

多组元气体中的单粒子密度矩阵

刘 金 明
(物理学系)

提 要

本文应用随时间演变算符和拉氏变换证明了多组元气体中各组元的单粒子密度矩阵都满足 Bloch 型方程. 这结果也容易推广到包含有粒子与辐射场或粒子与其它热源有相互作用的情况. 本文还得出在外加交变电场的一级近似下, 多组元气体的线性极化率公式. 式中明显给出各粒子间相互作用对于极化率的贡献.

一、引言

F. Bloch 在研究核磁共振理论时, 首先提出了自旋系统的密度矩阵 ρ_s 所满足的方程为⁽¹⁾

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = -i(L_s + C_s)\rho_s(t) + \Gamma(\rho_s(t)) \quad (1.1)$$

在导出此方程时, 有三个基本假设: ①设自旋系统 S 只和周围的分子系统 M 有相互作用, 忽略自旋系统之间的相互作用. 因此整个系统可以认为只包含一个自旋系统 S 和周围大量分子组成的系统 M 所组成. 整个系统的哈密顿量可写为

$$H = H_s + H_M + H_{SM}. \quad (1.2)$$

自旋系统的密度矩阵 ρ_s 和整个系统的密度矩阵 ρ 的关系为

$$\rho_s = \text{Tr}_M \rho. \quad (1.3)$$

②设分子系统始终处于热平衡态 $\rho_M(0)$ 于是

$$\rho(t) = \rho_s(t)\rho_M(0). \quad (1.4)$$

在(1.1)中 $L_s \rho_s = [H_s, \rho_s]$, (1.5)

$$C_s \rho_s = [\text{Tr}_M H_{SM} \rho(0), \rho_s]. \quad (1.6)$$

③设分子系统具有无限大的热传导, 可用 Markoff 近似. 这样(1.1)中 $\Gamma(\rho_s)$ 是 ρ_s 的线性函数, 代表由于分子系统与自旋系统的相互作用产生的自旋系统的弛豫效应. 其具体形式依赖于 H_{SM} 的形式.

后来 Argyres 和 Kelley⁽²⁾ 不用后面两个假设, 改设

• 本文1981年11月收到

$$\rho(0) = \rho_s(0)\rho_M(0). \quad (1.7)$$

应用投影算符法, 引进投影算符

$$P = \rho_M(0)T_{r_M}, \quad (1.8)$$

式中

$$T_{r_M}\rho_M(0) = 1. \quad (1.9)$$

推导出 ρ_s 满足的方程为

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = -i(L_s + C_s)\rho_s - \int_0^t dt' T_{r_M} L_{NM} e^{-i(1-P)L(t-t')} (1-P)L\rho_M(0)\rho_s(t') \quad (1.10)$$

方程(1.10)就叫做Bloch型方程。不仅在核磁共振问题中, 而且已应用于量子光学问题及气体分子与光场相互作用的非平衡统计问题中⁽³⁻⁵⁾。

在以上的推导中, 自旋系统 S 和分子系统 M 处于非对称的位置, 没有考虑自旋系统之间的相互作用。而在研究多组元气体的性质时, 各分子处于对称位置, 显然第二个假设(1.4)式是不适用了。由于这时整个系统的哈密顿量为(设只有两种分子 a 和 b);

$$H = \sum_i H_a(i) + \sum_j H_b(j) + \sum_{i,i'}' H_{aa}(i,i') + \sum_{jj'}' H_{bb}(jj') + \sum_{ij} H_{ab}(i,j) + \sum_i H_{iv}(i) + \sum_j H_{jv}(j). \quad (1.11)$$

比第一个假设下的(1.2)式复杂。因而这时单粒子密度矩阵 $\rho_a(t)$ 满足什么样的方程并不是十分显然的⁽⁶⁾。实际上若对刘维方程直接求迹求单粒子密度矩阵随时间变化的方程, 会出现二粒子密度矩阵, 求二粒子密度矩阵的运动方程时会出现三粒子密度矩阵, 如此继续求下去便得无穷方程组⁽⁷⁾。本文应用随时间演变算符和拉氏变换法证明这种无穷方程组是可以截断成为单粒子密度矩阵的封闭方程, 而此方程仍是Bloch型方程。最后作为例子, 应用多组元气体的单粒子密度矩阵求得了多组元气体的线性极化率公式, 式中明显给出各粒子间相互作用对极化率的贡献。

二、单粒子密度矩阵的方程

虽然以下的推导对于单组元气体都一样适用, 但为普遍计, 设气体有两种分子, 一种记为 a , 其分子总数记为 N_a , 分子数密度记为 n_a 。另一种分子记为 b , 其分子总数和分子数密度分别记为 N_b 和 n_b 。 a 种分子记以 $1, 2, \dots, N$, 其中之一记以 i , b 种分子记以 $1', 2', \dots, N'$, 其中之一记以 j 。整个系统的密度矩阵为 $\rho(t)$, 定义 a 种分子和 b 种分子的单粒子密度矩阵 ρ_a 和 ρ_b 分别为

$$\rho_a(t) = T_{r_{2 \dots N, 1' 2' \dots N'}} \rho(t), \quad (2.1)$$

$$\rho_b(t) = T_{r_{1 \dots N, 2' \dots N'}} \rho(t). \quad (2.2)$$

整个系统的哈密顿量为(1.11), 相应的刘维算符为

$$L = \sum_a L_a + \sum_b L_b + \sum' L_{aa} + \sum' L_{bb} + \sum L_{ab} + \sum_a L_{av}(t) + \sum_b L_{bv}(t), \quad (2.3)$$

式中, L_a, L_b 分别表示一个 a 分子或 b 分子的刘维算符. $\sum_a L_a$ 表示对所有 a 种分子求和,

为书写方便, 省写了第 i 个 a 种分子的下标 i , 以下都采用这种省略记法. L_{aa}, L_{bb} 和 L_{ab} 分别表示 a 分子之间、 b 分子之间或 a, b 分子之间的相互作用. L_{av} 和 L_{bv} 分别代表 a 种分子或 b 种分子和外场 $V(t)$ 的相互作用的刘维算符.

由整个系统的刘维方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -iL\rho. \quad (2.4)$$

直接求迹可得

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} = -i(L_a + L_{av}(t))\rho_a - in_a \text{Tr}_2 L_{aa} \rho_{aa} - in_b \text{Tr}_{1'} L_{ab} \rho_{ab}. \quad (2.5)$$

方程中出现双粒子密度矩阵 ρ_{aa} 和 ρ_{ab} , 其定义为

$$\rho_{aa} = V_0 \text{Tr}_{3\dots N, 1' \dots N'} \rho, \quad (2.6)$$

$$\rho_{ab} = V_0 \text{Tr}_{2\dots N, 2' \dots N'} \rho, \quad (2.7)$$

V_0 为系统的体积. 而双粒子密度矩阵满足的方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{aa}}{\partial t} = & -i(L_{a1} + L_{a2} + L_{a1a2} + L_{a1v} + L_{a2v})\rho_{aa} - in_a \text{Tr}_3 (L_{a1a3} + \\ & + L_{a2a3})\rho_{aaa} - in_b \text{Tr}_{1'} (L_{ba1} + L_{ba2})\rho_{baa}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{ab}}{\partial t} = & -i(L_a + L_b + L_{ab} + L_{av} + L_{bv})\rho_{ab} - in_a \text{Tr}_2 (L_{ab} + L_{aa})\rho_{baa} - \\ & - in_b \text{Tr}_{2'} (L_{a1b2} + L_{b1b2})\rho_{bba}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

式中
$$\rho_{aaa} = V_0^2 \text{Tr}_{4\dots N, 1' \dots N'} \rho, \quad (2.10)$$

$$\rho_{baa} = V_0^2 \text{Tr}_{3\dots N, 2' \dots N'} \rho, \quad (2.11)$$

$$\rho_{bba} = V_0^2 \text{Tr}_{2\dots N, 3' \dots N'} \rho. \quad (2.12)$$

是三粒子密度矩阵, 继续求多粒子密度矩阵的运动方程便得无穷方程组. 显然不能由此求得单粒子密度矩阵的准确解. 通常有两种做法, 一是将多粒子密度矩阵近似表成较少粒子密度矩阵的乘积而把无穷方程组截断. 另一种是找出单粒子密度矩阵的封闭方程再求解. 这二种做法与多体问题中处理单粒子格林函数所满足的方程的方法相同. 下面将证明, 应用随时间演变算符的方法可以得到准确的单粒子密度矩阵的封闭方程. 而此方程正是 Bloch 型方程.

定义 $\rho_a(t)$ 的随时间演变算符 $U_a(t)$ 为

$$U_a(t)\rho_a(0) = \rho_a(t) \quad (2.13)$$

容易验证

$$U_a(t) = \text{Tr}_{2\dots N, 1' \dots N'} \rho(t) \rho_a(0)^{-1}. \quad (2.14)$$

同理, 引进 $\rho_{aa}(t)$ 和 $\rho_{ab}(t)$ 的随时间演变算符 $U_{aa}(t)$ 和 $U_{ab}(t)$, 定义为

$$U_{aa}(t) \rho_{aa}(0) = \rho_{aa}(t), \quad (2.15)$$

$$U_{ab}(t) \rho_{ab}(0) = \rho_{ab}(t). \quad (2.16)$$

$$\text{则 } U_{aa}(t) = V_0 \text{Tr}_{3\dots N, 1' \dots N'} \rho(t) \rho_{aa}(0)^{-1}, \quad (2.17)$$

$$U_{ab}(t) = V_0 \text{Tr}_{2\dots N, 1' \dots N'} \rho(t) \rho_{ab}(0)^{-1}. \quad (2.18)$$

作拉氏变换 (或叫付氏—拉氏变换)

$$f(\omega) = \int_0^\infty f(t) e^{i\omega t} dt \quad (2.19)$$

可得

$$\rho_a(\omega) = U_a(\omega) \rho_a(0), \quad (2.20)$$

$$\rho_{aa}(\omega) = U_{aa}(\omega) \rho_{aa}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} \rho_a(\omega), \quad (2.21)$$

$$\rho_{ab}(\omega) = U_{ab}(\omega) \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} \rho_a(\omega). \quad (2.22)$$

引进变换算符 $K_{aa}(\omega)$ 和 $K_{ab}(\omega)$, 分别定义为

$$K_{aa}(\omega) = U_{aa}(\omega) \rho_{aa}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} - \rho_{aa}(0) \rho_a(0)^{-1}, \quad (2.23)$$

$$K_{ab}(\omega) = U_{ab}(\omega) \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} - \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1}. \quad (2.24)$$

这两个变换算符在 $\omega \rightarrow \infty$ 时都有

$$K_{aa}(\infty) = K_{ab}(\infty) = 0. \quad (2.25)$$

于是(2.21)(2.22)式化为

$$\rho_{aa}(\omega) = K_{aa}(\omega) \rho_a(\omega) + \rho_{aa}(0) \rho_a(0)^{-1} \rho_a(\omega), \quad (2.26)$$

$$\rho_{ab}(\omega) = K_{ab}(\omega) \rho_a(\omega) + \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1} \rho_a(\omega). \quad (2.27)$$

求这二式的逆变换后代进(2.5)式, 便得只含单粒子密度矩阵的封闭方程, 这方程是 Bloch型方程:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} = -i(L_a + L_{av}(t) + C_a) \rho_a + \int_0^t \Sigma_a(t-t') \rho_a(t') dt', \quad (2.28)$$

式中

$$-iC_a = -in_a \text{Tr}_2 L_{aa} \rho_{aa}(0) \rho_a(0)^{-1} - in_b \text{Tr}_{1'} L_{ab} \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1}, \quad (2.29)$$

$$\Sigma_a(t) = -in_a \text{Tr}_2 L_{aa} K_{aa}(t) - in_b \text{Tr}_{1'} L_{ab} K_{ab}(t). \quad (2.30)$$

可见, C_a 代表作用于 ρ_a 上的平均场效果, 积分核 $\Sigma_a(t)$ 叫做自能算符或记忆算符, 代表所有粒子间互作用的效果。一般说, 这个算符是十分复杂的, 但是如果我们所处理问题的时间常数比碰撞时间大得多, 可以近似认为系统是没有记忆力的, 可作 Markoff 近似

$$\Sigma_a(t-t') \approx \widetilde{\Sigma}_a \delta(t-t'), \quad (2.31)$$

方程便简化为微分方程, 这是最常用的一种近似。如果可以认为系统的记忆时间很短, 可设

$$\Sigma_a(t-t') \approx \widetilde{\Sigma}_a e^{-(t-t')^2/2\tau_a^2} \tag{2.32}$$

于是(2.28)中的被积函数只在 $(t-t') \sim \tau_a$ 时才重要, 积分上限可取为 ∞ , (2.28)式可以简化. 如果假设 $t=0$ 时各分子统计上互相独立

$$\rho(0) = \prod_a \rho_a(0) \prod_b \rho_b(0), \tag{2.33}$$

而且分子间互作用可当作微扰, 则由(2.20)(2.21)式可得

$$U_a(\omega)^{-1} = -i[\omega - L_a - \langle M_a^c(\omega) \rangle_B], \tag{2.34}$$

式中

$$\langle M_a^c(\omega) \rangle_B = \text{Tr}_{2 \dots N, 1' \dots N'} L_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{Q}{\omega - L_a} L_1 \right)^n \rho_2(0) \dots \rho_{N'}(0), \tag{2.35}$$

$$Q = 1 - \rho_2(0) \dots \rho_{N'}(0) \text{Tr}_{2 \dots N'}, \tag{2.36}$$

$$L_1 = \sum_a' L_{aa} + \sum_b' L_{bb} + \sum_{a,b} L_{ab} + \sum_a L_{av} + \sum_b L_{bv}, \tag{2.37}$$

以及

$$U_{aa}(\omega) = iR_{aa}(\omega) [1 + \langle M_{aa}(\omega) \rangle_B' R_{aa}(\omega)] \rho_{aa}(0), \tag{2.38}$$

式中

$$R_{aa}(\omega) = \frac{1}{\omega - L_a(1) - L_a(2)}, \tag{2.39}$$

$$\langle M_{aa}(\omega) \rangle_B' = \text{Tr}_{2 \dots N'} L_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\omega - L_a(1) - L_a(2)} L_1 \right)^n \rho_3(0) \dots \rho_{N'}(0), \tag{2.40}$$

代进(2.23)(2.24)式再用(2.30)式就可得到 $\Sigma_a(t)$ 的微扰论展开式. 这里只是说明通常计算自能算符的方法, 而不讨论自能算符的具体计算.

在以上的证明中, a 种粒子和 b 种粒子是处于对称位置. 因此, 重复以上的证明, 只需将 a 和 b 互换, 便得到关于 $\rho_b(t)$ 满足的方程为

$$-\frac{\partial}{\partial t} \rho_b = -i(L_b + L_{bv}(t) + C_b) \rho_b + \int_0^t \Sigma_b(t-t') \rho_b(t') dt', \tag{2.41}$$

式中

$$-iC_b = -in_a \text{Tr}_1 L_{ab} \rho_{ab}(0) \rho_a(0)^{-1} - in_b \text{Tr}_2' L_{bb} \rho_{bb}(0) \rho_b(0)^{-1}, \tag{2.42}$$

$$\Sigma_b(t) = -in_a \text{Tr}_1 L_{ab} K_{ab}(t) - in_b \text{Tr}_2' L_{bb} K_{bb}(t). \tag{2.43}$$

三、更多组元或有与大热源的互作用情况

若气体中含有更多的组元, 例如有 a, b 和 c 三种分子. 设 c 种分子数密度为 n_c , 以 $1''$, $2'' \dots N''$ 表示 c 种分子, 则定义

$$\rho_a = \text{Tr}_{2 \dots N, 1' \dots N', 1'' \dots N''} \rho. \tag{3.1}$$

照样可得(2.28)式, 只是 C_a 和 Σ_a 分别要加上 c 种分子的贡献:

$$(2.29) \text{ 式的 } C_a \text{ 加上 } n_c \text{Tr}_1 \# L_{ac} \rho_{ac}(0) \rho_a(0)^{-1}, \quad (3.2)$$

$$(2.30) \text{ 式的 } \Sigma_a \text{ 加上 } -in_c \text{Tr}_1 \# L_{ac} K_{ac}(t). \quad (3.3)$$

ρ_a 满足的 Bloch 型方程 (2.28) 式, 也容易推广到包含有分子与辐射场或与其他热源的相互作用情况。设辐射场或其他热源的自由度记为 R , 气体与 R 的互作用的刘维算符为

$$\sum_a L_{aR} + \sum_b L_{bR}. \quad (3.4)$$

这时单粒子密度矩阵 ρ_a 的定义改为

$$\rho_a(t) = \text{Tr}_{2 \dots N, 1' \dots N'} \cdot R \rho(t). \quad (3.5)$$

引进与 R 相连系的密度矩阵和随时间演变算符分别为

$$\rho_{aR}(t) = \text{Tr}_{2 \dots N, 1' \dots N'} \rho(t), \quad (3.6)$$

$$U_{aR}(t) \rho_{aR}(0) = \rho_{aR}(t). \quad (3.7)$$

它的拉氏变换和变换算符分别为

$$\rho_{aR}(\omega) = U_{aR}(\omega) \rho_{aR}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} \rho_a(\omega), \quad (3.8)$$

$$K_{aR}(\omega) = U_{aR}(\omega) \rho_{aR}(0) \rho_a(0)^{-1} U_a(\omega)^{-1} - \rho_{aR}(0) \rho_a(0)^{-1}. \quad (3.9)$$

照样可得到 $\rho_a(t)$ 满足方程 (2.28)。只是 C_a 和 Σ_a 要分别加上热源的贡献:

$$(2.29) \text{ 式的 } C_a \text{ 加上 } \text{Tr}_R L_{aR} \rho_{aR}(0) \rho_a(0)^{-1}, \quad (3.10)$$

$$(2.30) \text{ 式的 } \Sigma_a \text{ 加上 } -i \text{Tr}_R L_{aR} K_{aR}(t). \quad (3.11)$$

以上证明了, 在多级元气体中, 只要互作用形式如 (3.4) 式那样, 是各分子求和形式, 那末每个组元的单粒子密度矩阵都满足 Bloch 型方程。

四、线性极化率

作为一个简单应用, 我们讨论多级元气体的线性极化率。设 a 种分子的电偶极算符为 \vec{d}_a , b 种分子的电矩为 \vec{d}_b , 则系统的极化强度 \vec{P} 为

$$\vec{P} = n_a \text{Tr}_a \rho_a(t) \vec{d}_a + n_b \text{Tr}_b \rho_b(t) \vec{d}_b. \quad (4.1)$$

我们先讨论 a 种分子的贡献。设外场 $V(t) = 0$ 时, 气体已处于热平衡态, 其密度矩阵为 ρ_0 , 于是

$$\rho_a(t) |_{v=0} = \rho_a(0) = \rho_{a0}. \quad (4.2)$$

由 (2.23) (2.24) 和 (2.30), 可见这时

$$\Sigma_a |_{v=0} = 0 \quad (4.3)$$

所以设有外电场时, ρ_a 满足方程

$$-i(L_a + C_a) \rho_{a0} = 0 \quad (4.4)$$

设外电场较弱, 对 Σ_a 的影响是二级小量, 在考虑线性极化率时可忽略, 而对 $\rho_a(t)$ 的影响可记为

$$\rho_a(t) = \rho_{a0} + \delta\rho_a(t), \tag{4.5}$$

式中 $\rho_a(0)$ 为没有外电场时的平衡态单粒子密度矩阵, 于是在一级近似下, 可得 $\delta\rho_a(t)$ 的方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta\rho_a(t) = -i(L_a + C_a)\delta\rho_a(t) - iL_{av}(t)\rho_{a0}. \tag{4.6}$$

初条件为

$$\delta\rho_a(-\infty) = 0. \tag{4.7}$$

设一个 a 种分子的哈密顿量记为 H_a , 一个 a 种分子和外电场 $\vec{E}(t)$ 的相互作用 $V(t)$, 在偶极近似下为

$$V(t) = -\vec{d}_a \cdot \vec{E}(t). \tag{4.8}$$

于是

$$-iL_{av}(t)\rho_{a0} = i[\vec{d}_a \cdot \vec{E}(t), \rho_{a0}]. \tag{4.9}$$

代进(4.6)式, 按标准方法可得 $\delta\rho_a(t)$, 只取一级近似便得

$$\begin{aligned} \delta\rho_a(t) = & -i \int_{-\infty}^t e^{-iL_a t'} L_{av}(t-t') \rho_{a0} dt' - \\ & - \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} ds e^{-iL_a(t'-s)} C_a e^{-iL_a s} L_{av}(t-t') \rho_{a0}. \end{aligned} \tag{4.10}$$

式中各个量都是一个 a 分子的力学量, 所以只要知道平衡态的单粒子密度矩阵 ρ_{a0} , 和 a 种分子哈密顿量 H_a 的本征值和本征函数, 就可以计算 a 种分子对于气体性质的贡献.

设外电场 $\vec{E}(t)$ 为单频交变电场

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}), \tag{4.11}$$

则 a 种分子对于线性极化率的贡献为

$$\chi_a(\omega) = n_a \text{Tr}_a \delta\rho_a(t) \vec{d}_a \text{中} \text{与} \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \text{成正比的项} \tag{4.12}$$

设 H_a 的本征能级记为 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots$, α 能级与 β 能级之差记为 $\omega_{\alpha\beta}$, H_b 的本征能级记为 α', β', \dots . 设电场方向为 x 方向, 气体各向同性, 将(4.10)式的 $\delta\rho_a(t)$ 代进(4.12)式, 便得和 a 种分子对于线性极化率的贡献为

$$\begin{aligned} \chi_a(\omega) = & \sum_{\alpha, \beta, \gamma} n_a \rho_{\alpha\alpha} \rho_{\alpha\beta} \left[\frac{d_{\alpha, \beta}^x d_{\alpha, \gamma}^x}{\omega_{\gamma\beta} - \omega} + \frac{d_{\alpha, \beta}^x d_{\alpha, \gamma}^x}{\omega_{\gamma\alpha} + \omega} \right] \\ & + \sum_{\alpha\beta\gamma} n_a^2 \pi (\text{Tr}_2 H_{aa} \rho_{a00} \rho_{a0}^{-1})_{\alpha\beta} [\rho_{a0}, d_{\alpha}^x]_{\beta\gamma} d_{\alpha, \gamma}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \frac{P}{\omega_{\gamma\beta}} + \\ & + \sum_{\alpha\beta\gamma} n_a n_b \pi (\text{Tr}_{1'} H_{ab} \rho_{ab0} \rho_{a0}^{-1})_{\alpha\beta} [\rho_{a0}, d_{\alpha}^x]_{\beta\gamma} d_{\alpha, \gamma}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \frac{P}{\omega_{\alpha\beta}} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} n_a^2 \left(\rho_{a\alpha\alpha}\rho_{a\alpha\alpha}^{-1} \right)_{\alpha\beta}^{\alpha\beta} [d_a^x, \rho_{a\alpha\alpha}]_{\beta\gamma} \left(H_{ac} \right)_{\gamma\delta}^{\beta\alpha} d_{a,\delta\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \frac{P}{\omega_{\alpha\beta} + \omega_{\gamma\delta}} + \\
& + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} n_a n_b \pi \left(\rho_{ab\alpha}\rho_{a\alpha\alpha}^{-1} \right)_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} [d_a^x, \rho_{a\alpha\alpha}]_{\beta\gamma} \left(H_{ab} \right)_{\gamma\delta}^{\beta'\alpha'} d_{a,\delta\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \frac{P}{\omega_{\alpha\beta} + \omega_{\gamma\delta}} + \\
& + i \sum_{\alpha,\beta,\gamma} n_a^2 \pi^2 (\text{Tr}_2 H_{aa} \rho_{a\alpha\alpha} \rho_{a\alpha\alpha}^{-1})_{\alpha\beta} [\rho_{a\alpha\alpha}, d_a^x]_{\beta\gamma} d_{a,\gamma\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \delta(\omega_{\alpha\beta}) + \\
& + i \sum_{\alpha,\beta,\gamma} n_a n_b \pi^2 (\text{Tr}_1 H_{ab} \rho_{ab\alpha} \rho_{a\alpha\alpha}^{-1})_{\alpha\beta} [\rho_{a\alpha\alpha}, d_a^x]_{\beta\gamma} d_{a,\gamma\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \delta(\omega_{\alpha\beta}) + \\
& + i \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} n_a^2 \pi^2 \left(\rho_{a\alpha\alpha}\rho_{a\alpha\alpha}^{-1} \right)_{\alpha\beta}^{\alpha\beta} [d_a^x, \rho_{a\alpha\alpha}]_{\beta\gamma} \left(H_{aa} \right)_{\gamma\delta}^{\beta\alpha} d_{a,\delta\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \delta(\omega_{\alpha\beta} + \omega_{\gamma\delta}) + \\
& + i \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} n_a n_b \pi^2 \left(\rho_{ab\alpha}\rho_{a\alpha\alpha}^{-1} \right)_{\alpha\beta}^{\alpha'\beta'} [d_a^x, \rho_{a\alpha\alpha}]_{\beta\gamma} \left(H_{ab} \right)_{\gamma\delta}^{\beta'\alpha'} d_{a,\delta\alpha}^x \delta(\omega_{\gamma\beta} + \omega) \\
& \delta(\omega_{\alpha\beta} + \omega_{\gamma\delta}). \tag{4.13}
\end{aligned}$$

从以上结果可见，第一项正是通常不考虑分子间相互作用的结果。后面各项明显给出分子间相互作用对于线性极化率的贡献。

b 种分子的贡献也和(4.13)式相似，只要将各个 a 种分子的量改为 b 种分子的量就行了，故不重复写出。

公式(2.28)，(4.10)和(4.13)的特点就是将整个系统的问题化成单粒子的统计问题，这就使问题简化了一大步。

参 考 文 献

- [1] F.Bloch, *Phys. Rev.*, 105 (1957), 1206.
- [2] P.N.Argyres and P.L.Kelley, *Phys. Rev.*, 134 A (1964), 98.
- [3] C.Cohen-Tannoudji, in *Frontiers in Laser Spectroscopy*, I, edited by R.Balian, S.Haroche and S. Liberman, North-Holland, (1977).
- [4] A.Beu-Reuven and Y.Rakin, *Phys. Rev.*, A19 (1979), 2056.
- [5] A.Beu-Reuven, *Phys. Rev.*, A22 (1980), 2572.
- [6] R.Feynman, *Statistical Mechanics*, Benjamin Inc., New York, (1972), ch.2.
- [7] N.Bogoliubov, in *Studies in Statistical Mechanics*, I, edited by J.de Boer and G. Uhlenback, North-Holland, (1962).

The Single Particle Density Matrix in Multicomponent Gas

Liu Jiming

Abstract

The equations of motion for the single particle density matrices $\rho_a(t)$ and $\rho_b(t)$ in multicomponent gas are derived using time-evolution operator and Laplace's transformations. It is shown that $\rho_a(t)$ and $\rho_b(t)$ both satisfy the Bloch-type equations:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} = -i(L_a + L_{av}(t) + C_a)\rho_a + \int_0^t \Sigma_a(t-t')\rho_a(t')dt',$$

$$\frac{\partial \rho_b}{\partial t} = -i(L_b + L_{bv}(t) + C_b)\rho_b + \int_0^t \Sigma_b(t-t')\rho_b(t')dt'.$$

These equations can be easily generalized to the case including the interaction of particles with reservoir. In this paper, the expression for the linear susceptibility in multicomponent gas is obtained. The contributions of the interaction between the particles to the susceptibility are given apparently.