

布朗运动中的量子及非 Markov 效应

孙喆民 吴锡真 卓益忠

(中国原子能科学研究院, 北京)

摘 要

本文采用路径积分方法,在谐振子相互作用模型下得到了密度矩阵 $\rho(x, x', t)$, 计算了坐标二阶矩, 并与经典结果进行了比较. 在 Markov 近似下, 我们得到了 Fokker-Planck 方程的量子修正, 讨论系统的非 Markov 行为, 我们建议采用具有量子关联条件的 Langevin 方程并给出了它的形式.

一、引 言

很多我们感兴趣的物理体系可以归结为布朗运动, 其经典行为可用唯象 Langevin 方程描写:

$$\begin{cases} \ddot{x} + \beta \dot{x} + V'(x) = F(t), \\ \langle F(t) \rangle = 0 \\ \langle F(t)F(t') \rangle = 2m\beta kT \delta(t-t'), \end{cases} \quad (1-1)$$

其中 m, β 分别为布朗粒子质量参数和粘滞系数, T 为热浴温度, $V(x)$ 是外势, 随机力 $F(t)$ 提供了无规碰撞, 这个方程给出的关联称为白噪声. 显然, (1-1) 没有包括量子效应 (低温) 和非 Markov 效应 (记忆摩擦), 在很多情况下这两种修正是不能不考虑的, 特别是量子行为. 目前对有阻尼的 Brownian 运动的工作已经得到了一些普遍的结果. 基于将布朗粒子与环境通过引入某种方式的耦合统一考虑, 再设法消去环境变量的物理思想, 六十年代 Senitzky^[1]、Mori^[2]、Zwanzig^[3] 以及 Nakajima^[4] 等人分别从 Heisenberg 表象和 Schrödinger 表象出发得到了约化密度矩阵, 并有人用来解决空腔中电磁场及 Josephson 结等问题. Caldeira 等人^[5] 在模型哈密顿量的基础上, 通过路径积分技术推导了约化密度矩阵传播子的解析表达式. 文献[9]在 Caldeira 工作的基础上, 研究了量子布朗运动的特征, 发展了原子核的量子布朗运动模型. 本文通过改进文献[9]的热浴谱分布密度, 进一步研究量子布朗运动中非 Markov 效应、量子效应及非白噪声的影响, 并想初步探讨具有量子修正的 Fokker-Planck 方程.

二、约化密度矩阵

设布朗粒子为系统 A , 热浴为系统 B , 系统与热浴的相互作用取线性耦合形式, 外场

为谐振子势, 热浴中粒子间相互作用也取为谐振子形式, 因此系统哈密顿量写为:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 x^2 + \sum_{\kappa} C_{\kappa} R_{\kappa} x + \sum_{\kappa} \left(\frac{P_{\kappa}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_{\kappa}^2 R_{\kappa}^2 \right). \quad (2-1)$$

根据文献[9]的推导得到约化密度矩阵传播子

$$\begin{aligned} J(xyt; x'y'o) = & \int \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[y] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_A[x] - S[y] \right. \\ & \left. - \int_0^t \int_0^{\tau} [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_I(\tau - s) [x(s) + y(s)] ds d\tau \right\} \\ & \cdot \exp \left\{ - \frac{1}{\hbar} \int_0^t \int_0^{\tau} [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x(s) - y(s)] ds d\tau \right\}. \end{aligned} \quad (2-2)$$

其中,

$$\alpha_I(\tau - s) = - \sum_{\kappa} \frac{C_{\kappa}^2}{2m\omega_{\kappa}} \sin \omega_{\kappa}(\tau - s), \quad (2-3)$$

$$\alpha_R(\tau - s) = \sum_{\kappa} \frac{C_{\kappa}^2}{2m\omega_{\kappa}} \coth \frac{\hbar\omega_{\kappa}}{2kT} \cos \omega_{\kappa}(\tau - s). \quad (2-4)$$

在此采用渐变的德拜谱:

$$\rho_D(\omega) C^2(\omega) = \frac{2m\eta\omega^2}{\pi} e^{-\lambda\omega} \quad (2-5)$$

来代替文献[9]的热浴谱分布, 则有:

$$\begin{aligned} \alpha_I(\tau - s) = & - \frac{\eta}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda\omega} \cdot \omega \cdot \sin \omega(\tau - s) d\omega \\ = & - \frac{1}{2} \frac{d\alpha}{ds}, \end{aligned} \quad (2-6)$$

$$\begin{aligned} \alpha_R(\tau - s) = & \frac{2\eta}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda\omega} \cos \omega(\tau - s) \omega \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} d\omega \\ = & 2\eta \cdot \frac{\lambda}{\pi[\lambda^2 + (\tau - s)^2]} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0^+} 2\eta\delta(\tau - s), \end{aligned} \quad (2-7)$$

其中, η 是粘滞系数, λ 是渐变参数. 高温近似下:

$$\begin{aligned} \hbar\alpha_R(\tau - s) = & \frac{\hbar\eta}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda\omega} \cdot \omega \cdot \coth \frac{\hbar\omega}{2kT} \cdot \cos \omega(\tau - s) d\omega \\ = & kT\alpha(\tau - s) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0^+} 2\eta kT\delta(\tau - s) \end{aligned} \quad (2-8)$$

可以看出这正是(1-1)式的结果, 参数 λ 给出了非 Markov 效应, $\lambda \rightarrow 0^+$ 表示 Markov 近似, (2-8)就是著名的涨落-耗散定理.

最后得到约化密度矩阵的传播子为:

$$\begin{aligned} J(x, y, t; x', y', 0) = & \int \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[y] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_R[x] - S_R[y] \right. \\ & \left. - 2\gamma M \int_0^t \int_0^{\tau} [x(\tau) - y(\tau)] g(\tau - s) [\dot{x}(s) + \dot{y}(s)] ds d\tau \right\} \end{aligned}$$

$$\exp - \frac{1}{\hbar} \int_0^t \int_0^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x(s) - y(s)] ds d\tau \quad (2-9)$$

其中,

$$S_R[x] = \int_0^t \left(\frac{1}{2} M \dot{x}^2 - \frac{1}{2} M \omega_k^2 x^2 \right) d\tau$$

$\omega_k^2 = \omega^2 - (\Delta\omega)^2$ 称为重整化频率.

$$(\Delta\omega)^2 = \frac{\alpha(0)}{M}, \quad \eta = 2\gamma M, \quad g(\tau - s) = \frac{1}{2\eta} \alpha(\tau - s)$$

由(2-9)式得到等效的拉氏量:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2} M \dot{x}^2 - \frac{1}{2} M \dot{y}^2 - \frac{1}{2} M \omega_k^2 x^2 + \frac{1}{2} M \omega_k^2 y^2 \\ & - 2\gamma M \int_0^\tau x(\tau) \dot{x}(s) g(\tau - s) ds \\ & - 2\gamma M \int_0^\tau x(\tau) \dot{y}(s) g(\tau - s) ds \\ & + 2\gamma M \int_0^\tau y(\tau) \dot{x}(s) g(\tau - s) ds \\ & + 2\gamma M \int_0^\tau y(\tau) \dot{y}(s) g(\tau - s) ds, \end{aligned} \quad (2-10)$$

令 $\xi = x - y$, $X = x + y$, 由经典动力学原理得到:

$$\ddot{X} + 4\gamma \int_0^\tau \dot{X}(s) g(\tau - s) ds + \omega_k^2 X = 0, \quad (2-11)$$

$$\ddot{\xi} - 4\gamma \frac{d}{d\tau} \int_\tau^t \xi(s) g(\tau - s) ds + \omega_k^2 \xi = 0, \quad (2-12)$$

满足初始条件:

$$\begin{cases} X(0) = X_i, & \xi(0) = \xi_i, \\ X(t) = X_f, & \xi(t) = \xi_f, \end{cases}$$

如果作 Markov 近似: $\lambda \rightarrow 0^+$ 即 $g(\tau - s) \rightarrow \delta(\tau - s)$, 方程退化为:

$$\begin{aligned} \ddot{X} + 2\gamma \dot{X} + \omega_k^2 X &= 0 \\ \ddot{\xi} - 2\gamma \dot{\xi} + \omega_k^2 \xi &= 0 \end{aligned}$$

这与 Caldeira 等在 Markov 近似下得到的方程一致. (2-11)的解可表示为:

$$\begin{aligned} X(\tau) = & X_i \left[\left(1 - \omega_k^2 \int_0^\tau \varphi(u) du \right) - \left(1 - \omega_k^2 \int_0^t \varphi(u) du \right) \frac{\varphi(\tau)}{\varphi(t)} \right] \\ & + X_f \cdot \frac{\varphi(\tau)}{\varphi(t)} \end{aligned} \quad (2-13)$$

其中 $\varphi(\tau)$ 为 Volterra 型积分方程的解.

$$\varphi(\tau) = \frac{1}{\omega_R} \sin \omega_R \tau - \frac{4\gamma}{\pi} \int_0^\tau K(\tau, \xi) \varphi(\xi) d\xi, \quad (2-14)$$

$$K(\tau, \xi) = \int_\xi^\tau \frac{\lambda}{\xi \lambda^2 + (\tau - u)^2} \cdot \cos \omega_R(u - \xi) du,$$

此方程存在收敛的解。方程(2-12)的解对 \tilde{S}_i 没有贡献,传播子实部中的非 Markov 效应主要来源于剩余涨落力项,因此采用 $\lambda \rightarrow 0^+$ 求解(2-12)。

$$\xi(\tau) = \frac{e^{\gamma\tau}}{\sin \omega t} [\xi_i e^{-\gamma\tau} \sin \omega\tau + \xi_i \sin \omega(t-\tau)] \quad (2-15)$$

$$\omega^2 = \omega_k^2 - \gamma^2$$

对过阻尼的情形: $\omega^2 = \gamma^2 - \omega_k^2$, 解有完全相同的形式只需代换: $\sin \rightarrow \sinh$ 。

$$J(X_f, \xi_f, t; X_i, \xi_i, 0) = G \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \{ \Gamma_1(t) \xi_f X_f + \Gamma_2(t) X_i \xi_i - \Gamma_3(t) X_i \xi_f - \Gamma_4(t) X_f \xi_i \} \cdot \exp - \frac{1}{\hbar} \{ A(t) \xi_f^2 + B(t) \xi_f \xi_i + C(t) \xi_i^2 \} \quad (2-16)$$

其中,

$$\begin{cases} \Gamma_1(t) = \frac{M \dot{\varphi}(t)}{2 \varphi(t)} \\ \Gamma_2(t) = \frac{M}{\varphi(t)} \cdot \left(1 - \omega_k^2 \int_0^t \varphi(u) du \right) \\ \Gamma_3(t) = \frac{M}{2} \left[\omega_k^2 \varphi(t) + \left(1 - \omega_k^2 \int_0^t \varphi(u) du \right) \frac{\dot{\varphi}(t)}{\varphi(t)} \right] \\ \Gamma_4(t) = \frac{M}{\varphi(t)} \end{cases}$$

$$A(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\infty d\nu \cdot \nu \cdot e^{-\lambda\nu} \cdot \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} \cdot A_\nu(t)$$

$$A_\nu(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega\tau \cos \nu(\tau-s) \sin \omega s e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds$$

$$B(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\infty d\nu \cdot \nu \cdot e^{-\lambda\nu} \cdot \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} B_\nu(t)$$

$$B_\nu(t) = \frac{2e^{-\gamma t}}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega\tau \cos \nu(\tau-s) \sin \omega(t-s) e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds$$

$$C(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\infty d\nu \cdot \nu \cdot e^{-\lambda\nu} \cdot \coth \frac{\hbar\nu}{2kT} C_\nu(t)$$

$$C_\nu(t) = \frac{1}{\sin^2 \omega t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega(t-\tau) \cdot \cos \nu(\tau-s) \sin \omega(t-s) e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds$$

G 可由归一化条件确定,(2-16)式包括了记忆摩擦效应和非白噪声,从它出发可以得到任意时刻的约化密度矩阵,原则上能够讨论系统的量子和非 Markov 效应。

三、量子效应及非白噪声的影响

为计算方便我们略去记忆摩擦,对考虑量子结果来说是允许的,另外也可以看出非白噪声的影响。当记忆函数 $g(\tau-s) \rightarrow \delta(\tau-s)$ 时(2-16)式约化为:

$$\begin{aligned}
 J(X_f, \xi_f, t; X_i, \xi_i, 0) = & G \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[K(t) - \frac{M\gamma}{2} \right] X_f \xi_f \right. \\
 & + \left[K(t) + \frac{M\gamma}{2} \right] X_i \xi_i - L(t) X_i \xi_f - N(t) X_f \xi_i \left. \right\} \\
 & \cdot \exp - \frac{1}{\hbar} \{ A(t) \xi_i^2 + B(t) \xi_i \xi_f + C(t) \xi_f^2 \}
 \end{aligned} \quad (3-1)$$

$K(t), L(t), N(t)$ 与文献[5]相同, 取初始约化密度矩阵为:

$$\rho(X_i, \xi_i, 0) = N' \cdot \exp - \frac{1}{4\sigma_x^2} (X_i^2 + \xi_i^2) \quad (3-2)$$

则末态约化密度矩阵为:

$$\begin{aligned}
 \rho(x', x, t) = & \frac{N}{\sqrt{\pi R_c}} \exp - \frac{N^2}{4R_c} (x' + x)^2 \cdot \exp - \alpha (x' - x)^2 \\
 & \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \beta (x'^2 - x^2)
 \end{aligned} \quad (3-3)$$

$$R_c = \hbar C_1 + \sigma_x^2 K_1^2 \quad \alpha = \frac{A}{\hbar} + \frac{\sigma_x^2 L^2}{\hbar^2} - \frac{(2\sigma_x^2 K_1 L - B\hbar)^2}{\hbar^2 (4\hbar C_1 + 4\sigma_x^2 K_1^2)}$$

$$\beta = K_2 - \frac{2\sigma_x^2 K_1 L - B\hbar}{2R_c} \cdot N \quad C_1 = C(t) + \frac{\hbar}{4\sigma_x^2}$$

$$K_1 = K(t) + \frac{M\gamma}{2} \quad K_2 = K(t) - \frac{M\gamma}{2}$$

(3-3)式可以给出布朗粒子的所有力学量.

$$\langle \dot{x} \rangle = 0 \quad (3-4)$$

$$\langle \dot{x}^2 \rangle = R_c / 2N^2 \quad (3-5)$$

$$\langle \dot{p} \rangle = 0 \quad (3-6)$$

$$\langle \dot{p}^2 \rangle = 2M_c R_c / N^2 \quad (3-7)$$

$$M_c = K_2^2 + [(\hbar A + \sigma_x^2 L^2)N^2 - K_2 N (2\sigma_x^2 K_1 L - B\hbar)] / R_c$$

对各种不同的温度 T 、粘滞系数 γ 以及参数 λ 我们计算了坐标的二次矩。如图 1(a), 1(b), 1(c) 所示。首先, 从 $\lambda = 0.1, 0.5$ 和 1.0 的计算结果中可以看出非白噪声的影响对各种温度都是比较明显的, 而粘滞性越大影响越小。当 $\lambda < 0.1$ 时基本上退化为白噪声即为 Markov 近似, 因为没有考虑记忆摩擦, 因此计算结果没有包括全部的非 Markov 效应。对 $T = 0.5 \text{ MeV}, 2.0 \text{ MeV}$ 和 8 MeV 的计算给出了布朗粒子的量子行为, 在低温下计算结果明显大于经典的结果。如图 2 所示存在一个从量子行为到经典行为的临界温度 $T_c = 1.5 T_0 \left(T_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_R \right)$, 当 $T \gg T_c$ 时, 布朗粒子表现出经典行为。在粘滞系数不很小时, T_c 基本上与 γ 无关。从图 3 也可以看出这一点。图 3 给出了 $\langle x^2 \rangle$ 随温度的变化, 当 $T < T_c$ 时, 明显偏离了经典的线性关系, 粘滞系数越小, 偏离就越大。

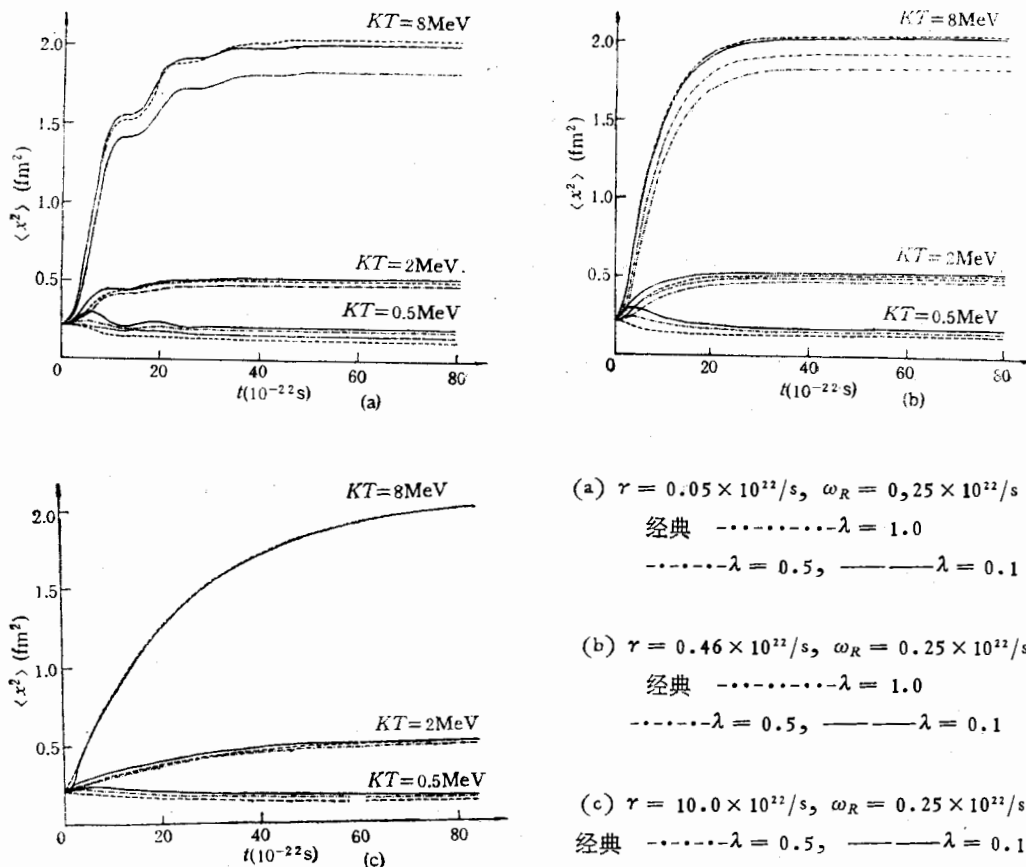


图 1 量子耗散系统的坐标,二次矩随时间的变化

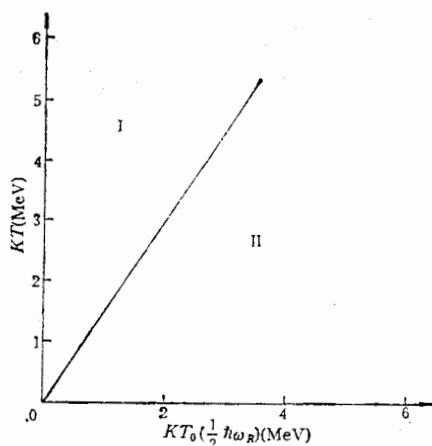


图 2 温度对量子耗散系统的影响
 I——经典区域 II——量子区域

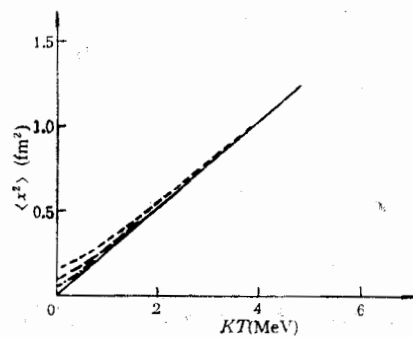


图 3 量子耗散系统的坐标二次矩随温度的变化
 $\omega_R = 0.25 \times 10^{22}/s, \lambda = 0.1$.
 ——— 经典 $\gamma = 0.46 \times 10^{22}/s$
 $\gamma = 1.2 \times 10^{22}/s$, $\gamma = 0.05 \times 10^{22}/s$

四、Fokker-Planck 方程的量子修正

我们希望从(2-9)式出发找到一个包含量子效应和非 Markov 效应的密度矩阵微分方程,在高温和 Markov 近似下应该退化为 Fokker-Planck 方程。由(2-9)的推导可知,要得到该式必须要求初态是非耦合的,而一般中间态并不满足这一点,即:

$$J(x, y, t; x_0, y_0, t_0) \approx \int dx' dy' J(x, y, t; x', y', t') J(x', y', t'; x_0, y_0, t_0) \quad (4-1)$$

约化密度矩阵传播子是带有记忆的,只有在 Markov 近似下才能满足上式。设 ϵ 为小量,时刻 $t + \epsilon$ 和 t 的约化密度矩阵分别为:

$$\rho(x, y, t + \epsilon) = \int dx_0 dy_0 J(x, y, t + \epsilon; x_0, y_0, 0) \rho(x_0, y_0, 0), \quad (4-2)$$

$$\rho(x', y', t) = \int dx_0 dy_0 J(x', y', t; x_0, y_0, 0) \rho(x_0, y_0, 0), \quad (4-3)$$

(2-9)式可以改写为:

$$\begin{aligned} J(x, y, t + \epsilon; x_0, y_0, 0) = & \iint \mathcal{D}[x'] \mathcal{D}[y'] \iint dx' dy' \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \{ S_R[x'] - S_R[y'] \\ & - 2\gamma M \int_0^t \int_0^\tau [x'(\tau) - y'(\tau)] g(\tau - s) [\dot{x}'(s) + \dot{y}'(s)] ds d\tau \} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \right. \\ & \cdot \left. \int_0^t \int_0^\tau [x'(\tau) - y'(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x'(s) - y'(s)] ds d\tau \right\} \cdot \iint \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[y] \cdot \exp \frac{i}{\hbar} \\ & \cdot \left\{ S_R^e[x] - S_R^e[y] - 2M\gamma \int_t^{t+\epsilon} \int_0^\tau [x'(\tau) - y'(\tau)] g(\tau - s) [\dot{x}'(s) + \dot{y}'(s)] ds d\tau \right\} \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\epsilon} \int_0^t [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x'(s) - y'(s)] ds d\tau \right\} \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\epsilon} \int_t^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \alpha_R(\tau - s) [x(s) - y(s)] ds d\tau. \right\} \quad (4-4) \end{aligned}$$

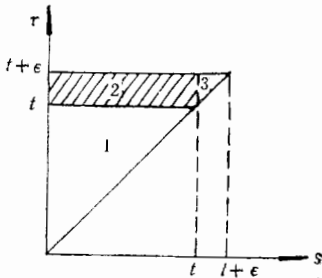


图 4

实部的积分可分为三个区域,区域2是由非 Markov 效应贡献的。在 Markov 近似下, $g(\tau - s)$, $\alpha_R(\tau - s)$ 均趋于 $\delta(\tau - s)$ 的行为,有效积分区域只有1和3。传播子成为无记忆的,满足(4-1)式。 $t + \epsilon$ 时刻的约化密度矩阵满足方程:

$$\begin{aligned} \rho(x, y, t + \epsilon) & = \iint dx' dy' J(x, y, t + \epsilon; x', y', t) \rho(x', y', t), \quad (4-5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J(x, y, t + \epsilon; x', y', t) = & \iint \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[y] \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ S_R^e[x] - S_R^e[y] \right. \\ & \left. - M\gamma \int_t^{t+\epsilon} (x\dot{x} - y\dot{y} + x\dot{y} - y\dot{x}) d\tau \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_t^{t+\epsilon} \int_t^\tau [x(\tau) - y(\tau)] \right. \\ & \left. \cdot \alpha_R(\tau - s) [x(s) - y(s)] ds d\tau. \right\} \quad (4-6) \end{aligned}$$

采用通常的 Feynman 近似, 同时考虑到 $x(t + \epsilon) = x$,

$$\begin{aligned}
 x(t) &= x', \quad \dot{x} = \frac{x - x'}{\epsilon}, \quad y = \frac{y - y'}{\epsilon}, \quad \int_t^{t+\epsilon} f(x) d\tau = \epsilon \cdot f\left(\frac{x + x'}{2}\right) \\
 J(x, y, t + \epsilon; x', y', t) &= \frac{1}{A^2} \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{M(x - x')^2}{2\epsilon} - \frac{M(y - y')^2}{2\epsilon} + v_R \left(\frac{y + y'}{2} \right) \right. \\
 &\quad \cdot \epsilon - v_R \left(\frac{x + x'}{2} \right) \cdot \epsilon - M\gamma \left[\frac{x + x'}{2} (x - x') - \frac{y + y'}{2} (y - y') \right. \\
 &\quad \left. \left. - \frac{y + y'}{2} (x - x') + \frac{x + x'}{2} (y - y') \right] \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{\hbar} \left[\frac{x + x'}{2} - \frac{y + y'}{2} \right] \right. \\
 &\quad \left. \cdot (x - y) \int_t^{t+\frac{\epsilon}{2}} \alpha_R \left(t + \frac{\epsilon}{2} - s \right) \frac{\sin \omega_1 s}{\sin \omega_1 \left(t + \frac{\epsilon}{2} \right)} e^{-\tau \left(t + \frac{\epsilon}{2} - s \right)} ds, \right\} \quad (4-7)
 \end{aligned}$$

代入(4-5)式展开到 ϵ 的一次项:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\hbar}{2M_i} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2M_i} \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{1}{i\hbar} v_R(x) \rho - \frac{1}{i\hbar} v_R(y) \rho \\
 &\quad - \gamma(x - y) \frac{\partial \rho}{\partial x} + \gamma(x - y) \frac{\partial \rho}{\partial y} - \frac{1}{\hbar} (x - y)^2 \\
 &\quad \cdot \int_0^{\frac{\epsilon}{2}} \alpha_R \left(s - \frac{\epsilon}{2} \right) \frac{\sin \omega_1 (t + s)}{\sin \omega_1 \left(t + \frac{\epsilon}{2} \right)} e^{-\tau \left(\frac{\epsilon}{2} - s \right)} ds \quad (4-8)
 \end{aligned}$$

作 Wigner 变换得到单粒子分布函数满足的方程:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{P}{M} \frac{\partial W}{\partial x} + v_R' \frac{\partial W}{\partial P} + 2\gamma \frac{\partial}{\partial P} (PW) + D \frac{\partial^2 W}{\partial P^2} \quad (4-9)$$

其中:

$$D = \hbar \int_0^{\frac{\epsilon}{2}} \alpha_R \left(s - \frac{\epsilon}{2} \right) \frac{\sin \omega_1 (t + s)}{\sin \omega_1 \left(t + \frac{\epsilon}{2} \right)} e^{-\tau \left(\frac{\epsilon}{2} - s \right)} ds$$

$$\omega_1^2 = \omega_R^2 - \gamma^2 \quad (4-10)$$

(4-10)式为经典 Fokker-Planck 方程的量子修正。在推导中已经作了 Markov 近似, 若作高温近似则由(2-8)式得: $D = 2M\gamma kT$

方程(4-10)退化为经典 Fokker-Planck 方程^[8], 可以看出由于非 Markov 效应, 约化密度矩阵传播子 J 不满足 Chapman-Kolmogorov 方程, 因此得到包括记忆摩擦的类似 Fokker-Planck 方程的几率描述是困难的, Langevin 方程采用随机变量描述更容易讨论非 Markov 效应。约化密度矩阵传播子的虚部提供阻尼项, 实部提供关联项则 Langevin 方程可写为:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x}{dt^2} + 4\gamma M \int_0^t \dot{x}(s) g(t-s) ds + \omega_R^2 x = F(t) \\ \langle F(t) \rangle = 0 \\ \langle F(t) F(s) \rangle = \frac{2\hbar M \gamma}{\pi} \int_0^\infty e^{-\lambda \omega} \cdot \omega \cdot \coth \frac{\hbar \omega}{2kT} \cdot \cos \omega(\tau - s) d\omega \end{cases} \quad (4-11)$$

和经典的唯象方程比较, $g(t-s)$ 与剩余涨落力提供非 Markov 的记忆过程, 量子效应由无规力提供, 在高温和 Markov 近似下方程(4-11)可以退化为经典方程(1-1).

五、结 论

本文采用路径积分方法, 在量子力学框架下讨论布朗运动, 得到了普遍的约化密度矩阵. 计算结果表明非白噪声对所有的温度都是重要的. 其影响随粘滞性的增大而减小, 参数 λ 表征了非 Markov 效应的重要性, $\lambda < 0.1$ 时, 布朗粒子表现出 Markov 特征. 量子效应仅在低温时才显得重要, 存在临界温度 $T_c \doteq 1.5T_0$ ($T_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_R$). 当 $T < T_c$ 表现出量子行为而 $T \gg T_c$ 时, 过程是经典的在粘滞系数不是很小时, T_c 几乎与粘滞性无关, 最后我们得到 Fokker-Planck 方程的量子修正, 本文的结果还只是初步的, 对如何完整地研究非 Markov 效应以及考虑 Pauli 原理并进一步改进环境与系统的耦合方式等问题还有待更深入的研究.

参 考 文 献

- [1] I. R. Senitzky, *Phys. Rev.*, **119**(1960), 670.
- [2] H. Mori, *Prog. Theor. Phys.*, **33**(1965), 423.
- [3] R. Zwanzig, *J. Chem. Phys.*, **33**(1960), 1338.
- [4] S. Nakajima, *Prog. Theor. Phys.*, **20**(1958), 948.
- [5] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Physica*, **21A**(1983), 587.
- [6] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (New York 1965).
- [7] F. Smithies, *Integral Equation* (Cambridge 1962).
- [8] H. Risken, *The Fokker Plank Planck Equation* (Springer, Heidelberg, 1984).
- [9] Xizhen Wu, Zhuxiu Li, J. A. Maruhn, W. Greiner and Yizhong Zhuo, *J. Phys. G: Nucl. Phys.*, **14**(1988), 1049.

STUDY OF QUANTUM AND NON-MARKOVIAN EFFECTS IN BROWNIAN MOTION

SUN ZHEMIN WU XIZHEN ZHUO YIZHONG

(China Institute of Atomic Energy, Beijing)

ABSTRACT

Based on the new form of the distribution density of the reservoir oscillator frequencies, the analytical expression of the density matrix $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)$ for a dissipative quantum system has been obtained. The quantum and Non-Markovian effects on the quantum Brownian motion have been studied quantitatively and the Fokker-Planck equation including the quantum effects has been primarily derived under the Markovian approximation.