

# 非线性耗散对亚稳态系统量子衰变速率的影响<sup>\*</sup>

毕 磊 包景东<sup>†</sup>

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2006 年 6 月 1 日收到, 2006 年 11 月 20 日收到修改稿)

发展了一种快速傅里叶变换路径积分方法, 研究非线性耗散系统的量子衰变速率, 得到了 Bounce 轨道的作用量  $S_B$ , 即衰变速率的指数因子. 在系统与环境存在非线性耦合  $f(x) = \tan[\lambda(x - x_0)]$  的情形下, 发现其对衰变速率具有抑制作用. 指数因子随温度  $T$  的关系不再满足  $S_B = a[1 - b(T/T_c)^2]$  法则; 与通常的线性耗散情形相比, 跨越温度  $T_c$  回升, 即系统更早地进入穿透区域.

关键词: 量子衰变, 非线性耦合, 路径积分, 快速傅里叶变换

PACC: 0365D, 0365S

## 1. 引 言

亚稳态耗散系统的量子衰变是物理学、化学和生物学领域中遇到的普遍问题, 因而一直受到人们持续的研究和关注<sup>[1-4]</sup>. Langer<sup>[5]</sup>提出的热力学方法(自由能虚部)已被认为是得到系统衰变速率的一种恰当途径, 且基于系统加热浴模型和 Feynman 路径积分理论的基础上, 已经形成了处理量子衰变问题的统一方式<sup>[6]</sup>. 这一处理方式的基本思想是: 当系统和热浴的整体处于平衡态时, 利用虚时间路径积分可以得到整体的量子配分函数, 由于欧几里德拉格朗日量对环境坐标是二次型的, 因而可以对热浴的自由度进行积分, 这时系统的平衡态和准平衡态的行为由约化配分函数来描述. 已知配分函数便得到了系统的自由能, 从而给出衰变速率. 配分函数可以根据路径积分半经典近似方法计算, 这时亚稳态系统穿透率具有如下表达式:  $\Gamma = A \exp(-S_B/\hbar)$ , 这里  $S_B$  为使有效作用量取极值时的“经典轨道”所对应的作用量,  $A$  为“经典轨道”附近的涨落而导致的前置因子.

已有的研究表明<sup>[6]</sup>, 系统衰变速率强烈地依赖于温度. 根据系统衰变的不同机制, 可以将温度划分为三个区域: 高温热激发区、跨域区和量子穿透区. 在不同的温度区域中,  $S_B$  所取的形式是不相同的.

高温时, “经典轨道”为平庸解, 粒子永远停留在鞍点处或基态; 当温度小于跨越温度  $T_c$  时, 出现非平庸解 Bounce 轨道, 它对量子穿透起主要作用<sup>[7]</sup>.

线性耗散对亚稳态系统穿透速率的影响已有深入的研究<sup>[6]</sup>. 在这种情形下 Bounce 轨道的作用量与温度的关系可写作:  $S_B = a[1 - b(T/T_c)^2]$  ( $a, b$  均为正数). 然而, 线性耦合在很多实际的物理和化学系统中是不合适的, 是一种理想化的概念. 例如, 在极化介质中的电荷转移反应(质子输运、 $\text{SN}_2$  反应)实际问题中, 环境和系统的耦合函数不具有线性形式<sup>[8]</sup>. 对于非线性耦合情形,  $S_B$  与温度的关系是否仍然具有  $S_B = a[1 - b(T/T_c)^2]$  的形式? 对这个问题进行深入探讨, 将对一般耗散系统的量子穿透率是很有意义的.

另外, 对于线性耗散系统(不考虑势在鞍点处的非简谐性情况下), 当温度  $T$  降低到  $T_c$  时, 半经典近似得到的前置因子发散<sup>[7]</sup>, 出现对量子穿透起主导作用的 Bounce 轨道. 在这里, 导致前置因子发散的 温度与 Bounce 轨道出现的温度是相同的, 且与保守系统(摩擦为零)的情况相比, 耗散会导致系统跨越温度的降低. 那么, 在非线性情况下, 跨越温度的定义式与 Bounce 轨道出现的温度是否相符合? 或者非线性耗散对跨越温度有什么影响? 这也是本文关注的问题.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10235020)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050027001)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

本文给出了量子耗散问题的基本模型和 Bounce 轨道方程(非线性积分微分方程)的数值解法,对穿透速率的指数因子的数值结果进行了讨论.

## 2. 模型和计算方法

在非线性耦合下,系统和热浴的欧几里德拉格朗日量可以写为<sup>[9]</sup>

$$L^E = \frac{1}{2} M \dot{x}^2 + V(x) + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_{\alpha} [ \dot{q}_{\alpha}^2 + \omega_{\alpha}^2 q_{\alpha}^2 ] + \sum_{\alpha=1}^N \left[ - C_{\alpha} q_{\alpha} f(x) + \frac{C_{\alpha}^2}{2 m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} f^2(x) \right], \quad (1)$$

式中  $V(x)$  为亚稳态势(如图 1 所示),环境热浴由无穷多个( $N \rightarrow \infty$ )谐振子组成,摩擦起源于系统和环境的耦合  $f(x)$ ,  $C_{\alpha}$  为耦合系数.这里不考虑因为耦合而导致外势场  $V(x)$  的重正化.消除环境振子的坐标  $q_{\alpha}$  以后,平衡态下耗散系统的量子配分函数可以写成虚时间路径积分的形式<sup>[6]</sup>,

$$Z = \int D[x(\tau)] \exp(-S[x(\tau)]/\hbar). \quad (2)$$

这里  $S$  为有效作用量,

$$S = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left( \frac{1}{2} M \dot{x}^2 + V(x(\tau)) \right) + \frac{1}{2} \int_0^{\hbar\beta} \int_0^{\hbar\beta} d\tau d\tau' k(\tau - \tau') f(x(\tau)) f(x(\tau')), \quad (3)$$

式中  $x(\tau)$  是周期为  $\hbar\beta$  的积分路径, $\beta$  是温度的倒数, $k(\tau)$  是周期为  $\hbar\beta$  的积分核函数.非局域项包含了环境对系统的一切影响.

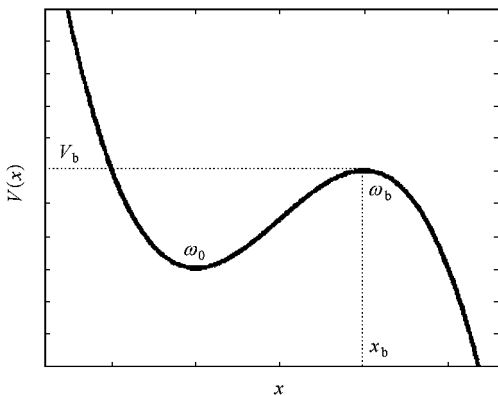


图 1 亚稳态立方势  $\omega_0, \omega_b$  为基态和鞍点的频率,  $V_b$  为位垒高度,  $x_b$  为鞍点位置

为了计算配分函数(2)式,根据路径积分半经典近似的思想,对积分起主要作用的周期性路径为作用量泛函的稳定点.因此,我们令作用量的一阶变

分为零,于是得到欧拉-拉格朗日方程

$$M\ddot{x} - V'(x) - \int_0^{\hbar\beta} k(\tau - \tau') f(x(\tau')) d\tau' = 0. \quad (4)$$

方程(4)的解即为“经典轨道”.容易看出,方程(4)有两个平庸解:  $x(\tau) = 0$ ,  $x(\tau) = x_b$ .在线性耦合情形时,跨越温度有非平庸解的出现,即以上所述的 Bounce 轨道<sup>[10]</sup>.其中平庸路径  $x(\tau) = x_b$  和 Bounce 轨道的作用量与衰变速率的指数因子直接相关.因而要研究作用量的规律,我们必须求解方程(4).

一般情况下,无法得到 Bounce 路径的解析解,对于线性耗散情形,现有的解决方法有两个.一是利用傅里叶级数将周期性路径进行展开,从而将方程(4)化为代数方程,进行迭代求解<sup>[7,11,12]</sup>.二是先给出试探解,再采用变分方法进行计算<sup>[13]</sup>.对于非线性耗散系统,我们沿用第一种方法的思想(但是需要推广).这里我们利用离散傅里叶变换,首先把虚周期  $\hbar\beta$  分割成  $L$  个等份,每一个小等份的宽度为  $\epsilon = \hbar\beta/L$ .因而周期性路径  $x(\tau)$  和积分核  $k(\tau)$  可以展开为离散形式的傅里叶级数

$$x(\tau_l) = \sum_{n=1}^L R_n \exp(i\omega_n \tau_l), \quad (5)$$

$$k(\tau_l) = \frac{1}{\hbar\beta} \sum_{n=1}^{L-1} K(\omega_n) \exp(i\omega_n \tau_l). \quad (6)$$

其中

$$K(\omega_n) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{C_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \frac{2 - 2\cos\omega_n \epsilon}{2 - 2\cos\omega_n \epsilon + \omega_{\alpha}^2 \epsilon^2},$$

$$\omega_n = 2\pi n / \hbar\beta,$$

$$\tau_l = \epsilon l \quad (l = 1, 2, \dots, L).$$

这里  $\omega_n$  为松原频率.于是 Bounce 轨道方程(4)具有如下形式:

$$\mu_n^b R_n = \sum_{l=1}^L x(\tau_l) \exp(i\omega_n \tau_l) + \Lambda, \quad (7)$$

其中  $\Lambda$  是非线性耦合在轨道方程中的体现,

$$\mu_n = \frac{Lx_b}{\omega_0^2} \left[ \frac{2 - 2\cos(\omega_n \epsilon)}{\epsilon^2} + \omega_0^2 + \frac{f'(x_b) \sum K(\omega_n)}{M} \right], \quad (8)$$

$$\Lambda = - \frac{x_b \epsilon}{m\omega_0^2} \sum_{l,l'=1}^L k(\tau_{l-l'}) [f'(x(\tau_l)) f(x(\tau_{l'})) - f'(x_b) f(x(\tau_l) - x_b)] \exp(i\omega_n \tau_l). \quad (9)$$

Bounce 轨道所对应的作用量(穿透速率指数因子)为

$$S_B = \frac{1}{2} \hbar\beta \sum_{n=1}^{L-1} \frac{2 - 2\cos(\omega_n \epsilon)}{\epsilon^2} R_n^2 + \sum_{n=1}^L V(x(\tau_l)) \epsilon$$

$$+ \frac{\varepsilon^2}{2} \sum_{l, l'=1}^L k(\tau_l - \tau_{l'}) f(x(\tau_l)) f(x(\tau_{l'})), \quad (10)$$

其中  $\lambda = f'(x_b)$  为耦合函数在鞍点处的一阶导数.

下面对方程 (7) 进行迭代求解. 需要注意的是, 直接迭代方程是不稳定的, 将导致结果发散. 我们做如下的变换:

$$R_n = R'_n / |R'_n|^p \quad (1 \leq p < 2),$$

并选取 Bounce 轨道的试探解<sup>[13]</sup>作为初值,

$$x(\tau_l) = \frac{a}{1 - b \cos(2\pi\tau_l / \hbar\beta)},$$

其中  $a > 0, -1 < b < 1$ . 将  $x(\tau_l)$  代入 (7) 式等号右端, 给出新的  $R'_n$ , 利用 (7) 式反复迭代至收敛. 再通过 (10) 式计算出作用量  $S_B$ . 与传统的方法比较, 上述做法有如下特点和改进: 传统方法中  $p = 2$  时的变换不能直接推广到非线性情形, 会导致迭代的振荡, 必须减小这个计算因子才能得到收敛解. 非线性情况下 (7) 式的计算反复利用了快速傅里叶变换, 与传统的代数运算相比较, 大大提高了运算效率, 同时可以增大  $L$  以提高精度.

为了确定积分核, 我们引入环境振子的谱密度<sup>[14]</sup>

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{C_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \delta(\omega - \omega_\alpha), \quad (11)$$

则积分核的傅里叶系数可以写为如下积分形式:

$$K(\omega_n) = \frac{2}{\pi} \int d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \frac{2 - 2\cos(\omega_n \varepsilon)}{2 - 2\cos(\omega_n \varepsilon) + \varepsilon^2 \omega^2}. \quad (12)$$

对于 Drude 摩擦, 谱密度

$$J(\omega) = \eta\omega [1 + (\omega\tau_d)^2],$$

其中  $\tau_d$  为记忆时间. 这时

$$K(\omega_n) = \frac{2\eta \sin(\omega_n \varepsilon / 2)}{\varepsilon + 2\sin(\omega_n \varepsilon / 2)\tau_d}. \quad (13)$$

容易看出  $\tau_d = 0$  时, Drude 摩擦变为欧姆摩擦.

最后, 我们给出跨越温度的定义式

$$2 - 2\cos(\omega_n \varepsilon) - \varepsilon^2 \omega_b^2 + \frac{K(\omega_n) \varepsilon^2}{M} = 0. \quad (14)$$

对于 Drude 摩擦, 这时需要求解关于  $\varepsilon$  的三次代数方程<sup>[15]</sup>, 我们解得跨越温度为

$$T_c = [k_B(-q/2 + \sqrt{R})]^{1/3} + (-q/2 - \sqrt{R})^{1/3}, \quad (15)$$

式中  $k_B$  为玻尔兹曼因子. 相关参数定义如下:

$$b = 2\tau_d L \sin(\pi/L) - 2\eta_0 f'(x_b) L \sin(\pi/L) \omega_b^2,$$

$$c = -4L^2 \sin^2(\pi/L) \omega_b^2,$$

$$d = -8\tau_d L^3 \sin^3(\pi/L) \omega_b^2,$$

$$p = c - b^3/3,$$

$$q = d - bc/3 + 2b^3/27,$$

$$R = p^3/27 + q^2/4.$$

对于欧姆摩擦,

$$T_c = \frac{\omega_b}{2\pi} \left[ \frac{L}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{L}\right) \right]^{-1} \left[ \sqrt{\alpha^2 f'(x_b)^2 + 1} - \alpha \right],$$

其中  $\alpha = \eta_0/2\omega_b$  为无量纲阻尼系数.

### 3. 结果及讨论

将以上提出的方法应用于实际耗散系统, Bounce 轨道的作用量将对系统的穿透速率起关键作用. 我们探讨它的规律. 现选取常用于描述原子核裂变过程<sup>[14, 16]</sup>和极化介质中电荷转移反应的亚稳态势和耦合函数

$$V(x) = \frac{1}{2} M \omega_0^2 x^2 \left( 1 - \frac{x}{x_0} \right), \quad (16)$$

$$f(x) = \tan[\lambda(x - x_b)], \quad (17)$$

其中  $x_0$  为穿透宽度,  $\omega_0$  为基态的频率或曲率,  $x_b$  为鞍点坐标,  $\lambda$  为耦合函数的耦合宽度且反映系统在鞍点处的经典摩擦系数.

在计算中, 我们用  $S = S_B \omega_0 / V_b$  重新标度作用量,  $V_b = 2\omega_0^2 x_0^2 / 27$  为势垒高度, 并采用自然单位制  $M = \hbar = k_B = 1$ . 令  $f(x) = \lambda(x - x_b)$ , 图 2 给出了线性情形时作用量与温度的关系. 我们考虑的是记忆阻尼情形, 相关参数选  $\lambda = 1, \omega_0 = \sqrt{6}, \alpha = 1.2, \tau_d = 1/\omega_0, L = 2048$ . 从图 2 可以看出, 随着温度的降低, 在  $T/T_c = 1$  处出现 Bounce 轨道. 因为它的作用

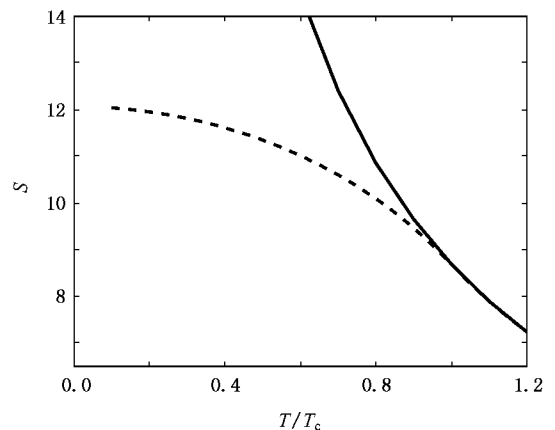


图 2  $\lambda = 1$  时, 作用量随温度的变化. 实线为 Arrhenius 速率的指数作用量, 短划线代表线性耗散情形.

量比  $\beta V_b$  要小,因而对穿透速率起主要作用. 随着温度的降低,量子效应越加明显,  $S_B = a[1 - k(T/T_c)]$  近似地被满足.

当  $\lambda = 0.4$ ,  $\omega_0 = \sqrt{6}$ ,  $\alpha = 4$ ,  $\tau_d = 0$ ,  $L = 2048$  时,平庸解  $x(\tau) = x_b$ ,线性情形时 Bounce 轨道以及非线性情形 Bounce 轨道作用量的比较如图 3 所示. 我们发现线性耦合比非线性耦合更能有效地抑制系统的衰变,表现为作用量的降低. 这是因为非线性情形的摩擦区域要小于线性情形,且在摩擦区域以内环境谐振子的平衡位置的漂移要小于线性情形,从而系统能量耗散较少,就更容易穿越势垒. 同时  $S_B = a[1 - k(T/T_c)]$  还能近似地被满足,这是因为在  $\lambda$  较小时,  $\tan[\lambda(x - x_b)] \approx \lambda(x - x_b)$ .

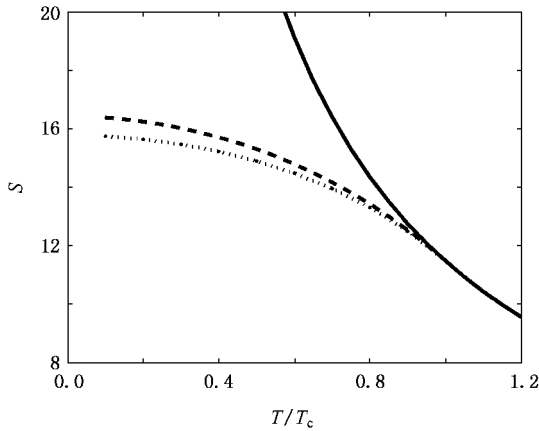


图 3  $\lambda = 0.4$  时,作用量随温度的变化 实线为 Arrhenius 情形,短划线和虚线分别代表线性和非线性耦合情形

有趣的是,当耦合宽度  $\lambda$  增大时,随着温度的降低,  $S_B$  与温度的关系将会发生实质性的改变. 图 4 给出了  $\lambda = 1.3$  时  $S_B$  与温度的关系. 此时  $S_B$  几乎与温度无关,即穿透速率几乎由前置因子  $A$  或由 Bounce 轨道附近的涨落决定,又因为穿透速率  $\Gamma$  更敏感地依赖于指数因子,可见  $\Gamma$  在跨越温度以下几

乎保持常数.

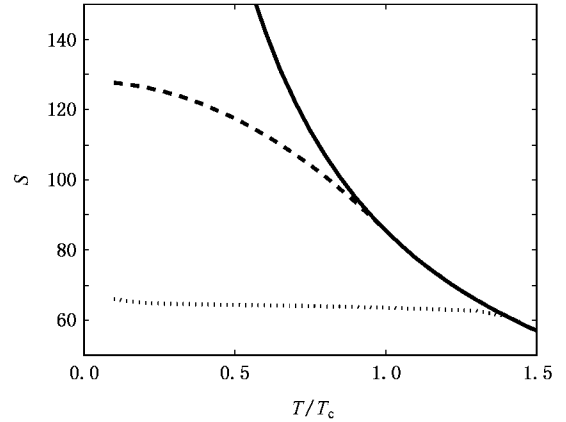


图 4  $\lambda = 1.3$  时,作用量随温度的变化 实线为 Arrhenius 情形,短划线和虚线分别代表线性和非线性耦合情形(增大了耦合宽度)

另外,从图 4 中我们能清楚地看出由线性耦合(14)式定义的‘跨越温度’( $T/T_c = 1$ )与 Bounce 路径出现时的温度(真正意义上的跨越温度)的关系. 跨越温度在图中表现为分岔点( $T = 1.4 T_c$ ). 在非线性耦合情形下,跨越温度要高于线性情形,即随温度降低系统更早地进入量子穿透区域.

### 4. 结 论

本文用路径积分方法研究非线性耗散对亚稳态系统的量子穿透速率的影响,发现在极化介质中的电荷转移反应这一实际例子中,衰变速率的指数因子与温度的关系与线性情形有实质性的区别,线性情形比非线性情形更能有效地抑制粒子的穿透. 具体表现在以下两个方面 (1)与线性耦合相比较,非线性耦合时 Bounce 轨道的作用量偏低,更能有效地抑制系统的衰变;且穿透速率的指数因子与温度的关系不明显. (2)线性耦合导致跨越温度的降低,非线性耦合使跨越温度有所反弹.

[1] Zhang L, Ge M L 1999 *The Frontier of Quantum Mechanics* (Beijing: Tsinghua University Press) [in Chinese] 张礼、葛墨林 1999 量子力学的前沿问题(北京:清华大学出版社)

[2] Hänggi P, Talkner P, Borkovec M 1990 *Rev. Mod. Phys.* **62** 251

[3] Pollak E, Talkner P 2005 *Chaos* **15** 026116

[4] Nie Y X, Zhang Y B, Liang J Q 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 5 (in Chinese) [聂一行、张云波、梁九卿 1999 物理学报 **48** 5]

[5] Langer J S 1967 *Ann. Phys.* **41** 108

[6] Weiss U 1993 *Quantum Dissipative Systems* (Singapore: World Scientific)

[7] Grabert H, Olschowski P, Weiss U 1987 *Phys. Rev. B* **36** 1931

[8] Haynes G R, Voth G A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2143

[9] Caldeira A O, Leggett A J 1983 *Ann. Phys.* **149** 374

[10] Coleman S 1977 *Phys. Rev. D* **15** 2929

- [ 11 ] Chang L D , Chakravarty S 1983 *Phys. Rev. B* **29** 130
- [ 12 ] Chang L D , Chakravarty S 1984 *Phys. Rev. B* **30** 1566
- [ 13 ] Freidkin E , Riseborough P , Hänggi P 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1952
- [ 14 ] Bao J D , Zhuo Y Z , Wu X Z 1995 *Phys. Rev. E* **52** 5656
- [ 15 ] Wang Z X , Guo D R 2000 *Introduction to Special Function* ( Beijing : Peking University Press )( in Chinese ] 王竹溪、郭敦仁 2000 特殊函数概论 ( 北京 北京大学出版社 )
- [ 16 ] Bao J D 2002 *Phys. Rev. A* **65** 052120

## Influence of nonlinear coupling on quantum decay rate of metastable dissipative systems <sup>\*</sup>

Bi Lei Bao Jing-Dong<sup>†</sup>

( *Department of Physics , Beijing Normal University , Beijing 100875 , China* )

( Received 1 June 2006 ; revised manuscript received 20 November 2006 )

### Abstract

We develop the fast-Fourier-transformation path-integral approach to investigate the quantum decay of a nonlinear dissipative system. The action of the bounce trajectory , i. e. the exponential factor of decay rate , is obtained. In the case of the nonlinear coupling  $f(x) = \tan[\lambda(x - x_b)]$  between the system and its environment , we find that the nonlinear coupling suppresses the decay rate. In contrast to the usual linear coupling , the action will not abide by the law  $S_B = a[1 - b(T/T_c)^2]$  and the crossover temperature rebounds , which means that the system steps into the quantum tunneling region at a higher temperature.

**Keywords :** quantum decay , nonlinear coupling , path integral , fast Fourier transformation

**PACC :** 0365D , 0365S

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant No. 10235020 ) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China( Grant No. 20050027001 ).

<sup>†</sup> E-mail : jdbao@bnu.edu.cn