

量子布朗运动和原子核裂变*

吴锡真 李祝霞 卓益忠

(中国原子能科学研究院, 北京)

摘 要

本文研究了在谐振子位势中量子布朗运动与体系粘滞性、温度等参量的关系, 观察了体系运动由显示量子行为到完全经典行为的过渡. 对由位阱和位垒组成的裂变位势和一般位势情况, 通过局域谐振子近似和推广在谐振子位势中的传播子来计算布朗粒子跨越位垒的速率, 与经典 Fokker-Planck 方程 (F-P 方程) 的解相比, 它包括了量子效应, 因而对量子输运理论的发展具有重要意义.

一、引 言

在自然界中许多体系可以用经典 Langevin 方程或 F-P 方程来描述. 但在很多情况下, 特别是体系能量不高的情况下, 量子效应却是非常重要的. 因此如何把有阻尼的经典运动方程和量子化过程结合起来已成为物理学一个非常基本的问题. 近二、三十年以来, 人们试图回答这一问题, 主要在两个方向上开展了工作: 一是寻找量子化的新方案; 二是采用体系加热浴的途径. Senitzky^[1], Mori^[2], Zwanzig^[3] 和 Nakajima^[4] 等沿着第二个方向, 研究体系和热浴的相互作用, 得到密度算符的广义主方程. 我们曾经采用与时间有关的投影算符技术, 得到相互耦合系统的主方程^[5,6]. 本文根据上述思想将体系哈密顿量表示成集体运动部分、内部运动部分和两者相互作用部分之和^[7]. 其中内禀运动部分作热浴处理, 相互作用部分取通常线性耦合形式.

裂变和重离子碰撞过程经常作为研究集体运动和单粒子耦合的例子. 在核裂变的扩散模型中^[8,9], 我们把核的变形运动看成布朗粒子的扩散运动, 而核内核子运动当作热浴处理, 核子对核壁的碰撞作为无规碰撞. 为了进一步发展我们的理论, 自恰地考虑量子效应, 本文采用以上哈密顿模型. 为了简单起见, 暂将热浴看成由 N 个谐振子组成, 从这个哈密顿出发, 利用泛函积分方法, 解析得到描述密度矩阵随时间、空间传播的传播子. 这个传播子反映了在空间某处初始为 δ 函数的分布随时间的演化. 如果我们要研究的子系统所处的位不是谐振子位, 而是任意位, 例如裂变位, 那末在它的每一个局域仍可近似认为是一个谐振子位. 应用局域谐振子近似下的传播子方法^[10], 将以上的模型推广到实际位势情

本文 1988 年 12 月 23 日收到.

* 国家自然科学基金资助课题.

况, 发展了量子布朗运动模型. 本文定量研究了量子布朗运动的规律及各种参量对它的影响; 观察了运动由量子行为到经典行为的过渡; 定量地比较了用量子和经典布朗运动模型计算的裂变速率. 这些结果的合理性指出: 这个模型不仅对研究裂变或重离子融合等具有实际价值, 而且对研究跨越任意位垒的有阻尼的量子扩散(穿透)问题也具有一定的理论意义.

二、密度矩阵传播子

我们的目的是研究体系在类裂变位势中的量子布朗运动. 为了使模型是可解析的, 首先对裂变位势作局域谐振子近似, 即在某局域空间坐标下, 得到集体运动(子系 A)的哈密顿量:

$$H_A = P^2/2M + 1/2M\omega_A^2(x - x_0)^2, \quad (1)$$

M 是质量参数, $\omega_A(x_0)$ 是局域谐振子频率, 是 x_0 的函数. x 和 P 表示集体运动坐标和相应动量. 热浴(子系 B)由 N 个处在谐振子位阱中的粒子组成, 其哈密顿量为:

$$H_B = \sum_K P_K/2m + \sum_K 1/2m\omega_K^2 R_K^2, \quad (2)$$

其中 m 是粒子质量, ω_K 是频率, R_K 和 P_K 为粒子坐标和动量. 如果认为子系 A 与 B 的耦合不是强的, 则可以把它写成线性耦合形式:

$$H_I = x \sum_K C_K R_K, \quad (3)$$

C_K 表示耦合强度. 为了将它与体系粘滞系数联系起来, 这里借用固体物理中德拜频谱分布^[11]:

$$\rho_D(\omega)C^2(\omega) = \begin{cases} 2m\eta\omega^2/\pi, & \omega < Q \\ 0, & \omega > Q \end{cases} \quad (4)$$

η 是粘滞系数, ρ_D 是体系 B 谐振子频谱分布密度, Q 是截断频率. 引用以上的频谱分布可将体系 B 谐振子求和变成积分. 体系 B 成为真正热浴. 在这样的哈密顿模型下, 密度矩阵的传播子是可解析的. 现在给出推导传播子公式的要点. 首先假定在初始时刻系统和热浴没有相互作用, 即: $\rho(0) = \rho_A(0)\rho_B(0)$, 同时认为子系 B 始终处在热力学平衡, 然后借助 Feynman-Vernon 理论, 经过推导可得约化密度矩阵 $\rho_A(x, y, t)$ 的传播子表达式:

$$\begin{aligned} J = & N(t)/\pi\hbar \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \left[K(t) - \frac{1}{2} M\gamma \right] x_f \xi_f + \left[K(t) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} M\gamma \right] x_i \xi_i - L(t)x_i \xi_f - N(t)x_f \xi_i \right\} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} [A_1(t)\xi_f^2 + A_2(t)\xi_f \xi_i + A_3(t)\xi_i^2] \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

其中: $x_f = x + y$; $\xi_f = x - y$; $x_i = x' + y'$; $\xi_i = x' - y'$;

$$N(t) = M\omega_R e^{-\gamma t} / 2 \sin \omega_R t; \quad \gamma = \eta / 2M;$$

$$L(t) = M\omega_R e^{-\gamma t} / 2 \sin \omega_R t;$$

$$K(t) = \frac{1}{2} M \omega_R \cot \omega_R t;$$

$$A_i(t) = \frac{M\gamma}{\pi} \int_0^\infty d\nu \coth \frac{\hbar\nu}{2KT} A_{vi}(t); \quad i = 1, 2, 3$$

$$A_{v1}(t) = \frac{e^{-2\gamma t}}{\sin^2 \omega_R t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega_R \tau \cos \nu(\tau - s) \sin \omega_R s e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds;$$

$$A_{v2}(t) = \frac{2e^{-\gamma t}}{\sin^2 \omega_R t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega_R \tau \cos \nu(\tau - s) \sin \omega_R(t - s) e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds;$$

$$A_{v3} = \frac{1}{\sin^2 \omega_R t} \int_0^t \int_0^t \sin \omega_R(t - \tau) \cos \nu(\tau - s) \sin \omega_R(t - s) e^{\gamma(\tau+s)} d\tau ds;$$

$$\omega_R = \begin{cases} (\omega_A^2 - \gamma^2)^{1/2} & \text{对位阱和小粘滞性情况;} \\ i(\gamma^2 - \omega_A^2)^{1/2} & \text{对位阱和大粘滞性情况;} \\ i(\omega_A^2 + \gamma^2)^{1/2} & \text{对位垒情况.} \end{cases}$$

三、在谐振子位阱中的量子布朗运动

有了密度矩阵传播子, 不难得到相应于特定初始分布的量子分布. 为了与经典 F-P 方程的结果进行比较, 对量子分布施行 Wigner 变换. 假如选取 Gaussian 型初始分布函数:

$$P_i(x_0 p_0) = \frac{1}{2\pi\sigma_p\sigma_x} \exp\left(-\frac{x_0^2}{2\sigma_x^2} - \frac{p_0^2}{2\sigma_p^2}\right),$$

其中 $\sigma_p \cdot \sigma_x = \hbar$, 相应于量子力学零点能提供核温度. 经过简单推导, 求出体系在经典相空间分布函数

$$W(x, p, t) = \frac{N(t)}{2\pi} \left(\frac{1}{2\sigma_x^2 K_1^2 + \hbar C_1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{R^{\frac{1}{2}}} \\ \times \exp\left\{-\frac{1}{R} \left[\frac{p^2}{4} + \left(\frac{RN(t)^2}{2\sigma_x^2 + \hbar C_1} + s_c^2 \right) x^2 + s_c x p \right]\right\}$$

$$\text{其中: } R = \hbar A_1(t) + 2\sigma_x^2 L^2(t) - \frac{(4\sigma_x^2 K_1 L(t) - A_2(t)\hbar)^2}{8\sigma_x^2 K_1^2 + 4\hbar C_1};$$

$$K_1 = K(t) + \frac{1}{2} M\gamma; \quad K_2 = K(t) - \frac{1}{2} M\gamma;$$

$$C_1 = A_3(t) + \frac{\hbar}{8\sigma_x^2}.$$

$$s_c = K_2 - 0.5(4\sigma_x^2 K_1 L - \hbar A_2)N / (2\sigma_x^2 K_1^2 + \hbar C_1)$$

由此得到各种二次矩的表达式:

$$\langle x^2 \rangle = (2\sigma_x^2 K_1^2 + \hbar C_1) / 2N^2(t);$$

$$\langle p^2 \rangle = 2(R + 2s_c^2 \langle x^2 \rangle);$$

$$\langle xp \rangle = -2s_c \langle x^2 \rangle.$$

作为对模型合理性的一个检验, 我们在高温和马尔可夫近似下讨论了二次矩的渐进行为. 观察函数 $A_1(t)$, $A_2(t)$, $A_3(t)$, 对它们取高温近似, 即将函数

$$\coth \frac{\hbar\nu}{2KT} \rightarrow \frac{2KT}{\hbar\nu};$$

另外在函数 $\cos\nu(\tau-s)$ 中包含着非马尔可夫效应,为作马尔可夫近似注意公式

$$\int_0^\infty d\nu \cos\nu(\tau-s) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{\sin\nu(\tau-s)}{\tau-s} = \delta(\tau-s).$$

因此只要将 ν 的上限 Ω 趋向很大,在 $A_i(t)$ 中就出现了 δ 函数,相应对时间作了马尔可夫近似,得到 $A_i(t)$ 的解析表达式. 例如:

$$A_3(t) = \frac{KTM\gamma}{2\hbar\sin^2\omega_R t} \left\{ \frac{1}{\gamma} (e^{2\gamma t} - 1) + \frac{1}{\omega_R^2 + \gamma^2} \right. \\ \left. \times (\gamma \cos 2\omega_R t - \gamma e^{2\gamma t} - \omega_R \sin 2\omega_R t) \right\},$$

这样推出二次矩在谐振子位阱中当 $\gamma < \omega_A$ 情况下的解析表达式. 我们发现这些公式与在谐振子位阱中解经典 F-P 方程得到的二次矩公式^[12]完全一样. 说明经典 F-P 方程的确是我们研究的量子布朗运动在高温和马尔可夫近似下的极限情况.

为了推动这种模型的实际应用,我们首先研究热浴振子的截断频率 Ω 对结果的影响. 图 1 给出在不同温度和粘滞系数下二次矩对截断频率的依赖关系. 由图可见,对小粘滞系数情况,在截断频率 Ω 大于 $20 \times 10^{22}/s$ 时,二次矩 $\langle x^2 \rangle$ 随 Ω 的变化呈振荡函数. 但在 Ω 小于 $20 \times 10^{22}/s$ 时, $\langle x^2 \rangle$ 对 Ω 不敏感. 在粘滞系数较大时,二次矩几乎不随 Ω 变化(除 Ω 非常小之外). 因此只要粘滞性不十分小,我们的计算结果就不依赖于 Ω 的选取. 如果要研究小粘滞性时体系的行为,可以在不同 Ω 下计算 $\langle x^2 \rangle$, 然后取其平均值.

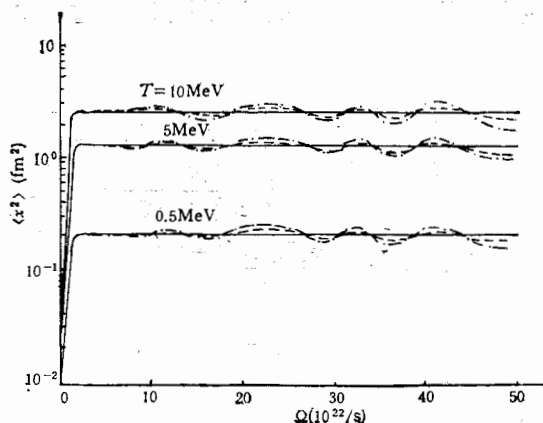


图 1 二次矩与截断频率 Ω 的关系 ($t = 2 \times 10^{-19}s$)

— $\gamma = 0.100(10^{22}/s)$ - - - $\gamma = 0.06(10^{22}/s)$ - · - · $\gamma = 0.04(10^{22}/s)$

随着体系温度的增加,量子布朗运动会逐渐过渡到经典情况. 图 2 显示了这种过渡. 这里我们划出在不同粘滞性下,二次矩 $\langle x^2 \rangle$ 随体系温度的变化,其中短划线表示在经典情况下的 $\langle x^2 \rangle$ 值. 定义一个温度 T_{cr} , 表示量子扩散的 $\langle x^2 \rangle$ 值达到(在 10% 精度内)经典 $\langle x^2 \rangle$ 值的临界温度. 那末,由图 2 可见,在小粘滞性下,量子 $\langle x^2 \rangle$ 值在较高 T_{cr} 下才达到经典 $\langle x^2 \rangle$ 值,随着粘滞性的增加, T_{cr} 变小,在达到中等粘滞性以后, T_{cr} 对粘滞性

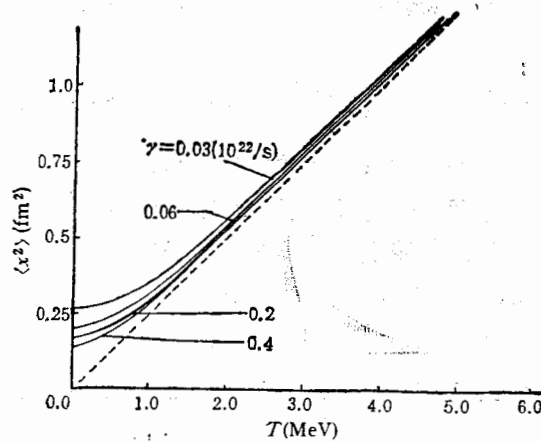
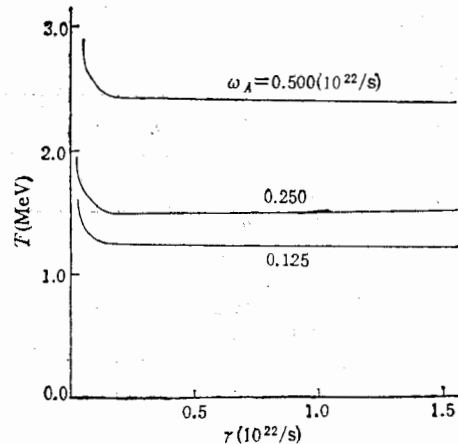


图 2 二次矩与核温度的关系

$$Q = 10 \times 10^{22}/s \quad t = 2 \times 10^{-19}s$$

— 量子情况 ---- 经典情况

似乎不太敏感。 $\langle x^2 \rangle$ 对温度的这种依赖关系体现了体系由量子行为向完全经典行为的过渡。在经典布朗运动中,环境的影响始终看成是“无规力”的作用。而在量子情况,还存在着量子涨落,随着温度的增加,它将逐渐消失,这就导致体系由显示量子行为完全过渡到经典行为。在图 3 我们示意划出 T_{cr} 与体系粘滞性的关系。图中的三条曲线分别相应于位阱曲率 $\omega_A = 0.50, 0.25, 0.125$, 对应的量子力学零点能为 1.64, 0.82, 0.41 MeV。 $T_{cr}-\gamma$ 曲线将空间划分成两个区域: 经典区域和量子区域。当然两者之间的区分不是截然的,有一个过渡区域。由图可定性看出,在什么条件下布朗运动呈现量子行为,在什么条件下可以用经典近似。同时 T_{cr} 的大小与位阱的宽度有关,量子力学零点能愈高的体系, T_{cr} 也愈高,即从量子到经典行为的转变温度高,反之亦然。

图 3 T_{cr} 与粘滞性 γ 的关系

四、在裂变位势中的量子布朗运动

典型裂变位势由基态位阱和位垒组成。

作为在这样的位势中研究量子布朗运动的例子,

我们选位阱的曲率为 1.64 MeV, 位垒曲率为 0.64 MeV, 位垒高度为 4 MeV^[13]。在这样的位势中不能写出传播子的解析表达式。我们应用局域谐振子近似,即对裂变的任一小局域用谐振子来逼近它^[10,13]。而在谐振子位阱中和位垒上的约化密度算符的传播子前面已求得。通过 Wigner 变换可以得到它们在经典相空间的形式。假如已知在 $t = 0$ 时刻的初始分布 $W_0(x_0, p_0, 0)$, 那末下一时刻的分布函数将是

$$W(x, p, t) = \iint dx_0 dp_0 J(x, p, t; x_0, p_0, 0) W(x_0, p_0, 0),$$

传播子需满足初始条件:

$$\lim_{t \rightarrow 0} J(x, p, t; x_0, p_0, 0) = \delta(x - x_0) \delta(p - p_0).$$

这就是说,当 $t = 0$ 时, J 只表示在 x, p 两维相空间的一个点,而随着时间的的发展, J 在相空间会逐渐变宽. 我们总可以把时间间隔 Δt 取得足够小,以使传播子的分布保持在一个相当窄的宽度内. 这是因为我们使用局域谐振子来逼近真实位,因此必须使 $J(x, p, t; x_0, p_0, t_0)$ 保持窄分布. 这样我们只能使用多次传播的方式来获得某一较长时刻的分布函数. 这就要求传播子具有连续传播的性质,即

$$J(x, p, t + \varepsilon; x', p', 0) = \iint dx'' dp'' J(x, p, t + \varepsilon; x'', p'', t) \\ \times J(x'', p'', t; x', p', 0).$$

在第二节中引入的 J 与一般传播子不同,并不严格具有这种性质^[7]. 然而我们已经证明^[14]在马尔可夫近似下它具有连续传播性质,而这时它包括了全部量子效应,所以我们可以用它来研究在裂变位中的量子输运问题. 应用这种方法,我们计算了在裂变位中的量子布朗运动分布函数、鞍点及断点上的裂变速率以及平均动能和分布宽度等,这和文献[13,15]中所作的相似. 限于篇幅,现只给出鞍点上裂变速率随时间的变化. 为了与经典

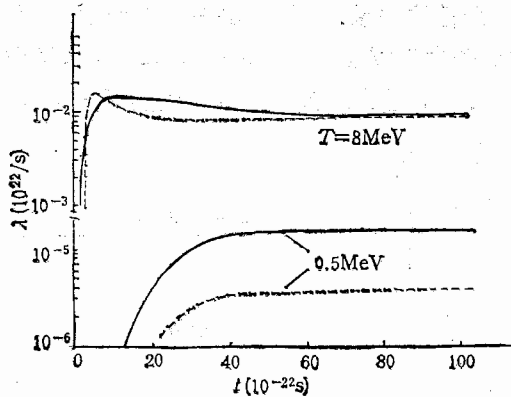


图4 鞍点裂变速率随时间的变化
 $E_f = 4\text{MeV}$ $\gamma = 0.5(10^{22}/\text{s})$
 ——量子情况 ----经典情况

F-P 方程的解进行比较,在图4上部划出在高温极限情况下 ($T = 8\text{MeV}$) 用两种方法计算的鞍点上的裂变速率. 结果表明: 在高温下量子布朗运动和经典F-P方程给出几乎相同的渐近结果,差别仅在于扩散的初始阶段. 图4下部给出低温情况下两种方法计算的裂变速率. 由于量子效应增强了扩散过程,使量子情况的裂变速率明显大于F-P方程的结果,并且在量子情况扩散进行得较早. 但是它们随时间上升最后达到准稳态值的总趋势是相似的. 这当然是合理的. 由此可见在低温下研究布朗粒子逃逸位垒的行为,必须考虑量子效应,即采用量子布朗运动的观点和模型.

五、结 论

为了发展量子输运理论,本文从一个简单模型入手,借助泛函积分方法和 Wigner 变换,得到包括量子效应的经典相空间的分布函数. 通过此模型研究得到以下结论:

1. 在粘滞系数不小的情况下,热浴频谱的截断频率对扩散过程的影响不十分明显,即使在较小粘滞系数下,也可以通过适当选取截断频率来减少由于它的选择造成对结果的

影响,使定量计算成为可能。

2. 对给定粘滞性 γ , 量子体系存在一个类似临界温度 T_c , 远大于这个温度, 体系可用经典 F-P 方程描述; 明显小于这个温度时量子效应不可忽略。因此 T_c - γ 空间可粗略分成两个区域: 量子区域和经典区域。

3. 初步尝试了在裂变位势中描述量子扩散的模型和方法。发现在高温下本文模型和经典扩散理论有基本相同的结果,但在低温下量子效应是必须考虑的。

以上工作是初步的。还有许多问题要解决: 需要考虑量子隧道效应; 要研究非马尔可夫效应对量子输运的影响; 要研究改进体系和环境的耦合形式等; 以便更深刻地理解有阻尼的量子布朗运动的实质。

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] 卓益忠, 吴锡真, 高能物理与核物理, **3**(1979), 501.
- [6] 卓益忠, 张竟上, 吴锡真, 马中玉, 高能物理与核物理, **4**(1980), 752.
- [7] A. O. Caldeira, *A. J. Leggett, Physica*, **121A**(1983), 587.
- [8] 吴锡真, 卓益忠, 高能物理与核物理, **4**(1980), 113.
- [9] 吴锡真, 卓益忠, 原子核物理, **2**(1980), 275.
- [10] F. Scheuter, H. Hofmann, *Nucl. Phys.*, **A394**(1983), 477.
- [11] R. Zwanzig *J. Math. Phys.*, **9**(1973), 215.
- [12] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.*, **15**(1943), 1.
- [13] 冯仁发, 吴锡真, 卓益忠, 裂变系统扩散过程的研究 (I)-趋向平衡过程现象分析, 原子核物理, **10**(1988), 16.
- [14] 孙喆民, 吴锡真, 卓益忠, 布朗运动中的量子及非以 Markov 效应, 高能物理与核物理, 待发表.
- [15] 冯仁发, 吴锡真, 卓益忠, 裂变系统扩散过程的研究 (II)-准稳态现象的分析. 原子核物理, **10**(1988), 120.

QUANTUM BROWNIAN MOTION AND NUCLEAR FISSION

WU XIZHEN LI ZHUXIA ZHUO YIZHONG

(Institute of Atomic Energy of China, Beijing)

ABSTRACT

Based on a simplified Hamiltonian model the transition from quantum to classical diffusion behaviours for a system has been shown. The approximation of a locally harmonic oscillator and reduced density operator propagator in the harmonic oscillator are generalized to calculate the escape rate over the barrier for the system in a fission potential consisting of a ground state well and barrier.