第 38 卷 第 9 期 物 理 学 报 Vol. 38, No. 9
1989 年 9 月 ACTA PHYSICA SINICA Sept., 1989

耗散量子隧道系统中的局域-退局域转变*

陈 鸿 章豫梅 吴 翔
上海同济大学物理系

1988 年 11 月 7 日收到

通过考虑声子基态交迭积分对隧道参量的重整化效应，本文提出一种新的方法来研究玻色型耗散量子隧道系统中的局域-退局域转变．研究表明，已有的理论结果主要建立在位移声子态近似的基础上，而本文的方法可以用来研究其它声子基态(如位移压缩声子态)对局域-退局域转变的影响．

一个粒子在一个 N 阱势 ($N \geqslant 2$) 中的量子隧道运动为许多物理及化学问题提供了一个简单的理论模型．过去通常将这种量子隧道系统视为一个孤立系统处理，认为它与周围环境没有能量交换．近年来，环境的耗散效应对量子隧道系统的影响引起了人们的很大兴趣，如耗散对宏观量子隧道过程的影响[1]，对无序体系中原子隧道态的影响[2-4]等．利用路径积分技术及 Anderson 等人的重整化方法，许多作者发现，在温度 $T=0$ 时玻色型耗散的量子隧道系统存在局域-退局域转变[5]．这种转变起源于低频声子所引起的红外发散效应，因此它取决于耦合系统中声子基态的性质．一般来说，耗散量子隧道系统中的声子基态难以严格给出，不同的近似得到不同的声子基态[6]．这样，一个重要的问题就是研究不同声子基态的选择对局域-退局域转变的影响，而现有的路径积分技术却难以做到这一点．本文将提出一种新的方法来研究局域-退局域转变．这种方法并不涉及到路径积分技术，而仅仅从声子基态交迭积分出发，即可得到标度方程．我们发现，现有的标度理论几乎与绝热近似完全等价．

为简单起见，仅考虑一个粒子在一个双阱势 ($N=2$) 中运动，并与一个声子库相互作用．本文的讨论推广到多阱势 ($N>2$) 玻色库问题并没有实质性困难．通过 Tomonaga 变换，一个费密库可与一个玻色库相联系[7]，因此本文的讨论还可以推广到费密库情形．问题的哈密顿量为

$$H = -\Delta_0\sigma_x + \sum_k \omega_k b_k^+ b_k + \sum_k g_k(b_k^+ + b_k)\sigma_z, \tag{1}$$

Δ_0 为"裸"隧道参量，σ_x, σ_y 为 Pauli 算符，b_k^+ 为声子算符，g_k 为耦合系数．为了更具有一般性，ω_k 与 g_k 定义为

$$\omega_k = \alpha(ka_0)^\nu, \quad g_k = \gamma(ka_0)^\lambda, \tag{2}$$

α, γ 为比例常数，a_0 为双阱势的特征长度．在温度 $T=0$ 时，声子库对隧道运动的影响可写成重整化隧道参量形式：

* 国家青年自然科学基金和国家自然科学基金资助的课题．

$$\Delta=\Delta_0\langle\Phi_{\mathrm{ph},l}|\Phi_{\mathrm{ph},r}\rangle, \tag{3}$$

式中 $\Phi_{\mathrm{ph},l}(\Phi_{\mathrm{ph},r})$ 为粒子处于左侧(右侧)势阱时的声子基态. 因此，声子基态的选取对重整化隧道参量有很大影响. 下面将研究由(1)式所描述的耦合系统中的声子基态.

将表征位移的么正变换

$$S=\prod_k \exp[\sigma_z(g_k/\omega_k)(b_k^+-b_k)] \tag{4}$$

作用到H上给出

$$\begin{aligned}\widetilde{H}&=SHS^{-1}\\&=\sum_k\omega_k b_k^+b_k-\sum_k(g_k^2/\omega_k)-\Delta_0\left\{\cosh\left[\sum_k(2g_k/\omega_k)(b_k^+-b_k)\right]\right\}\sigma_x\\&\quad-\Delta_0\left\{i\sinh\left[\sum_k(2g_k/\omega_k)(b_k^+-b_k)\right]\right\}\sigma_y.\end{aligned} \tag{5}$$

从 $\widetilde{H}$ 中可以看出隧道粒子对声子库的两种不同影响. 第一种来自 σ_x 项，它代表处于基态 ($\sigma_x=+1$) 或激发态 ($\sigma_x=-1$) 的隧道粒子对声子库的扰动. 而σ_y项则描述隧道粒子在其基态—激发态跃迁过程中对声子库的扰动. 这种跃迁需要声子参与，仅在温度 $T>\Delta_0/k_B$ 时才起重要作用. 本文主要讨论 $T=0$ 时的行为,所以在下面的计算过程中将略去 σ_y 项. 当隧道粒子处于基态时,(5)式给出一个等效声子哈密顿量

$$H_{\mathrm{ph,eff}}=\sum_k\omega_k b_k^+b_k-\Delta_0\cosh\left[\sum_k(2g_k/\omega_k)(b_k^+-b_k)\right]-\sum_k(g_k^2/\omega_k). \tag{6}$$

这个哈密顿量描述一个具有非线性相互作用的复杂声子体系. 一般来说，$H_{\mathrm{ph,eff}}$ 的基态难以严格求解,必须借助近似方法. 在零阶近似下 (即 $\cosh x\approx1$)，$H_{\mathrm{ph,eff}}$ 的基态为通常的真空态 Φ_{vac}. 则声子的基态为

$$\Phi_g(\sigma_x)=S^{-1}\Phi_{\mathrm{vac}}=\prod_k\exp[\sigma_x(g_k/\omega_k)(b_k^+-b_k)]\Phi_{\mathrm{vac}}, \tag{7}$$

即所谓位移真空态. (7)式表明,在零阶近似下，与隧道粒子的耦合仅导致声子波函数的刚性位移. 若近似到更高阶，$H_{\mathrm{ph,eff}}$ 将给出新的声子基态，这一点将在后面讨论. 对于(7)式表示的位移真空态,重整化的隧道参量为

$$\begin{aligned}\Delta&=\Delta_0\langle\Phi_{\mathrm{ph},l}|\Phi_{\mathrm{ph},r}\rangle\\&=\Delta_0\langle\Phi_g(\sigma_x=+1)|\Phi_g(\sigma_x=-1)\rangle\\&=\Delta_0e^{-W},\end{aligned} \tag{8}$$

W为 Debye-Waller 因子

$$W=\sum_k 2(g_k/\omega_k)^2. \tag{9}$$

根据(2)式,对 d 维声子库有

$$W=\kappa\int_0^\infty\theta(\xi-1)\xi^{x-3}e^{-\tau_c\xi/\tau_0}d\xi, \tag{10}$$

$\xi=\omega\tau_0$, $\theta(x)$ 为阶跃函数,

$$x=(2\lambda+d+1)/\nu. \tag{11}$$

无量纲耦合系数 κ 的定义为

$$\kappa = \frac{C\gamma^2}{\pi\nu\alpha^2}(\tau_0 d)^{2-x}. \tag{12}$$

常数 C 的大小仅与维数 d 有关．在(10)式中，引入了两个截断因子：声子能谱的上限截断因子 $\omega_c = \tau_c^{-1}$ 及下限截断因子 $\omega_0 = \tau_0^{-1}$．当 $\omega_0 \to 0(\tau_0 \to \infty)$，阶跃函数 $\theta(\xi-1) \equiv 1$．这时(10)式等号右边积分的收敛性取决于 x 的数值．当 $x > 2$ 时，积分收敛并给出 $\Delta \neq 0$；当 $x \leqslant 2$ 时，积分发散并给出 $\Delta = 0$．所以 ω_0 又称为红外发散截断因子，它反映了低频声子对粒子隧道运动的影响．

下面将以 ω_0 作为基本标度变化参量进行标度分析．在给出标度方程之前，先看看这种标度变化的物理含义．当重整化的隧道粒子与热库达到热平衡时，隧道体系的配分函数为

$$Z_T = \frac{1}{2}\cosh[\Delta(\omega_0)/2k_B T]. \tag{13}$$

根据文献[5]的取法 $\omega_0 = p\Delta(p > 1)$，(13)式又可写成

$$Z_T = \frac{1}{2}\cosh(\omega_0/2k_B T p), \tag{14}$$

即 Z_T 只跟 ω_0 和 $k_B T$ 这两个特征能量的比值有关．在保持 Z_T 不变的意义下，ω_0 的变化就相当于热库温度 T 的变化．为了便于与其它文献比较，以 τ_0 为标度变化因子．随着 τ_0 增大到 $\tau_0 + d\tau_0$，重整化隧道参量的相应变化为

$$\Delta(\tau_0 + d\tau_0) = \Delta_0(1-\kappa)d\ln\tau_0. \tag{15}$$

根据逃逸率的定义 $y = \Delta\tau_0$，上式给出 y 的标度方程

$$dy/d\ln\tau_0 = (1-\kappa)y. \tag{16}$$

另外，(12)式给出 κ 的标度方程

$$d\kappa/d\ln\tau_0 = (2-x)\kappa. \tag{17}$$

下面将(16)，(17)两式与路径积分理论及 Anderson 重整化方法的结果比较．对欧姆耗散 ($x = 2$) 的双阱势系统，文献[5]给出

$$dy/d\ln\tau_0 = (1-\kappa)y, \tag{18}$$

$$d\kappa/d\ln\tau_0 = -y^2\kappa. \tag{19}$$

对多阱势体系，文献[8]给出

$$dy/d\ln\tau_0 = (1-\kappa')y, \tag{20}$$

$$d\kappa'/d\ln\tau_0 = (2-x)\kappa', \tag{21}$$

式中 $\kappa' = \kappa\Gamma(x-1)$，$\Gamma(x-1)$ 为 Γ 函数．无量纲耦合系数 κ 乘上一个与标度因子无关的常数并不影响最后的标度结果，所以本文的结果与文献[8]的结果相同．对欧姆耗散情形 ($x = 2$)，$\kappa = \kappa'$，(17)式给出 $\kappa = \kappa_0$ 为标度不变．从(16)式看出，κ_0 的不同取值将影响 y 的标度行为：随着 τ_0 增大(或热库温度 T 下降)，$\kappa_0 < 1$ 导致 y 增大，$\kappa_0 > 1$ 导致 y 减小，而 $\kappa_0 = 1$ 为不动点．当 $\tau_0 \to \infty$ (或 $T = 0$)，对 $\kappa_0 < 1$ 有 $y \neq 0$，即隧道粒子处于退局域状态；而对 $\kappa_0 > 1$ 有 $y = 0$，即隧道粒子处于局域状态．本文的结果不同于双阱势的路径积分理论结果．这种差异的原因是，本文的方法对双阱及多阱势系统给出同样的结果，因为相邻势阱间的声子基态交迭积分是一样的．而路径积分理论由于跳跃路径的限制，双阱势系统的结果不同于多阱势系统的结果[8]．

标度方程(16)、(17)式是建立在哈密顿量(6)式的零阶近似的基础上，这时耦合对声子基态波函数的影响仅仅是简单的绝热刚性位移．对高频声子模式（$\omega_k \gg \Delta$）这种近似是合理的．但对低频模式（$\omega_k \leqslant \Delta$），更精确的基态还应同时包含耦合的形变及非绝热两种效应．在这种新的基态下，我们期待将会出现新的局域-退局域转变条件．本文提出的方法可以直接进行这方面的研究，而现有的路径积分理论却难以做到这一点．事实上我们已经发现[6]，在一阶近似下$\left(\text{即 }\cosh x \approx 1 + \frac{1}{2} x^2\right)$，哈密顿量(6)式的基态为压缩态．以位移压缩真空态作为新的声子变分基态可以同时反映耦合的形变及非绝热两种效应．利用本文提出的方法可以给出新的局域-退局域转变条件，有关这方面的详细讨论我们将另文给出．

作为结束语，本文提出了一种新的方法来研究耗散量子隧道系统中的局域-退局域转变．与现有的方法比较，本文的方法不仅非常简明，而且可以研究不同声子基态的选择对局域-退局域转变条件的影响．我们发现，现有的标度理论几乎与绝热近似完全等价．

[1] S. Chakravarty and S. Kivelson, *Phys. Rev.*, **B32**(1985), 76.
[2] H. Chen and X. Wu, *Phys. Lett.*, **A116**(1986), 63.
[3] H. Chen, X. Wu and J. X. Fang, *J. Phys. C*, **20**(1987), 4891.
[4] H. Chen, X. Wu and J. X. Fang, *Solid State Commun.*, **60**(1986), 373.
[5] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Gray and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.*, **50**(1987), 1.
[6] H. Chen, Y. M. Zhang and X. Wu, *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 546.
[7] P. Hedegard, *Phys. Rev.*, **B35**(1987), 533.
[8] K. Itai, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 7609.

LOCALIZATION-DISLOCALIZATION TRANSITION IN DISSIPATIVE QUANTUM TUNNELING SYSTEMS

CHEN HONG ZHANG YU-MEI WU XIANG
Department of Physics, Tongji University, Shanghai

(Received 7 November 1988)

ABSTRACT

Based on the renormalization effect of the phonon ground state on the tunneling parameters, a new method is proposed to investigate the localization-dislocalization transition of a tunneling system with bosonic bath. Our study shows the previous theories are in principle built on the displaced phonon state approximation, while our method may be used to examine the effects of other type of phonon ground states (such as squeezed phonon state) on the localization-dislocalization transition.