

强磁场下的输运过程与 Liouville 方程的两种定态解

陈 式 刚

1980年1月11日收到

提 要

本文中讨论了在外场中 Liouville 方程的两种定态解,指出在用 Kubo 公式计算输运系数时的关键之处是:在完成 Kubo 公式中的时间积分之前,必须把关联函数的时间行为表示成趋向平衡的形式.注意到这一点就能得到正确的输运系数表示式.用这种办法,我们重新计算了文献[1]中曾讨论过的强磁场下的电导率,得到了正确的非零的结果.

—

1964年作者曾写过一篇讨论强磁场下横向输运过程的文章^[1],在这篇文章中用文献[2]发展的方法计算了横向电导率,发现可约部分和不可约部分刚好完全抵消,电导率为零.文献[1]中正确地指出:这个结果对应于外场中平衡态的解.为了求出输运系数,作者曾企图用空间反演不变的办法论证:对于输运过程的解,可约部分应该等于零.霍裕平等同志在文献[3]中指出,这个论证是不对的,而且文献[1]中给出的输运系数中出现的输运方程只能给出输运系数为零的解.为了解决这个困难,他们引入了宏观流算子的概念,得到了不等于零的输运系数.

经过和霍裕平同志的讨论,作者认为他对文献[1]的批评是正确的.但是文献[3]中引入宏观流算子的概念作者感到不太满意.这相当于引入一种新的统计假设.因为我们在平衡态的邻域工作的,又利用了 Van Hove 或 Prigogine 的趋向平衡理论.我们出发的平衡态已经相当于趋向平衡理论中有统计假设的初态了.我们不应该再引入其他的统计假设.那么该怎样求得正确的输运系数呢?或者说,以同一的 Liouville 算符怎么表示平衡态的解和输运过程的解呢(要注意这两个解都是定态解)?只有正确地解决了后一问题,以确切的方式表达出输运过程的解之后,才能回答前一个问题.

在本文中作者将论证这样一个观点: Kubo 的输运系数表示式既包含了平衡态的解(在这种情况下它等于零),也包含了输运过程的解(这时它给出正确的输运系数),问题在于如何计算输运系数.其中关键的一步是时间积分的上限 $\Delta t \rightarrow \infty$ 是怎么取的,假使我们先让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 以后再完成其他计算(如算符运算、求迹,对 ω 的积分,体积趋向 ∞ ,及完成趋向平衡理论形式的表示等等)那么会得到平衡态的解.反之,如果先完成其他计算,再让 $\Delta t \rightarrow \infty$,就会得到输运过程的解.在让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 以前要完成的关键计算是要把输

运系数的时间行为表示成趋向平衡理论的形式,即表示成弛豫过程的形式,以后再让 $\Delta t \rightarrow \infty$. 在这个讨论的基础上,我们计算了强磁场下的横向电导率,得到了不为零的表达式,它表明文献[3]的结果基本上是正确的,但是我们的做法更干净,结果是完全严格的(至少在形式上).

二

我们首先用布朗运动模型讨论输运系数计算中可能遇到的问题和从不同表示式出发所得结果的等价性问题. 这个模型具有直观性,在它上面进行的计算和证明都较为简单,但所遇到的问题和所得的结果仍具有普遍的意义.

考虑一个单位质量粒子的一维布朗运动,它的速度由方程

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{v}{\tau} + F(t) \quad (2.1)$$

描述,其中 τ 为弛豫时间, $F(t)$ 为涨落力,它的关联函数为

$$\langle F(t) F(t') \rangle = \frac{2kT}{\tau} \delta(t - t'). \quad (2.2)$$

$\langle \cdots \rangle$ 表示系综平均. (2.1)式的解为

$$v = v_0 e^{-t/\tau} + \int_0^t F(t') e^{-(t-t')/\tau} dt'. \quad (2.3)$$

再积分一次得到坐标 x 的表示式

$$x = x_0 + v_0 \tau (1 - e^{-t/\tau}) + \int_0^t dt' \int_0^{t'} F(t'') e^{-(t'-t'')/\tau} dt''. \quad (2.4)$$

扩散系数的 Kubo 表示式为

$$D = \int_0^\infty \langle v(t) v(0) \rangle dt. \quad (2.5)$$

按照通常的算法,利用(2.3)式及关系

$$\langle v(0) F(t) \rangle = 0 \quad \text{当 } t > 0, \quad (2.6)$$

先完成(2.5)式中对系综平均的计算,得

$$\langle v(t) v(0) \rangle = \langle v_0^2 \rangle e^{-t/\tau}. \quad (2.7)$$

再完成对时间的积分,得

$$D = \langle v_0^2 \rangle \tau. \quad (2.8)$$

现在我们先完成(2.5)式中对时间的积分,但仍保持上限有限,得

$$D = \langle x(\Delta t) v(0) \rangle_{\Delta t \rightarrow \infty} - \langle x(0) v(0) \rangle. \quad (2.9)$$

利用平衡态关联函数的时间反演不变性立刻可以证明

$$\langle x(0) v(0) \rangle = 0, \quad (2.10)$$

所以

$$D = \langle x(\Delta t) v(0) \rangle_{\Delta t \rightarrow \infty}. \quad (2.11)$$

如把(2.4)式代入,也就是说先完成统计计算,然后让 $\Delta t \rightarrow \infty$, 仍然得到(2.8)式. 这也说明(2.11)与(2.5)式是等价的. 假使企图先完成 $\Delta t \rightarrow \infty$ 的极限过程,要注意到通常的

D 的时间积分中带有时间截断因子, 即(2.5)式应改写为

$$D = \int_0^\infty \langle v(t) v(0) \rangle e^{-\varepsilon t} dt. \quad (2.12)$$

这样, (2.9)式成为

$$D = \langle x(t) v(0) \rangle e^{-\varepsilon t} \Big|_0^\infty + \varepsilon \int_0^\infty \langle x(t) v(0) \rangle e^{-\varepsilon t} dt. \quad (2.13)$$

在体积 $v \rightarrow \infty$ 之前让 $\varepsilon \rightarrow 0$, (2.13) 式第二项的积分有限, 乘上 ε 后 $\rightarrow 0$, 所以 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时有

$$D = -\langle x(0) v(0) \rangle. \quad (2.14)$$

由下节的分布函数可以看到, (2.14)式对应于平衡态的解, 根据(2.10)式, 得知(2.14)式的 $D = 0$.

也可以用另一种办法得到 $D = 0$ 的结果. 利用时间平移不变性

$$\langle x(t) x(t') \rangle = f(t - t'),$$

所以

$$\frac{d}{dt} \langle x(t) x(t') \rangle = -\frac{d}{dt'} \langle x(t) x(t') \rangle,$$

即

$$\langle x(t) v(0) \rangle = -\langle v(t) x(0) \rangle.$$

利用(2.3)式得

$$\langle v(t) x(0) \rangle = 0 \quad \text{当 } t > 0. \quad (2.15)$$

(2.9)式成为

$$D = \langle x(\Delta t) v(0) \rangle_{\Delta t \rightarrow \infty} = -\langle v(\Delta t) x(0) \rangle_{\Delta t \rightarrow \infty} = 0. \quad (2.16)$$

这里未让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 以前就有 $D = 0$. 以下将说明在布朗运动模型中这种计算是不允许的.

从另一个不同的表示式出发, 也可以得到同样的结论. 这更可以说明 D 的计算主要只与 $\Delta t \rightarrow \infty$ 的过程有关, 而与 D 的表示式无关(在(2.16)式的意义上说, 是与表示式有关的, 但这只是布朗运动模型的特殊情况). 例如 Kubo 曾用如下办法得到扩散系数的另一种表示式:

$$\begin{aligned} D &= \int_0^{\Delta t} \langle v(t) v(0) \rangle dt \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} (\Delta t - t) \langle v(t) v(0) \rangle dt \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} dt \int_t^{\Delta t} dt' \langle v(t) v(0) \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} dt \int_0^t dt' \langle v(t') v(0) \rangle \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} dt \langle x(t) v(0) \rangle \\ &= -\frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} dt \langle v(t) x(0) \rangle \end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{\Delta t} \langle [x(\Delta t) - x(0)]x(0) \rangle. \quad (2.17)$$

这个表示式在一定意义上与文献[3]中引入的宏观流算子对应,不过在这里 $\Delta t \rightarrow \infty$. 利用对时间的平移和反演不变性可得

$$D = \frac{1}{\Delta t} \langle x(\Delta t)[x(\Delta t) - x(0)] \rangle, \quad (2.18)$$

把它与(2.17)式平均,得

$$D = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Delta t} \langle [x(\Delta t) - x(0)]^2 \rangle. \quad (2.19)$$

(2.19)与(2.8)式是完全等价的. 同样,对 $\Delta t \rightarrow \infty$ 取不同的做法可以得到不同的结果.

例如,将(2.4)式代入(2.19)式,利用(2.2)式计算系综平均,可得

$$\langle [x(\Delta t) - x(0)]^2 \rangle \xrightarrow{\Delta t \rightarrow \infty} 2kT\tau\Delta t, \quad (2.20)$$

所以

$$D = kT\tau = \langle v_0^2 \rangle \tau$$

和(2.8)式相同. 但是,如果先保持系统体积有限,而让 $\Delta t \rightarrow \infty$:

$$D = \lim_{\substack{\Delta t \rightarrow \infty \\ V \text{ 有限}}} \frac{1}{2\Delta t} \langle [x(\Delta t) - x(0)]^2 \rangle = 0, \quad (2.21)$$

在外场中的有限系统在 ∞ 长时间内一定会趋向平衡,所以这是平衡解.

直接把(2.4)式代入(2.17)式,也得到 $D = 0$ 的结果,这时并不需要把 $\Delta t \rightarrow \infty$.

在上面的计算中利用了平衡态关联函数的性质,例如时间平移不变和时间反演不变性. 但是(2.1)式不具有这种性质,它的第一项破坏了反演不变性,第二项破坏了平移不变性. 这使我们在(2.16)和(2.17)式中让 $\varepsilon \rightarrow 0$ 或 $\Delta t \rightarrow 0$ 之前就得到 $D = 0$ 的结果. 反过来,用与(2.17)式等效的(2.18)式来计算时却得到 $D = 2\langle v_0^2 \rangle \tau$ 的结果. 因此不适当地交替运用关联函数的力学性质(时间平移不变和反演不变)和进行统计运算将会得到各种不同的结果. 但是这完全是由统计模型引起的. 在布朗运动模型中为了得到正确的结果,在作统计平均以前要选用一个适当的表示式作为出发点. 因此我们在证明 D 可以等于零时,尽量避免作统计运算,而只强调 $\Delta t \rightarrow \infty$ (或 $\varepsilon \rightarrow 0$) 极限的取法. 在(2.13)和(2.21)式中,我们在对 $\langle \cdots \rangle$ 作任何统计计算和 $v \rightarrow \infty$ 之前让 $\Delta t \rightarrow \infty$, 这样得到的 $D = 0$ 的结果,显然地对应于平衡态的解. 当对系统用趋向平衡理论作认真处理时,不会遇到上述的利用了不同表示式所产生的不确定性. 只要把 $\Delta t \rightarrow \infty$ 的极限做好了,就只可能有两种解: 一种对应于平衡态的解,另一种对应于输运过程的解. 当然,为了计算方便和能得到有意义的结果,我们也要选用一适当的表示式作为出发点. 这个表示式的选用与未微扰 Hamilton 算符的对角表示有关.

三

Boltzmann 方程对外场响应问题有两个不同的定态解. 如果在对外场线性化的方程中保留对坐标的微扰项,将得到平衡态的解;如果保留碰撞项则得到输运过程的解. 在

Liouville 方程中怎样表示这两个解呢? 在本节中我们将讨论这个问题. 说明 Liouville 方程的这两个解在形式上的差别是在完成计算之前让 $\Delta t \rightarrow \infty (\varepsilon \rightarrow 0)$ 或保持 Δt (或 ε) 有限. 然后证明这两个解是不同的, 一个对应平衡态的解, 另一个对应输运过程的解.

考虑处于外电场 $\mathbf{E}$ 中的系统, 它的 Hamilton 算符为 H , 则密度矩阵对外场的一级微扰为

$$\Delta\rho = -i \int_{-\infty}^0 e^{iHt} [e\mathbf{x}, \rho] e^{-iHt+\varepsilon t} \cdot \mathbf{E} dt, \quad (3.1)$$

其中 $\mathbf{x}$ 为整个系统的坐标算符. 设 $\rho = \exp[-\beta(H - F)]$, F 为自由能, 在以下的计算过程中将不写出 $e^{\beta F}$. 得

$$\begin{aligned} -i[e\mathbf{x}, \rho] &= -ie^{-\beta H} \int_0^\beta e^{\lambda H} [\mathbf{x}, H] e^{-\lambda H} d\lambda \\ &= \rho \int_0^\beta \mathbf{v}(-i\lambda) d\lambda, \end{aligned}$$

所以

$$\Delta\rho = \rho \int_{-\infty}^0 e^{iHt} \int_0^\beta \mathbf{v}(-i\lambda) \cdot \mathbf{E} e^{-iHt+\varepsilon t} d\lambda dt.$$

为了强调要在完成趋向平衡的计算之后再让 $t \rightarrow \infty$, 我们将把它写为

$$\Delta\rho_{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \rho \int_0^{\Delta t} e^{-iHt} \int_0^\beta \mathbf{v}(-i\lambda) \cdot \mathbf{E} d\lambda e^{iHt} dt. \quad (3.2)$$

它也可以写成另一种形式: 在(3.2)式右边乘以

$$\int dE \delta(H - E) = 1. \quad (3.3)$$

完成对 λ 和 t 的积分, 保持 ε 有限, 得

$$\Delta\rho_\varepsilon = \rho \int dE \frac{e^{\beta(H-E)} - 1}{H - E} \cdot \frac{1}{i(H - E - i\varepsilon)} \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \delta(H - E), \quad (3.4)$$

这里我们把它记为 $\Delta\rho_\varepsilon$, 以与(3.2)式的 $\Delta\rho_{\Delta t}$ 区别开来.

若在(3.4)式中让 $\varepsilon \rightarrow 0$, 则可得

$$\begin{aligned} \Delta\rho_\varepsilon &\equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Delta\rho_\varepsilon = \rho \int dE \frac{e^{\beta(H-E)} - 1}{H - E} \mathbf{x} \cdot \mathbf{E} \delta(H - E) \\ &= \rho \int_0^\beta d\lambda \mathbf{x}(-i\lambda) \cdot \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

这相应于平衡态的解, 即平衡密度矩阵

$$\rho_e = e^{-\beta(H + e\mathbf{x} \cdot \mathbf{E})} \quad (3.6)$$

对 $\mathbf{E}$ 展开的一级项. 为了保持(3.5)和(3.2)式及(3.4)式的差别, 我们不能让(3.2)式中 $\Delta t \rightarrow \infty$ 或(3.4)式中 $\varepsilon \rightarrow 0$. 容易看出, (3.5)与(3.2)式及(3.4)式有一根本的差别: 对一空间平移不变的系统, (3.2)和(3.4)式是坐标平移不变的, (3.5)式则不是坐标平移不变的.

考虑一个空间平移不变的系统, 例如电声子系统, 它的动量算符可写为

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_p, \quad (3.7)$$

$\mathbf{P}_e$ 为电子部分的总动量算符, $\mathbf{P}_p$ 为声子部分的总动量算符,

$$\mathbf{P}_e = m\mathbf{v}. \quad (3.8)$$

$\mathbf{P}$ 和 H 及 $\mathbf{P}_e$ 和 $\mathbf{P}_p$ 之间有如下关系:

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}, H] &= 0, \\ [\mathbf{P}_e, \mathbf{P}_p] &= 0, [\mathbf{P}, \mathbf{P}_e] = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

利用(3.7),(3.8)和(3.9)式,易见

$$[\mathbf{P}, \Delta\rho_{\Delta t}] = [\mathbf{P}, \Delta\rho_e] = 0, \quad (3.10)$$

而

$$[\mathbf{P}, \Delta\rho_e] = -i\beta N\rho\mathbf{E}, \quad (3.11)$$

N 为电子的粒子数算符. 所以 $\Delta\rho_{\Delta t}$ 与 $\Delta\rho_e$ 是空间平移不变的, $\Delta\rho_e$ 则不是空间平移不变的.

对一具有空间平移不变性的系统, 它在外场中仍保持平移不变的解正是输运过程的解. 为了保持它的平移不变性, 在计算过程中不应该让 $\mathbf{v} = i[H, \mathbf{x}]$ 中的 $[H - E]$ 与 $(H - E - i\varepsilon)^{-1}$ 抵消掉, 即不应该让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 或 $\varepsilon \rightarrow 0$. 另一方面, 从趋向平衡理论的角度^[2], 正是 $\mathbf{x}$ 左边的 $(H - E - i\varepsilon)^{-1}$ 因子与 $\mathbf{x}$ 右边 $\delta(H - E)$ 中的 $(H - E + i\varepsilon)^{-1}$ 项给出了趋向平衡的结果, 如果把左边的 $(H - E - i\varepsilon)^{-1}$ 抵消掉, 就没有趋向平衡现象了. 因此, 当计算输运系数时, 要在完成趋向平衡理论的计算之后再让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 或 $\varepsilon \rightarrow 0$. 文献[2]中对于在 $\mathbf{v}$ 为对角的表象中的计算证明了这一点. 在那里, (3.4) 式中 $\mathbf{v} = i[H, \mathbf{x}] = i[H - E]\mathbf{x}$ 中的 $[H - E]$ 因子不会与分母中的 $[H - E - i\varepsilon]$ 因子抵消, 让 ε 先趋向零或后趋向零是无关紧要的 (为了保持正确的解析性质, ε 不应该等于零), 计算的结果得到了正确的输运系数表示式. 但文献[1]中对强磁场的计算则不同, 在那里我们是在对迴旋中心 R_x 为对角的表象中工作的, 并且也先让 $\varepsilon \rightarrow 0$ 了, 这样不论怎么计算, 实质上一定会出现 $\dot{R}_x = i[H - E]R_x$ 中 $[H - E]$ 因子与分母中 $[H - E - i\varepsilon]$ 因子抵消的现象. 所以得到的电导率总是零, 它对应平衡态的解. 第二节中对(2.11)和(2.13)式的讨论是上述结论的例证, 在对系统作纯力学计算时让 $\Delta t \rightarrow \infty$ 得到零的结果, 而在作统计计算后再让 $\Delta t \rightarrow \infty$, 就会得到有限的结果.

在力学上说 $\Delta\rho_{\Delta t}$ 与 $\Delta\rho_e$ 是等价的, 因此作认真的趋向平衡计算时, 它们应该给出相同的结果. 但在不同的问题中, 它们有各自的方便之处. 例如在文献[2]中讨论的自由粒子表象中用 $\Delta\rho_e$ 较方便, 在强磁的 Landau 表示中则用 $\Delta\rho_{\Delta t}$ 较为方便.

四

经过上面几节的讨论, 现在就明白该如何计算强磁场下的横向输运系数了. 下面仍以横向电导率为例进行讨论.

文献[4]和文献[1]中曾证明强磁场下的横向电导率可归结于只计算迴旋中心运动的贡献. 在矢势 $\mathbf{A} = (0, xH, 0)$ (这里 H 表磁场) 的规范中, 迴旋中心在 x 方向的坐标是

$$R_x = x - \frac{1}{eH} (P_y + m\omega_H x). \quad (4.1)$$

这里 m 为电子质量, H 为磁场, ω_H 为迴旋频率, P_y 为 y 方向的电子动量. R_x 与 Hamilton

算符

$$H_c = \frac{1}{2m} [P_x^2 + (P_y + m\omega_H x)^2 + P_z^2] \quad (4.2)$$

是对易的, 我们可在它们的共同对角化表象中工作. 在这个表象中, 据文献 [4] 和文献 [1], x 方向的电导率为

$$\sigma = e^2 \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \text{Sp}[\dot{R}_x(-i\lambda)\dot{R}_x(t)\rho]. \quad (4.3)$$

在 $\dot{R}_x$ 的两边利用(3.3)式引入两个 $\delta(H - E)$ 函数, 得到

$$\sigma = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} e^2 \int_0^{\Delta t} dt \int_0^\beta d\lambda \int dE \int dE' \text{Sp}[\delta(H - E)\dot{R}_x \\ \times \delta(H - E')\dot{R}_x] e^{\lambda(E - E')} e^{-\beta E} e^{i(E - E')t}.$$

作变数变换并完成对 λ 的积分后得

$$\sigma = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} 2e^2 \int_0^{\Delta t} dt \int dE \int d\omega \text{Sp} \left[\delta\left(H - E - \frac{\omega}{2}\right)\dot{R}_x \right. \\ \left. \times \delta\left(H - E + \frac{\omega}{2}\right)\dot{R}_x \right] \frac{\sinh \frac{1}{2}\beta\omega}{\omega} e^{-\beta E} e^{i\omega t},$$

把 $\dot{R}_x$ 化成 R_x

$$\sigma = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} 2e^2 \int_0^{\Delta t} dt \int dE \int d\omega \text{Sp} \left[\delta\left(H - E - \frac{\omega}{2}\right)R_x \right. \\ \left. \times \delta\left(H - E + \frac{\omega}{2}\right)R_x \right] \omega \sinh\left(\frac{1}{2}\beta\omega\right) e^{i\omega t} e^{-\beta E}. \quad (4.4)$$

按照文献[2]中同样的讨论, 可把(4.4)式表示为

$$\sigma = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^{\Delta t} dt \int dE \int d\omega R_x \{ [\omega - i(\Gamma_{+-}(E, \omega) \\ - \tilde{W}_{+-}(E, \omega))]^{-1} (D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)) \\ + [\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega))]^{-1} (D_-(E, \omega) \\ - D_+(E, -\omega)) \} R_x \omega \sinh\left(\frac{1}{2}\beta\omega\right) e^{i\omega t} e^{-\beta E}, \quad (4.5)$$

式中 D 为预解式算符的对角部分, $\tilde{W}_{+-}$ 为以状态指标 α, α' 为指标的矩阵, R_x 为列矩阵. 它们的定义分别为

$$D_\pm(E, \omega) = \frac{1}{H_0 - E - \frac{\omega}{2} - G \mp iJ}, \quad (4.6)$$

$$\tilde{W}_{+-\alpha\alpha'}(E, \omega) = \frac{\delta}{\delta A(\alpha')} \langle \alpha | i^{-1} [D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)] \\ \times \left[T_+\left(E + \frac{1}{2}\omega\right) A T_-\left(E - \frac{1}{2}\omega\right) \right]_{id} | \alpha \rangle, \quad (4.7)$$

$$\Gamma_{+-\alpha\alpha'}(E, \omega) = \delta(\alpha - \alpha') \int d\alpha'' \tilde{W}_{+-\alpha\alpha''}(E, \omega). \quad (4.8)$$

(4.6)式中 $(G \pm iJ)$ 为 $D_\pm$ 的不可约部分, G 为实部, J 为虚部. (4.7)式中 id 表不可约

对角部分, A 为任意对角算符, T 为反应矩阵:

$$T_{\pm}(E) = V - VD_{\pm}(E)V + \dots \quad (4.9)$$

$\tilde{W}_{+-\omega}$ 有正的实部, Γ_{+-} 也有正实部, Γ_{+-} 的模大于 $\tilde{W}_{+-}$ 的模. 所以 $\Gamma_{+-} - \tilde{W}_{+-}$ 的本征值具有正的实部. 反之 $\Gamma_{-+} - \tilde{W}_{-+}$ 的本征值具有负的实部.

按照上面的讨论, 我们先完成 (4.5) 式中对 ω 的积分. 当 $t > 0$ 时, 可在 ω 复平面的上半平面加上大圆构成闭合回路. 按 (4.6) 式的定义, (4.5) 式的第一项中因子 $[D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)]$ 对 ω 说来在上半平面是解析的, 所以只有因子 $[\omega - i(\Gamma_{+-}(E, \omega) - \tilde{W}_{+-}(E, \omega))]^{-1}$ 贡献一个极点, 它的位置定义为

$$i\theta(E) = i[\Gamma_{+-}(E, i\theta(E)) - \tilde{W}_{+-}(E, i\theta(E))]. \quad (4.10)$$

我们假设它只有一个解. 反之, (4.5) 式的第二项中因子 $(D_-(E, \omega) - D_+(E, -\omega))$ 在上半平面有极点, 而因子 $[\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega))]^{-1}$ 则是解析的. 但我们可以分别对 $D_-(E, \omega)$ 与 $D_+(E, -\omega)$ 的 E 作一位移把 ω 消去. 例如按照 (4.6) 式将 $D_+(E, -\omega)$ 改为 $D_+(E + \frac{\omega}{2}, -\omega) = D_+(E, 0)$, 它与 ω 无关. 分别把带有 $D_-(E, \omega)$ 和 $D_+(E, -\omega)$ 的项的对 E 的积分作一变数变换就可做到这一点. 而变换后的其他因子对 ω 在其上半平面仍是解析的, 因此完成对 ω 的积分后 (4.5) 式第二项的贡献为零. 完成 (4.5) 式中对 ω 的积分, 得到

$$\begin{aligned} \sigma = & \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} -\frac{e^2}{\pi} \int_0^{\Delta t} dt \int dE R_x i\theta(E) \sinh\left(\frac{i}{2}\beta\theta(E)\right) \\ & \times e^{-\theta(E)t} \frac{1}{1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))} \\ & \times (D_+(E, i\theta) - D_-(E, -i\theta)) R_x e^{-\beta E}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

式中 $\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta)$ 表 $\Gamma_{+-}(E, \omega)$ 对 ω 的微商并取 $\omega = i\theta$, $\tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta)$ 也具有同样的意义. 由于 θ 与 $\Gamma'_{+-\omega}(E, \omega) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, \omega)$ 及 $D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)$ 中因子并不交换, 因此对这两个因子的严格定义为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))} (D_+(E, i\theta) - D_-(E, -i\theta)) \\ & \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{\theta t} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega - i\theta}{\omega - i(\Gamma_{+-}(E, \omega) - \tilde{W}_{+-}(E, \omega))} \\ & \times (D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)) e^{i\omega t}. \end{aligned}$$

现在可以完成对 t 的积分

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{e^2}{\pi} \int dE R_x \sin\left(\frac{1}{2}\beta\theta(E)\right) \frac{1}{1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))} \\ & \times \frac{1}{i} (D_+(E, i\theta) - D_-(E, -i\theta)) R_x e^{-\beta E}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

引入定义

$$\Delta(E, \omega) = \frac{1}{2\pi i} (D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)), \quad (4.13)$$

(4.12) 式成为

$$\sigma = 2e^2 \int dE R_x \sin \left\{ \frac{1}{2} \beta \theta(E) \right\} \frac{1}{1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))} \times \Delta(E, i\theta) R_x \rho(E), \quad (4.14)$$

式中 $\rho(E) = e^{-\beta(E-F)}$. (4.3) 式中 $\hat{R}_x(-i\lambda)$ 的宗量 $-i\lambda$ 实际上是一 $i\hbar\lambda$, σ 的经典近似只要把 (4.3) 式中 $\hat{R}_x(-i\lambda)$ 改为 $\hat{R}_x(0)$ 即可, 即相当于在最后的结果中把 $\sin \left\{ \frac{1}{2} \beta \theta(E) \right\}$ 换为 $\frac{1}{2} \beta \theta(E)$. 这样得到经典情况的结果为

$$\sigma = e^2 \rho \int dE R_x \theta(E) \frac{1}{1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))} \times \Delta(E, i\theta) R_x \rho(E). \quad (4.15)$$

(4.14) 和 (4.15) 式各为量子情况和经典情况电导率的完全表示式, 在得到它们时没有作任何近似. 它既包含了全部弛豫过程, 也包含了平衡态密度矩阵对系统内部互相作用的全部微扰展开 (在文献 [3] 中没有考虑到后一种展开).

把 (4.15) 式和霍裕平等的结果^[3] 比较, (4.15) 式少了一项与相对坐标 $(x - R_x)$ 有关的项¹⁾, 而 (4.15) 式比文献 [3] 的相应项严格. (4.15) 式的结果更为简单, 物理意义也更为明确——它说明输运过程完全是通过迴旋中心之间的跃迁来进行的.

把 (4.15) 式与文献 [1] 中的结果比较, (4.15) 式把文献 [1] 中的 $\Gamma_{+-} - \tilde{W}_{+-}$ 换为 $\theta(E)$, 并多出 $[1 - i(\Gamma'_{+-\omega}(E, i\theta) - \tilde{W}'_{+-\omega}(E, i\theta))]^{-1}$ 因子. 这里的 $\Gamma_{+-} - \tilde{W}_{+-}$ 即布鲁塞尔学派引入的碰撞算符 $\phi(E, \omega)$ ^[5]. 把 (4.10) 式写为

$$\theta(E) = \phi(E, i\theta(E)), \quad (4.16)$$

将右边对 θ 展开

$$\theta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\{ \frac{\partial^n}{\partial \omega^n} \phi(E, \omega) \right\}_{\omega=i0} \theta^n, \quad (4.17)$$

对 $\phi(0)$ 迭代展开

$$\begin{aligned} \theta(E) &= \phi(E, 0) + \dot{\phi}_\omega(E, 0) \phi(E, 0) + [\dot{\phi}_\omega(E, 0)]^2 \phi(E, 0) \\ &+ \frac{1}{2} \ddot{\phi}_\omega(E, 0) [\phi(E, 0)]^2 + \dots \end{aligned} \quad (4.18)$$

只准到 $\phi(E, 0)$ 的一级项, (4.15) 式就变成文献 [1] 中的结果:

$$\begin{aligned} \sigma &= \pi e^2 \rho \int dE \sum_{\alpha\alpha'} \Delta_\alpha(E) W_{+-\alpha\alpha'}(E) \Delta_{\alpha'}(E) \\ &\times (R_x(\alpha) - R_x(\alpha'))^2 \rho(E). \end{aligned} \quad (4.19)$$

$\Delta_\alpha(E)$ 在最低级近似下即

$$\Delta_\alpha(E) = \delta(E - E_\alpha), \quad (4.20)$$

E_α 为 α 状态的能量本征值. $W_{+-\alpha\alpha'}$ 由下式定义:

$$\tilde{W}_{+-\alpha\alpha'} \equiv \Delta_\alpha W_{+-\alpha\alpha'}. \quad (4.21)$$

利用 (4.20) 式很容易完成 (4.19) 式中对 E 的积分, 具体的计算是求矩阵元 $W_{+-\alpha\alpha'}$ 并完成

1) 作者猜想: 在宏观流算子的假设下, 作更认真的讨论, 也应该可以把与 $(x - R_x)$ 有关的项消去.

对状态求和。(4.19)式实际上只在近似到相互作用的二级项时是正确的。所以,虽然文献[1]中得到的平衡态解是“直接电流”和“扩散电流”相互抵消的结果,但它们并不简单地完全对应于 σ 的不可约部分和可约部分。

最后,对(4.4)式情况我们再一次重复本文的中心思想。如果一开始就完成对 t 的积分,并让 $\varepsilon \rightarrow 0$,利用 S_p 的轮换不变性可见被积函数是 ω 的奇函数,因此(4.4)式的积分等于零。所以要计算出正确的输运系数,关键在于正确处理时间上的弛豫过程。当过程对时间的变化仍表现为纯粹力学形式时,就完成对时间的积分总得到等于零的结果。只有把对时间的变化写成一种趋向平衡的过程的形式后再完成对时间的积分,才能得到正确的输运系数。

由于霍裕平同志向作者指出文献[1]中存在的问题和周光召同志对作者的督促,才使作者开始认真地考虑这个问题,与他们有关这个问题的讨论对作者的思想有很大启发,谨在此向他们表示谢意。

参 考 文 献

- [1] 陈式刚,物理学报, **20**(1964), 579; 中国科学 **XIII** (1964), 1587.
- [2] 陈式刚,物理学报, **19**(1963), 456; 中国科学, **XIII** (1964), 35.
- [3] 霍裕平等,中国科学,待发表.
- [4] Kubo, Hasegawa and Hashitsume, *J. Phys. Soc. Japan*, **14** (1959), 56.
- [5] 例如参见 I. Prigogine, C. George, F. Henin & L. Rosenfeld, *Chemica Scripta*, **4** (1973), 5.

TRANSPORT PROCESS UNDER STRONG MAGNETIC FIELD AND TWO STATIONARY SOLUTIONS OF THE LIOUVILLE EQUATION

CHEN SHI-GANG

ABSTRACT

In this paper, we discuss the problem of two stationary solutions of the Liouville equation when an external field is present. We show that the key point for calculating the transport coefficient by the Kubo formula is: before completing the integral over time, the time behavior of the correlation function must be expressed in terms of the theory of approach to equilibrium. With this point, being considered, it is then possible to derive the correct expression for transport coefficient. Using this method, we calculate once again the conductivity under strong magnetic field that had been discussed in reference[1], and obtain a correct non-vanishing result.