第 33 卷 第 4 期 物 理 学 报 Vol. 33, No. 4
1984 年 4 月 ACTA PHYSICA SINICA Apr., 1984

Kubo 线性输运系数公式

翁征宇 吴杭生
(中国科学技术大学)
1983 年 4 月 18 日收到

提 要

在这篇短文中,作者对霍裕平等和陈式刚在文[1]—[4]中,提出的和争论的问题,陈述一些不同的看法.

一、引 言

在文献[1]中,霍裕平等人企图从 Kubo 公式[5]出发,进行严格的计算,得到线性输运系数(以后,简称为"严格计算"问题). 他们证明,对强磁场中的带电粒子体系以及其它相类似的作"局域运动"的体系,由 Kubo 公式严格计算出的各种输运系数,都是等于零的.这个结果显然是不合理的. 霍裕平等人提出,应把 Kubo 公式中的流算符用宏观流算符来替代[1,2]. 他们认为,只有引入宏观流算符,才能使输运系数有确定的值.

陈式刚利用 van Hove 理论[6],从 Kubo 公式计算强磁场下横向电导,得到不为零的结果[3]. 他认为,引入宏观流算符是不必要的. 认为在 Kubo 公式基础上引入宏观流算符,是一种新的统计假设和进一步的近似,必然会去掉一部分高级关联[3,4].

在这篇短文中,我们对文献[1—4]提出的和争论的问题,陈述一些不同的看法. 本文限于讨论力学扰动情形.

二、"严格计算"问题

刘维方程为

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)=(L+L_F)\rho(t). \tag{1}$$

$L=H\times 1-1\times H$ 为体系的刘维超算符[7],H 为体系的哈密顿量算符. 一般可以把 H 分成"自由"部分 H_0 和相互作用部分 H'. 相应地 L 可表示为 L_0 和 L' 之和,其中 $L_0=H_0\times 1-1\times H_0$; $L'=H'\times 1-1\times H'$. 在以后讨论中,我们假定 H_0 的能谱是连续的. L_F 表示外场作用. 假设当 $t\leqslant 0$ 时, $L_F=0$, 体系处于热力学平衡态:

$$\rho(t)=\rho_s=\frac{1}{z}e^{-\beta H}. \tag{2}$$

当 $t>0$ 时,在体系上加一个恒定的外场,

$$-L_F = L_B F, \tag{3}$$

其中 F 是一个 c 数,表示外场强度; $L_B = B \times 1 - 1 \times B$, B 是一个算符. 在经过足够长的时间后,体系达到非平衡定态,输运系数就是这个状态的性质.

在准到微扰论一级,刘维方程(1)的解为 $\rho(t) = \rho_0 + \Delta\rho(t)$, 其中

$$\Delta\rho(t) = -i\int_0^t d\tau' e^{-iL(t-\tau')} L_F \rho_0. \tag{4}$$

Kubo 把体系经过足够长的时间后,达到的非平衡定态定义为 $\rho(\infty) = \rho_0 + \Delta\rho(\infty)$. 令 $\tau = t - \tau'$, 由(4)和(3)式得到

$$\Delta\rho(\infty) = iF\int_0^\infty d\tau e^{-iL\tau} L_B \rho_0. \tag{5}$$

由此式算出流 $J_A = \mathrm{Sp}(\dot{A}\Delta\rho(\infty))$, 进而导出 Kubo 线性输运系数公式:

$$\sigma = i\int_0^\infty d\tau \mathrm{Sp}(\dot{A} e^{-iL\tau} L_B \rho_0). \tag{6}$$

对 τ 积分,得到

$$\sigma = -\mathrm{Sp}(\dot{A} R(i0^+) L_B \rho_0), \tag{7}$$

其中 $R(z) = (z - L)^{-1}$ 为豫解式.

利用 $\dot{A} = iLA$ 和 $LA = -AL$ 两等式,由(7)式直接导出

$$\sigma = i\mathrm{Sp}(AL_B\rho_0) = i\mathrm{Sp}([A, B]\rho_0). \tag{8}$$

考虑到,实际遇到的(在恒定外场中的)线性输运现象,A 和 B 是指同一个力学量,或者虽然是指不同力学量,但是它们是对易的. 所以,$\sigma = 0$. 这个结论是霍裕平等人在文献[1]中得到的. 我们这里给出的是另一种证明方法.

可是,霍裕平等人认为,他们这个结论仅仅只适用于强磁场中,带电粒子体系以及其它作"束缚运动"的体系. 对这一点,我们持不同的看法. 因为在由(7)式导出(8)式的过程中,既没有对算符 A 和 B 加任何限制,也没有对体系性质作任何要求,我们只用到下面三个性质:

$$\text{(a)}\quad \dot{A} = iLA, \tag{9}$$

$$\text{(b)}\quad LA = -AL, \tag{10}$$

$$\text{(c)}\quad LR(i0^+)L_B\rho_0 = -L_B\rho_0. \tag{11}$$

第一个性质是量子力学的一般结果.实际上,在 Kubo 导出他的公式 $\sigma \sim \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathrm{Sp}(JJ(t)\rho_0)$ 过程中[5],也用到这个性质. (b) 是超算符 L 的对换 (transposition) 性质[7]. (c) 成立的条件: 要求 $L_B\rho_0$ 不是 L 的不变量. 显而易见, 这个条件是成立的. 所以, $\sigma = 0$ 结论, 并不像霍裕平等人认为的那样, 只能用于作"局域运动"体系, 而是对所有体系都是正确的.

三、讨 论

1. 我们认为, 按 Kubo 公式严格计算, $\sigma = 0$, 是 Kubo 理论的一个合乎逻辑的结果. 为什么这样讲呢?

为此，我们来计算在 Kubo 定义的非平衡定态下，体系的熵．它由下式给出

$$S = -\mathrm{Sp}(\rho(\infty)\ln\rho_0), \tag{12}$$

（见文献［8］，公式（17.67a））．把 $\rho(\infty) = \rho_0 + \Delta\rho(\infty)$ 代入，计及（2）和（5）式，得到

$$S = S_0 + iF\beta\int_0^\infty d\tau \mathrm{Sp}(He^{-iL\tau}L_B\rho_0) + \ln Z\cdot \mathrm{Sp}(\Delta\rho(\infty)), \tag{13}$$

式中 $S_0 = -\mathrm{Sp}(\rho_0\ln\rho_0)$ 是未引入力学扰动以前，体系的平衡态熵．由于 $\mathrm{Sp}(\rho) = \mathrm{Sp}(\rho_0) = 1$，所以 $\mathrm{Sp}(\Delta\rho(\infty)) = 0$，从而（13）式右端第三项等于零．再利用 $HL = LH = 0$ 以及 Kubo 等式

$$L_B\rho_0 = \int_0^\beta d\lambda L e^{-\lambda L}B\rho_0, \tag{14}$$

易证（13）式右端第二项也等于零．因此，

$$S = S_0, \tag{15}$$

即引入外场，没有引起体系熵的改变．事实上，Kubo 定义的非平衡定态 $\rho(\infty)$ 是从刘维定理用微扰论方法得到的．它除了计及初始条件（2）式和力学因果律外，没有引入任何统计假设．所以，用 $\rho(\infty)$ 算出的 S 应和 S_0 相等．

Kubo 公式(6)是直接从 $\Delta\rho(\infty)$ 经阵迹运算得到的，自然也是个纯力学结果．从这样一个公式出发，进行严格运算，得到 $\sigma = 0$，也就很自然的了，是 Kubo 理论的一个合乎逻辑的结果．

2．有鉴于 $\sigma = 0$ 的结果，霍裕平等人认为，不应该以 Kubo 的公式作为计算线性输运系数的出发点．他们提出：应把 Kubo 公式中的流算符用宏观流算符来替代，以此修改的公式为出发点来计算输运系数．我们不同意他们这个看法．

我们认为，正如同可逆的刘维方程是不可逆的非平衡态统计理论的基础和出发点一样，Kubo 公式提供了一个计算线性输运系数的基础和出发点，问题是：Kubo 公式仅仅只提供了一个力学出发点．要从它得到正确的输运系数，必须在计算过程中引入适当的近似(即统计假设)．也只有这样做，才能从一个力学出发点获得正确的统计结果．在杂志上已发表的从 Kubo 公式成功计算线性输运系数的例子，都是这样做的．顺便提及，陈式刚算出的横向电导所以不等于零[3]，主要原因就在于他只保留了矩阵元的对角奇异部分（参见文献［9］，235 页）．

所以，文[1]提出的“严格计算”问题，在问题提法本身就是不正确的．因此，引入宏观流算符也就不必要了．对宏观流的看法，我们和陈式刚在结论上是一致的，但双方持的论点是不同的．

参　考　文　献

［1］ Ho Yu-ping, Hu Xi-wei, Chen Zheng-xiong, *Commun. in Theor. Phys.*, (Beijing, China), **1**(1982), 427.

［2］ 霍裕平，物理学报，**31**(1982)，516.

［3］ 陈式刚，物理学报，**29**(1980)，1323.

［4］ 陈式刚，物理学报，**31**(1982)，600.

［5］ R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, 12(1957), 570.

[6] L. van Hove, *Physics*, **23**(1957), 441.
[7] I. Prigogine, C. George, F. Henin, L. Rosenfeld, *Chemica Scripta*, 4(1973), 5.
[8] D. N. Zubrev, Nonequilibrium Statistical Thermodynamics, (1974).
[9] S. Fujita, in 1962 Brandeis Lectures, Vol. 3, Statistical Physics, Editor K. W. Ford.

NOTE ON THE KUBO FORMULA OF THE LINEAR TRANSPORT COEFFICIENT

WENG ZHENG-YU WU HANG-SHENG
(*University of Science and Technology of China Hefei*)

ABSTRACT

In this letter, some comments are presented on the problem proposed and discussed by Ho et al. and Chen in the papers [1]—[4].