^nW_{00}(t),$$

$$W_{0n}(t)=[u(t)]^nW_{00}(t),$$

$$W_{nn'}(t)=W_{00}(t)\sum_{q=0}^{n,n'\text{较小者}}C_n^qC_{n'}^q[D(t)]^{n-q}[u(t)]^{n'-q}[R(t)\cdot D(t)]^q. \tag{19}$$

由归一化条件 $\sum_{n=0}^{\infty}W_{n0}(t)=1$ 和 (13) 式得到

$$W_{00}(t)=\frac{1}{1+\mu(t)},\qquad \bar{\alpha}(t)=\ln(1+\mu(t)). \tag{20}$$

至此跃迁几率已完全由少量不可约积分和表示. 为了确定这些积分和，只要求出函数 $\mu(t)$ 和 $R(t)$ 即可（见 (13)，(14) 式). 在单粒子子空间中传播子 $\langle 1|e^{-iHt}|1\rangle$ 和 $\langle 1|e^{-iHt}|k\rangle$ 的性质已作过详尽的讨论[7,8]，这里仅给出结果

$$\langle 1|e^{-iHt}|1\rangle = \frac{1}{2\pi i}\int_c \frac{e^{-izt}}{\eta(z)}dz,$$

$$\langle 1|e^{-iHt}|k\rangle = \frac{1}{2\pi i}\int_c \frac{\lambda v_k e^{-izt}}{\eta(z)(z-k)}dz, \tag{21}$$

其中

$$\eta(z) = \omega_0 - z + \int_0^\infty \frac{\lambda^2|v_k|^2}{z-k}dk.$$

在复平面上积分路线 c 是从 $-\infty+i0$ 到 $+\infty+i0$.

耦合系数 v_k 被认为相对于 k 解析，当 $k\to\infty$ 时，v_k 能足够快地趋于零[7,8]. 在这条件下，利用 (13′)，(14) 和 (21) 式不难证明，当 $t\to\infty$ 时，有 $R(t)\to 0$，$\mu(t)\to\mu_0$.

$$\mu_0 = \int_c \frac{1}{\eta(z)}\frac{e^{-\beta z}}{1-e^{-\beta z}}dz. \tag{22}$$

这样

$$\begin{aligned} W_{nn'}(\infty) &= \lim_{t\to\infty} W_{nn'}(t) \\ &= \left(\frac{\mu_0}{1+\mu_0}\right)^n \Big/ 1+\mu_0. \end{aligned} \tag{23}$$

对振子的任意初始分布，振子态都趋于唯一的平衡分布

$$\begin{aligned} \rho(\infty) &= \sum_{n=0}^\infty \left(\frac{\mu_0}{1+\mu_0}\right)^n \Big/ 1+\mu_0 |n\rangle\langle n| \\ &= \sum_{n=0}^\infty (1-e^{-\beta E})e^{-n\beta E}|n\rangle\langle n|, \\ E &= \frac{1}{\beta}\ln\frac{\mu_0}{1+\mu_0}. \end{aligned} \tag{24}$$

显然等效能量 E 是温度 β 的函数. 这告诉我们当子系与热源具有强的相互作用时，热源温度不仅影响子系的分布函数，而且影响到等效能量本身. 这个图象与弱耦合情况完全不同.

附　　录

由 (2) 式可知

$$\begin{aligned} \phi &= \sum_{p=0}^\infty S_p, \\ S_p &= \int\cdots\int \langle k_1',\cdots,k_p', |k_1,\cdots,k_p\rangle e^{-\beta(k_1+\cdots+k_p)}\langle k_1,\cdots,k_p|k_1',\cdots,k_p'\rangle dk dk' \\ &= \frac{1}{(p!)^2}\int\cdots\int \langle 0|a_{k_1'}\cdots a_{k_p'}a_{k_1}^+\cdots a_p^+|0\rangle e^{-\beta(k_1+\cdots+k_p)} \\ &\quad \cdot \langle 0|a_{k_1}\cdots a_{k_p}a^+{}_{k_1'}\cdots a^+{}_{k_p'}|0\rangle dk dk', \end{aligned} \tag{A·1}$$

式中矩阵元 $\langle 0|a_{k_1'}\cdots a_{k_p'}a_{k_1}^+\cdots a_{k_p}^+|0\rangle$ 可由 (5) 式化成若干个积 $\prod_{i=1}^{p} G_{kk'}$ 相加的形式，取和的次数由一切可能的 $a_{k'}$ 和 a_k^+ 之间的对易数来确定.

积分 S_p 是可约的，利用 (5) 和 (8) 式，可以将它用不可约积分来表示. 我们先讨论 S_p 中包含有 m_ν 个 ν 级不可约积分 δ_ν 的部分 $S_p(m_\nu)$，m_ν 和 ν 满足如下关系:

$$m_\nu \cdot \nu \leqslant p. \tag{A·2}$$

由 q 个 k' 和 q 个 k 中分别挑出 ν 个 k' 和 k 来，又由这 ν 个 k 和 k' 配对构造出可能的 ν 级不可约积分的选法有 $(C_q^\nu)^2\nu!(\nu-1)!$ 个. 而 m_ν 个 ν 级不可约积分的可能组合数为 $\prod_{i=0}^{m_\nu-1}[(C_{p-i\nu}^\nu)^2\nu!(\nu-1)!]$. 由于这 m_ν 个不可约积分任意交换次序仅代表同一种可能的组合，所以必须乘以 $1/m_\nu!$ 的因子，m_ν 个 ν 级不可约积分给出因子 $[\delta_\nu]^{m_\nu}$，结果有

$$\begin{aligned}
S_p(m_\nu) &= \frac{[\delta_\nu]^{m_\nu}}{[p!]^2 m_\nu!}\prod_{i=0}^{m_\nu-1}[(C_{p-i\nu}^\nu)^2\nu!(\nu-1)!] \\
&\quad \cdot \int\cdots\int \langle 0|a_{k_1'}\cdots a_{k'_{p-m_\nu\cdot\nu}}a_{k_1}^+\cdots a_{p-m_\nu\cdot\nu}^+|0\rangle e^{-\beta(k_1+\cdots+k_{p-m_\nu\cdot\nu})} \\
&\quad \cdot \langle 0|a_{k_1}\cdots a_{k_{p-m_\nu\cdot\nu}}a_{k_1'}^+\cdots a_{k'_{p-m_\nu\cdot\nu}}^+|0\rangle dk\,dk' \\
&= \frac{[\delta_\nu]^{m_\nu}}{m_\nu!\,\nu^{m_\nu}}\int\cdots\int \langle k_1',\cdots,k'_{p-m_\nu\cdot\nu}|k_1,\cdots,k_{p-m_\nu\cdot\nu}\rangle e^{-\beta(k_1+\cdots+k_{p-m_\nu\cdot\nu})}\langle k_1, \\
&\quad \cdots,k_{p-m_\nu\cdot\nu}|k_1',\cdots,k'_{p-m_\nu\cdot\nu}\rangle dk\,dk'.
\end{aligned} \tag{A·3}$$

此式对满足 (A·2) 式条件的一切 ν 和 m_ν 均成立. 整个 S_p 显然是这一切可能的选择之和. 而在 (A·3) 式中积分号内的因子又回到了 (A·1) 式的形式，只要 $p - m_\nu\cdot\nu > 0$，我们可继续 (A·3) 式的操作，直至 S_p 完全用不可约积分的代数式表示为止，这就得出

$$S_p = \sum_{\Sigma\nu\cdot m_\nu=p}\prod_{\nu-1}^{p}\left[\frac{1}{m_\nu!}\left(\frac{\delta\nu}{\nu}\right)^{m_\nu}\right]. \tag{A·4}$$

将 (A·4) 式代人 (A·1) 式可得出 (9) 式.

参 考 文 献

[1] W. H. Louisell and L. R. Walker, *Phys. Rev.*, B**204** (1965), 137.
[2] E. B. Davies, *Comm. Math. Phys.*, **39** (1974), 91.
[3] E. Braun, *Physica*, **86**A, (1977), 337.
[4] P. Huguenin, *Hel. Phys. Acta*, **51** (1978), 346.
[5] D. C. Khandekar and S. V. Lawande, *J. Math.*, **20**(9) (1979), 469.
[6] R. R. Puri and S. V. Lawande, *Physics Letters*, A**69** (1978), 161.
[7] A. Grecos, *Adv. Chem. Phys.*, **38** (1978), 143.
[8] E. C. G. Sudarshan, C. B. Chin and V. Gorini, *Phys. Rev.*, D**18** (1978), 2914.

THE EXACT SOLUTION OF RELAXATION PROCESS OF AN OSCILLATOR IN A THERMO-BATH

Hu Gang

(Department of Physics, Beijing Normal University)

A. Grecos

(Chimie-Physique II, Université Libre de Bruxelles, Belgium)

Abstract

Starting from the Von Neumanm equation, the exact solution of the transition probability of an oscillator coupled with a thermo-bath is obtained, without the weak coupling approximation. The equilibrium distribution for the oscillator is given explicitely as well.