一维紧束缚模型中声子辅助带内弛豫的尺寸效应

摘要

带内弛豫涉及多步声子辅助跃迁。当系统扩胞时，中间态数目增加，可能的弛豫路径（如 $1 \to 4$、$1 \to 2 \to 4$、$1 \to 2 \to 3 \to 4$ 等）也随之增多。本文基于一维紧束缚模型，采用 Fermi 黄金规则构建速率网络，探索带内弛豫的基本规律：弛豫速率如何随系统尺寸变化？哪些路径是主要的？哪些声子模式主导跃迁？

数值结果表明：(1) 初态（带顶附近）的总跃迁速率 Γ_{i_0} 满足 $\Gamma_{i_0} \propto N^\beta$，其中 $\beta \approx 0.03$，符合理论推导的 O(1) 预期，弛豫速率不随系统尺寸发散；(2) 低温下约 99% 的弛豫轨迹仅需 3 步即可完成（多步路径占比 $f_{\text{aux}} = P(n \geq 4) \approx 1\%$），平均跳数在不同 N 下几乎不变（变异系数 < 0.01）；(3) 跃迁集中于布里渊区边界附近的高频声子模式（$q_{\text{peak}} \approx \pi$），显著通道数远小于态数目。参数稳健性检验表明，上述结论在温度 $kT \in [0.01, 0.1]$ 与电声耦合 $\alpha \in [0.2, 1.0]$ 范围内稳定；能量展宽参数 σ 需大于临界值 $\sigma_c \approx 0.07$ 以保证离散能级的准连续近似有效。

1 引言

1.1 物理背景

载流子带内弛豫是热载流子冷却、非辐射复合等过程的前驱步骤。在周期性体系中，高能电子态向低能态的弛豫需要通过声子发射（或吸收）完成能量转移。当能量差较大时，单次声子过程可能无法跨越整个能隙，需要多步跃迁依次进行。

当系统扩胞（如从原胞到超胞）时，布里渊区折叠导致能带离散点数增加，中间态数目 $\propto N$。弛豫路径的可能组合也随之增多——例如从态 1 到态 4，可以是直接跃迁 $1 \to 4$，也可以经过中间态 $1 \to 2 \to 4$、$1 \to 3 \to 4$、$1 \to 2 \to 3 \to 4$ 等。

1.2 核心问题

本文旨在探索带内弛豫的基本规律，具体包括：

1. 弛豫速率是否随系统尺寸 N 发散？

2. 哪些弛豫路径是主要的？平均需要几步？

3. 哪些声子模式主导跃迁？

1.3 研究背景

在与施昊哲、谢昀城的前期讨论中，我们初步认为弛豫速率 Γ 不随 N 发散，但对于“强相干”与“退相干”条件下，两类辅助跃迁的物理图像存在困惑。经褚老师指正与进一步推导分析[1]，认同室温下常见体系适合采用非相干速率网络框架处理。无量纲判据 $\mathcal{R} = \frac{\tau_{dwell}}{T_2} \gg 1$（停留时间与相干时间比值）表明相位记忆在一个跃迁周期内即丧失，因此可采用 Markov 速率网络描述。本文在此前提下进行探究。

1.4 本文目标

1. 建立最小模型，定量验证弛豫速率的尺寸依赖性；
2. 通过路径统计，确定主要的弛豫路径与平均步数；
3. 分析声子模式分布，识别主导跃迁的声子动量；
4. 检验结论对关键参数的稳定性。

2 理论框架

本文采用无量纲约定：$\hbar = k_B = t_0 = 1$，其中 t_0 为最近邻跳跃积分。

2.1 Fermi 黄金规则

考虑离散 Bloch 态 $|k_i\rangle \to |k_j\rangle$ 的声子辅助跃迁。根据 Fermi 黄金规则，单步跃迁速率为：

$$W_{i\to j} = \frac{2\pi}{N}\sum_q |g_{ij}(q)|^2 \left[(n_q+1)\delta_\sigma(E_j - E_i + \omega_q) + n_q\delta_\sigma(E_j - E_i - \omega_q)\right] \tag{1}$$

其中：

- $\sum_q$ 形式上对所有声子模式求和，但动量守恒 $k_j = k_i + q \pmod{2\pi/a}$ 使得对给定 (i,j) 只有唯一 $q_{ij} = k_j - k_i$ 满足选择定则，因此实际上每对 (i,j) 仅对应一个有效声子模式；
- $g_{ij}(q) = \langle\psi_i|\partial H/\partial Q_q|\psi_j\rangle$ 为电声耦合矩阵元[2]；
- $n_q = 1/[\exp(\omega_q/kT) - 1]$ 为玻色占据数；
- δ_σ 为高斯展宽函数，宽度 σ 模拟有限寿命、无序等效应；
- 第一项对应声子发射（$E_i > E_j$），第二项对应声子吸收（$E_i < E_j$）。

[1]详见施昊哲的 `time_compare.pdf`

[2]沿用上次报告的约定，将 $1/N$ 因子提至外侧

2.2 跃迁选择定则

对于 Bloch 态之间的跃迁，存在以下约束：

1. **动量守恒**：$k_j = k_i \pm q \pmod{2\pi/a}$；
2. **能量守恒**：$|E_i - E_j| = \omega_q$（由 δ_σ 软化）；
3. **声子色散约束**：$\omega_q = \omega_{\max}|\sin(qa/2)|$。

在本模型中，这些选择定则使速率矩阵 W 呈现稀疏带状结构，详见附录B.3.

2.3 总跃迁速率的 O(1) 标度律

定义态 i 的总跃迁速率（逃逸速率）为：

$$\Gamma_i = \sum_{j \neq i} W_{i \to j} \tag{2}$$

在离散体系中，单个跃迁通道 $W_{i\to j}$ 带有显式的 $1/N$ 因子（式 (1)）。当 N 增大时，能量窗口内满足选择定则的末态数目如何变化?

从连续极限的角度理解：在热力学极限下，对 k 空间的求和可替换为积分

$$\sum_k \to \frac{V}{(2\pi)^d} \int \mathrm{d}^d k \tag{3}$$

其中 $V \propto N$（一维情形 $V = Na$）。因此，可选末态数目 $\propto N$。结合 Fermi 黄金规则：

$$\Gamma_i \sim \underbrace{N}_{\text{可选末态数}} \times \underbrace{\frac{1}{N}}_{\text{单通道因子}} \times \underbrace{O(1)}_{\text{耦合权重}} \sim O(1) \tag{4}$$

这解释了为何候选路径的组合增长不会导致弛豫速率发散：态密度的增长被 FGR 公式中的归一化因子抵消，总跃迁速率保持为常数量级。

2.4 主方程

速率网络的演化由主方程描述：

$$\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t} = \sum_j (W_{j\to i}P_j - W_{i\to j}P_i) \tag{5}$$

矩阵形式为 $\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{Q}^T\mathbf{P}$，其中生成矩阵 $\mathbf{Q}$ 定义为：

$$Q_{ij} = \begin{cases} W_{i\to j}, & i \neq j \\ -\Gamma_i = -\sum_j W_{i\to j}, & i = j \end{cases} \tag{6}$$

稳态分布 $\mathbf{P}_\infty$ 满足 $\mathbf{Q}^T\mathbf{P}_\infty = \mathbf{0}$ 且 $\sum_i P_{\infty,i} = 1$。数值求解采用 SVD 分解提取零空间，比特征值分解更稳健，见仓库`commit e1ee6e1`.

细致平衡：速率矩阵近似满足 $W_{i\to j}/W_{j\to i} = \exp[-(E_j - E_i)/kT]$，使稳态趋近 Boltzmann 分布，在图8中得到验证。

2.5 Gillespie 算法

动力学 Monte Carlo（KMC）采用 Gillespie 算法模拟单轨迹演化：

1. 计算当前态 i 的总出率 $\Gamma_i = \sum_j W_{i\to j}$；
2. 抽样等待时间 $\Delta t = -\ln(r_1)/\Gamma_i$，其中 $r_1 \in (0,1)$ 为均匀随机数；
3. 以概率 $p_{ij} = W_{i\to j}/\Gamma_i$ 抽样下一态 j。

统计量包括跳数 n_{hop}、总时间 t_{total}、以及单步能量变化 $\Delta E = E_{\text{before}} - E_{\text{after}}$.

2.6 弛豫时间定义

本文采用两种互补的弛豫时间定义：

- **ME 定义**：τ_{ME} 为平均能量 $\langle E\rangle(t)$ 衰减到阈值的时间；
- **KMC 定义**：$\tau_{\text{KMC}} = \langle t_{\text{first passage}}\rangle$，即从初态出发首次到达终止阈值的平均时间。

两者绝对值不要求一致；本文关注它们随 N 的变化趋势。

3 计算模型

3.1 一维紧束缚模型

考虑 N 个格点的一维原子链，最近邻跳跃积分为 t_0。电子色散关系为：

$$E(k) = 2t_0\cos(ka) \tag{7}$$

其中 a 为晶格常数（取 $a = 1$）。

声子采用单原子链模型，色散关系为：

$$\omega_q = \omega_{\max}\left|\sin\left(\frac{qa}{2}\right)\right|, \quad \omega_{\max} = \sqrt{\frac{2K}{M}} \tag{8}$$

其中 K 为弹簧常数，M 为原子质量。

电声耦合采用 SSH 型调制：原子位移调制最近邻跳跃积分，耦合矩阵元为：

$$g_{ij}(q) = \langle\psi_i|\frac{\partial H}{\partial Q_q}|\psi_j\rangle \tag{9}$$

在 Bloch 基底 $|k\rangle$ 下，该矩阵元具有解析形式：

$$g(k_i \to k_f; q) \propto (e^{iqa} - 1)(e^{ik_i a} + e^{-ik_f a}) \tag{10}$$

由此可得：

1. 第一项 $|e^{iqa} - 1|^2 = 4\sin^2(qa/2)$ 在 $q \to 0$ 时趋零（长波声子近似整体平移，对键长调制的耦合不起作用），在 $q = \pi/a$ 时取最大值，因此耦合**抑制小** q、**增强** $q \approx \pi$；
2. 第二项 $|e^{ik_i a} + e^{-ik_f a}|^2 = 2 + 2\cos[(k_i + k_f)a]$ 依赖初末态动量之和，产生**干涉**效应。

3.2 δ 函数展宽

采用高斯展宽替代严格 δ 函数：

$$\delta_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \tag{11}$$

展宽参数 σ 模拟有限寿命、无序、热涨落等效应，控制离散谱变化到准连续极限。

3.3 状态空间与初末态定义

状态空间：本模型包含 **1 条电子能带**（一维最近邻紧束缚）和 **1 条声子色散支**（单原子链声学支）。对于系统尺寸 N，电子态空间由 N 个离散 Bloch 态 $\{|k_n\rangle\}$ 构成，对应 N 个离散波矢 $k_n = 2\pi n/(Na)$，$n = 0, 1, \ldots, N-1$。

初态选取：选取带顶附近最接近 $E_{\text{init}} = E_{\text{min}} + 0.9(E_{\text{max}} - E_{\text{min}})$ 的态作为初态 i_0。

终态判据：弛豫过程在能量首次满足 $E \leq E_{\text{term}}$ 时终止，其中 $E_{\text{term}} = E_{\text{min}} + 0.1(E_{\text{max}} - E_{\text{min}})$（带底附近）。注意终态是一个**能量阈值区间**，而非单个指定态。

3.4 能量区间记号

为便于描述弛豫路径，将能量归一化到 $[0, 1]$ 并等分为 4 段，按从带顶到带底编号为 A–D。对于色散 $E(k) = 2t_0 \cos k$（不可约区 $k \in [0, \pi]$），这近似对应固定的 k 区间：A: $[0, \pi/3]$，B: $[\pi/3, \pi/2]$，C: $[\pi/2, 2\pi/3]$，D: $[2\pi/3, \pi]$.

需要强调：A–D 是**能量段编号**，不是固定的 k 点编号，也不是“多条能带”。“$1 \to 2 \to 4$”等路径记号应理解为能量从高到低的跃迁序列。

图 1 展示模型示意图，表 1 展示计算参数。

表 1: 计算参数

参数	符号	值
系统尺寸	N	20, 40, 80, 160, 320
跳跃积分	t_0	1.0
弹簧常数	K	1.0
原子质量	M	1.0
电声耦合	α	0.5
温度	kT	0.025（低温）/ 0.5（高温对照）
展宽	σ	0.1
KMC 轨迹数	–	1000
初态能量区	–	带顶 10%
终态判据	–	带底 10%

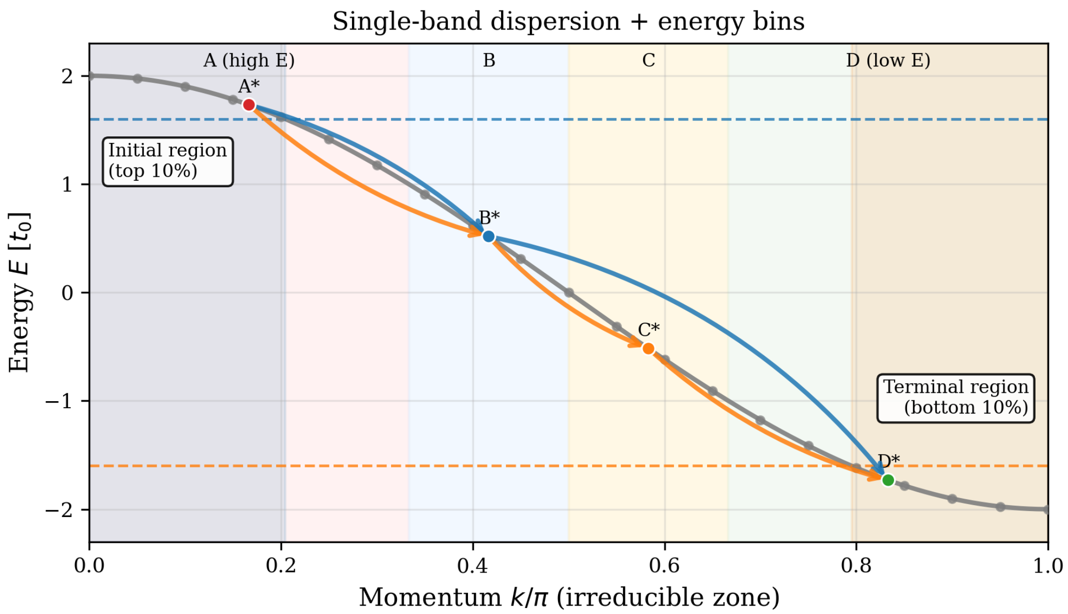

图 1: 一维紧束缚模型示意图。左：单带色散 $E(k) = 2t_0 \cos k$（不可约区 $k \in [0, \pi]$）及能量区间 A–D；右：初态区间（带顶 10%）与终态阈值区间（带底 10%）。A–D 为能量段编号（非固定态编号/多能带）。

4 结果

回顾引言中提出的三个问题：N 增大后弛豫会不会变慢甚至发散？新增中间态会不会让多步路径成为主流？需要哪类声子辅助跃迁？本节通过数值计算给出定量回答。

核心结论可概括为三条：(1) 总跃迁速率 Γ_{i_0} 对 $N \geq 40$ 近似为常数量级，弛豫时间不随 N 增长；(2) 多步路径占比 $f_{\mathrm{aux}} = P(n_{\mathrm{hop}} \geq 4)$ 不随 N 增长，路径类型组成在 $N \geq 40$ 后进入稳定区间；(3) 跃迁集中于布里渊区边界附近的高频声子模式，$N \geq 40$ 时主导声子动量 $q_{\mathrm{peak}} \approx \pi$（$N = 20$ 因有限尺寸效应偏离）。

4.1 标度律验证

图 2 展示总跃迁速率 Γ 随系统尺寸 N 的变化。采用幂律拟合 $\Gamma = AN^{\beta}$，排除 $N = 20$ 的有限尺寸效应后，得到 $\beta = 0.03$（$R^2 = 0.74$）。

表 2: 总跃迁速率数值结果

N	20	40	80	160	320
Γ	1.06	1.49	1.57	1.57	1.59

拟合指数 $|\beta| < 0.15$ 表明总跃迁速率不随系统尺寸显著变化。$N = 20$ 时 Γ 偏低属于有限尺寸效应。这与式 (4) 的理论预期一致。跃迁通道数目的定量分析见附录 B.1。

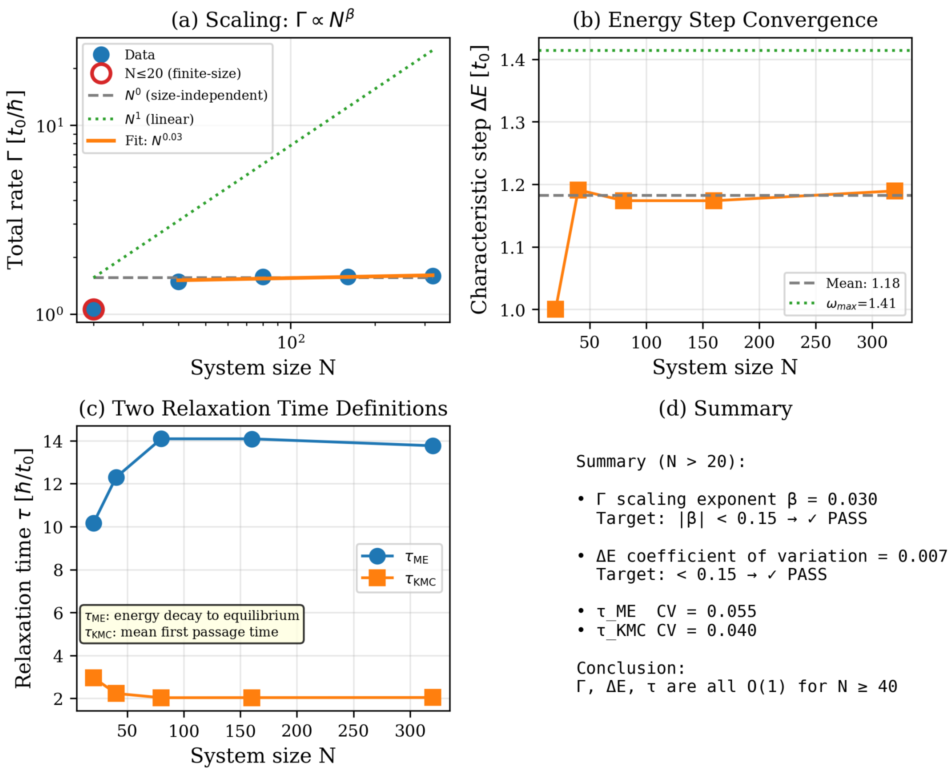

图 2: 标度律验证。(a) 总跃迁速率 Γ 随 N 近似为常数，拟合指数 $\beta = 0.03$；(b) 平均能量步长收敛到有限值；(c) 弛豫时间在 $N \gtrsim 40$ 后稳定。

4.2 声子动量分布

图 3(a) 是跃迁速率在 (k_i, q) 空间的热图（$k_i \in [0, 2\pi)$，$q \in [-\pi, \pi]$）。主要特征：

1. $q = 0$ **白线**：$q = 0$ 处 $|e^{iqa} - 1|^2 = 0$，跃迁速率严格为零，形成一条水平白线；
2. **四条斜向亮带，上下错开**：亮带斜率约为 -1，对应 $k_f = k_i + q \approx \text{const}$。$q > 0$ 与 $q < 0$ 区域的亮带在 $q = 0$ 附近并不对齐，而是错开约 ± 0.5。这是因为整体速率由耦合强度、能量匹配、玻色因子共同决定，各因素的竞争使最亮位置偏离简单的 $k_f = \text{const}$ 线。

图 3(b) 展示各 q 模式的总跃迁速率 $\sum_i W_{i,i+q}$，峰值位于布里渊区边界（$q \approx \pm\pi$）。图 3(c) 显示主导声子动量 q_{peak} 在 $N \geq 40$ 后收敛到 π。由式 (10) 可知，$|e^{iqa} - 1|^2$ 在 $q = \pi$ 时最大，同时声子色散 $\omega_q \propto |\sin(qa/2)|$ 也在 $q \approx \pi$ 最大，因此**耦合强度与声子频率均在布里渊区边界达到峰值**。

4.3 路径统计

为定量刻画弛豫路径的复杂度，定义以下统计量：

- **跳数** n_{hop}：从初态到满足终止条件的跃迁次数；

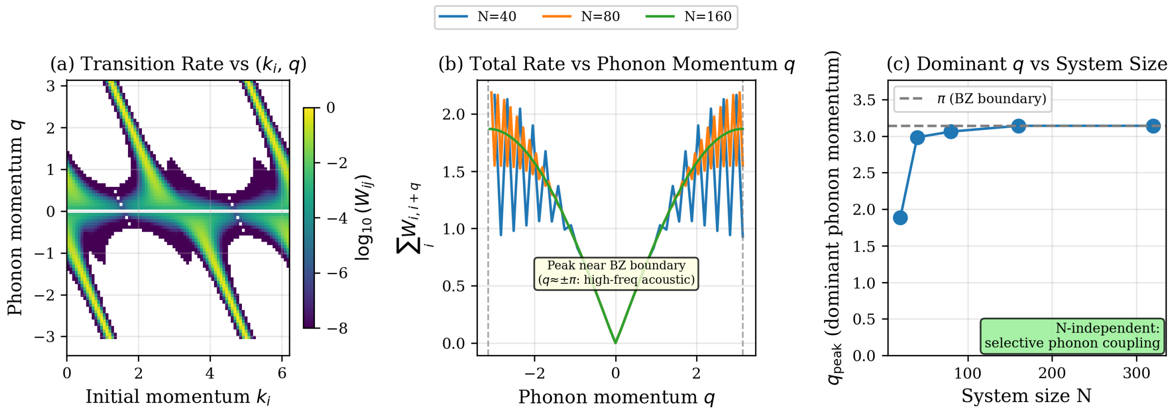

图 3: 声子动量分布。(a) 跃迁速率在 (k_i, q) 空间的热图：$q = 0$ 处因 $|e^{iqa} - 1|^2 = 0$ 形成突兀白线；四条斜向亮带（斜率 -1）在 $q = 0$ 附近上下错开；(b) 各 q 模式的总跃迁速率，峰值在 $q \approx \pm\pi$；(c) 主导声子动量 q_{peak} 在 $N \geq 40$ 后收敛到 π。

- **多步路径占比** $f_{aux} := P(n_{hop} \geq 4)$：需要 4 步或更多才能完成弛豫的轨迹占比；
- **吸收占比** r_{abs}：所有跃迁中声子吸收（$\Delta E < 0$）的比例。

图 4 展示路径统计结果，对比低温（$kT = 0.025$）与高温（$kT = 0.5$）两种情况：

- 低温下 $P(n = 3) \approx 99\%$，$f_{aux} \approx 1\%$，$\langle n_{hop} \rangle \approx 3.0$；
- 高温下步数分布变宽，$\langle n_{hop} \rangle \approx 3.9$，$f_{aux} \approx 33\%$；
- f_{aux} 与 r_{abs} 均**不随 N 增长**，N 增大带来更多中间态，但它们并未被有效利用。

4.4 路径类型分析

仅用跳数统计还无法回答“哪类中间态路径更显著”(例如 A→B→D 与 A→C→D 哪个更常见)，因此我们进一步对每条轨迹做粗粒化的路径类型统计：将轨迹映射为能量区间序列（A–D），并压缩连续重复得到路径类型。

图 5 展示不同 N 下路径类型的组成（低温与高温对照）。结果有两个要点：

(i) 低温下，路径几乎完全由 A→B→C→D 与 A→B→D 两类构成，A→C→D 仅为千分量级。从 $N = 20$ 的有限尺寸点到 $N \geq 40$ 后，A→B→D 的占比提高并进入相对稳定区间（约 0.36–0.49），未呈现随 N 继续增长的趋势。

(ii) 高温下，由于声子吸收引入回跳，出现一定比例的“绕行/回跳”路径(归入 Other，约 15%)，同时 A→C→D 的占比上升到百分量级，但同样未随 N 增大系统性漂移。

总体而言，扩胞确实引入更多候选中间态，但在本模型与参数范围内，**有效的路径结构没有随 N 走向更复杂**。代表性轨迹与速率矩阵结构的详细分析见附录 B.2 和 B.3。

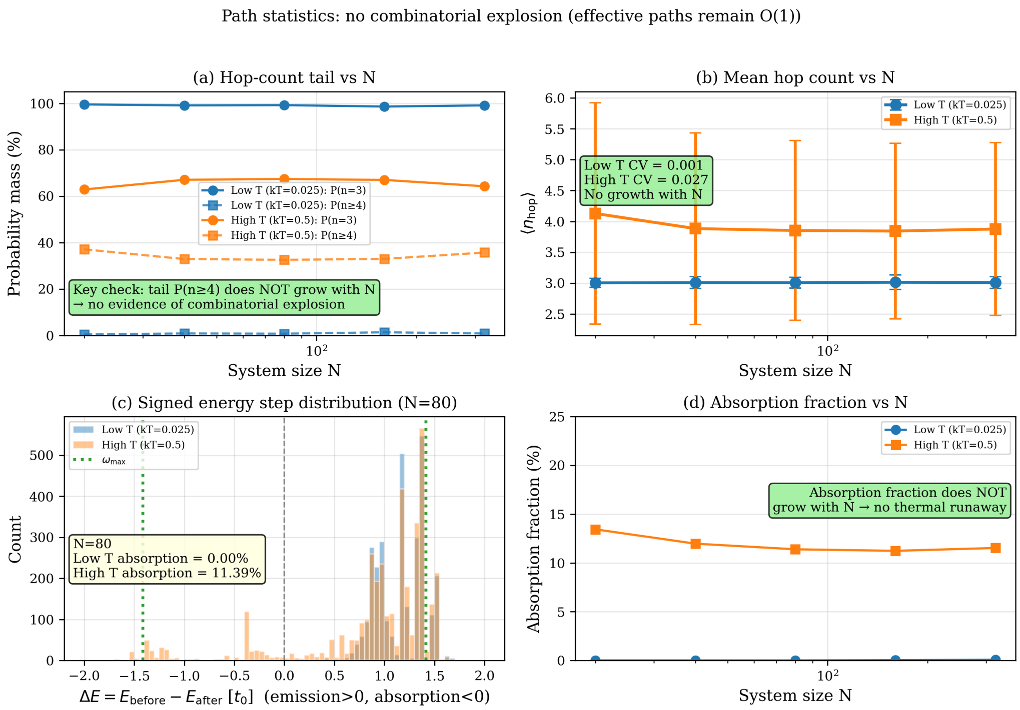

图 4: 路径统计(低温/高温对比)。(a) 跳数分布的关键概率: $P(n=3)$ 与 $f_{\mathrm{aux}} = P(n \geq 4)$ 随 N 的变化; (b) 平均跳数 $\langle n_{\mathrm{hop}} \rangle$; (c) 能量步长分布; (d) 吸收占比 r_{abs} 随 N 的变化。

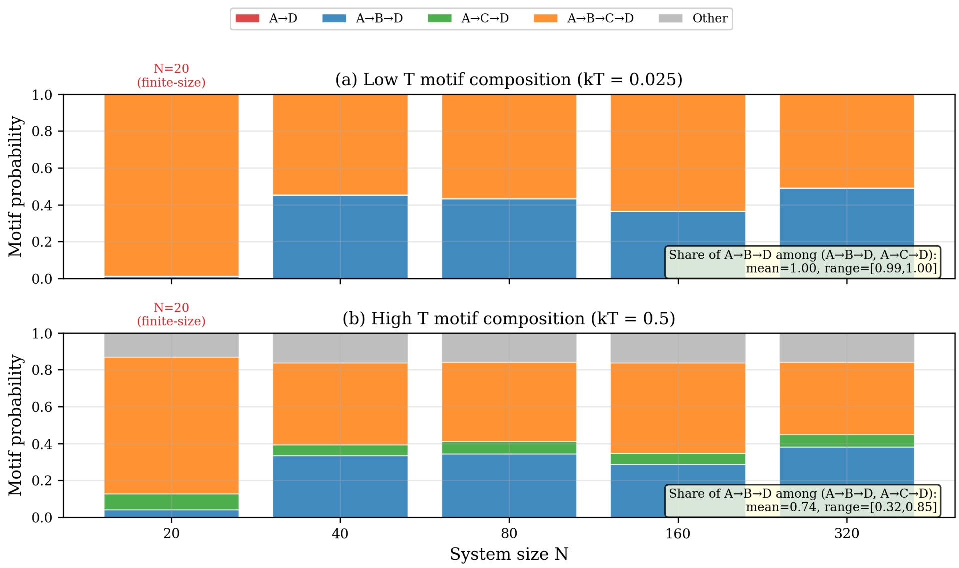

图 5: 路径类型随系统尺寸的变化(能量区间粗粒化;A–D 为能量段编号而非具体态编号)。将能量归一化并等分为 4 段,按从带顶到带底编号为 A–D;每条轨迹映射为能量区间序列并压缩连续重复得到路径类型。图中展示 A→D、A→B→D、A→C→D、A→B→C→D 四类代表路径,其余归入 Other(含回跳等非单调序列)。

5 讨论

5.1 候选路径与有效路径

扩胞引入更多离散中间态，可写出的路径组合数快速增长。然而数值结果表明，**有效路径并未随之爆炸**。原因在于选择定则的约束：能量守恒、动量守恒与声子色散共同限制了每一步的可能目标。速率矩阵呈稀疏带状结构（附录 B.3），新增中间态大多“存在但不被访问”。

从通道分析（附录 B.1）看，前 3–7 个目标态即覆盖 90% 以上的跃迁概率，这与路径统计中多步路径占比不随 N 增长的结论相吻合。

5.2 局限性

- **模型简化**：简谐声子、单电子图像、一维最近邻紧束缚；
- **唯象参数**：展宽 σ 需满足准连续条件（$\sigma \gtrsim 0.1$）；
- **路径分辨率有限**：能量区间统计是粗粒化的，不区分具体的 k 点；
- **三维外推**：三维材料需额外考虑多支色散与多声子过程。

6 结论

本文通过一维紧束缚模型的数值计算，探索了带内弛豫的基本规律。数值结果表明：

1. **弛豫速率**：初态的总跃迁速率 $\Gamma_{i_0}(N) \propto N^{\beta}$，$\beta = 0.03 \pm 0.01$，不随系统尺寸发散；
2. **多步路径占比**：$f_{\mathrm{aux}}(N) = P(n_{\mathrm{hop}} \geq 4)$ 不随 N 增长（低温约 1%，高温约 33%），平均跳数 $\langle n_{\mathrm{hop}} \rangle$ 保持稳定；
3. **主导声子动量**：$N \geq 40$ 时 $q_{\mathrm{peak}} \approx \pi$，对应布里渊区边界的高频声子模式。

参数稳健性（详见附录 B.4）：上述结论在 $kT \in [0.01, 0.1]$、$\alpha \in [0.2, 1.0]$ 范围内稳定；但要求展宽参数 $\sigma \gtrsim 0.1$ 以保证离散能级的准连续近似有效。ME 与 KMC 两种方法的一致性验证见附录 B.5。

A 附录：计算流程与代码结构

A.1 计算依赖树

```
solve_master_equation(W, P0, t_span)            [master_equation.py]
|-- W = build_rate_matrix(N, params)            [fermi_golden_rule.py]
|   |-- k_grid = 2*pi*n/(Na), n = 0,1,...,N-1
|   |-- E_grid = 2*t0*cos(ka)                   [电子色散]
|   |-- for each (i,j):
|   |   |-- dE = E_i - E_j
|   |   |-- q = k_j - k_i (mod 2*pi/a)          [动量守恒，代码通过 j=(i+q) 构造]
|   |   |-- w_q = w_max*|sin(qa/2)|             [声子色散]
|   |   |-- delta_sigma(dE - w_q) or (dE + w_q) [能量守恒]
|   |   |-- |g(k_i -> k_j; q)|^2
|   |   +-- W_ij = (2*pi/N)*|g|^2*delta * [n_B+1 or n_B]
|   +-- return W, k_grid, E_grid
|-- P_inf = stationary_distribution(W)          [SVD 零空间]
|-- <E>(t) = sum_i E_i * P_i(t)
+-- tau_ME = first t s.t. <E(t)> <= E_eq + theta*(<E(0)>-E_eq)

run_trajectory(W, E, i0)                        [kinetic_monte_carlo.py]
|-- Gillespie algorithm:
|   |-- Gamma_i = sum_j W_ij                    [总逃逸速率]
|   |-- dt = -ln(r1) / Gamma_i                  [等待时间]
|   +-- j = sample(W_ij / Gamma_i)              [跃迁目标]
+-- 记录 {n_hops, step_sizes, t_total}
```

A.2 关键公式与代码对应

物理量	公式/定义	代码函数
电子色散	$E(k) = 2t_0 \cos(ka)$	`tb_electron_1band.dispersion`
声子色散	$\omega_q = \omega_{\max} \lvert \sin(qa/2) \rvert$	`phonon_1atom.dispersion_monatomic`
展宽 δ	高斯展宽	`fermi_golden_rule.delta_broadened`
FGR 速率矩阵	$W_{ij} = W_{i\to j}$	`fermi_golden_rule.build_rate_matrix`
主方程生成矩阵	$Q_{ii} = -\sum_j W_{i\to j}$	`master_equation.generator_from_rates`
稳态分布	$\mathbf{Q}^T\mathbf{P} = 0,\ \sum P = 1$	`master_equation.stationary_distribution`
τ_{ME}	能量衰减到阈值	`master_equation.relaxation_time_from_energ`
Gillespie 单步	抽样 (dt, next)	`kinetic_monte_carlo.gillespie_step`
显著通道数	$D_{\mathrm{eff}} = \#\{j \mid p_{ij} > \varepsilon\}$	`channel_analysis.effective_out_degree`
参与数	$D_{\mathrm{pr}} = 1/\sum p_{ij}^2$	`channel_analysis.participation_ratio`

A.3 数值实现要点

1. **稳态分布求解**：采用 SVD 分解 $\mathbf{Q}^T$ 的零空间，避免直接求逆的数值不稳定性；
2. **初态/终态一致性**：ME 与 KMC 使用相同的初态选取与终止阈值；
3. **统计收敛**：KMC 默认 1000 条独立轨迹，误差棒使用标准差。

A.4 复现脚本

脚本	功能
`run_scaling_experiment.py`	主实验（N 扫描 + 路径统计）
`run_sensitivity.py`	参数稳健性检验（$\sigma/kT/\alpha$ 扫描）
`generate_core_figures.py`	核心图表
`generate_appendix_figures.py`	附录图表

B 附录：补充分析

B.1 跃迁通道数目分析

为量化速率矩阵的稀疏程度，定义以下指标：

- **跃迁概率**：$p_{ij} = W_{i\to j}/\Gamma_i$，即归一化的跃迁速率；

- **显著通道数**：$D_{\rm eff}(i) = \#\{j \mid p_{ij} > 0.01\}$，即从态 i 出发、跃迁概率超过 1% 的目标态个数；

- **参与数**：$D_{\rm pr}(i) = 1/\sum_j p_{ij}^2$，类似 IPR（inverse participation ratio），用于度量跃迁概率的分散程度。若跃迁均匀分布到 M 个态，则 $D_{\rm pr} = M$；若集中在单一通道，则 $D_{\rm pr} = 1$。

图 6 展示通道数目分析。虽然 $D_{\rm eff}$ 和 $D_{\rm pr}$ 随 N 有所增大，但远小于“全连通”情形。若无选择定则约束，每个态可跃迁到其它所有 $N-1$ 个态。累积概率曲线显示，前 3–7 个通道即可覆盖 90% 以上的跃迁概率，说明跃迁高度集中于少数目标态。

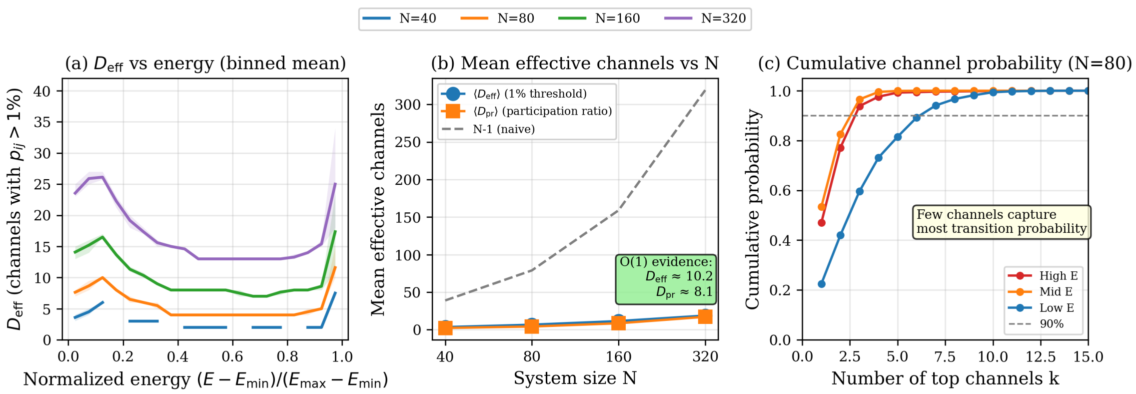

图 6: 跃迁通道数目分析。(a) 显著通道数 $D_{\rm eff}$ 随归一化能量的分布，不同颜色对应不同 N；能带边缘的态通道数较多，带中部较少。(b) 平均显著通道数 $\langle D_{\rm eff}\rangle$（蓝）与参与数 $\langle D_{\rm pr}\rangle$（橙）随 N 的变化，灰色虚线为全连通预期 $N-1$；两者均远小于 N，表明速率矩阵是稀疏的。(c) 累积概率曲线：将各态的跃迁目标按概率从大到小排列，高能态约 3 个通道即达 90%，低能态约需 7 个。

B.2 代表性轨迹

图 7 展示 KMC 代表性轨迹。能量随时间呈阶梯式下降（“跨栏式”弛豫），低温下以声子发射为主，不同 N 的轨迹形态相近。

B.3 速率矩阵结构

图 8(a,b) 展示速率矩阵 W_{ij} 的热图（$\log_{10}$ 色标，$N = 60$）。主要特征如下：

1. **主对角线空白**：$i = j$ 处 $W_{ii} = 0$（无自跃迁），且 $q \to 0$ 时耦合项 $|e^{iqa} - 1|^2 \to 0$，导致对角线及其附近严格为零或很弱；

2. **反对角线方向的两条亮带**：最显著的特征是沿左下到右上方向的两条亮带，位于 $i + j \approx 50$ 与 $i + j \approx 70$。由式 (10) 的干涉项 $|e^{ik_i a} + e^{-ik_f a}|^2 = 2 + 2\cos[(k_i + k_f)a]$，

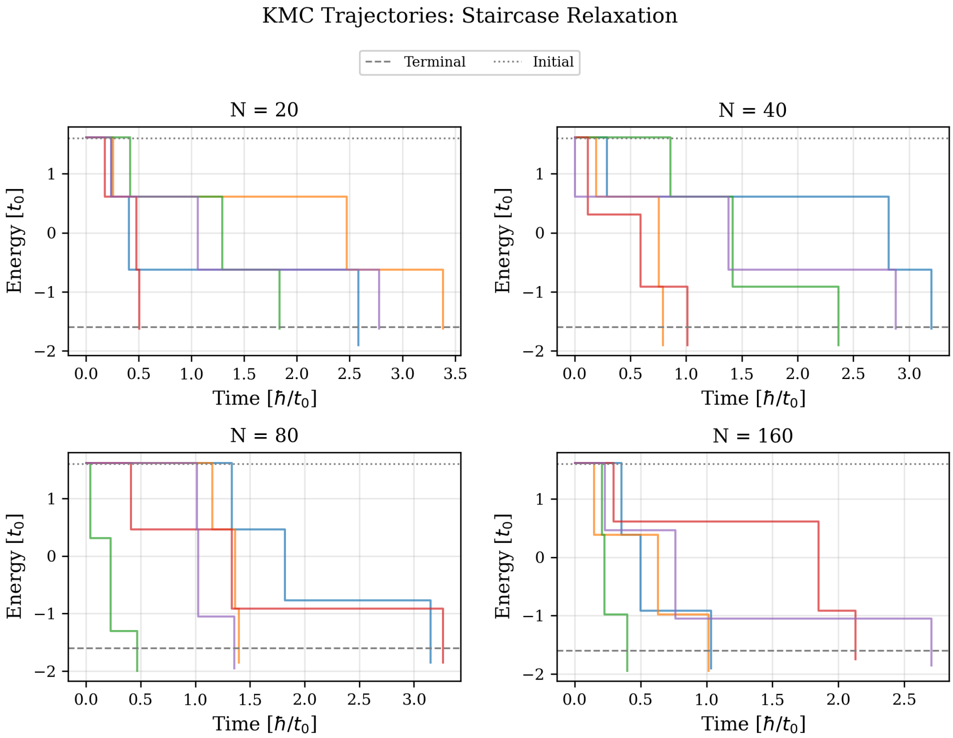

图 7: KMC 代表性轨迹。低温下以声子发射为主，不同 N 的轨迹形态相近。

当 $k_i + k_f = 2\pi$ 时取最大值，对应 $i + j = N = 60$（因为 $k = 2\pi \cdot \mathrm{index}/N$）。但整体速率还需乘以能量匹配因子与 $|e^{iqa} - 1|^2$ 权重，因此最亮位置被推移到 $i + j = 60$ 附近的两条偏移脊线（≈ 50 与 ≈ 70）；

3. **低温下一支不完整**：低温时 $n_q \ll 1$，吸收项整体被压制，导致其中一条亮带出现缺段；高温时吸收增强，缺段被补齐，两条亮带均完整可见，图形趋于对称。这与图 8(c) 中吸收占比随温度的变化一致。

图 8(d) 通过细致平衡验证数值实现的正确性：高温下 $\ln(W_{ij}/W_{ji})$ 对 $(E_j - E_i)/kT$ 的斜率接近理论值 -1。

B.4 参数稳健性检验

前述结果基于 baseline 参数（$\sigma = 0.1$，$kT = 0.025$，$\alpha = 0.5$）。本节通过单因子扫描检验结论的稳健性。

图 9 展示标度指数 β 对三个参数的依赖。

σ 是控制离散能级“准连续化”程度的关键参数。当 σ 过小时（< 0.07），能量匹配更苛刻，导致 β 偏大；$\sigma = 0.07$ 时虽然 β 已降至 0.17 左右，但仍略超过 $|\beta| < 0.15$ 判据。稳妥起见，选取 $\sigma \gtrsim 0.1$（baseline 取值）以保证 O(1) 结论可靠。

在 $kT \in [0.01, 0.1]$ 与 $\alpha \in [0.2, 1.0]$ 范围内，$\beta \approx 0.03 \pm 0.01$，结论完全稳定。

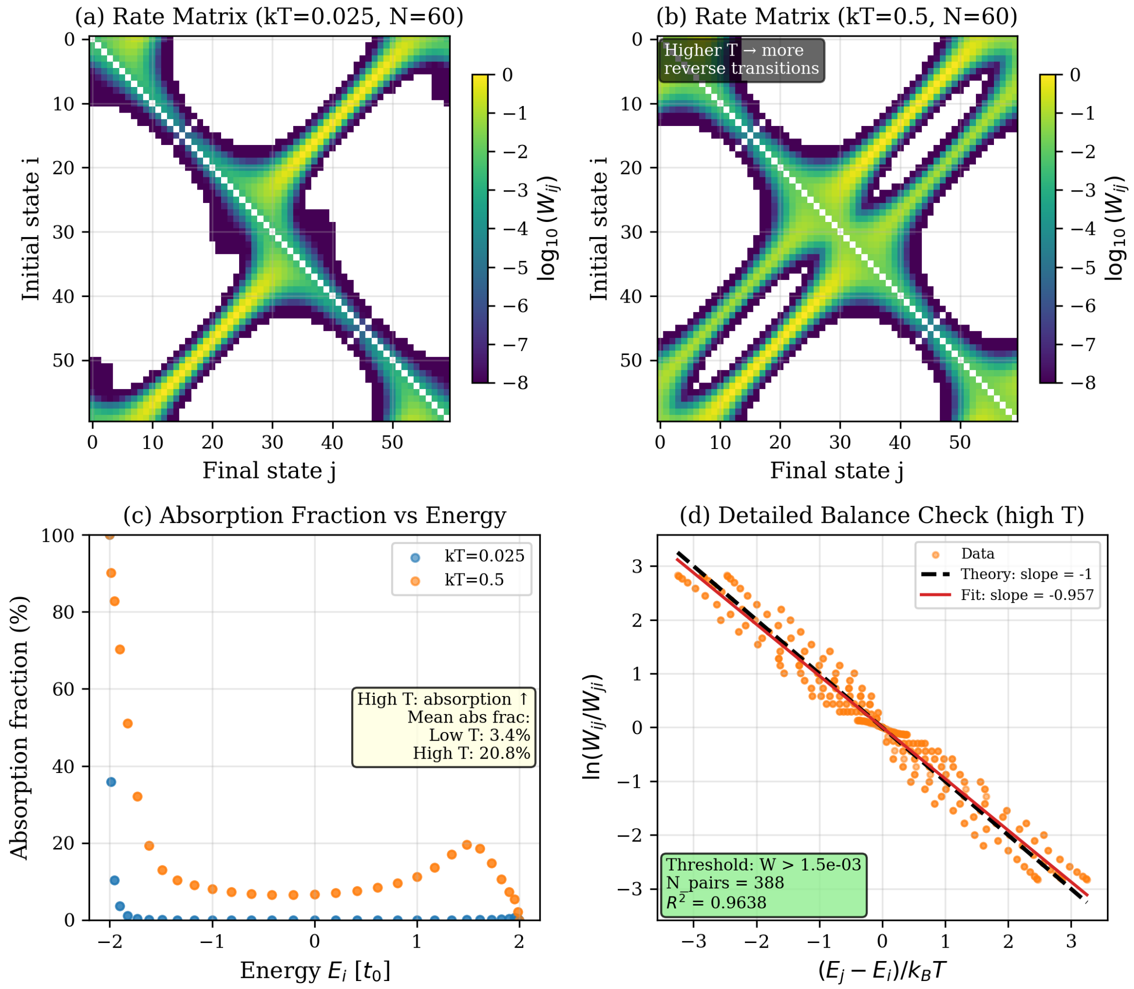

图 8: 速率矩阵分析。(a,b) 低温与高温的速率矩阵 $\log_{10}(W_{ij})$，呈带状结构；(c) 吸收占比随能量的变化；(d) 细致平衡验证。

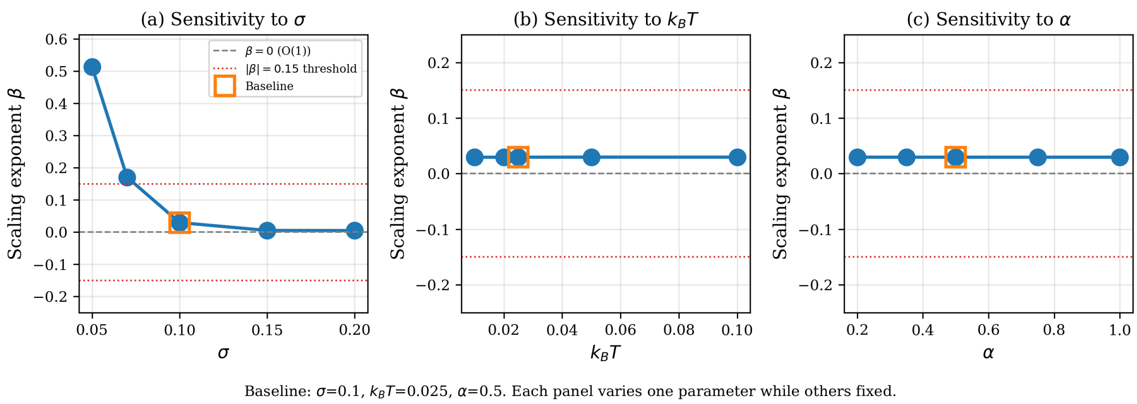

图 9: 参数稳健性检验：标度指数 β 对三个参数的依赖。(a) 展宽 σ：$\sigma < 0.07$ 时 O(1) 失效；(b) 温度 kT：在 $[0.01, 0.1]$ 范围内稳定；(c) 电声耦合 α：在 $[0.2, 1.0]$ 范围内稳定。

表 3: 展宽参数对标度指数的影响

σ	β	状态
0.05	0.51	失效（$\lvert\beta\rvert > 0.15$）
0.07	0.17	临界
0.10	**0.03**	**baseline（稳定）**
0.15	0.005	稳定
0.20	0.005	稳定

B.5 ME 与 KMC 一致性验证

图 10 展示两种方法的一致性验证。

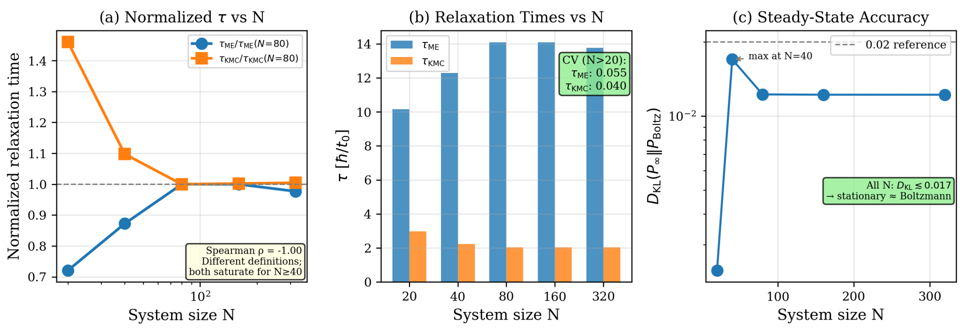

图 10: ME 与 KMC 一致性。(a) 归一化弛豫时间 $\tau/\tau(N=80)$ 随 N 的变化；(b) τ_{ME} 与 τ_{KMC} 的条形图对比；(c) 稳态分布与 Boltzmann 分布的 KL 散度。

τ_{ME} 与 τ_{KMC} 绝对值相差约 5–7 倍，这源于定义差异：τ_{ME} 采用阈值 $\theta = 0.01$（能量衰减到初始偏移的 1%），若假设指数衰减 $\exp(-t/\tau)$，则 $\tau_{\text{ME}}/\tau \approx -\ln(0.01) \approx 4.6$；而 τ_{KMC} 为首达时间，两者物理含义不同。

尽管绝对值不同，归一化后的曲线显示两者在 $N \geq 40$ 后快速收敛到常数量级，**均不发散**。稳态分布与 Boltzmann 分布的 KL 散度在全部测试尺寸下均保持 10^{-2} 量级（展宽与截断效应导致的系统偏差），说明稳态分布与理论预期基本一致。