

## 量子統計中的綫性輸运系数理論\*

陈 式 剛

### 提 要

本文利用 van Hove 的趋向平衡理論討論了 Kubo 的輸运系数表达式,得到了沒有任何无規相位假設的結果,并将其与玻耳茲曼方程作了比較。由本文的討論,我們期望在强作用系統的高頻現象中能觀測到相位关联效应。高頻綫性輸运系数的宏观測量不会破坏这种 相 位 关 联。

Kubo<sup>[1]</sup> 給出了非常普遍的綫性輸运系数理論,它使得对各种新的輸运現象的討論有了良好的基础。但是也正因为如此,它是一种很形式的理論,它完全沒有接触到輸运現象中的弛豫过程这个实质性的問題。而且在討論比較具体的問題时,往往仍旧要借助于玻耳茲曼方程(例如參見文献[2])。因此我們想要在 Kubo 的形式中普遍地討論系統的弛豫行为,討論它所包含的結果会比玻耳茲曼方程的解多了一些什么新的性質。如所周知,玻耳茲曼方程是在力学規律上作了統計的假設而得出的,而 Kubo 的形式理論完全是力学的。人們自然会期望,若在后一种理論中不作进一步的假設,那么两种理論的結果会有根本不同的地方。在實驗中观察这种差别可以判断統計物理的基本假設是否正确。这个判断对于各种已經观察到的实际效应可能显得并不重要,但是对这些假設能否作为統計物理的基础說来却有根本的意义。

在經典統計中, Balescu<sup>[3]</sup> 用 Prigogine 等<sup>[4]</sup> 的趋向平衡理論証明:对于靜态电导,由 Kubo 公式給出的結果与玻耳茲曼方程的結果在定性上是完全一致的。在本文中,我們將用 van Hove<sup>[5]</sup> 的量子統計中趋向平衡理論來討論輸运系数,得到了与 Balescu 相同的結論。Balescu 指出:因为靜态电导討論的是穩定态的,所以一般理論給出与玻耳茲曼方程的解相同的結果。为了寻求新的效应,我們进一步討論了高頻外場中的輸运現象,在这些現象中,确实能够給出非馬尔科夫过程的可觀測的效应。利用文献[5]中公式討論綫性輸运过程时不牽涉到任何无規相位假設,上述效应就是沒有作这个統計假設的結果。

Kohn 与 Luttinger<sup>[6]</sup>, Montroll 与 Ward<sup>[7]</sup>, Langer<sup>[8]</sup> 及 Клицлер<sup>[9]</sup> 等都在多体理論形式中討論过輸运系数的計算問題,因而能搞清楚一部分 Kubo 形式与弛豫过程的关系。不过这些作者都着重于輸运系数的实际計算,其一般的任意級微扰的結果都是很复杂的,不便于討論上述基本問題与寻求新的非馬尔科夫效应。

在考虑我們的討論是否有意义、上述效应是否能觀測时,碰到一个困难問題:在量子力学中进行一次測量将会破坏波函数的相位关联,連續的測量将使得系統的时间行为沒

\* 1962年10月29日收到。

有任何相位关联效应。至于输运过程的测量一般地将产生什么效应是完全不清楚的。在上面所描述的理论中,没有考虑到测量仪器的作用问题。严格地说,它只给出在初态一平衡态——进行一次测量后再在  $t$  时进行一次测量所得的结果,不同时间的结果要由许多同样宏观系统构成的系综给出。幸运的是对于高频现象,例如高频电导,我们往往只观测系统对电磁波的吸收。在这种观测中,仪器并不直接作用于系统本身,而只作用于进入系统与通过系统的电磁波上,并且对于线性过程说,无规相位的电磁波不会破坏系统的相位关联。因此我们期望弛豫过程的非马尔科夫效应是可以观测的,它表现在输运系数与外场频率的关系上。

下面在第二节中我们给出静态输运系数的弛豫理论一般表示式;在第三节中讨论周期性外场中的情况;第四节将上面二节的结果与玻耳兹曼方程的结果进行了比较与讨论;在第五节中指出用本文的理论同样可以讨论在磁场中的输运过程,并简单地指出一些可能的可观测效应。

## 二

各种稳定非平衡态的线性输运系数,除去一些已知比例系数外,可以写成下面的一般形式<sup>[1]</sup>:

$$L_{BA} = \int_0^{\infty} dt \int_0^{\beta} d\lambda \text{Sp} [A(-i\lambda)B(t)\rho], \quad (1)$$

其中  $\beta = 1/kT$ ,  $\rho = e^{-\beta H}$  为平衡态密度矩阵,在这里,为简单起见,不考虑化学势与归一化问题。算符  $A$  与  $B$  和具体的输运过程有关,它可以是粒子流密度,电流密度,能量流密度,动量流密度。 $A$  与  $B$  有值得注意的特点:它们都是矢量,而且在时间反演变换下要改变符号;它们在自由粒子表示中都是对角化的。当讨论磁化问题时,若  $A, B$  为磁矩,则(1)式稍有不同之处<sup>[1]</sup> [对没有永磁性的系统,它仍简化为(1)式],不过对自旋磁化或局域态的磁化, $A$  与  $B$  对自由粒子或局域表示仍是对角的,可以用与本节相似的理论讨论这个问题。

利用  $\delta(H - E)$  型的函数,可以将(1)中与  $\lambda$  及  $t$  有关的部分变为  $c$  数,提出  $\text{sp}$  符号。完成对  $\lambda$  与  $t$  的积分,并利用倒逆关系消去其虚部,(1)可写成

$$L_{BA} = \pi\beta \int dE \text{Sp} [A\delta(H - E)B\delta(H - E)]e^{-\beta E}. \quad (2)$$

$\text{Sp}$  的形式使我们可以用  $A, B$  的对角表示将(2)展开:

$$L_{BA} = \pi\beta \int dE \sum_{kk'} A(k)B(k')\delta(H - E)_{kk'}\delta(H - E)_{k'k}e^{-\beta E}, \quad (3)$$

$k$  与  $k'$  为  $A, B$  对角表示中态的指标,下面设它为粒子动量变量的集合。因为

$$\delta(H - E) = (2\pi i)^{-1} \left[ \frac{1}{H - E - i\epsilon} - \frac{1}{H - E + i\epsilon} \right],$$

$L_{BA}$  可以表示成为 van Hove<sup>[5]</sup> 的  $X$  函数:

$$\begin{aligned} L_{BA} = \frac{\beta}{4\pi} \int dE \sum_{kk'} A(k)B(k') [ & X_{E+i\epsilon, E-i\epsilon}(k', k) + \\ & + X_{E-i\epsilon, E+i\epsilon}(k', k) - X_{E+i\epsilon, E+i\epsilon}(k', k) - \\ & - X_{E-i\epsilon, E-i\epsilon}(k', k) ] e^{-\beta E}. \end{aligned} \quad (4)$$

$X$  的定义是

$$X_{ll'}(kk') = \left\langle k' \left| \frac{1}{H-l} \right| k \right\rangle \left\langle k \left| \frac{1}{H-l'} \right| k' \right\rangle. \quad (5)$$

为了简化并给出物理意义清楚的结果,在  $E$  的复平面上讨论(4)的积分。(4)的四个积分可以看成是同一函数在一沿实轴有割线的平面上不同路线与不同权重的积分。不过更有实际意义的是这些函数在第二黎曼面上的解析行为,这四个函数的黎曼面不同,其解析性质也不同。第二黎曼面上的函数定义,可以利用 van Hove 文章中的公式进行解析延拓而得到。下面引用文献[5]中几个公式。设  $R_l = (H-l)^{-1}$  对于  $k$  态的对角部分为  $D_l(k)$ ,  $X_{ll'}(kk')$  的不可约部分为  $W_{ll'}(k, k')$ , 则  $X$  满足 Bethe-Salpeter 型的方程:

$$\begin{aligned} X_{ll'}(kk') &= D_l(k) D_{l'}(k) \delta(k-k') + \\ &+ D_l(k) D_{l'}(k) \sum_{k_1} W_{ll'}(kk_1) X_{ll'}(k_1 k'). \end{aligned} \quad (6)$$

引入能量壳层上的  $X$  之不可约部分:

$$\tilde{W}_{ll'}(kk') = i[D_l(k) - D_{l'}(k)]W_{ll'}(kk'),$$

(6)可写为

$$\begin{aligned} (l-l')X_{ll'}(kk') &= [D_l(k) - D_{l'}(k)]\delta(k-k') + \\ &+ i \int dk'' \tilde{W}_{ll'}(k''k) X_{ll'}(kk') - \\ &- i \int dk'' \tilde{W}_{ll'}(kk'') X_{ll'}(k''k'); \end{aligned} \quad (7)$$

或者写成对  $k, k'$  的矩阵形式:

$$(l-l')X_{ll'} = (D_l - D_{l'}) + i(\Gamma_{ll'} - \tilde{W}_{ll'})X_{ll'}, \quad (8)$$

$\Gamma_{ll'}$  是对角矩阵,其矩阵元为

$$\Gamma_{ll'}(kk') = \int dk'' \tilde{W}_{ll'}(k''k) \delta(k-k').$$

由(8)求得  $X$  的形式解为

$$X_{ll'} = [(l-l') - i(\Gamma_{ll'} - \tilde{W}_{ll'})]^{-1}(D_l - D_{l'}). \quad (9)$$

利用(9)可以将  $X_{E \pm i\epsilon, E \pm i}$  向第二黎曼面延拓,在开拓时,我们认为上面公式中的  $D, \Gamma, W$  都有取了  $\epsilon \rightarrow 0$  的极限以后的形式。可以期望它们在第二黎曼面上除了有限孤立奇点及可能的割线以外是解析的。这些奇点一部分来自  $D_l$  的极点,另一部分来自算符  $(\Gamma_{ll'} - \tilde{W}_{ll'})$  的零本征值的贡献。

以  $X_{+-}(E)$  表示  $X_{E+i\epsilon, E-i\epsilon}$ ,  $A$  与  $B$  表  $A(k), B(k)$  构成的行与列矩阵。则利用(9)式后(4)可写成:

$$\begin{aligned} L_{BA} &= \frac{\beta}{4\pi} \int dE i B [(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1}(D_-(E) - D_+(E)) + \\ &+ (\Gamma_{+-}(E) - \tilde{W}_{+-}(E))^{-1}(D_+(E) - D_-(E)) - \\ &- (\Gamma_{++}(E) - \tilde{W}_{++}(E))^{-1}(D_+(E) - D_+(E)) - \\ &- (\Gamma_{--}(E) - \tilde{W}_{--}(E))^{-1}(D_-(E) - D_-(E))] A e^{-\beta E}. \end{aligned} \quad (10)$$

在下面将可以看到  $B(\Gamma_{++}(E) - \tilde{W}_{++}(E))^{-1}A$  等是有限的,因此(10)中第三,四项为零。

$X_{ll'}(kk') = X_{ll'}(k'k)$ , 时间反演不变给出  $X_{ll'}(kk') = X_{ll'}(-k', -k)$ , 所以  $X_{ll'}(kk') = X_{ll'}(-k, -k')$ , 时间反演不变还给出  $A(k) = -A(-k)$ ,  $B(k) = -B(-k)$ , 因此(10)中前二项相同. 设  $D_l$  之不可约部分为  $G_l + i \operatorname{sgn}(lml) J_l$ , 而  $e_l = H_0 - l - G_l$ , 则

$$D_-(E) - D_+(E) = -2iJ_E/e_E^2 + J_E^2.$$

(10)式最后变成

$$L_{BA} = \frac{\beta}{\pi} \int dE B(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1} A \frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}, \quad (11)$$

在  $E$  的复平面上, 当  $E \rightarrow \infty$  时,  $(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1} \rightarrow$  常数,  $\frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} \rightarrow E^{-2}$  (在  $-\infty$  方向除外). 由于系统的能谱有下界, 密度矩阵可以归一化, 因子  $\frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}$  在  $-\infty$  的积分为零. 于是在(11)的积分中可以加以上半平面或下半平面的大圆积分, 结果使积分计算变成极点留数的计算.  $J_E/(e_E^2 + J_E^2)$  在  $E \rightarrow -\infty$  时趋向零的速度可以更清楚地如下看到: 由于  $H_0$  的谱有下界,  $J_E$  是以下面类型积分之和与积组成的:

$$\int_{E_0}^{\infty} dE_k f(E_k) \delta(E_k - E), \quad (12)$$

$E_0$  为  $E_k$  之下界. (12)式当  $E < E_0$  时为零, 于是  $J_E$  当  $E < E_0$  时以很快的速度趋向零.

van Hove 在文献[5]中曾证明  $X_{E+l, E-l}$  在  $l=0$  处有一阶极点, 因此(10)中  $(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1}$  等将是发散的. 但正如本节开头所指出的, 由于  $A, B$  是矢量, 时间反演不变给出  $\Sigma_k A(k) = \Sigma_k B(k) = 0$ , 所以  $B(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1} A$  等成为不定式. 这个不定式的极限是存在的, 它可以  $(\Gamma(E) - \tilde{W}(E))^{-1}$  展为级数而得到证明:

$$B(\Gamma(E) - \tilde{W}(E))^{-1} A = B \frac{1}{\Gamma(E)} \left[ 1 + \tilde{W}(E) \frac{1}{\Gamma(E)} + \tilde{W}(E) \frac{1}{\Gamma(E)} \tilde{W}(E) \frac{1}{\Gamma(E)} + \dots \right] A, \quad (13)$$

其中每一项是如下因子之积:

$$\int dk' \tilde{W}_{ll'}(kk') f(k, k') / \int dk \tilde{W}_{ll'}(k'k), \quad (14)$$

$f(k, k')$  是角度因子,  $|f(k, k')| \leq 1$ , 所以(14)小于一, (13)式收敛.

在(11)中还没有考虑到密度矩阵归一化, 将密度矩阵归一化, 并引入记号:

$$\rho_k(E) = \frac{J_E(k)}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E} / \sum_k \int dE \frac{J_E(k)}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}, \quad (15)$$

(11)可写为

$$L_{BA} = \beta \int dE B(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1} A \rho(E), \quad (16)$$

这与通常由玻耳兹曼方程得到的电导张量具有同样的结构,  $(\Gamma_{-+}(E) - \tilde{W}_{-+}(E))^{-1}$  相当于弛豫时间算符. 与玻耳兹曼方程不同的是在原则上以多电子的、考虑到作用的任意级微扰的量代替了单电子的一级微扰量.

### 三

上节的讨论对于以 Kubo 的公式具体计算输运系数提供了一般的物理意义清楚的途

径。但是它不包含玻耳兹曼方程所没有的新的现象。为了寻找这种现象，我们考虑在频率为  $\omega$  的周期性外场中的输运系数：

$$L_{BA}(\omega) = \int_0^\infty dt e^{-i\omega t} \int_0^\beta d\lambda \text{Sp} [A(-i\lambda)B(t)], \quad (17)$$

利用与上节相似的方法，得到

$$L_{BA}(\omega) = f_{BA}(\omega) + \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^\infty P \frac{f_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega', \quad (18)$$

其中

$$f_{BA}(\omega) = \frac{2\pi}{\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta \omega \int dE \text{Sp} \left[ A \delta \left( H - E - \frac{1}{2} \omega \right) B \delta \left( H - E + \frac{1}{2} \omega \right) \right] e^{-\beta E}. \quad (19)$$

记  $X_{E+\frac{1}{2}\omega+i\epsilon, E-\frac{1}{2}\omega-i\epsilon}$  等为  $X_{+-}(E, \omega)$ ，则利用(8)式可以将(19)展开为

$$\begin{aligned} f_{BA}(\omega) = & \frac{2\pi}{\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta \omega \int dE B \\ & [(\omega - i(\Gamma_{+-}(E, \omega) - \tilde{W}_{+-}(E, \omega)))^{-1}(D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)) + \\ & + (\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega)))^{-1}(D_-(E, \omega) - D_+(E, -\omega)) - \\ & - (\omega - i(\Gamma_{++}(E, \omega) - \tilde{W}_{++}(E, \omega)))^{-1}(D_+(E, \omega) - D_+(E, -\omega)) - \\ & - (\omega - i(\Gamma_{--}(E, \omega) - \tilde{W}_{--}(E, \omega)))^{-1}(D_-(E, \omega) - D_-(E, -\omega))] A e^{-\beta E}, \end{aligned} \quad (20)$$

与  $\omega = 0$  时的(10)式一个不同的地方是(20)之第三、四项不自动为零，每一项的大圆积分也不为零。不过这时要注意到这样一个事实： $D, \Gamma, \tilde{W}$  等量的虚部都是由(12)形式的项组成的，当  $E \rightarrow -\infty$  时它们都为零，这时(20)中四项变成相同的了。而在大圆其他部分的积分为零。于是我们可以将各项在  $-\infty$  的积分相互抵消。(20)之第三项在上半平面解析，第四项在下半平面解析，所以若在第一项中加入沿上半平面的大圆积分，在第二项中加入沿下半平面大圆的积分；或者反之，都可以消去第三第四项。结果(20)成为

$$\begin{aligned} f_{BA}(\omega) = & \frac{2\pi}{\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta \omega \left\{ \int_{c_1} dEB [\omega - i(\Gamma_{+-}(E, \omega) - \right. \\ & \left. - \tilde{W}_{+-}(E, \omega))]^{-1}(D_+(E, \omega) - D_-(E, -\omega)) A e^{-\beta E} + \right. \\ & \left. + \int_{c_2} dEB [\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega))]^{-1}(D_-(E, \omega) - \right. \\ & \left. - D_+(E, -\omega)) A e^{-\beta E}, \right. \end{aligned} \quad (21)$$

$c_1$  与  $c_2$  的线路如图所示。利用时间反演不变性，可以将(21)第二项作如下变换：

$$X_{-+}(E, \omega) \rightarrow X_{+-}(E, -\omega),$$

因为

$$\begin{aligned} X_{-+}^*(k, k') &= X_{+-}(k', k) \\ &= X_{+-}(k, k'), \end{aligned}$$

所以(21)中两个被积函数对于实的  $E$  互为共轭，它可以化为取一个积分的实部的形式：

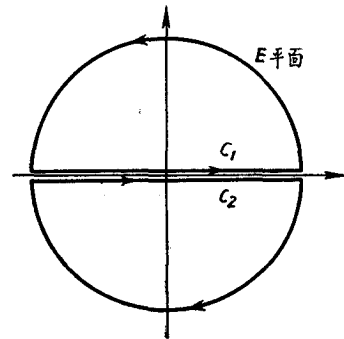


图1 积分线路图

$$f_{BA}(\omega) = \frac{4\pi}{\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta \omega \operatorname{Re} \int_c dE B [\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega))]^{-1} (D_{-}(E, \omega) - D_{+}(E, -\omega)) A e^{-\beta E}, \quad (22)$$

这里积分路线  $c$  可以取  $c_1$ , 也可以取  $c_2$ . 我们将在下节讨论(18)与(22)给出的在频率行为上不同于玻耳兹曼方程解的地方, 在这里先考虑系统的时间行为, 它也有助于对下节的了解.

能将系统性质最明显表现出来的时间行为是系统对脉冲的响应, 它由响应函数描述:

$$\varphi_{BA}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f_{BA}(\omega) e^{-i\omega t} \quad (23)$$

(假设我们只考虑吸收部分的响应), 若  $\varphi_{BA}(0)$  存在, 则(22)中对  $\omega$  的积分当  $t > 0$  时可以加上沿下半平面大圆的积分. 于是(23)对  $E$  与  $\omega$  的积分都变成求极点与留数的计算. 这要求我们讨论下面两个因子的解析性质:

$$[\omega - i(\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega))]^{-1}, \quad (24)$$

$$D_{-}(E, \omega) - D_{+}(E, -\omega); \quad (25)$$

(24)作为  $E$  的函数, 对一定的  $\omega$  在  $E \rightarrow \infty$  时为一常数, 因此在  $E$  的有限区域内一定有奇异区域存在. 对于固定的  $E$ , 若设通常微扰的图象正确的話, (24)至少有一个与一級微扰的与  $E$  无关的純虛数极点相应的  $\omega$  的极点. 现在由于  $\Gamma_{-+}$  与  $\tilde{W}_{-+}$  是  $\omega$  的函数, 所以可能产生其他的极点(因为决定极点的方程不是一次的). 而且当  $\omega \neq 0$  时,  $\Gamma_{-+}$  与  $\tilde{W}_{-+}$  不是实的, 这些极点都将偏离虚轴. (24)的这些在  $\omega$  平面上的极点在与  $A, B$  的数乘积中将变成一条割线; 在特殊情况下(例如各向同性介质中具有弹性散射机构的单电子性的输运过程中), 它仍可能保持为一极点. (25)的解析性质比较简单. 按照 van Hove 的假设,  $D$  只有一个极点, 所以(24)或者对固定的  $\omega$  在  $E$  平面上有两极点; 或者反之, 其中一个由  $D_{+}$  给出位于下半平面; 另一由  $D_{-}$  给出位于上半平面.

在计算(23)时, 设先完成(22)中对  $E$  的积分. 可以得到两种类型的项, 一种相应于取(25)在  $E$  平面上极点的留数值; 另一种则相应于取(24)的. 前者保留了(24)在  $\omega$  平面上的极点, 后者保留了(25)的极点. (23)的时间行为决定于下面两个函数的解析性质:

$$[\omega - i(\Gamma_{-+}(E_j, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E_j, \omega))]^{-1}, \quad (26)$$

$$D_{-}(E_i, \omega) - D_{+}(E_i, -\omega); \quad (27)$$

$E_i, E_j$  表示(24)与(25)的极点. 在(23)中, (26)与(27)的因子是以和的形式出现的. 设  $\tau = 1/\langle J \rangle$ , 则(26)给出了相应通常输运过程中的弛豫行为, 其弛豫时间相应于  $\tau/(1 - \langle \cos \theta \rangle)$ ,  $\theta$  表散射角; (27)给出相应于在平衡态上激发了一个状态的衰减的弛豫行为, 其弛豫时间相应于  $\tau$ . 后面一种弛豫行为是通常输运过程中所没有的, 而前者的性质又与通常的有所不同. 立刻可以看出力学的、相位关联产生了三种属于非马尔科夫过程的效应: 对于一种载流子与散射机构可能出现几个不同的弛豫时间, 系统的时间行为是这些弛豫时间所描述的行为的迭加; 弛豫时间具有一虚部, 因此在时间行为上表现出振荡现象; 在输运过程中可能包含由单个态的衰减的弛豫时间所描述的弛豫行为. 因为这些现象都是由于  $\Gamma$  与  $\tilde{W}$  是  $\omega$  的函数而来的, 所以是属于非马尔科夫过程的效应.

## 四

現在將上兩節的結果與由輸運方程解得的結果作比較，討論在導出輸運方程時所作的假設會在(22)中丟掉什麼因子。為了討論通常輸運方程理論中不同的假設，我們將利用不同的輸運方程。在下面，當談到玻耳茲曼方程時，不單指原始的单粒子的玻耳茲曼方程，而是指所討論的時間行為與玻耳茲曼方程解一致的一類方程。

因為只有高頻現象使我們感到興趣，下面將只討論在周期性外場下的輸運過程，並以電導為例。輸運方程是由劉維方程取關於  $\rho$  的对角部分而得到的：

$$\frac{\partial P}{\partial t} + i\{[H', \rho]\}_d = \text{散射項}, \quad (28)$$

其中  $P$  為  $\rho$  的对角部分， $H'$  是哈密頓算符的外場作用項。在電導的情況下：

$$H' = \mathbf{E} \sum_i e_i \mathbf{r}_i = ie \mathbf{E} \sum_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}; \quad (29)$$

通常我們認為，對於綫性輸運過程，在散射項中可以不考慮電場的影響，並且  $[H', \rho]$  中的  $\rho$  可以代以平衡態的  $\rho = e^{-\beta H}$ 。對(29)的  $H'$ ，得到

$$i[H', \rho] = -\beta \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} e^{-\beta H}, \quad (30)$$

其中  $\mathbf{j}$  為電流算符。以  $(\Gamma - \tilde{W})$  表散射算符，則對綫性過程(28)變為

$$\frac{\partial P}{\partial t} + (\Gamma - \tilde{W}) P = \frac{\beta}{\pi} \int dE \mathbf{E} \cdot \mathbf{j} \frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}. \quad (31)$$

引入  $P$  的譜分解：

$$P(t) = \int dE P(E, t), \quad (32)$$

(31)可以化成為每個  $E$  的方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} P(E, t) + (\Gamma(E, t) - \tilde{W}(E, t)) P(E, t) = \frac{\beta}{\pi} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}(t) \frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}. \quad (33)$$

下面討論對散射算符  $(\Gamma - \tilde{W})$  的兩種不同的處理方法，一種是玻耳茲曼的方法，一種是 van Hove 的。

考慮到任意級微擾的、作了任意時刻無規相近似的 master 方程不能如 Pauli 方程那樣導出<sup>[10]</sup>。因為這時我們不能在整個過程中分出一段時間，在這時間內可以用 Dirac 的微擾理論。不過我們可以由 van Hove 的 master 方程作一定假設得到它。設几率分布隨時間的變化相當慢，例如在  $T_0$  時內的變化可以忽略，而在這時間內，

$$\tilde{W}(E, t) = (2\pi^2)^{-1} \int dl \exp(ilt) \tilde{W}(E, l)$$

趨向零。於是 van Hove 的 master 方程變為

$$\frac{\partial}{\partial t} P(E, t) = (\tilde{W}_{-+}(E, 0) - \Gamma_{-+}(E, 0)) P(E, t), \quad (34)$$

這方程描述的是一馬爾科夫過程，其時間行為是與玻耳茲曼方程一致的。將(34)的散射算符代入(33)，並考慮一周期性外場  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E} e^{i\omega t}$ ，對它可以設  $P(E, t) = P(E, \omega) e^{i\omega t}$ ，由此得到的方程解為

$$P(E, \omega) = \frac{\beta}{\pi} \frac{1}{\Gamma_{-+}(E, 0) - \tilde{W}_{-+}(E, 0) + i\omega} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}, \quad (35)$$

相应于(22)的电导张量实部为

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \beta \operatorname{Re} \int dE j_\mu \frac{1}{\Gamma_{-+}(E, 0) - \tilde{W}_{-+}(E, 0) + i\omega} j_\nu \rho(E). \quad (36)$$

要利用 van Hove 的散射算符, 可先将(33)变到福里叶表象中:

$$i\omega P(E, \omega) + (\Gamma(E, \omega) - \tilde{W}(E, \omega))P(E, \omega) = \frac{\beta}{\pi} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}(\omega) \frac{J_E}{e_E^2 + J_E^2} e^{-\beta E}, \quad (37)$$

将它与 van Hove 的 master 方程比较一下就知道  $\Gamma(E, \omega) - \tilde{W}(E, \omega)$  就是上节的  $\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega)$ , 由于我们考虑的是稳定周期性行为, 非齐次项可以忽略. 电导张量实部为

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \beta \operatorname{Re} \int dE j_\mu \frac{1}{\Gamma_{-+}(E, \omega) - \tilde{W}_{-+}(E, \omega) + i\omega} j_\nu \rho(E). \quad (38)$$

比较(36), (38)与(22), 容易看到, 它们在  $\omega = 0$  时是完全一致的, 当  $\omega \neq 0$  时三者都互不相同了. (36)与(38)的差别是由(38)的弛豫时间是  $\omega$  函数而引起的, 它产生了上节所述的前二种非马尔科夫效应: 多个弛豫时间与振荡现象. (36)只适用于低频或弱作用的情况. 这个差别的物理意义是很清楚的. (38)与(22)的差别在于由(38)至(22)作了以下的替换:

$$\beta \rightarrow \frac{2}{\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta \omega, \quad (39)$$

$$D_-(E) - D_+(E) \rightarrow D_-(E, \omega) - D_-(E, -\omega); \quad (40)$$

容易看到, 这个差别是由得到(38)时对  $[H', \rho]$  的对角部分与 van Hove 输运方程中非齐次项处理不得当而引起的. 在物理图象上可以这样想象: 在(28)的右边, 虽然在长时间后, 相应于 van Hove 输运方程中非齐次项的自然运动会趋向零, 但是周期性外场会不断激起新的自然运动, 它相应于自然运动与电场的交叉项, 并由(28)中的  $[H', \rho]$  给出. 在 van Hove 输运方程中, 非齐次项是表示系统历史行为的项之一, 所以(39), (40)的代替也是一种非马尔科夫效应. 替换(40)的后果已在上节讨论过, 它使我们能够在输运过程中观察到单个状态衰减的自然运动. 替换(39)表现为一种低温  $\beta\omega \gtrsim 1$  时的量子效应.

## 五

在这一节中我们进一步讨论在磁场中的输运系数, 不过不打算作详细讨论, 而只指出本文的方法可以如何处理这些问题.

设一自由载流子在一矢势采取  $\mathbf{A} = (0, xH, 0)$  形式的规范之磁场中运动, 那么它的量子数可以由一组指标描述  $\alpha = (n, k_y, k_x)$ .  $n$  对应于在磁场中量子化了的能级的指标, 对应一间断谱.  $k_y$  相应于回旋中心在  $x$  方向的位置, 具有同样  $n$  与  $k_x$  的态对  $k_y$  是退化的.  $k_x$  描述  $z$  方向的运动, 对应一个连续谱. 显而易见, 以  $\alpha$  表示为未微扰态, 则对 van Hove 所讨论过的作用哈密顿算符, 文献[5]中所述的多体系统的性质仍存在: 能谱是连续的; 对角奇异仍存在, 不过对角部分只比非对角部分大  $N^{2/3}$  或  $N^{1/3}$ . 对  $k_y, k_x$  都相同



而  $n$  不同的非对角部分,可能与相应的对角部分有相同的数量级。但是在利用对角奇异性导出第二节中  $X$  的方程时,交叉对角部分之和比之非交叉的对角部分之和仍可以忽略,前者仍比后者小  $N^{2/3}$  数量级。因此第二节的  $X$  方程(8)式仍成立。

在强磁场或共振情况应以  $\alpha$  表示为未微扰态。与前三节所讨论的情况不同,现在算符  $A, B$  对  $\alpha$  表示不再是对角的了,不过可以引入  $B$ -不可约对角部分代替不对角的  $A, B$ <sup>[11]</sup>。算符  $A$  的  $B$ -不可约对角部分定义为

$$A_{Bd} = \{(1 - VD_i + VD_iVD_i \cdots)A(1 - D_{i'}V + D_{i'}VD_{i'}V \cdots)\}_{Bd}, \quad (41)$$

$Bd$  表示除了  $A$  算符中由于  $A$  可能是  $n$  个算符之积而出现的中間态可以与初态及其他中間态相同外,不能再取其他的对角部分。利用(41),由文献[11]得到

$$\{R_l A R_{l'}\}_d = \{R_l A_{Bd} R_{l'}\}_d, \quad (42)$$

$R_l A R_{l'}$  的非对角部分可以分成不可约部分与可约部分,在文献[12]中将可约部分写成包含(42)的一个不可约部分。总的结果如下<sup>1)</sup>:

$$\begin{aligned} \{R_l A R_{l'}\}_{nd} = & \{R_l A R_{l'}\}_{Bd} + \{(1 - D_i V + D_i V D_i V \cdots) \\ & (R_l A R_{l'})_d (1 - V D_{i'} + V D_{i'} V D_{i'} V \cdots)\}_{Bd}. \end{aligned} \quad (43)$$

利用(41),(42),(43),得到

$$\text{Sp}[A R_l B R_{l'}] = \text{Sp}[(A R_l B R_{l'})_{id}] + A_{l'l} X_{l'l} B_{l'l}, \quad (44)$$

所以对于在磁场中的输运过程,我们只要将(22)代以下式就行了:

$$\begin{aligned} f_{BA}(\omega) = & \frac{1}{2\pi\omega} \sinh \frac{1}{2} \beta\omega \left\{ \int_{c_1} dE [\text{Sp}[(A R_+(E, -\omega) B R_-(E, \omega))_{Bd}] + \right. \\ & \left. + B_{+-}(E, \omega) X_{+-}(E, \omega) A_{-+}(E, -\omega)] e^{-\beta E} + \int_{c_2} dE \right. \\ & \left. [\text{Sp}[(A R_-(E, -\omega) B R_+(E, \omega))_{Bd}] + \right. \\ & \left. + B_{-+}(E, -\omega) X_{-+}(E, -\omega) A_{+-}(E, \omega)] e^{-\beta E} \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

(45)的进一步讨论是较复杂的,但是我们期望它能给出有意思的结果。我们将在以后的文章中讨论它,在这里只指出以下两点: i)(45)给出了在磁场中输运系数对散射展开的最简练、最完全的表达式,因此可以用它来对电流磁效应进行清楚的分析,以澄清过去在理论中含糊的地方。ii)(45)能给出迴旋共振的表达式。讨论由非马尔科夫效应引起的共振峰的移动可能是检验相位关联的最有效方法之一;因为相位关联效应只能通过系统的时间行为或频率行为的测量而得到,在实际上只能进行频率行为的宏观测量,而共振现象是最明显的频率行为。不过相位关联现象只在强作用系统或起码要考虑二级微扰的系统中才能表现出来,因此这是复杂的问题。

在工作中经霍裕平同志讨论与指正,谨在此表示谢意。

\* \* \*

在完成工作后,作者注意到 Chester 与 Thellung<sup>[13]</sup> 及 Verboven<sup>[14,15]</sup> 也用 van Hove 理论讨论了电导问题,不过他们所要解决的问题和做法都与本文不同。

1) 在文献[12]中,作者没有给出(43)中的第一项,虽然它在趋向平衡的长时间行为中是不重要的,但在输运系数中却不能被忽略。

## 参 考 文 献

- [1] Kubo, R., *Journ. Phys. Soc., Japan*, **12** (1957), 570.
- [2] Kubo, R., *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. 1, Boulder, p. 120.
- [3] Balescu, R., *Physica*, **27** (1961), 693.
- [4] Prigogine, I. and Résibois, P., *Physica*, **27** (1961), 629.
- [5] Van Hove, L., *Physica*, **23** (1957), 441.
- [6] Kohn, W. and Luttinger, J., *Phys. Rev.*, **108** (1957), 590; **109** (1958), 1892.
- [7] Montroll, E. W. and Ward, J. C., *Physica*, **25** (1959), 423.
- [8] Langer, J. S., *Phys. Rev.*, **120** (1960), 714; **124** (1961), 1003.
- [9] Клипплер, М. И., *Ф.Т.Т.*, II (1960), 3092; III (1961), 1342; 1354.
- [10] Pauli, W., *Probleme der Modernen Physik* (Festschrift zum 60 Geburtstag A. Sommerfeld Hirzel, Leipzig (1928), p. 30.
- [11] Van Hove, L., *Physica*, **25** (1959), 268.
- [12] Janner, A., *Helv. Phys. Acta*, **35** (1962), 47.
- [13] Chester, G. V. and Thellung, A., *Proc. Phys. Soc.*, **73** (1959), 745.
- [14] Verboven, E., *Physica*, **26** (1960), 1091.
- [15] Van Hove, L., *Fundamental Problems in Statistical Mechanics* (Proc. of the NUFFIC Inter. Sum. Con. in Sci. at Nijenrode Castle. August, 1961), p. 156.

## THE THEORY OF LINEAR TRANSPORT COEFFICIENTS IN QUANTUM STATISTICS

CHEN SHI-KANG

### ABSTRACT

Using the method of van Hove in the theory of approach to equilibrium, we analyse Kubo's formula of transport coefficients. The results of dynamical theory are obtained without using the assumption of random phase and compared with the solution of Boltzmann equation. We expect that the phase interference effect may be observed in the high-frequency phenomena of strongly interacting system. The macroscopic measurement of high-frequency linear transport process does not destroy this interference effect.