

# 非平衡格林函数理论

2023 年 1 月 17 日

(翻译自 An Introduction to Nonequilibrium Many-Body Theory by Joseph Maciejko)

## 1 非平衡扰动理论

这一章的目的是用微扰论展开单粒子轮序 (contour-ordered) 格林函数。首先, 我们解释为什么在一般的非平衡情况下通常的扰动展开理论对于费曼序 (实轴从  $-\infty$  到  $\infty$ ) 或者对于松原序 (虚轴上的一个片段从  $-i\beta$  到  $i\beta$ ) 失效。

### 1.1 传统时序扰动理论的失效

非平衡多体理论的中心目标是计算实时关联函数。例如, 我们可能想要去计算海森堡绘景下单粒子时序格林函数

$$iG(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \rangle = \text{Tr} \rho T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \quad (1)$$

(注: 上面的数学公式先按 ctrl+alt+m, 然后按 alt+m) 式中  $\rho$  是任意的非平衡密度矩阵, 哈密顿量  $\mathcal{H}(t)$  一般是含时的。

#### 1.1.1 平衡多体理论

在传统的平衡多体理论中, 我们知道如何使用扰动理论去计算这个量。在零温下, 密度矩阵是

$$\rho = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0| \quad (2)$$

式中  $|\Psi_0\rangle$  是准确的考虑完全相互作用含时哈密顿量的基态。时序格林函数

$$iG(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \Psi_0 | T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle \quad (3)$$

通过传统的费曼-戴森扰动理论给出。

$$iG(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \frac{\langle \Phi_0 | T[S(\infty, -\infty)\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \quad (4)$$

式中符号  $\hat{\psi}$  表示算符是关于二次哈密顿量  $H_0$  的相互作用绘景的算符, 式中  $H = H_0 + V$ ,  $|\Phi_0\rangle$  是  $H_0$  的基态, S 矩阵的表达式为

$$S(\infty, -\infty) = T \exp(-i \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{V}(t_1)) \quad (5)$$

S 矩阵的幂次展开以及使用 Wick 理论产生了一般的费曼图, 其中没有连接的部分抵消了分母中的相位因子。

在有限温度下, 我们使用密度矩阵的形式

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (6)$$

式中  $Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$  为配分函数, 演化算符  $U(t) = e^{-iHt}$  用来建立虚时的扰动理论。再一次使用 Wick 理论, 因为扰动展开的每一项是对无相互作用密度矩阵  $\rho_0 = e^{-\beta H_0}/Z_0$ , 式中  $Z = \text{Tr} e^{-\beta H_0}$ 。

注：公式（4）的证明

相互作用绘景中  $\hat{\psi}(t) = U(t)\hat{\psi}(0)$ ，式中  $U(t) = \text{Exp}[-i \int_0^t \hat{V}(t_1) dt_1]$ ， $S(t, t') = U(t)U^\dagger(t')$ ，又因为

$$\psi(0) = S(0, -\infty)\Phi_0$$

由于  $e^{-iHt}\psi(t) = e^{-iH_0t}\hat{\psi}(t)$ ，有  $\psi(0) = \psi(t) = e^{iHt}e^{-iH_0t}U(t)\hat{\psi}(0)$ ，即  $U^\dagger(t) = e^{iHt}e^{-iH_0t}$ 。假设  $\psi(\infty) = S(\infty, 0)\psi(0) = e^{iL}\Phi_0$ ，则海森堡绘景和相互作用绘景下算符的关系可表示为

$$C(t) = e^{iHt}C e^{-iHt} = e^{iHt}e^{-H_0t}\hat{C}(t)e^{H_0t}e^{-iHt} = U^\dagger(t)\hat{C}(t)U(t) = S(0, t)\hat{C}(t)S(t, 0)$$

所以时序格林函数可以表示为

$$\begin{aligned} iG(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \langle \Psi_0 | T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Psi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | S(-\infty, 0)T[S(0, t)\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)S(t, 0)S(0, t')\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t')S(t', 0)]S(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle \\ &= \langle \Phi_0 | S(-\infty, \infty)S(\infty, 0)T[S(0, t)\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)S(t, 0)S(0, t')\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t')S(t', 0)]S(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle \\ &= \frac{\langle \Phi_0 | S(\infty, 0)T[S(0, t)\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)S(t, 0)S(0, t')\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t')S(t', 0)]S(0, -\infty) | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi_0 | T[S(\infty, -\infty)\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', t')] | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | S(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle} \end{aligned}$$

### 1.1.2 传统计算方法的失效

这些方法似乎非常有用，我们为什么不把它们用于更一般的问题？

让我们首先考虑松原方法。在非平衡态，没有温度这个物理概念。由此导致一般来说密度矩阵不是 e 指数的形式，所以我们不能使用松原方法，它包含同时展开的密度矩阵和时间演化算符这两个算符的函数形式的一致性。

在费曼情况下，再一次的，密度矩阵不是简单的像公式（2）所示的在基态上的投影。

这些论点是正确的，但更详细地了解上述平衡扰动展开地数学构造在什么地方失败，是具有启发意义的。我们将尝试用普通的费曼方法构造非平衡格林函数的展开式，看看它是否失败。

考虑一般的密度矩阵

$$\rho = \sum_{\Phi} p_{\Phi} |\Phi\rangle\langle\Phi| \quad (7)$$

式中  $|\Phi\rangle$  可以是任意的量子态。首先回顾一下在海森堡绘景中，密度矩阵不随时间演化，因为量子刘维尔方程和海森堡运动方程差了一个负号，因此  $\rho$  的时间演化抵消了（量子刘维尔和海森堡运动方程如下图所示，图片来源：[https://en.wikipedia.org/wiki/Liouville%27s\\_theorem\\_\(Hamiltonian\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Liouville%27s_theorem_(Hamiltonian))）。

## Quantum Liouville equation [edit]

The analog of Liouville equation in quantum mechanics describes the time evolution of a mixed state. Canonical version of this theorem, the von Neumann equation. This procedure, often used to devise quantum analogues of classical system using Hamiltonian mechanics. Classical variables are then re-interpreted as quantum operators, v commutators. In this case, the resulting equation is<sup>[10][11]</sup>

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \quad \text{量子刘维尔方程}$$

where  $\rho$  is the density matrix.

When applied to the expectation value of an observable, the corresponding equation is given by Ehrenfest's theorem

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle [H, A] \rangle \quad \text{海森堡方程}$$

为了方便，我们每次只研究一个态，也就是说我们想要去计算期望值。

$$iG_{\Phi}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \Phi | T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^{\dagger}(\mathbf{x}', t')] | \Phi \rangle \quad (8)$$

我们可以通过式  $G = \sum_{\Phi} p_{\Phi} G_{\Phi}$  计算全格林函数。

现在考虑下面的哈密顿量的划分  $\mathcal{H}(t) = H + H'(t)$ ，式中  $H$  是未扰动的平衡哈密顿量（但是仍然包含相互作用），所有含时量都包含在非平衡扰动  $H'(t)$  中。相互作用表象下的场算符为

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) = e^{-iHt} \psi(\mathbf{x}) e^{-iHt} \quad (9)$$

在海森堡绘景下

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \mathcal{U}^{\dagger}(t) \psi(\mathbf{x}) \mathcal{U}(t) = \mathcal{S}(0, t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \mathcal{S}(t, 0) \quad (10)$$

式中  $\mathcal{S}(0, t) = e^{iHt} \mathcal{U}(t)$ ，时间演化算符为

$$\mathcal{U}(t) = T \exp(-i \int_0^t dt_1 \mathcal{H}(t_1)) \quad (11)$$

更一般的，S-矩阵

$$\mathcal{S}(t, t') = e^{iHt} \mathcal{U}(t, t') e^{-iHt'} = T \exp(-i \int_{t'}^t dt_1 \hat{H}'(t_1)) \quad (12)$$

式中  $\mathcal{U}(t, t') = T \exp(-i \int_{t'}^t dt_1 \mathcal{H}(t_1))$ ， $\hat{H}'(t) = e^{iHt} H'(t) e^{-iHt}$  是相互作用绘景下的非平衡扰动。

将上面公式带入 (8) 中，我们可以得到

$$iG_{\Phi}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \Phi | T[\mathcal{S}(0, t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \mathcal{S}(t, 0) \mathcal{S}(0, t') \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \mathcal{S}(t', 0)] | \Phi \rangle \quad (13)$$

相互作用绘景下量子态的含时演化可以通过如下公式得到

$$|\Phi(t)\rangle_I = \mathcal{S}(t, 0) |\Phi(0)\rangle_I = \mathcal{S}(t, 0) |\Phi\rangle \quad (14)$$

因为所有绘景下在  $t=0$  时刻的系统初态相同。我们可以得到

$$|\Phi\rangle = \mathcal{S}(0, \pm\infty) |\Phi(\pm\infty)\rangle_I \quad (15)$$

结合上面所有公式，我们可以得到

$$iG_{\Phi}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \Phi(\infty) |_I \mathcal{S}(\infty, 0) T[\mathcal{S}(0, t) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \mathcal{S}(t, t') \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \mathcal{S}(t', 0)] \mathcal{S}(0, -\infty) |\Phi(-\infty)\rangle_I \quad (16)$$

S 矩阵  $\mathcal{S}(\infty, -\infty)$  本身是一个时序积，所以我们可以将上式写成

$$iG_{\Phi}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle \Phi(\infty) |_I T[\mathcal{S}(\infty, -\infty) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{x}', t')] |\Phi(-\infty)\rangle_I \quad (17)$$

目前位置，所有的推导对于非平衡情况都是准确的。此时，只有在以下关键步骤成立的情况下，才能得到传统的 Feynman 表达式 (4):  $|\Phi(\infty)\rangle_I$  和  $|\Phi(-\infty)\rangle_I$  只相差一个相因子。这在系统一直处于平衡态时是成立的，但是在非平衡态时不成立。

原因如下。在传统的零温理论中，我们绝热地开启和关闭相互作用

$$\mathcal{H}_{\epsilon} = H + e^{-\epsilon|t|} H' \quad (18)$$

式中  $\epsilon$  是一个无限小正值。我们将系统哈密顿量  $\mathcal{H} = H + H'$  的基态  $|\Phi\rangle$  记为  $|\Psi_0\rangle$ 。我们假设基态非简并。因为时间演化是绝热的，我们可以使用绝热理论得到  $|\Phi(\pm\infty)\rangle_I = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{S}_{\epsilon}(\pm\infty, 0) |\Psi_0\rangle$ ，也是  $H$  的本征态。因为  $|\Psi_0\rangle$  是非简并的，这两个态只相差一个相因子

$$|\Phi(\infty)\rangle_I = e^{iL} |\Phi(-\infty)\rangle_I \quad (19)$$

为了方便书写, 我们用如下的记号  $|\Phi_0\rangle \equiv |\Phi(-\infty)\rangle_I$ , 可以看出

$$e^{iL} = \langle \Phi_0 | \mathcal{S}(\infty, -\infty) | \Phi_0 \rangle \quad (20)$$

利用上面的公式, 我们可以从 (17) 式得到 (4) 式。

当系统处于非平衡态时, 绝热定理的使用是不合理的, 因为系统量子态在一个随时变化的哈密顿量  $\mathcal{H}(t)$  下的演化是非绝热的。在哈密顿量不含时的情况下, 但密度矩阵仍然是任意的-非平衡稳态的重要情况, 我们仍然不能使用绝热定理, 因为一般量子态  $|\Phi\rangle$  不一定是  $\mathcal{H}$  的本征态, 绝热定理只适用于哈密顿量的本征态。如果我们用  $\mathcal{H}$  的本征态来展开密度矩阵, 一般来说密度矩阵不是对角化的

$$\text{Tr} \rho O = \sum_{\Phi} p_{\Phi} \langle \Phi | O | \Phi \rangle = \sum_{nn'} \rho_{nn'} \langle n | O | n' \rangle \quad (21)$$

即使本征态满足  $|n(\infty)\rangle_I = e^{iL_n} |n(-\infty)\rangle_I$ , 交叉项的出现仍破坏了展开。最后, 即使假设基态是非简并的, 出现在非平衡密度矩阵  $\rho$  中的激发态  $|n\rangle$  也可以是简并的, 因此它们可以在绝热演化下被非阿贝尔 Berry 相混合, 这再次使传统的过程无效。

简单来说, 非平衡态  $|\Phi(\infty)\rangle_I$  和  $|\Phi(-\infty)\rangle_I$  之间并不是简单的相关联。这在物理上是显而易见的, 因为当一个系统被脱离平衡态时, 它的渐近未来与它在遥远的过去的初始准备是完全不同的。各种非平衡时圈 (如双分支 Schwinger-Keldysh 时圈) 的目的正是为了避免对渐近未来状态  $|\Phi(\infty)\rangle_I$  的任何引用, 并仅基于展开渐近过去的状态  $|\Phi(-\infty)\rangle_I$ 。

## 1.2 Schwinger-Keldysh 时圈

这种方法由 Schwinger, Craig, Mill 提出, 并由 Keldysh 推广。为了避免不想要的渐近未来态  $|\Phi(\infty)\rangle_I$ , 我们使用时间演化算符倒退到渐近过去

$$|\Phi(\infty)\rangle_I = \mathcal{S}(\infty, -\infty) |\Phi(-\infty)\rangle_I \quad (22)$$

方程 (17) 变成了

$$iG_{\Phi}(x, t; x', t') = \langle \Phi(-\infty) |_I \mathcal{S}(-\infty, \infty) T[\mathcal{S}(\infty, -\infty) \hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}^{\dagger}(x', t')] | \Phi(-\infty) \rangle_I \quad (23)$$

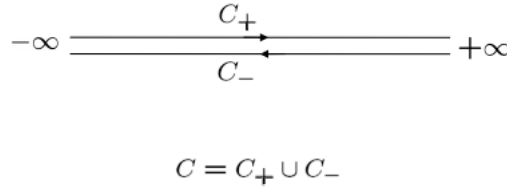


Fig. 1.1. Schwinger-Keldysh contour  $C$ .

现在我们不能通过简单的时序算符  $T$  将  $\mathcal{S}(-\infty, \infty)$  和向前演化算符  $\mathcal{S}(\infty, -\infty)$  合并, 因为整个向后演化算符在  $T$  的左边。就时间顺序而言, 左边意味着后面。一个简单的一石二鸟的方法是引入一个双分支时圈  $C$  并按照时圈序算符  $T_c$  排序。Schwinger-Keldysh 时圈由两个不同取向的分支构成  $C = C_+ \cup C_-$ , 向前的一支  $C_+$  从  $-\infty$  延展到  $\infty$ , 向后的一支  $C_-$  从  $\infty$  延展到  $-\infty$ 。我们现在将时间变量  $t, t'$  扩展到时圈上定义的变量  $\tau, \tau'$ , 定义最基本的非平衡多体理论中的变量, 时圈序格林函数

$$iG(x, \tau; x', \tau') = \langle T_c[\psi(x, \tau) \psi^{\dagger}(x', \tau')] \rangle = \text{Tr} \rho T_c[\psi(x, \tau) \psi^{\dagger}(x', \tau')] \quad (24)$$

考虑到时圈  $C$  上的变量和时序, 相互作用绘景下的表达式的形式为

$$iG_{\Phi}(x, t; x', t') = \langle \Phi(-\infty) |_I T[\mathcal{S}_c(-\infty, -\infty) \hat{\psi}(x, t) \hat{\psi}^{\dagger}(x', t')] | \Phi(-\infty) \rangle_I \quad (25)$$

式中时圈  $S$  矩阵为

$$S_c(-\infty, -\infty) \equiv T_c \exp(-i \oint_C d\tau_1 \hat{H}'(\tau_1)) \quad (26)$$

上式中积分路为时圈  $C$ 。注意到和之前的平衡态理论不同，(25) 式中不存在表示相位因子的分母，因为  $S$  矩阵本身是归一的。

根据我们之前的讨论，全格林函数由下式给出

$$iG(x, \tau; x', \tau') = Tr \rho(-\infty) T_c [S_c(-\infty, -\infty) \psi(x, \tau) \psi^\dagger(x', \tau')] \quad (27)$$

现在量子态不是海森堡绘景下的态，而是相互作用绘景下遥远的过去的量子态  $|\Phi(-\infty)\rangle_I$ 。式中

$$\rho(-\infty) = \sum_{\Phi} p_{\Phi} |\Phi(-\infty)\rangle_I \langle \Phi(-\infty)|_I \quad (28)$$

从公式 (7,15) 可以得出

$$\rho = S(0, -\infty) \rho(-\infty) S(-\infty, 0) \quad (29)$$

目前为止，这个公式是非常普遍的。在 Keldysh 理论中我们从  $t = -\infty$  绝热的按照  $e^{\epsilon t}$  引入非平衡扰动  $V$  而不去关闭它。这方便我们研究非平衡稳态行为。因为对于绝热开启过程， $\rho(-\infty)$  可以认为是在遥远的过去，非平衡扰动没有被引入时系统的密度矩阵。然后按照  $S$  矩阵  $S(0, -\infty)$  扰动至非平衡密度矩阵  $\rho$ 。因此我们通常选取  $\rho(-\infty)$  为系统处于平衡态时的密度矩阵，即  $\rho(-\infty) = e^{-\beta H}/Z$ 。

适用范围：知道  $t \rightarrow -\infty$  时的不包含相互作用的密度矩阵。

### 1.3 封闭时间路径时圈

在上一节中，我们构建了一种微扰展开的方式，体系的格林函数可以表示为系统遥远的过去的密度矩阵的平均值，因为引入扰动是一个绝热过程，我们有  $\rho(-\infty) = e^{-\beta H}/Z$ 。Keldysh 的想法确实有助于帮助我们避免通常位置的非平衡态密度矩阵  $\rho$ 。但是，这个方法并不是唯一的时圈选择方法，如果我们知道  $t = 0$  时刻的密度矩阵  $\rho$ ，我们利用方程 (13) 就可以得到格林函数。

$$iG(x, t; x', t') = Tr \rho T_c [S_c(0, 0) \hat{\psi}(x, \tau) \hat{\psi}^\dagger(x', \tau')] \quad (30)$$

式中  $\rho$  是  $t = 0$  时刻的密度矩阵，时圈时序算符  $T_c$  和  $S$  矩阵  $S_c$  定义在封闭时间路径时圈  $C_0$  上。从 0 到  $t$  和  $t'$  中更迟的那一个，再回到 0。 $t = 0$  时刻选取并没有特殊的要求，我们可以定义其他时刻  $t_0$  作为初始时刻，对应的平均值就是对  $t_0$  时刻的密度矩阵取平均。

$$iG(x, t; x', t') = Tr \rho(t_0) T_c [S_c(t_0, t_0) \hat{\psi}(x, \tau) \hat{\psi}^\dagger(x', \tau')] \quad (31)$$

现在闭合时间路径时圈从  $t_0$  到  $t$  和  $t'$  中更迟的那一个，然后再回到  $t_0$ 。如果想要回到 Schwinger-Keldysh 时圈情况下，我们只要选取  $t_0 \rightarrow -\infty$ ，插入  $S$  矩阵  $S_c(t, \infty) S_c(\infty, t)$  或  $S_c(t', \infty) S_c(\infty, t')$ ，具体插入哪个由  $t$  和  $t'$  哪个更迟决定。现在的密度矩阵为  $\rho(-\infty)$ ，我们选取  $\rho(-\infty) = e^{-\beta H}/Z$ 。

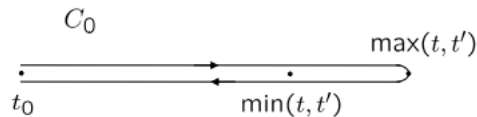


Fig. 1.2. Closed time path contour  $C_0$ .

适用范围：知道  $t_0$  时的不包含相互作用的密度矩阵。

## 1.4 相互作用：Kadanoff-Baym 时圈

等式 (31) 对于  $\rho(t_0)$  为不考虑相互作用的密度矩阵是一个合适的围绕展开的方式，相互作用绘景中场算符  $\hat{\psi}, \hat{\psi}^\dagger$  按照无相互作用哈密顿量  $H$  演化。的确，这些都是 Wick 定理适用的情况。如果  $H$  是不包含相互作用的哈密顿量时，Keldysh 理论对于这一情况是适用的，但是，如果  $H$  包含相互作用时会怎样呢？

让我们考虑任意的  $t_0$ ，假设  $\rho(t_0) = e^{-\beta H} / Z$ ，式中  $H$  是考虑相互作用的哈密顿量。我们永远可以取  $t_0 \rightarrow -\infty$  来重新回到 Keldysh 理论上。我们首先将平衡态哈密顿量  $H$  分解为无相互作用哈密顿量  $H_0$  和相互作用项  $V$ ，即  $H = H_0 + V$ 。我们心啊在想要用无相互作用密度矩阵  $e^{-\beta H_0}$  去表示相互作用密度矩阵  $e^{-\beta H}$ 。我们将使用  $U$  和  $S$  来表示演化矩阵和  $S$  矩阵。相互作用绘景和海森堡绘景都是相对于初始时刻  $t_0$  定义的，即  $A(t) = e^{iH(t-t_0)} A e^{-iH(t-t_0)}$ ， $\hat{A}(t) = e^{iH_0(t-t_0)} A e^{-iH_0(t-t_0)}$ 。因为  $H$  是含时的，时间演化算符可以写成  $U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)}$ ，我们可以得到  $S$  矩阵的表达式为

$$S(t, t_0) = e^{iH(t-t_0)} U(t, t_0) \quad (32)$$

式中  $S$  矩阵也可以写成  $S(t, t') = T \exp(-i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1))$ 。我们可以得到

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} S(t_0 - i\beta, t_0) \quad (33)$$

式中  $S$  矩阵  $S(t_0 - i\beta, t_0)$  沿着虚轴  $[t_0, t_0 - i\beta]$  演化密度矩阵。(31) 式的格林函数可以写成如下的形式

$$iG(1, 1') = \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} S(t_0 - i\beta, t_0) T_c [S_c(t_0, t_0) \hat{\psi}_H(1) \hat{\psi}_H^\dagger(1')] \quad (34)$$

式中为了简单起见，我们在哪里用一个指标来表示空间和时间参数，即  $1 \equiv (x, \tau)$ ， $1' \equiv (x', \tau')$ 。我们还明确指出，场算符仍然根据完整的  $H$  演化。它们必须被带到对于  $H_0$  定义的相互作用绘景中。这可以通过  $S$  矩阵实现

$$\hat{\psi}_H(x, t) = S(t_0, t) \hat{\psi}(x, t) S(t, t_0) \quad (35)$$

式中  $\hat{\psi}_H(x, t) = e^{iH_0(t-t_0)} \hat{\psi}(x, t) e^{-iH_0(t-t_0)}$ ， $\hat{\psi}(x, t) = e^{iH(t-t_0)} \hat{\psi}(x, t) e^{-iH(t-t_0)}$ ，其中  $\psi(x, t)$  是薛定谔绘景下的场算符， $\hat{\psi}(x, t)$  是对于  $H_0$  定义的相互作用绘景下的场算符。方程 (34) 可以写成

$$iG(1, 1') = \frac{1}{Z} \text{Tr} e^{-\beta H_0} S(t_0 - i\beta, t_0) T_c [S_c(t_0, t_0) S(t_0, t) \hat{\psi}(1) S(t, t_0) S(t_0, t') \hat{\psi}^\dagger(1') S(t', t_0)] \quad (36)$$

式中时圈包含三个分支  $C^* = C_0 \cup [t_0, t_0 - i\beta]$ ，这种时圈被称为 Kadanoff-Baym 时圈。

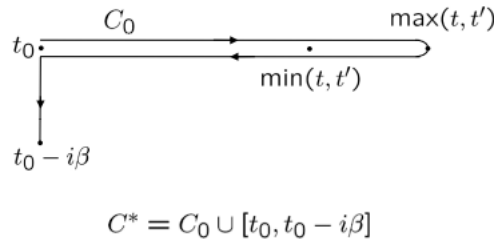


Fig. 1.3. Kadanoff-Baym contour  $C^*$ .

我们定义时圈时序算符  $T_{C^*}$  沿着这个时圈，可以将热  $S$  矩阵  $S(t_0 - i\beta, t_0)$  移动到时圈序积，得到

$$iG(1, 1') = \frac{\text{Tr} e^{-\beta H_0} T_{C^*} [S_{C^*}(t_0 - i\beta, t_0) S_c(t_0, t_0) \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0} T_{C^*} [S_{C^*}(t_0 - i\beta, t_0) S_c(t_0, t_0)]} \quad (37)$$

和 (26) 式类似，我们可以定义一个沿着 Kadanoff-Baym 时圈的时圈序  $S$  矩阵

$$S_c(t_0 - i\beta, t_0) \equiv T_{C^*} \exp(-i \int_{C^*} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)) \quad (38)$$



我们将配分函数写成

$$Z = \text{Tre}^{-\beta H} = \text{Tre}^{-\beta H_0} S(t_0 - i\beta, t_0) = \text{Tre}^{-\beta H_0} T_{c^*} [S_{c^*}(t_0 - i\beta, t_0) S_c(t_0, t_0)] \quad (39)$$

因为  $S$  矩阵在各自的时圈上是时序的，而且  $[t_0, t_0 - i\beta]$  迟于  $C_0$  上的时间，在  $T_{c^*}$  时序积情况下  $S_c(t_0, t_0) = 1$ ， $S_{c^*}(t_0 - i\beta, t_0) = S(t_0 - i\beta, t_0)$ 。式 (37) 现在适用于微扰理论，因为假设平均值是关于单粒子密度矩阵  $e^{-\beta H_0}$  的，并且场算符是根据非相互作用  $H_0$  演化的，因此可以应用 Wick 定理。

Kadanoff-Baym 范式适用于初始时刻含有相互作用的研究也就是  $t_0$  时刻的密度矩阵包含相互作用。为这种强大的技巧付出的代价是，格林函数是定义在三个分支时圈上的，并且在两个  $S$  矩阵的同时扰动展开方面具有复杂的表达式。然而，对于许多实际情况，这是多余的，对于稳态问题，我们不关心初始时刻相互作用的影响。在许多情况下，我们可以假设相关性随时间衰减，因此如果我们取极限  $t_0 \rightarrow -\infty$ ，在任何有限时间  $t > t_0$ ，初始密度矩阵  $\rho(t_0)$  中没有相关性的特征。这就是 Bogoliubov 的相关性弱化原理，非平衡统计力学的一般原理。然而，建议记住，在某些情况下，初始时刻相互作用可以持续很长时间，例如由于亚稳态的存在。

适用范围：知道  $t_0$  时的包含相互作用的密度矩阵。

#### 1.4.1 忽略初始时刻的关联和 Schwinger-Keldysh 限制

对于大部分实际情况，我们可以选取  $t_0 \rightarrow \infty$  安全地忽略初始时的关联。忽略初始关联等价于忽略 Kadanoff-Baym 时圈的虚部  $[t_0, t_0 - i\beta]$ ，这样我们就回到 Schwinger-Keldysh 时圈（正如 1.3 节所讲的内容一样延拓闭合路径时圈）。这时 (37) 式中分母就变成了  $\text{Tre}^{-\beta H_0}$ ，因此我们有

$$iG(1, 1') = \text{Tr} \rho_0 T_c [S_c(-\infty, -\infty) S_c(-\infty, -\infty) \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')] \quad (40)$$

式中无相互作用密度矩阵为

$$\rho_0 \equiv \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tre}^{-\beta H_0}} \quad (41)$$

$S_c(-\infty, -\infty)$  是 Kadanoff-Baym 时圈时序  $S$  矩阵

$$S_c(-\infty, -\infty) \equiv T_c \exp(-i \int_c d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)) \quad (42)$$

现在所有的时序都在 Schwinger-Keldysh 时圈  $C$  上。如果系统初始时刻处于零温下，体系初态只处于一个量子态上，我们可以简单地得到

$$iG(1, 1') = \langle \Phi_0 | T_c [S_c(-\infty, -\infty) S_c(-\infty, -\infty) \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')] | \Phi_0 \rangle \quad (43)$$

式中  $|\Phi_0\rangle$  是  $H_0$  对应的基态。我们可以看到上式和 (27) 式非常相似，除了有一个额外的  $S$  矩阵  $S_c$  用来包含相互作用  $V$  的影响。我们可以用一个公式来表示零温 (43) 和有限温度 (40) 下的格林函数

$$iG(1, 1') = \langle T_c [S_c(-\infty, -\infty) S_c(-\infty, -\infty) \hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')] \rangle \quad (44)$$

期望值根据零温和非零温有不同的形式。这是 Keldysh 理论计算的重要起始点。现在我们可以对 (26) 式中  $S_c$  进行非平衡项  $\hat{H}'$  或对 (38) 式中  $S_c$  进行相互作用项  $\hat{V}$  微扰展开。让我们在这里评论一下，Kadanoff-Baym 和 Keldysh 方法对非平衡多体理论，或者更一般地说，对非平衡场论的作用在于它的结构在形式上与通常的平衡多体理论相同，尽管在更一般的时圈上定义了时间演化和相应的微扰展开。那么量子场论的大多数工具都可以应用：费曼图，顶点函数的积分方程，例如 Dyson 方程等等。

#### 1.5 时圈 Dyson 方程

非平衡时圈  $C$  上时序的单粒子格林函数的全微扰展开可以重新表示为积分方程，即 Dyson 方程：

$$G(1, 1') = G_0(1, 1') + \int d2 G_0(1, 2) U(2) G(2, 1') + \int d2 \int d3 G_0(1, 2) \Sigma(2, 3) G(3, 1') \quad (45)$$

$$G(1, 1') = G_0(1, 1') + \int d2 G(1, 2) U(2) G_0(2, 1') + \int d2 \int d3 G(1, 2) \Sigma(2, 3) G_0(3, 1') \quad (46)$$

式中  $G(1, 1') \equiv -i \langle T_c [\psi(1) \psi^\dagger(1')] \rangle$  是 (24) 所示的格林函数,  $G(1, 1') \equiv -i \langle T_c [\hat{\psi}(1) \hat{\psi}^\dagger(1')] \rangle$  是相互作用绘景下场算符表示的未扰动格林函数,  $U(2)$  是单粒子势能,  $\Sigma(2, 3)$  是单粒子自能。积分符号表示所有内部变量的和,  $\int d2 \equiv \int_{\sigma_2} \int dx_2 \int_C d\tau_2$ 。为了方便书写, 我们将使用下面的记号

$$G = G_0 + G_0 U G + G_0 \Sigma G \quad (47)$$

$$G = G_0 + G U G_0 + G \Sigma G_0 \quad (48)$$

## 1.6 任意初始密度矩阵的初始相关性

为了保证理论的完整性, 让我们接下来提及以下最一般的问题, 尽管我们在这一节中并不打算解决它。考虑等式 (31), 在 Keldysh 理论中我们选取  $t_0 \rightarrow -\infty$ , 忽略初始相关性。在 Kadanoff-Baym 理论中我们考虑有限  $t_0$  时刻时的初始相关性, 但是我们假设初始密度矩阵  $\rho(t_0)$  有和平衡态一样的形式  $\rho(t_0) = e^{-\beta H} / Z$ , 式中  $H$  是包含相互作用的哈密顿量。现在如果  $\rho(t_0)$  为非平衡态密度矩阵, 我们无法写出其表达式, 该如何处理? 这种情况对应于系统在  $t_0$  时刻就处于非平衡态。比如说在研究一些关联等离子体时就需要研究这些问题。解决这些问题的思路就是修正 Kadanoff-Baym 时圈。首先, 一般的非平衡密度矩阵可以写成如下的形式

$$\rho(t_0) = \frac{e^{-\lambda B}}{\text{Tr} e^{-\lambda B}} \quad (49)$$

因为密度矩阵是正定并且厄密共轭的, 式中  $\lambda$  不是表示温度的变量  $\beta$ ,  $B$  不是哈密顿量  $H$  而是一些一般的变量。因为形式上可以类比于  $\lambda$  和  $B$  分别取  $\beta$  和  $H$  的情况, 我们可以在 Kadanoff-Baym 时圈上建立类似的微扰展开。

## 1.7 和实时格林函数的关系

在这一节中, 我们的所有讨论内容都在 Keldysh 方法的适用范围内 (不过平衡哈密顿量  $H$  仍可以包含相互作用)。让我们简明扼要的重述一遍。我们最初的目的是为了计算实时格林函数 (1) 式

$$iG(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \langle T[\psi(\mathbf{x}, t) \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \rangle = \text{Tr} \rho T[\psi(\mathbf{x}, t) \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \quad (50)$$

上式中所有算符都是非平衡哈密顿量  $\mathcal{H}$  对应的海森堡绘景中的算符 (注:  $\mathcal{H}$  总哈密顿量 =  $H + H' = H_0$  无相互作用哈密顿量 +  $V$  相互作用项 +  $H'$  微扰项),  $\rho$  是非平衡密度矩阵。我们定义了实时格林函数 (24)

$$iG(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \langle T_c [\psi(\mathbf{x}, \tau) \psi^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle \quad (51)$$

我们可以得到格林函数的微扰展开

$$iG(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \langle T_c [S_c(-\infty, -\infty) S_c(-\infty, -\infty) \hat{\psi}(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}', \tau')] \rangle \quad (52)$$

上式中所有算符都是在无相互作用哈密顿量  $H_0$  对应的相互作用绘景下。现在我们的问题是如何将时圈序格林函数 (51) 和实时格林函数联系起来 (50)。

答案是根据时圈参数  $\tau, \tau_0$  属于哪个分支, 它们处于不同的分支对应不同的实时格林函数:

$$G(\mathbf{x}, \tau; \mathbf{x}', \tau') = \begin{cases} G^T(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv -i \langle T[\psi(\mathbf{x}, t) \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \rangle & \text{if } \tau, \tau' \in C_+ \\ G^<(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv \pm i \langle \psi^\dagger(\mathbf{x}', t') \psi(\mathbf{x}, t) \rangle & \text{if } \tau \in C_+, \tau' \in C_- \\ G^>(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv -i \langle \psi(\mathbf{x}, t) \psi^\dagger(\mathbf{x}', t') \rangle & \text{if } \tau \in C_-, \tau' \in C_+ \\ G^{\tilde{T}}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv -i \langle \tilde{T}[\psi(\mathbf{x}, t) \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] \rangle & \text{if } \tau, \tau' \in C_- \end{cases} \quad (53)$$



式中费米子取正号, 玻色子取负号,  $G^T$  是 (50) 式里面的时序格林函数,  $\tilde{T}$  是反时序算符, 以与  $T$  相反的方式对操作符进行排序, 所以  $G^{\tilde{T}}$  是反时序格林函数。  $G^{>(<)}$  是大于 (小于) 格林函数。注:  $T[\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t')] = \theta(t-t')\psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t') \pm \theta(t'-t)\psi(\mathbf{x}', t')\psi^\dagger(\mathbf{x}, t)$ , 费米子取正号, 玻色子取负号, 即  $G^T(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \theta(t-t')G^>(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') + \theta(t'-t)G^<(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$ 。可以用一个  $2 \times 2$  的矩阵表示这 4 种格林函数

$$G = \begin{pmatrix} G^T & G^< \\ G^> & G^{\tilde{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix} \quad (54)$$

我们还可以根据上面 4 种格林函数定义 3 种新的格林函数

$$G^R = G^T - G^< = G^> - G^{\tilde{T}} \quad (55)$$

$$G^A = G^T - G^> = G^< - G^{\tilde{T}} \quad (56)$$

$$G^K = G^> + G^< = G^T + G^{\tilde{T}} \quad (57)$$

### 1.7.1 Larkin-Ovchinnikov 表示

在所谓的 Larkin-Ovchinnikov 表示中, 我们对  $G$  进行线性变换得到另一个矩阵  $\hat{G}$ ,

$$\hat{G} = L\sigma_3 GL^\dagger \quad (58)$$

式中  $L = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_0 - i\sigma_2)$ ,  $\sigma_i$  是泡利矩阵 ( $\sigma_0$  是单位阵)。  $G^{R(A)}$  是超前 (推迟) 格林函数。

$$G^R(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i\theta(t-t') < [\psi(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')]_{\pm} > \quad (59)$$

$$G^A(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = i\theta(t'-t) < [\psi(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')]_{\pm} > \quad (60)$$

式中正号对应费米子, 负号对应玻色子。  $G^K$  是 Keldysh 格林函数

$$G^K(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = -i < [\psi(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t')]_{\mp} > \quad (61)$$

式中正号对应玻色子, 负号对应费米子。

### 1.7.2 解析延拓的 Langreth 定理

考虑 (45,46) 式里面的矩阵积分, 这些是双分支时圈上的卷积积分。首先考虑以下两个时圈时序量的卷积 (如格林函数或自能)

$$C(1, 1') = \int d2 A(1, 2) B(2, 1') \quad (62)$$

为了方便书写, 我们用下面的形式表示矩阵卷积

$$C = AB \quad (63)$$

我们如何将这个乘积转换成包含  $A$  和  $B$  的实时分量的实轴积分? 这是由 Langreth 定理完成的, 这个定理由一系列规则组成

$$(AB)^{>, <} = A^R B^{>, <} + A^{>, <} B^A \quad (64)$$

$$(AB)^{R, A} = A^{R, A} B^{R, A} \quad (65)$$

$$(ABC)^{>, <} = A^R B^R C^{>, <} + A^R B^{>, <} C^A + A^{>, <} B^A C^A \quad (66)$$

$$(ABC)^{R, A} = A^{R, A} B^{R, A} C^{R, A} \quad (67)$$

式中右侧的“矩阵乘积”包含对内部自由度（空间和自旋）的求和以及从  $-\infty$  到  $\infty$  的实轴上的卷积积分。现在我们完全摆脱了时圈； $2 \times 2$  矩阵结构考虑了非平衡物理，我们可以使用普通的实时积分。特别地，我们可以在非平衡稳态的情况下对频率空间进行傅里叶变换。格林函数具有时间平移不变性， $G_{ij}(t, t') = G_{ij}(t - t')$ 。

我们将不推导所有这些规则，而只说明如何获得第一个规则。考虑 Schwinger-Keldysh 时圈。

$$\begin{aligned} C^<(t, t') &= \int_C d\tau_1 A(t, \tau_1) B(\tau_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 A^T(t, t_1) B^<(t_1, t') + \int_{\infty}^{-\infty} dt_1 A^<(t, t_1) B^{\bar{T}}(t_1, t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[ A^T(t, t_1) B^<(t_1, t') - A^<(t, t_1) B^{\bar{T}}(t_1, t') \right] \end{aligned}$$

从 (55,56) 式，我们可以知道  $A^T = A^R + A^<, B^{\bar{T}} = B^< - B^A$ ，因此有

$$\begin{aligned} C^<(t, t') &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[ (A^R(t, t_1) + A^<(t, t_1)) B^<(t_1, t') - A^<(t, t_1) (B^<(t_1, t') - B^A(t_1, t')) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \left[ A^R(t, t_1) B^<(t_1, t') + A^<(t, t_1) B^A(t_1, t') \right] \end{aligned}$$

其他规则以类似的方式得到。通常情况下，我们可以像传统的多体理论那样写下这些公式对应的图，并写出相应的包含时圈序的格林函数的解析表达式。通常，这些都涉及到时圈上的积分。然后使用 Langreth 规则将这些表达式翻译成实时积分。这通常被称为从时圈到实时轴的“解析延拓”。

## 2 应用

我们现在考虑一些非平衡多体理论的应用。

### 2.1 通过一个量子点的非平衡输运现象

在本节中，我们将研究通过连接两个外部金属引线（双端口）的量子点的非平衡输运现象。首先，我们用 Keldysh 非平衡格林函数推导出通过量子点的电流的一般表达式。

整个双端口系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{k, \alpha \in L, R} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + H_C[\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}] + \sum_{k, \alpha \in L, R, n} (t_{k\alpha n} c_{k\alpha}^\dagger d_n + t_{k\alpha n}^* d_n^\dagger c_{k\alpha}) \quad (68)$$

式中  $c_{k\alpha}^\dagger (c_{k\alpha})$  是沟道  $\alpha$  中动量为  $k$  的费米子产生（湮灭）算符， $d_n^\dagger (d_n)$  是量子点中处于第  $n$  个量子态的产生（湮灭）算符。 $H_C$  是量子点的哈密顿量。对于一个不考虑费米子相互作用的量子点， $H_C$  有如下的形式

$$H_C = \sum_{mn} h_{mn} d_m^\dagger d_n \quad (69)$$

对于格点上费米子存在排斥相互作用的量子点，哈密顿量可以写成

$$H_C = \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (70)$$

式中  $n_{\sigma} = d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$  是格点上自旋  $\sigma$  的费米子数。

无论是否考虑费米子相互作用，我们可以先推导出电流的一般表达式。

完整的哈密顿量可以按章节 1 中的方式进行划分，也就是  $\mathcal{H} = H + H'$ ，式中  $H$  是平衡哈密顿量， $H'$  是非平衡扰动。我们还需要指定初始无相互作用的密度矩阵  $\rho(-\infty)$ 。对于当前这个问题，我们有两种可能的分类方式：

- 将  $H$  选为独立的引线量子点， $H'$  为量子点和两个引线的耦合。系统初始的密度矩阵是各独立系统密度矩阵的直积：

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k,\alpha \in L,R} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + H_C[\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}] \\ H' &= \sum_{k,\alpha \in L,R,n} (t_{k\alpha n} c_{k\alpha}^\dagger d_n + t_{k\alpha n}^* d_n^\dagger c_{k\alpha}) \\ \rho(-\infty) &= \frac{1}{Z} (e^{-\beta(H_L - \mu_L N_L)} \otimes \rho_C^{(0)} \otimes e^{-\beta(H_R - \mu_R N_R)}) \end{aligned} \quad (71)$$

式中  $H_{L(R)}$  为左（右）端独立金属导线的哈密顿量， $\mu_{L(R)}$  为左（右）端金属导线处于平衡态的化学势。 $\rho_C^{(0)}$  是不考虑与金属导线耦合的量子点的密度矩阵。

- 或者，我们可以选择  $H$  为各部分相互连接后系统处于平衡态的哈密顿量，非平衡扰动  $H'$  在两端金属导线引入电势差：

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k,\alpha \in L,R} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + H_C[\{d_n^\dagger\}, \{d_n\}] + \sum_{k,\alpha \in L,R,n} (t_{k\alpha n} c_{k\alpha}^\dagger d_n + t_{k\alpha n}^* d_n^\dagger c_{k\alpha}) \\ H' &= \sum_{k,\alpha \in L,R,n} \Delta_{L,R} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} \\ \rho(-\infty) &= \frac{1}{Z} e^{-\beta(H - \mu N)} \end{aligned} \quad (72)$$

第一种分类方式适用于稳态问题，第二种方式适用于含时输运问题。

### 2.1.1 电流表达式

流经金属导线  $\alpha$  的电流定义为

$$J_\alpha(t) \equiv -e \langle \dot{N}_\alpha \rangle \quad (73)$$

式中  $N_\alpha = \sum_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}$  为导线  $\alpha$  内的粒子数算符， $e > 0$  为电子电荷。根据海森堡运动方程  $i\hbar \dot{N}_\alpha = [N_\alpha, H]$  和系统哈密顿量，我们可以得出

$$J_\alpha(t) = \frac{2e}{\hbar} \text{Re} \sum_{k,n} t_{k\alpha,n} G_{n,k\alpha}^< \quad (74)$$

式中混合小于格林函数  $G_{n,k\alpha}^<(t, t') = i \langle c_{k\alpha}^\dagger(t') d_n(t) \rangle$ 。使用 Keldysh 方法，我们可以得到混合时圈格林函数  $G_{n,k\alpha}(\tau, \tau') = -i \langle T_c \{ d_n(\tau) c_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle$  并对实时间进行延拓分析得到小于格林函数。

处于教学原因，让我们首先用 S 矩阵的围绕展开推导表达式，后续应用 Wick 理论，之后再再用路径积分这一更明显的方法得到相同的结果。

### 2.1.2 混合格林函数的扰动展开

我们采取第一种分类方式，Keldysh 格林函数的扰动展开式形式为

$$G_{n,k\alpha}(\tau, \tau') = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-i)^{l+1}}{l!} \oint_C d\tau_1 \cdots \oint_C d\tau_l \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_1) \cdots \hat{H}'(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \quad (75)$$

式中

$$\langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_1) \cdots \hat{H}'(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle = \prod_{i=1}^l \sum_{k_i \alpha_i n_i} \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) (\hat{c}_{k_i \alpha_i}^\dagger(\tau_i) t_{k_i \alpha_i n_i} \hat{d}_{n_i}(\tau_i) + \hat{d}_{n_i}^\dagger(\tau_i) t_{k_i \alpha_i n_i}^\dagger \hat{c}_{k_i \alpha_i}(\tau_i)) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \quad (76)$$

接下来运用 Wick 定理化简上面的公式

补充内容：Wick 定理

#### 4.3 Wick定理

关联函数的计算最终归结为如下形式表达式的计算:

$$\langle 0 | T \{ \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \dots \phi_n(x_n) \} | 0 \rangle$$

即任意有限多个自由场算符时序乘积的真空期望值。

现考虑  $\langle 0 | T \{ \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \} | 0 \rangle$ ,  $\phi_1(x)$  与  $\phi_2(y)$  都可分解为正负频部分, 如:

$$\phi_1(x) = \phi_1^+(x) + \phi_1^-(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} a_p e^{-ip \cdot x} + \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} a_p^\dagger e^{ip \cdot x}$$

由于  $a_p |0\rangle = 0$ ,  $\langle 0 | a_p^\dagger = 0$ , 有:

$$\phi_1^+(x) |0\rangle = \langle 0 | \phi_1^-(x) = 0$$

因而若  $x^0 > y^0$

$$\begin{aligned} T \phi_1(x) \phi_2(y) &= \phi_1(x) \phi_2(y) \\ &= [\phi_1^+(x) + \phi_1^-(x)] [\phi_2^+(y) + \phi_2^-(y)] \\ &= \phi_1^+(x) \phi_2^+(y) + \phi_1^-(x) \phi_2^-(y) + \phi_1^-(x) \phi_2^+(y) + \phi_1^+(x) \phi_2^-(y) \end{aligned}$$

为方使求真空期望值, 应尽量将正频部分放在右边。

$$\begin{aligned} \therefore T \phi_1(x) \phi_2(y) &= \phi_1^-(x) \phi_2^-(y) + [\phi_1^-(x) \phi_2^+(y) + \phi_1^+(x) \phi_2^-(y)] \\ &\quad - \phi_1^+(x) \phi_2^+(y) + \phi_1^-(x) \phi_2^-(y) + \phi_1^-(x) \phi_2^+(y) + \phi_1^+(x) \phi_2^-(y) \\ &= \phi_1^-(x) \phi_2^-(y) + \phi_1^-(x) \phi_2^+(y) + [\phi_1^-(x), \phi_2^+(y)] \\ &\quad + \phi_1^-(x) \phi_2^-(y) + \phi_1^+(x) \phi_2^-(y) \quad (4.33) \end{aligned}$$

在(4.33)中, 所有产生算符都位于湮灭算符左边, 这样的形式称为 normal ordering. 任意的 normal ordering 的真空期望值为 0. 用  $N(\dots)$  代表 normal ordering, 如:

$$N(a_p a_q^\dagger) = a_q^\dagger a_p$$

若  $a_p$  与  $a_q$  交换, 则  $a_p a_q = a_q a_p$ .

例4.3.1中  $\phi_1 \phi_2 \phi_3$  的  $\phi_1$  与  $\phi_3$  不相邻, 同样得一个 Feynman 传播子

$$N\{\phi_1 \phi_2 \phi_3\} = D_F(x_1 - x_3) N\{\phi_2\}$$

对4.3.3取真空期望值, 有贡献的只有完全缩并项。

$$\langle 0 | T \{ \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \phi_3(x_3) \} | 0 \rangle = D_F(x_1 - x_2) D_F(x_2 - x_3) + D_F(x_1 - x_3) D_F(x_2 - x_3)$$

用数学归纳法证明Wick定理

先证明计算:  $n$  个场的正规乘积乘上第  $n+1$  个场满足的关系。

$$N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} = N\{\phi_1 \dots \phi_n\} \phi_{n+1}$$

$n$  个场的正规乘积为: 设所有下指标  $1, 2, \dots, n$  构成集合  $X$ 。

$$N\{\phi_1 \dots \phi_n\} = \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger$$

$$= \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \quad (4.34)$$

现把  $\phi_{n+1}$  代入到正规乘积中。假设  $x_1^0 \geq x_2^0 \geq x_3^0 \geq \dots \geq x_n^0 \geq x_{n+1}^0$

$$N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} = \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger (\phi_{n+1} + \phi_{n+1}^\dagger)$$

$$= \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1} + \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1}^\dagger$$

①中第二项的  $\phi_{n+1}^\dagger$  需要与所有的  $\phi_i$  进行交换, 每交换一次出现一个对易子。

$$\phi_k^\dagger \phi_{n+1}^\dagger = \phi_k^\dagger \phi_{n+1} + \phi_{n+1}^\dagger \phi_k - \phi_{n+1} \phi_k^\dagger$$

$$= \phi_{n+1}^\dagger \phi_k + [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger]$$

$$= \phi_{n+1}^\dagger \phi_k + \phi_k \phi_{n+1} \rightarrow c \text{ 数}$$

一共出现的对易子数目等于  $A$  的元个数。

$$\Rightarrow N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} = \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1} + \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1}^\dagger$$

总的来说  $k$  可取  $1, 2, \dots, n$ 。即:

$$N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} = \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger \phi_{n+1} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

$$= N\{\phi_1 \dots \phi_n \phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n \sum_{A \subset X} \prod_{i \in A} \phi_i \prod_{j \in \bar{A}} \phi_j^\dagger [\phi_k^\dagger, \phi_{n+1}^\dagger] \phi_k$$

如果  $y^0 > x^0$ , 则4.33变成:

$$T \phi_1(x) \phi_2(y) = \phi_2(y) \phi_1(x)$$

$$= [\phi_2^+(y) + \phi_2^-(y)] [\phi_1^+(x) + \phi_1^-(x)]$$

$$= \phi_2^+(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^-(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^+(y) \phi_1^-(x)$$

$$= \phi_2^+(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^-(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^+(y) \phi_1^-(x)$$

$$= \phi_2^+(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^-(x) + \phi_2^-(y) \phi_1^+(x) + \phi_2^+(y) \phi_1^-(x)$$

由于  $[\phi_2^+(y), \phi_1^-(x)] = [\phi_2^-(y), \phi_1^+(x)] = 0$ , 上式与4.33唯一的区别在于  $[\phi_2^-(y), \phi_1^-(x)]$ , 引入新的量 (下面省略下标  $x$ )

$$\overline{\phi(x)\phi(y)} = \begin{cases} [\phi_2^-(y), \phi_1^-(x)] & x^0 > y^0 \\ [\phi_2^+(y), \phi_1^+(x)] & y^0 > x^0 \end{cases}$$

称为缩并, 这个量实际就是 Feynman 传播子, 因为:

$$\langle 0 | T \phi(x) \phi(y) | 0 \rangle = \overline{\phi(x)\phi(y)} \quad x^0 > y^0$$

$$= \overline{\phi(y)\phi(x)} \quad y^0 > x^0$$

缩并总是成对出现, 作用效果如图。4.33可重新写为:

$$T\{\phi(x)\phi(y)\} = N\{\phi(x)\phi(y)\} + \overline{\phi(x)\phi(y)}$$

$$= N\{\phi(x)\phi(y)\} + \overline{\phi(x)\phi(y)} \quad \text{缩并的结果为 } c\text{-number}$$

推广:

$$T\{\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\dots\phi_n(x_n)\}$$

$$= N\{\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\dots\phi_n(x_n)\} + \text{all possible contraction}\}$$

对  $n=4$ ,  $\phi_n = \phi(x_n)$

$$\begin{aligned} T\{\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4\} &= N\{\phi_1\phi_2\phi_3\phi_4\} + \overline{\phi_1\phi_2}\phi_3\phi_4 + \overline{\phi_1\phi_3}\phi_2\phi_4 + \overline{\phi_1\phi_4}\phi_2\phi_3 \\ &\quad + \overline{\phi_2\phi_3}\phi_1\phi_4 + \overline{\phi_2\phi_4}\phi_1\phi_3 + \overline{\phi_3\phi_4}\phi_1\phi_2 + \overline{\phi_1\phi_2}\phi_3\phi_4 + \overline{\phi_1\phi_3}\phi_2\phi_4 + \overline{\phi_1\phi_4}\phi_2\phi_3 \\ &\quad + \overline{\phi_2\phi_3}\phi_1\phi_4 + \overline{\phi_2\phi_4}\phi_1\phi_3 + \overline{\phi_3\phi_4}\phi_1\phi_2 \quad \text{(共17项)} \end{aligned}$$

也恰好是  $n+1$  个场的正规乘积。

$$N\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\} = N\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\} + \sum_{k=1}^n N\{\phi_1\phi_2\dots\phi_k\phi_{n+1}\phi_{k+1}\dots\phi_n\}$$

其中  $x_1^0 \geq x_2^0 \geq \dots \geq x_n^0 \geq x_{n+1}^0$ 。

假设Wick定理对某  $n$  成立, 可证:

$n=1, n=2$  成立。

对  $n+1$  个场有:

$$T\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\} = \phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}$$

$$= T\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\}$$

$$= N\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\} + \text{所有不含}\phi_{n+1}\text{的缩并项}\}$$

$$= N\{\phi_1\phi_2\dots\phi_n\phi_{n+1}\} + \text{所有可能出现的缩并项}$$

来源: 知乎用户 EgSRBT

(侵权删)

$$\begin{aligned}
& \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_1) \cdots \hat{H}'(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}(\tau') \} \rangle \\
= & \prod_{i=1}^l \sum_{k_i \alpha_i n_i} \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{d}_{n_i}^\dagger(\tau_i) t_{k_i \alpha_i n_i}^* \hat{c}_{k_i \alpha_i}(\tau_i) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \\
= & \sum_{k_l \alpha_l n_l} t_{k_l \alpha_l n_l}^* \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_1) \cdots \hat{H}'(\tau_{l-2}) \hat{H}'(\tau_{l-1}) \hat{d}_{n_l}^\dagger(\tau_l) \} \rangle \langle T_c \{ \hat{c}_{k_l \alpha_l}(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \\
+ & \sum_{k_{l-1} \alpha_{l-1} n_{l-1}} t_{k_{l-1} \alpha_{l-1} n_{l-1}}^* \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_1) \cdots \hat{H}'(\tau_{l-2}) \hat{H}'(\tau_l) \hat{d}_{n_{l-1}}^\dagger(\tau_{l-1}) \} \rangle \\
\times & \langle T_c \{ \hat{c}_{k_{l-1} \alpha_{l-1}}(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle + \cdots \\
+ & \sum_{k_1 \alpha_1 n_1} t_{k_1 \alpha_1 n_1}^* \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_2) \cdots \hat{H}'(\tau_{l-1}) \hat{H}'(\tau_l) \hat{d}_{n_1}^\dagger(\tau_1) \} \rangle \langle T_c \{ \hat{c}_{k_1 \alpha_1}(\tau_1) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle
\end{aligned}$$

式中每一个求和项的贡献相同。我们可以将得到 Keldysh 格林函数的化简形式为

$$\begin{aligned}
G_{n,k\alpha}(\tau, \tau') &= \sum_{k_l \alpha_l n_l} \oint_C d\tau_1 (-i) \sum_{l=1}^\infty \frac{(-i)^{l-1}}{(l-1)!} \oint_C d\tau_2 \cdots \oint_C d\tau_l \langle T_c \{ \hat{d}_n(\tau) \hat{H}'(\tau_2) \cdots \hat{H}'(\tau_l) \hat{c}_{k_l \alpha_l}^\dagger(\tau') \} \rangle \\
&\quad t_{k_l \alpha_l n_l}^* (-i) \langle T_c \{ \hat{c}_{k_l \alpha_l}(\tau_l) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \\
&= \sum_m \oint_C d\tau_1 G_{nm}(\tau, \tau_1) t_{kam}^* g_{k\alpha}(\tau_1, \tau)
\end{aligned} \tag{77}$$

式中

$$G_{nm}(\tau, \tau') \equiv -i \langle T_c \{ d_n(\tau) d_m^\dagger(\tau') \} \rangle = -i \langle T_c \{ S_c(-\infty, -\infty) \hat{d}_n(\tau) \hat{d}_m^\dagger(\tau') \} \rangle \tag{78}$$

为散射区域的时圈格林函数,

$$g_{k\alpha}(\tau, \tau') \equiv -i \langle T_c \{ \hat{c}_{k\alpha}(\tau) \hat{c}_{k\alpha}^\dagger(\tau') \} \rangle \tag{79}$$

为独立金属导线的时圈格林函数。

### 2.1.3 电流算符的一般表达式

在上一节中, 电流算符的表达式中出现了小于混合格林函数。我们对公式 22 使用 Langreth 解析延拓理论可以得到

$$G_{nk\alpha}^<(t, t') = \sum_m \int \frac{dw}{2\pi} (G_{nm}^R(w) t_{kam}^* g_{k\alpha}^<(w) + G_{nm}^<(w) t_{kam}^* g_{k\alpha}^A(w)) \tag{80}$$

独立金属导线的格林函数表达式可写为

$$g_{k\alpha}^<(w) = 2\pi i f_\alpha(\epsilon_{k\alpha}) \delta(w - \epsilon_{k\alpha}) \tag{81}$$

$$g_{k\alpha}^A(w) = \frac{1}{w - i\delta - \epsilon_{k\alpha}} \tag{82}$$

式中  $f_\alpha(\epsilon) = (e^{\beta(\epsilon - \mu_\alpha)} + 1)^{-1}$ 。将式 (25,26) 带入电流算符的公式, 我们可以得到

$$J_\alpha = \frac{2e}{\hbar} \text{Re} \sum_{kmn} \int \frac{dw}{2\pi} t_{kam}^* t_{kan} (g_{k\alpha}^<(w) G_{nm}^R(w) + g_{k\alpha}^A(w) G_{nm}^<(w)) \tag{83}$$

从格林函数的定义式我们可以得出如下关系式

$$\begin{aligned}
G^<(w)^\dagger &= -G^<(w) \\
G^R(w)^\dagger &= G^A(w)
\end{aligned}$$

将上面公式带入电流表达式, 可以得到

$$J_\alpha = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{dw}{2\pi} \text{Tr} \Gamma_\alpha(w) \{ f_\alpha(w) [G^R(w) - G^A(w)] + G^<(w) \} \tag{84}$$

式中线宽函数

$$\Gamma_{\alpha, mn}(w) \equiv 2\pi \rho_\alpha(w) t_{kam}^* t_{kan}$$

我们通过引入态密度  $\rho_\alpha(w) \equiv \sum_k \delta(w - \epsilon_{k\alpha})$  来将对 k 的求和转化为积分

$$\sum_k F(\epsilon_{k\alpha}) = \int d\epsilon \rho_\alpha(\epsilon) F(\epsilon)$$

公式 (29) 是通过多端口的量子点（量子点内部考虑费米子相互作用）的稳态电流的表达式。

对于双端口器件，假设两端金属导线通过界面耦合对量子点的影响成正比，即  $\Gamma_L(w) = \lambda\Gamma_R(w)$ ，我们可以得到一个更简单的表达式。首先利用体系达到稳态时有  $J = J_L = -J_R$ ，所以我们可以把流经量子点的电流写成  $J = xJ_L - (1-x)J_R$  的形式，其中  $x$  可以取任意值。电流表达式可以写成

$$J = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{dw}{2\pi} \text{Tr} \Gamma_R(w) [(\lambda x - (1-x))G^<(w) + (\lambda x f_L - (1-x)f_R)(G^R - G^A)]$$

取  $x = \frac{1}{1+\lambda}$ ，中括号里面的第一项抵消，我们可以得到

$$J = \frac{ie}{\hbar} \int \frac{dw}{2\pi} [f_L(w) - f_R(w)] \text{Tr} \left( \frac{\Gamma_L(w)\Gamma_R(w)}{\Gamma_L(w) + \Gamma_R(w)} \right) [G^R(w) - G^A(w)] \quad (85)$$

#### 2.1.4 非相互作用量子点

我们推导了量子点内没有相互作用时电流的另一种表达式。在这种情况下，推迟格林函数满足 Dyson 方程

$$G^R = G_0^R + G_0^R \Sigma^R G^R \quad (86)$$

式中

$$\Sigma_{mn}^R(w) = \sum_{k\alpha} t_{kam}^* g_{k\alpha}^R(w) t_{kan} \quad (87)$$

为不考虑相互作用的隧穿自能。展宽函数和自能的关系式为  $\Gamma = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta} = i(\Sigma^R - \Sigma^A)$ 。  $G_0^R$  为独立量子点的平衡格林函数。

$$G_0^R(w) = (w + i\delta - h)^{-1}$$

换句话说，在不考虑量子点内部费米子相互作用情况下，自能函数只包含金属导线的影响。由 Keldysh 等式我们可以得到小于格林函数满足

$$G^< = G^R \Sigma^< G^A$$

式中小于自能为

$$\Sigma^< = i \sum_{\beta} f_{\beta} \Gamma_{\beta} \quad (88)$$

考虑一个单能级系统，这时  $G, \Gamma, \Sigma$  都是标量。我们可以将  $G^<$  写成准平衡的形式

$$G^< = i\bar{f}A$$

式中  $A = i(G^R - G^A) = G^R \Gamma G^A$  为谱函数，准平衡分布  $\bar{f}$  为

$$\bar{f} = \frac{f_L \Gamma_L + f_R \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R}$$

使用上面推导出的公式，我们可以将电流算符写成如下的形式

$$J = \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta} \int dw [f_{\alpha}(w) - f_{\beta}(w)] T_{\alpha\beta}(w)$$

式中  $T_{\alpha\beta}(w) = \text{Tr} \Gamma_{\alpha}(w) G^R(w) \Gamma_{\beta}(w) G^A(w)$  为透射系数。这是典型的 Landaur 公式。