

量子输运问题的研究: 非平衡 Green 函数和广义 Langevin 方程中的关联函数

苏禹*

中国科学技术大学 化学与材料科学学院, 合肥 安徽 230026

(Dated: 2021 年 6 月 28 日)

摘要: 量子输运是微观和介观体系的非平衡统计物理的一个重要研究问题, 在这篇文章中, 我们回顾了非平衡 Green 函数的一般理论, 并且建立了其运动方程, 给出了热输运体系的稳恒热流表达式。除此之外, 我们还通过直接考察广义 Langevin 方程中的关联函数也给出了同样的结果, 并且比较了两种非平衡统计方法的不同并给出总结。

关键词: 量子热输运; 非平衡 Green 函数; 量子 Langevin 方程

Abstract: The paper provides two different approaches to quantum transport problem, a significant area of non-equilibrium statistical physics in microscopic and mesoscopic regimes. The paper reviews the general theory of non-equilibrium Green functions and obtains the steady-state heat current by establishing the equation of motion. Besides, another aspect also shows the same result, via considering the correlation functions in generalized Langevin equation. The differences of those methods are discussed in the paper.

Keywords: Quantum heat transport; Non-equilibrium Green functions; Quantum Langevin equation

I. 量子输运问题简介

输运现象是物理和化学领域里的重要研究对象, 宏观的输运现象涉及物质、能量、动量、电荷以及角动量等物理量在被研究体系中的交换与定向流动。对于宏观体系的研究, 输运现象在非平衡统计领域中有着至关重要的地位, 尤其是 Onsager 倒易原理等深刻揭示了宏观输运现象的本质。近平衡的宏观输运过程实际上可以视为体系环境相互作用的结果, 其输运的一般性质可由体系和环境的关联函数给出。而对于微观体系, 在纳米尺度上的输运问题也成为近来的研究热点 [1], 对于微观和介观体系, 其性质决定了量子效应不再能够忽略, 经典极限也无法正确成立, 但体系的输运性质仍旧是和体系、环境的关联函数紧密相关的, 因此在量子力学的基础上, 通过考察体系环境的相互作用, 我们在理论上也能够给出量子输运的一般性质。

在本文中, 我们主要考察了量子热输运体系, 其建立于非平衡统计的框架下, 对于其的深入了解是进一步探究量子区域下热力学的重要步骤。本文主要分为两个部分: 在第一部分中, 我们重新回顾了非平衡 Green 函数, 并且根据其性质, 通过运动方程法给出了热输运热流的一般表达式; 在第二部分中, 我们通过将体系-环境纠缠定理推广到非平衡区域后得到的性质重新给出了热流表达式, 在这种方法下, 我们能更明确地看出热输运的性质是来源于体系和环境之间的关联函数, 其具有更明确的物理含义。

II. 非平衡 Green 函数简介

在 20 世纪 60 年代 Schwinger、Keldysh、Kadanoff 等人提出了非平衡 Green 函数理论后, 其被广泛地用于超导、激光、量子输运等非平衡统计领域的研究 [5, 6]。值得注意的是, 在上世纪 80 年代, 我国物理工作者周光召、苏肇冰、于渌以及郝柏林等人对非平衡 Green 函数做了更为体系化的研究 [3, 5]。在这节中, 我们将简单地介绍非平衡 Green 函数的方法, 并且给出运动方程法的一般处理步骤, 最终使用之处理热输运问题。

* suyupilemao@mail.ustc.edu.cn

A. 基本定义

根据量子力学基本原理，一个量子体系可以由体系的密度算符完全确定，其定义为

$$\rho \equiv \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (\text{II.1})$$

这里 $|\psi_n\rangle$ 表示系综中不同的状态，其出现的概率为 p_n . 给定一组完备的正交基 $\{|n\rangle\} (n = 0, 1, 2, \dots)$ ，我们可以将密度算符在这组基下表示，即

$$\rho = \sum_{mn} \rho_{mn} |m\rangle \langle n|, \quad (\text{II.2})$$

这里

$$\rho_{mn} = \langle m | \rho | n \rangle. \quad (\text{II.3})$$

可以验证，密度算符有性质

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \quad \text{且} \quad \rho_{nn} \geq 0. \quad (\text{II.4})$$

对于一个可观测量 \hat{A} ，其系综平均为

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \text{Tr}[\hat{A}(t)\rho], \quad (\text{II.5})$$

其中 $\hat{A}(t)$ 是 Heisenberg 绘景中的算符，其满足 $\hat{A}(t) = U^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t_0) U(t, t_0)$ ，这里用到了 Hamilton 量 H 对应的传播子 $U(t, t_0) = T_+ e^{-i \int_{t_0}^t d\tau H(\tau)}$. 这里的时序算符 T_+ 定义为

$$T_+[\hat{A}(t_1) \hat{A}(t_2)] = \hat{A}(t_1) \hat{A}(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \hat{A}(t_2) \hat{A}(t_1) \theta(t_2 - t_1), \quad (\text{II.6})$$

其中 $\theta(t)$ 是阶跃函数，定义为

$$\theta(t) \equiv \begin{cases} 1, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \\ \frac{1}{2}, & t = 0 \end{cases}. \quad (\text{II.7})$$

求迹操作的循环不变性保证

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \text{Tr}[\hat{A}\rho(t)], \quad (\text{II.8})$$

这里 $\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)$ 是 Schrödinger 绘景下的密度算符。

当体系处于热力学平衡态时，其密度矩阵可以由正则分布描述，即 $\rho = \rho^{\text{eq}} = e^{-\beta H} / \text{Tr} e^{-\beta H}$. 但若要研究非平衡 Green 函数，我们不对系综平均的密度算符做任何假设。

非平衡 Green 函数的定义实际上和平衡 Green 函数的定义在形式上完全相同，其中推迟 Green 函数定义为

$$G_{AB}^{\text{R}}(t_1, t_2) \equiv -i\theta(t_1 - t_2) \langle [\hat{A}(t_1), \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle, \quad (\text{II.9})$$

与其对应的超前 Green 函数定义为

$$G_{AB}^{\text{A}}(t_1, t_2) \equiv i\theta(t_2 - t_1) \langle [\hat{A}(t_1), \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle, \quad (\text{II.10})$$

其中 η 是区分 Fermi 子和 Bose 子的指标。当 $\eta = 1$ 时, 表示 Bose 子, 此时 $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ 表示两个算符的对易子; 当 $\eta = -1$ 时, 表示 Fermi 子, 此时 $[\hat{A}, \hat{B}]_{-1} \equiv \{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ 表示两个算符的反对易子。

除了上述定义, 还有其他四种 Green 函数, 其定义为

$$G_{AB}^{--}(t_1, t_2) \equiv -i\langle T_+ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle, \quad (\text{II.11})$$

$$G_{AB}^{++}(t_1, t_2) \equiv -i\langle T_- \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle, \quad (\text{II.12})$$

$$G_{AB}^{+-}(t_1, t_2) \equiv G_{AB}^{>}(t_1, t_2) \equiv -i\langle \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle, \quad (\text{II.13})$$

$$G_{AB}^{-+}(t_1, t_2) \equiv G_{AB}^{<}(t_1, t_2) \equiv -i\eta \langle \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) \rangle. \quad (\text{II.14})$$

这里 $G^{<}$ 和 $G^{>}$ 分别称为小于 Green 函数和大于 Green 函数。

注意到这里的算符 $\hat{A}(t)$ 和 $\hat{B}(t)$ 均是 Heisenberg 绘景下的算符, 且所有的平均都基于任意的密度算符 ρ . 但是, 使用 ρ 来计算上述的物理量并不是很方便的, 而更优的选择是使用初始的无相互作用下的密度算符 ρ_0 , 为了进一步说明, 我们来考察如下 Hamilton 量

$$H_T(t) = H + H'(t). \quad (\text{II.15})$$

将第二部分视为微扰, 并在相互作用绘景下考虑, 其传播子定义为

$$U_H(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)}, \quad (\text{II.16})$$

$$U_I(t, t_0) = T_+ \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t d\tau H'(\tau) \right\}. \quad (\text{II.17})$$

因此量子系统的态和算符随时间的演化关系为

$$\rho_I(t) = U_I(t, t_0) \rho_I(t_0) U_I^\dagger(t, t_0), \quad (\text{II.18})$$

$$\hat{A}_I(t) = U_H^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t_0) U_H(t, t_0). \quad (\text{II.19})$$

假设在 $t_0 \rightarrow -\infty$ 时, 体系处于无相互作用的状态, 且相互作用是十分缓慢地引入到体系中的。容易证明

$$\langle T_+ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle = \text{Tr} \left\{ \rho_0 T_C \hat{A}_I(t_1^+) \hat{B}_I(t_2^+) \exp \left[-i \int_C d\tau H'(\tau) \right] \right\}. \quad (\text{II.20})$$

这里我们引入了复闭路编时算符 T_C , 其按照图 1 中的积分路径 C 定义时序, 具体为

$$T_C(\hat{A}(t_1^+) \hat{B}(t_2^+)) = T_+(\hat{A}(t_1^+) \hat{B}(t_2^+)), \quad (\text{II.21})$$

$$T_C(\hat{A}(t_1^-) \hat{B}(t_2^-)) = T_-(\hat{A}(t_1^-) \hat{B}(t_2^-)), \quad (\text{II.22})$$

$$T_C(\hat{A}(t_1^+) \hat{B}(t_2^-)) = \hat{B}(t_2^-) \hat{A}(t_1^+). \quad (\text{II.23})$$

这里我们定义了逆编时算符 $T_- \equiv (T_+)^{\dagger}$, 且引入了记号 t^+ 来表示在上半平面的时间, 其可以显式地写作 $t^+ = t + i0^+$ (这里 0^+ 表示一个无限小的正数); 同理 $t^- = t - i0^+$, 表示下半平面的时间。注意到在积分路径 C 中, 积分的路径分为从 $-\infty + i0^+$ 到 $\infty + i0^+$ 的部分 C_1 和从 $\infty - i0^+$ 到 $-\infty - i0^+$ 的部分 C_2 . 但实际上 C_1 的终点和 C_2 起点的位置可以是任意一个大于 t_1 和 t_2 的数。我们记 $\langle (\cdot) \rangle_0 \equiv \text{Tr}[\rho_0(\cdot)]$ 并令

$$S_C \equiv \exp \left[-i \int_C d\tau H'(\tau) \right], \quad (\text{II.24})$$

则有

$$\langle T_+ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle = \langle T_C \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2) S_C \rangle_0. \quad (\text{II.25})$$

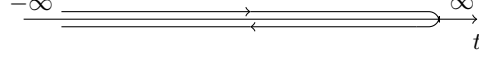


图 1: 图中表示了 T_C 定义的积分路径 C , 其分为两个部分: C_1 和 C_2 . 其中 C_1 表示在上半平面从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的路径; C_2 表示在下半平面从 $+\infty$ 到 $-\infty$ 的路径。

至此, 我们定义复闭路 Green 函数为

$$G_{AB}^C(t_1, t_2) \equiv -i\langle T_C \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \rangle = -i\langle T_C \hat{A}_I(t_1) \hat{B}_I(t_2) S_C \rangle_0, \quad (\text{II.26})$$

此处按照复闭路 C 进行编时, 可以验证由此定义的 Green 函数可以回到之前的四种情形。具体来说: 当 t_1 和 t_2 均处于上半平面时, 有

$$G_{AB}^C(t_1^+, t_2^+) = G_{AB}^{--}(t_1, t_2), \quad (\text{II.27})$$

由于这种情况下编时操作是按照时间顺序进行的, 这类 Green 函数又被称为因果 Green 函数; 当 t_1 和 t_2 均处于下半平面时, 有

$$G_{AB}^C(t_1^-, t_2^-) = G_{AB}^{++}(t_1, t_2); \quad (\text{II.28})$$

当 t_1 处于上半平面而 t_2 处于下半平面时, 即

$$G_{AB}^C(t_1^+, t_2^-) = G_{AB}^{<}(t_1, t_2); \quad (\text{II.29})$$

同理, 当 t_1 处于下半平面而 t_2 处于上半平面时, 有

$$G_{AB}^C(t_1^-, t_2^+) = G_{AB}^{>}(t_1, t_2). \quad (\text{II.30})$$

如此定义的复闭路 Green 函数可以展开为

$$iG_{AB}^C(t_1, t_2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_C d\tau_1 \int_C d\tau_2 \cdots \int_C d\tau_n \langle T_C \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) H'(\tau_1) H'(\tau_2) \cdots H'(\tau_n) \rangle_0. \quad (\text{II.31})$$

可以看出如此定义的复闭路非平衡 Green 函数和平衡 Green 函数有着相同的形式, 因此我们可以在此基础上使用微扰理论并建立相应的 Feynman 图形技术来计算 Green 函数。但我们在这里感兴趣的问题为量子体系的输运问题, 对于这类问题, 使用建立 Green 函数运动方程的方法在很多情况下相比于 Feynman 图方法是很直接的, 因此在之后的章节中, 我们将主要的精力集中于非平衡 Green 函数运动方程的建立。

B. 非平衡 Green 函数的运动方程

在输运问题的研究中, 我们常常考虑如下的 Hamilton 量:

$$H = H_0 + H_1, \quad (\text{II.32})$$

和之前的描述类似, 当 $t \rightarrow -\infty$ 时, $H_1 = 0$, 这里对应的是无相互作用的体系的态 ρ_0 , 即体系的各个组分之间不耦合在仪器。但随着体系的演化, H_1 以绝热的方式 (即十分缓慢地) 加在体系上, 这样就导致量体系中某些物理量以流的形式发生了输运。

根据传播子满足的运动方程

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = -iH(t)U(t, t_0), \quad (\text{II.33})$$

可以得到推迟 Green 函数的运动方程为

$$i\frac{\partial}{\partial t_1}G_{AB}^R(t_1, t_2) = \delta(t_1 - t_2)\langle[\hat{A}(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle - i\langle[[\hat{A}(t_1), H(t_1)], \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle\theta(t_1 - t_2). \quad (\text{II.34})$$

这里一个关键要素在于 $[\hat{A}(t_1), H]_\eta$ 的计算, 对于 Hamilton 量 H , 其无相互作用的部分可以在二次量子化下写作产生和湮灭算符的组合。例如, 对于 Fermi 子体系, H_0 可以表示为

$$H_0^{\text{Fermion}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}}, \quad (\text{II.35})$$

其中 $\hat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger$ 和 $\hat{c}_{\mathbf{k}}$ 分别表示动量为 \mathbf{k} 的 Fermi 子的产生和湮灭算符, $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 表示相应的能量。对于 Bose 子体系, H_0 可以表示为

$$H_0^{\text{Boson}} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad (\text{II.36})$$

其中 $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger$ 和 $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ 分别表示振动模为 $\omega_{\mathbf{k}}$ 的 Bose 子的产生和湮灭算符, $\omega_{\mathbf{k}}$ 表示相应的能量。注意到, Fermi 子和 Bose 子的产生和湮灭算符满足不同的对易关系, 即

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger]_\eta = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (\text{II.37a})$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}'}]_\eta = 0, \quad (\text{II.37b})$$

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger]_\eta = 0. \quad (\text{II.37c})$$

这里我们将 H_0 总结为统一的形式

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{II.38})$$

进一步地, 我们假设算符 \hat{A} 为产生或者湮灭算符 \hat{a}_j^\dagger (\hat{a}_j) 的线性组合, 因此我们只需要考虑单个产生或湮灭算符的方程, 则有

$$[\hat{a}_j, H_0] = \epsilon_j \hat{a}_j, \quad (\text{II.39})$$

$$[\hat{a}_j^\dagger, H_0] = -\epsilon_j \hat{a}_j^\dagger. \quad (\text{II.40})$$

并且, 我们记 $G_{jB}^R(t_1, t_2) \equiv -i\langle[\hat{a}_j^\dagger(t_1), \hat{B}(t_2)]\rangle\theta(t_1 - t_2)$ 和 $G_{jB}^B(t_1, t_2) \equiv -i\langle[\hat{a}_j(t_1), \hat{B}(t_2)]\rangle\theta(t_1 - t_2)$, 则我们可以将重新表述为

$$i\frac{\partial}{\partial t_1}G_{jB}^R(t_1, t_2) + G_{jB}^B(t_1, t_2) = \delta(t_1 - t_2)\langle[\hat{a}_j^\dagger(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle - i\langle[[\hat{a}_j^\dagger(t_1), H_1(t_1)], \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle\theta(t_1 - t_2). \quad (\text{II.41})$$

其形式解为

$$G_{jB}^B(t_1, t_2) = g_j^R(t_1 - t_2)\langle[\hat{a}_j^\dagger(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle + \int_{-\infty}^{t_1} d\tau g_j^R(t_1 - \tau)G_{H_{j1}B}^R(\tau, t_2), \quad (\text{II.42})$$

这里我们定义了两个推迟 Green 函数:

$$g_j^R(t_1 - t_2) \equiv -ie^{i\epsilon_j(t_1 - t_2)}\theta(t_1 - t_2), \quad (\text{II.43})$$

$$G_{H_{j1}B}^R(t_1, t_2) \equiv -i\langle[[\hat{a}_j^\dagger(t_1), H_1(t_1)], \hat{B}(t_2)]_\eta\rangle\theta(t_1 - t_2). \quad (\text{II.44})$$

其中 g^G 是自由粒子对应的 Green 函数。对于湮灭算符，方程的形式解为

$$G_{jB}^R(t_1, t_2) = g_j^R(t_1 - t_2) \langle [a_j(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle + \int_{-\infty}^{t_1} d\tau g_j^R(t_1 - \tau) G_{H_{j1}B}^R(\tau, t_2), \quad (\text{II.45})$$

其中

$$g_j^R(t_1 - t_2) \equiv -ie^{-i\epsilon_j(t_1 - t_2)} \theta(t_1 - t_2), \quad (\text{II.46})$$

$$G_{H_{j1}B}^R(t_1, t_2) \equiv -i \langle [[\hat{a}_j(t_1), H_1(t_1)], \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle \theta(t_1 - t_2). \quad (\text{II.47})$$

在这种情况下，我们可以将这里的积分区域拓展到复闭路 C ，则有

$$G_{j\pm B}^R(t_1, t_2) = g_{j\pm}^R(t_1 - t_2) \langle [a_j^\pm(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle + \int_C d\tau g_{j\pm}^R(t_1 - \tau) G_{H_{j\pm 1}B}^R(\tau, t_2), \quad (\text{II.48})$$

这里我们使用记号 \pm 表示湮灭/产生对应的情形，而该积分方程就是复闭路 Green 函数 $G_{AB}^C(t_1, t_2)$ 的运动方程的形式解。更一般地，其形式解可以写作

$$G_{j\pm B}^C(t_1, t_2) = g_{j\pm}^C(t_1 - t_2) \langle [a_j^\pm(t_2), \hat{B}(t_2)]_\eta \rangle + \int_C d\tau g_{j\pm}^C(t_1 - \tau) G_{H_{j\pm 1}B}^C(\tau, t_2). \quad (\text{II.49})$$

这就是在对 H_0 和 \hat{A} 作出上述限制下的 Dyson 方程，其更一般的形式可以通过微扰展开的方式得到。但对于复闭路的 Green 函数，其并不对应于真实物理量的计算，若要回到真实的物理体系，我们需要将复闭路 Green 函数重新关联回实时 Green 函数；另一方面，式 (II.49) 满足非平衡 Green 函数的运动方程还需要更为严格的说明。基于上述的要求，在下一个小节中我们将阐述 Langreth 定理来对上述问题进行回答。

C. Langreth 定理

Langreth 定理是将复闭路 Green 函数关联回实时 Green 函数的重要定理，其可以说是非平衡 Green 数理论中最关键的定理。

Langreth 定理陈述如下：如果复闭路 Green 函数满足

$$G(t_1, t_2) = \int_C dt G_1(t_1, t) G_2(t, t_2), \quad (\text{II.50})$$

则有四类 Green 函数满足

$$G^<(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [G_1^R(t_1, t) G_2^<(t, t_2) + G_1^<(t_1, t) G_2^A(t, t_2)], \quad (\text{II.51a})$$

$$G^>(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [G_1^R(t_1, t) G_2^>(t, t_2) + G_1^>(t_1, t) G_2^A(t, t_2)], \quad (\text{II.51b})$$

$$G^R(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^R(t_1, t) G_2^R(t, t_2), \quad (\text{II.51c})$$

$$G^A(t_1, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^A(t_1, t) G_2^A(t, t_2). \quad (\text{II.51d})$$

通常会将其简记为

$$(G_1 G_2)^< = G_1^R G_2^< + G_1^< G_2^A, \quad (\text{II.52a})$$

$$(G_1 G_2)^> = G_1^R G_2^> + G_1^> G_2^A, \quad (\text{II.52b})$$

$$(G_1 G_2)^R = G_1^R G_2^R, \quad (\text{II.52c})$$

$$(G_1 G_2)^A = G_1^A G_2^A. \quad (\text{II.52d})$$

我们首先来证明第一个式子：根据回路积分的性质，对于时间 $t > \max[\text{Re } t_1, \text{Re } t_2]$ 的积分抵消，这里我们不妨设 $\text{Re } t_2 > \text{Re } t_1$ 。因此有

$$G^<(t_1, t_2) = \int_{C_1} dt G_1(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) + \int_{C_1} dt G_1^<(t_1^+, t) G_2(t, t_2^-), \quad (\text{II.53})$$

这里的闭路 C_1 和 C_2 的定义如图 2 所示。进一步地，对于第一项可以按照图 3 继续划分成

$$\begin{aligned} & \int_{C_1} dt G_1(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) \\ &= \int_{-\infty}^{t_1} dt G_1^>(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) + \int_{t_1}^{-\infty} dt G_1^<(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t_1 - t) G_1^>(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) + \int_{\infty}^{-\infty} dt \theta(t_1 - t) G_1^<(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^R(t_1, t) G_2^<(t, t_2). \end{aligned} \quad (\text{II.54})$$

通过同样的处理方法，我们可以得到

$$\int_{C_1} dt G_1(t_1^+, t) G_2^<(t, t_2^-) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^<(t_1, t) G_2^A(t, t_2). \quad (\text{II.55})$$

同理，我们可以得到对于大于 Green 函数满足第二个式子。

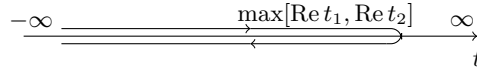


图 2: 闭路 C_1 的积分路径。

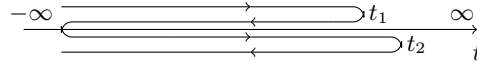


图 3: 闭路 C_2 所对应的积分路径。

接下来，我们需要继续证明第三个式子。根据推迟 Green 函数的定义，我们有

$$G^R(t_1, t_2) = \theta(t_1 - t_2) [G^>(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2)]. \quad (\text{II.56})$$

则

$$\begin{aligned} G^R(t_1, t_2) &= \theta(t_1 - t_2) [G^>(t_1, t_2) - G^<(t_1, t_2)] \\ &= \theta(t_1 - t_2) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^R(t_1, t) [G_2^>(t, t_2) - G_2^<(t, t_2)] + [G_1^>(t_1, t) - G_1^<(t_1, t)] G_2^A(t, t_2) \right\} \\ &= \theta(t_1 - t_2) \left\{ \int_{t_2}^{t_1} dt [G_1^>(t_1, t) - G_1^<(t_1, t)] [G_2^>(t, t_2) - G_2^<(t, t_2)] \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt G_1^R(t_1, t) G_2^R(t, t_2). \end{aligned} \quad (\text{II.57})$$

同理，我们可以得到超前 Green 函数所满足的 Langreth 定理。至此，我们证明了所有的复编时 Green 函数回到实时 Green 函数的关系。

从 Langreth 定理可以看出, 复闭路推迟 Green 函数满足的关系和实时 Green 函数相同, 因此我们对于从式 (II.48) 和式 (II.49) 有了更好的说明。根据式 (II.49) 给出的复闭路推迟 Green 函数关联到实时 Green 函数的积分方程正好满足推迟 Green 函数的运动方程, 即式 (II.34)。但 Langreth 更为直接的应用在于复闭路 Dyson 方程的研究, 根据 Dyson 方程和 Langreth 定理给出的 Keldysh 方程描述了非平衡体系动力学的一般性质 [2]。除此之外, 我们还可以证明通过运动方程法给出的结果是和 Dyson 方程相同的, 但 Dyson 方程可以给出更为一般情况下的结果, 不过其计算较为复杂。值得注意的是, 在这里由于平衡态体系和非平衡态体系可以有着相同的 Hamilton 量, 因此对于平衡态 Green 函数运动方程的形式解, 我们可以直接通过积分回路延拓的方法得到非平衡 Green 函数所满足的积分方程。

根据非平衡 Green 函数满足的性质, 我们可以总结运动方程法处理问题的一般途径为:

1. 写出平衡态 Green 函数满足的运动方程。
2. 求出其形式解。
3. 把时间积分延拓到复闭路上, 以得到复编时的非平衡 Green 函数。
4. 用 Langreth 定理将它关联回实时 Green 函数。

但我们通过运动方程法给出的仍旧是 Green 函数直接的关系, 如果我们需要进一步地计算 Green 函数, 那么我们可以采用 Feynman 图或者运动方程演化的方法。对于运动方程的演化, 基于 Kubo 和 Tanimura 的级联运动方程, 严以京、徐瑞雪等人发展了耗散子运动方程的方法, 该方法可以实现精度较高的量子体系的演化, 因此可以用于计算 Green 函数; 但运动方程的方法计算精度大、计算速度慢, 因此对于大体系的计算, 图形技术的方法至关重要。

III. 热输运问题的 Green 函数方法

在本节中, 我们着重于使用非平衡 Green 函数方法处理 Bose 子的输运问题, 即热输运问题。非平衡 Green 函数处理热输运体系的方法是十分经典的方法, 本节中我们使用运动方程法给出热输运问题的热流的表达式。

在热输运问题中, 我们考察如下的 Hamilton 量

$$H_T = H_S + h_B + H_{SB} = H_S + \sum_{\alpha} h_{\alpha} + \sum_{\alpha u} \hat{Q}_u \hat{F}_{\alpha u}, \quad (\text{III.1})$$

其中 H_S 是体系的 Hamilton 量且 $\{\hat{Q}_u\}$ 是耗散模。这里的环境为 Gauss-Wick 类环境, 满足

$$h_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_j \omega_{\alpha j} (\hat{p}_{\alpha j}^2 + \hat{x}_{\alpha j}^2) \quad \text{且} \quad \hat{F}_{\alpha u} = \sum_j c_{\alpha u j} \hat{x}_{\alpha j}, \quad (\text{III.2})$$

这里 $\alpha = L, R$, 表示左右热库, 其均达到热平衡态、具有温度 $\beta_{\alpha} \equiv 1/k_B T_{\alpha}$ 。定义环境的湮灭算符为

$$\hat{a}_{\alpha j}^{\dagger} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x}_{\alpha j} + i \hat{p}_{\alpha j}), \quad (\text{III.3})$$

则产生算符为 $\hat{a}_{\alpha j}^{\dagger}$ 。因此环境可以表示为

$$h_{\alpha} = \sum_j \omega_{\alpha j} \left(\hat{a}_{\alpha j}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha j} + \frac{1}{2} \right) \quad \text{且} \quad \hat{F}_{\alpha u} = \frac{1}{2} \sum_j g_{\alpha u j} (\hat{a}_{\alpha j} + \hat{a}_{\alpha j}^{\dagger}). \quad (\text{III.4})$$

我们重新定义了系数为 $g_{\alpha u j} \equiv \sqrt{2} c_{\alpha u j}$ 。热输运中的热流定义为

$$J_{\alpha}(t) \equiv -\langle \dot{h}_{\alpha}(t) \rangle = -i \sum_u \langle \hat{Q}_u [\hat{F}_{\alpha u}(t), h_{\alpha}(t)] \rangle, \quad (\text{III.5})$$

结合产生湮灭算符的性质，可以得到

$$J_\alpha(t) = \frac{1}{2} \sum_j \sum_u g_{\alpha u j} \omega_{\alpha j} [-i \langle \hat{a}_{\alpha j}(t) \hat{Q}_u(t) \rangle + \text{c.c.}] \equiv \sum_{ju} g_{\alpha u j} \omega_{\alpha j} \text{Re } G_{\alpha j, u}^<(t, t). \quad (\text{III.6})$$

其中我们使用了小于 Green 函数的定义，即

$$G_{\alpha j, u}^<(t, t') \equiv -i \langle \hat{a}_{\alpha j}(t) \hat{Q}_u(t') \rangle. \quad (\text{III.7})$$

由我们之前的讨论以及对易关系 $[\hat{a}_{\alpha j}(t), \hat{Q}_u(t)] = 0$ 和

$$\sum_u [\hat{a}_{\alpha j}(t), \hat{Q}_u \hat{F}_{\alpha u}(t)] = \frac{1}{2} \sum_u g_{\alpha u j} \hat{Q}_u(t), \quad (\text{III.8})$$

我们可以得到复闭路 Green 函数的积分方程为

$$G_{\alpha j, u}^C(t, t') = \frac{1}{2} \sum_v g_{\alpha v j} \int_C d\tau g_{\alpha j}^C(t - \tau) G_{vu}^C(\tau, t'), \quad (\text{III.9})$$

其中定义了

$$G_{vu}^C(t, t') \equiv -i \langle T_C \hat{Q}_v(t) \hat{Q}_u(t') \rangle \quad (\text{III.10})$$

和

$$g_{\alpha j}^C(t - t') \equiv -i \langle T_C \hat{a}_{\alpha j}(t) \hat{a}_{\alpha j}^\dagger(t') \rangle, \quad (\text{III.11})$$

且满足

$$g_{\alpha j}^R(t - t') = -i e^{-i\omega_{\alpha j}(t-t')} \theta(t - t'). \quad (\text{III.12})$$

这里，我们使用 Langreth 定理将其关联回实时 Green 函数，即

$$G_{\alpha j, u}^<(t, t') = \frac{1}{2} \sum_v g_{\alpha v j} \int_{-\infty}^t d\tau g_{\alpha j}^R(t - \tau) G_{vu}^<(\tau, t') + g_{\alpha j}^<(t - \tau) G_{vu}^A(\tau, t'). \quad (\text{III.13})$$

稳态时 Green 函数有平移对称性，因此可以得到

$$G_{\alpha j, u}^<(t) = \frac{1}{2} \sum_v g_{\alpha v j} \int_0^\infty d\tau g_{\alpha j}^R(\tau) G_{vu}^<(t - \tau) + g_{\alpha j}^<(\tau) G_{vu}^A(t - \tau). \quad (\text{III.14})$$

根据 Green 函数 $g_{\alpha j}^C(t - t')$ 在平衡态下的性质，我们可以得到

$$g_{\alpha j}^<(t - t') = -i e^{-i\omega_{\alpha j}(t-t')} \langle \hat{a}_{\alpha j}^\dagger \hat{a}_{\alpha j} \rangle, \quad (\text{III.15})$$

因此有

$$G_{\alpha j, u}^<(t) = -\frac{i}{2} \sum_v g_{\alpha v j} \int_0^\infty d\tau \left[\theta(\tau) G_{vu}^<(t - \tau) + \langle \hat{a}_{\alpha j}^\dagger \hat{a}_{\alpha j} \rangle G_{vu}^A(t - \tau) \right] e^{-i\omega_{\alpha j}\tau}, \quad (\text{III.16})$$

且根据

$$G_{vu}^A(t - \tau) = i\theta(\tau - t) \langle [\hat{Q}_v(t - \tau), \hat{Q}_u] \rangle, \quad (\text{III.17})$$

我们可以得到热流的稳态表达式为

$$J_\alpha = \frac{2}{\pi} \sum_{uv} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega}{e^{\beta_\alpha \omega} - 1} J_{uv}^\alpha(\omega) C_{uv}(\omega). \quad (\text{III.18})$$

这里定义了环境的谱函数

$$C_{uv}(\omega) \equiv \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \hat{Q}_u(t) \hat{Q}_v(0) \rangle e^{i\omega t} \quad (\text{III.19})$$

和环境谱密度函数

$$J_{uv}^\alpha(\omega) \equiv \frac{\pi}{2} \sum_j c_{\alpha u j} c_{\alpha v j} [\delta(\omega - \omega_{\alpha j}) - \delta(\omega + \omega_{\alpha j})]. \quad (\text{III.20})$$

注意到，温衡热流可以表达为

$$J_\alpha = \frac{2}{\pi} \sum_{uv} \int_0^\infty d\omega \omega J_{uv}^\alpha(\omega) [\bar{n}_\alpha(\omega) C_{uv}(\omega) - (\bar{n}_\alpha(\omega) + 1) C_{uv}(-\omega)], \quad (\text{III.21})$$

其中 $\bar{n}_\alpha(\omega)$ 是 Bose 分布，即

$$\bar{n}_\alpha(\omega) = \frac{1}{e^{\beta_\alpha \omega} - 1}. \quad (\text{III.22})$$

这就是热输运所对应的 Landauer 公式 [1]。

IV. 热输运的 Langevin 方程方法

从非平衡 Green 函数对于输运问题的研究，我们可以看出 Green 函数实际上作为关联函数的推广，对于其的研究可以给出体系和环境之间的联系，这恰恰是输运体系的关键。另一方面，体系和环境的研究最为直接的方式是对于开放体系的统计研究，在本章中，我们将通过热输运体系所满足的 Langevin 方程来对非平衡 Green 函数进行更深层次的理解。在整个处理中，其中关键步骤在于产生、湮灭部分的分解，并且我们利用了 Bogoliubov 变换，将有限温体系映射到有效的真空态，对响应和关联函数给出了较为方便的处理方法。

A. Langevin 方程的建立

这里我们依旧考虑式 (III.1) 给出的 Hamilton 量。在这里，我们在环境的相互作用绘景下考虑问题，其中一个重要的性质来自于等式

$$\phi_{uv}^\alpha(t) \equiv i[\hat{F}_{\alpha u}^\text{B}(t), \hat{F}_{\alpha v}^\text{B}(0)] = \sum_j c_{\alpha u j} c_{\alpha v j} \sin(\omega_{\alpha j} t), \quad (\text{IV.1})$$

这里用到了 $\hat{F}_{\alpha u}^\text{B}(t) \equiv e^{ih_\text{B}(t-t_0)} \hat{F}_{\alpha u} e^{-ih_\text{B}(t-t_0)} = e^{ih_\alpha t} \hat{F}_{\alpha u} e^{-ih_\alpha(t-t_0)}$ 。可以看出，这里定义的环境响应函数 $\phi_{uv}^\alpha(t)$ 是个 c 数而不是 q 数，因此其可以重新表示为

$$\phi_{uv}^\alpha(t) = i\langle [\hat{F}_{\alpha u}^\text{B}(t), \hat{F}_{\alpha v}^\text{B}(0)] \rangle_\alpha, \quad (\text{IV.2})$$

这里 $\langle (\cdot) \rangle_\alpha \equiv \text{tr}_\text{B}[(\cdot)e^{-\beta_\alpha h_\alpha}] / \text{tr}_\text{B} e^{-\beta_\alpha h_\alpha}$ 。环境响应函数相应的谱密度函数定义为

$$J_{uv}^\alpha(\omega) \equiv \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [\hat{F}_{\alpha u}^\text{B}(t), \hat{F}_{\alpha v}^\text{B}(0)] \rangle_\alpha = \frac{\pi}{2} \sum_j c_{\alpha u j} c_{\alpha v j} [\delta(\omega - \omega_{\alpha j}) - \delta(\omega + \omega_{\alpha j})]. \quad (\text{IV.3})$$

可以看出 $J_{uv}^\alpha(\omega) = J_{vu}^\alpha(\omega) = -J_{uv}^\alpha(-\omega)$.

根据之前的定义, 在 Heisenberg 绘景下, 一个可观测量的时间依赖定义为 $\hat{A}(t) \equiv e^{iH_T(t-t_0)} \hat{A} e^{-iH_T(t-t_0)}$, 则我们可以得到运动方程, 即 Langevin 方程为

$$\ddot{\hat{x}}_{\alpha j}(t) = -\omega_{\alpha j}^2 \hat{x}_{\alpha j}(t) - \omega_{\alpha j} \sum_u c_{\alpha u j} \hat{Q}_u(t), \quad (\text{IV.4})$$

其形式解为

$$\hat{x}_{\alpha j}(t) = \hat{x}_{\alpha j} \cos[\omega_{\alpha j}(t-t_0)] + \hat{p}_{\alpha j} \sin[\omega_{\alpha j}(t-t_0)] - \sum_u c_{\alpha u j} \int_{t_0}^t d\tau \sin[\omega_{\alpha j}(t-\tau)] \hat{Q}_u(\tau). \quad (\text{IV.5})$$

因此, 我们有

$$\hat{F}_{\alpha u}(t) = \hat{F}_{\alpha u}^{\text{B}}(t) - \sum_v \int_{t_0}^t d\tau \phi_{uv}^\alpha(t-\tau) \hat{Q}_v(\tau). \quad (\text{IV.6})$$

同样地, 热流算符定义为

$$\hat{J}_\alpha \equiv -\frac{dh_\alpha}{dt} = \sum_u \hat{Q}_u \dot{\hat{F}}_{\alpha u}, \quad (\text{IV.7})$$

这里 $\dot{\hat{F}}_{\alpha u} \equiv i[H_T, \hat{F}_{\alpha u}] = i[h_\alpha, \hat{F}_{\alpha u}]$. 而稳恒热流为

$$J_\alpha \equiv \langle \hat{J}_\alpha \rangle = \sum_u \langle \hat{Q}_u \dot{\hat{F}}_{\alpha u} \rangle, \quad (\text{IV.8})$$

因此我们的主要的目标为 $\langle \hat{Q}_u \dot{\hat{F}}_{\alpha u} \rangle$ 的计算。

B. 热态的纯化和 Bogoliubov 变换

对于一个混态系统, 其可以看作是一个更高维的 Hilbert 空间的约化密度算符 [4]. 例如, 对于一个纠缠态, 当将其的一个自由度约化求偏迹后, 其约化成某个混态. 反之, 对于一个混态, 我们可以通过纯化的方式得到一个纯态. 对于一个热平衡态, 其密度算符为

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr} e^{-\beta H}}. \quad (\text{IV.9})$$

对于热输运体系的环境, 其处于热平衡态, 我们考察其某一个振动模 $\omega_{\alpha k}$ 的密度算符

$$\rho_{\alpha k} \equiv \frac{e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha k} \hat{a}_{\alpha k}^\dagger \hat{a}_{\alpha k}}}{Z_{\alpha k}} = \sum_{n_{\alpha k}=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha k} n_{\alpha k}}}{Z_{\alpha k}} |n_{\alpha k}\rangle \langle n_{\alpha k}|, \quad (\text{IV.10})$$

这里 $Z_{\alpha k} \equiv \text{Tr} e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha k} \hat{a}_{\alpha k}^\dagger \hat{a}_{\alpha k}} = (1 - e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha k}})^{-1}$, 并且这里定义了 $|n_{\alpha k}\rangle \equiv (\hat{a}_{\alpha j}^\dagger)^{n_{\alpha k}} |0_{\alpha j}\rangle / \sqrt{n_{\alpha k}!}$ 且 $|0_{\alpha j}\rangle$ 是真真空. 构建纯态为

$$|\xi_{\alpha k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z_{\alpha k}}} \sum_{n_{\alpha k}=0}^{\infty} e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha k} n_{\alpha k}/2} |n_{\alpha k}\rangle \otimes |n_{\alpha k}\rangle', \quad (\text{IV.11})$$

这里 $|n_{\alpha k}\rangle' \equiv (\hat{b}_{\alpha j}^\dagger)^{n_{\alpha k}} |0_{\alpha k}\rangle' / \sqrt{n_{\alpha k}!}$ 和相应的产生 (湮灭) 算符 $\hat{b}_{\alpha k}^\dagger$ ($\hat{b}_{\alpha k}$) 构造了纯化的辅助 Fock 空间, 可以验证

$$\rho_{\alpha k} = \text{tr}'(|\xi_{\alpha k}\rangle \langle \xi_{\alpha k}|), \quad (\text{IV.12})$$

这里的 tr' 表示对于辅助自由度的约化。对于多个振动模的情形，密度算符为

$$\rho_\alpha = \prod_k \otimes \rho_{\alpha k}. \quad (\text{IV.13})$$

接下来我们通过 Bogoliubov 变换将热库映射到零温的有效热库，具体操作为：定义变换

$$\hat{a}_{\alpha j} = \sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{c}_{\alpha j} + \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{d}_{\alpha j}^\dagger, \quad (\text{IV.14a})$$

$$\hat{b}_{\alpha j} = \sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{d}_{\alpha j} + \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{c}_{\alpha j}^\dagger, \quad (\text{IV.14b})$$

这里定义了 $\bar{n}_\alpha(\omega_{\alpha j}) \equiv \bar{n}_{\alpha j}$ ，其逆变换为

$$\hat{c}_{\alpha j} = \sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{a}_j - \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{b}_{\alpha j}, \quad (\text{IV.15a})$$

$$\hat{d}_{\alpha j} = \sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{b}_j - \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{a}_{\alpha j}, \quad (\text{IV.15b})$$

可以验证

$$[\hat{c}_{\alpha j}, \hat{c}_{\alpha k}^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (\text{IV.16a})$$

$$[\hat{d}_{\alpha j}, \hat{d}_{\alpha k}^\dagger] = \delta_{jk}, \quad (\text{IV.16b})$$

因此可以得到

$$\hat{c}_{\alpha j} |\xi_{\alpha j}\rangle = 0, \quad (\text{IV.17a})$$

$$\hat{d}_{\alpha j} |\xi_{\alpha j}\rangle = 0, \quad (\text{IV.17b})$$

这里用到了 $\bar{n}_{\alpha j} = e^{-\beta_\alpha \omega_{\alpha j}} (\bar{n}_{\alpha j} + 1)$ 。因此，在 $\hat{c}_{\alpha j}$ 和 $\hat{d}_{\alpha j}$ 下，纯态 $|\xi_{\alpha j}\rangle$ 可以看作是有效的真空态，定义其表示为

$$|\xi_{\alpha j}\rangle = |0_{\alpha j}\rangle_c |0_{\alpha j}\rangle'_d, \quad (\text{IV.18})$$

这里 $\hat{c}_{\alpha j} |0_{\alpha j}\rangle_c = \hat{d}_{\alpha j} |0_{\alpha j}\rangle'_d = 0$ 。

在 Bogoliubov 变换下，由式 (III.1) 给出的 Hamilton 量可以表示为

$$H_T = H_S + \sum_\alpha h'_\alpha + \sum_{\alpha u} \hat{Q}_u \hat{F}_{\alpha u}, \quad (\text{IV.19})$$

其中

$$h'_\alpha = \frac{1}{2} \sum_j \omega_{\alpha j} (\hat{c}_{\alpha j}^\dagger \hat{c}_{\alpha j} - \hat{d}_{\alpha j}^\dagger \hat{d}_{\alpha j}), \quad (\text{IV.20})$$

且

$$\hat{F}_{\alpha u} = \sum_j c_{\alpha u j} (\sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{y}_{\alpha j} + \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{z}_{\alpha j}), \quad (\text{IV.21})$$

这里定义了

$$\hat{y}_{\alpha j} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{c}_{\alpha j} + \hat{c}_{\alpha j}^\dagger), \quad (\text{IV.22})$$

$$\hat{z}_{\alpha j} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{d}_{\alpha j} + \hat{d}_{\alpha j}^\dagger), \quad (\text{IV.23})$$

至此，我们构建了零温下的有效环境和总的 Hamilton 量。

C. 稳恒热流

首先, 我们将热库算符 $\hat{F}_{\alpha u}$ 按照产生和湮灭算符 $(+, -)$ 分解为

$$\hat{F}_{\alpha u} = \sum_{\sigma=+,-} \hat{F}_{\alpha u}^{\sigma} = \hat{F}_{\alpha u}^{+} + \hat{F}_{\alpha u}^{-}, \quad (\text{IV.24})$$

并且我们记 $\hat{a}^{\dagger} \equiv \hat{a}^{+}$ 和 $\hat{a}^{-} \equiv (\hat{a}^{+})^{\dagger}$, \hat{a} 代表所有定义过的产生湮灭算符. 因此我们可以有

$$\hat{F}_{\alpha u}^{\sigma} = \hat{F}_{\alpha u}^{\text{B};\sigma} - \sum_v \int_{t_0}^t d\tau \phi_{uv}^{\alpha;\sigma}(t-\tau) \hat{Q}_v(\tau). \quad (\text{IV.25})$$

这里, 根据 Bogoliubov 变换定义的有效真空态, 我们有

$$\hat{F}_{\alpha u}^{\sigma} = \sum_j \frac{c_{\alpha u j}}{\sqrt{2}} (\sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{c}_{\alpha j}^{\sigma} + \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{d}_{\alpha j}^{\sigma}), \quad (\text{IV.26})$$

并且有

$$\hat{F}_{\alpha u}^{\text{B};\sigma}(t) = \sum_j \frac{c_{\alpha u j}}{\sqrt{2}} (\sqrt{1 + \bar{n}_{\alpha j}} \hat{c}_{\alpha j}^{\sigma} e^{i\omega_{\alpha j} t} + \sqrt{\bar{n}_{\alpha j}} \hat{d}_{\alpha j}^{\sigma} e^{-i\omega_{\alpha j} t}), \quad (\text{IV.27})$$

故由环境响应函数的定义我们可以得到

$$\phi_{uv}^{\alpha;\sigma}(t) = \frac{1}{2} \sum_j c_{\alpha u j} c_{\alpha v j} [\sin(\omega_{\alpha j} t) - \sigma i (1 + 2\bar{n}_{\alpha j}) \cos(\omega_{\alpha j} t)], \quad (\text{IV.28})$$

因此,

$$\dot{\hat{F}}_{\alpha u}^{\sigma}(t) = \dot{\hat{F}}_{\alpha u}^{\text{B};\sigma}(t) - \sum_v \int_{t_0}^t d\tau \dot{\phi}_{uv}^{\alpha;\sigma}(t-\tau) \hat{Q}_v(\tau) + \sigma i \sum_{vj} c_{\alpha u j} c_{\alpha v j} \left(\bar{n}_{\alpha j} + \frac{1}{2} \right) \hat{Q}_v(t). \quad (\text{IV.29})$$

至此, 我们可以得到

$$\langle \hat{Q}_u \dot{\hat{F}}_{\alpha u} \rangle = \langle \hat{Q}_u \dot{\hat{F}}_{\alpha u}^{+} \rangle + \text{c.c.}, \quad (\text{IV.30})$$

这里我们用到了 $(\hat{F}_{\alpha u}^{+})^{\dagger} = \hat{F}_{\alpha u}^{-}$ 和 Hermite 算符的性质. 在稳态情形下, 有 $t - t_0 \rightarrow \infty$, 此时可以导出稳恒热流的表达式为

$$J_{\alpha} = \frac{2}{\pi} \sum_{uv} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega}{e^{\beta_{\alpha} \omega} - 1} J_{uv}^{\alpha}(\omega) C_{uv}(\omega). \quad (\text{IV.31})$$

可以看出, 其和之前的结果完全一致。

V. 总结

在本文中, 通过非平衡 Green 函数的运动方程法和 Langevin 方程的关联函数法, 我们分别给出了相同的热输运的稳恒热流表达式。从整个过程中我们可以看出: Green 函数和关联函数均表示了在环境的影响下的体系环境关联, 并且能够通过关联给出响应, 即热流。但相比于非平衡 Green 函数法, 通过关联函数直接考察的方法更能够体现出关联的物理意义, 且更为简洁且没有数学上的繁琐。非平衡 Green 函数法作为一种经典的处理非平衡体系的方法, 其可以建立一套完整的操作流程来处理问题, 但其数学形式较为繁琐, 且忽略了解析性的考虑。通过对体系环境总的动力学的考量, 根据耗散子动力学方程, 我们能够从根本上验证热流公式的正确性, 并且可以基于此计算热流。但对于介观等较大的体系, 通过严格的动力学方法会由于计算量大的原因无法很好的计算, 在这种情况下, 通过非平衡 Green 函数建立的 Dyson 方程且结合图形展开的方法, 可以对介观体系的输运问题给出数值解。除了对于 Bose 子体系 (即热输运) 的研究, 非平衡 Green 函数和关联函数的方法也可以用于 Fermi 子体系的处理, 其可以给出微观电子输运的稳恒电流。

A. 体系环境纠缠定理

本节作为附录，在不影响行文顺序的情况下简要地介绍非平衡体系下的体系环境纠缠定理，同样地我们依旧考虑由式(III.1)所定义的 Hamilton 量。体系环境纠缠定理实际上描述了一种“输入”和“输出”的关系，其中定义的体系体系纠缠函数是一种“输入”函数，即

$$\chi_{uv}^{\text{ss}}(t) \equiv i\langle[\hat{Q}_u(t), \hat{Q}_v(0)]\rangle \equiv [\chi^{\text{ss}}(t)]_{uv}, \quad (\text{A.1})$$

通过其给出“输出”函数，即其他的响应函数，定义为

$$\chi_{uv}^{\text{s}\alpha}(t) \equiv i\langle[\hat{Q}_u(t), \hat{F}_{\alpha v}(0)]\rangle \equiv [\chi^{\text{s}\alpha}(t)]_{uv}, \quad (\text{A.2})$$

$$\chi_{uv}^{\alpha\text{s}}(t) \equiv i\langle[\hat{F}_{\alpha u}(t), \hat{Q}_v(0)]\rangle \equiv [\chi^{\alpha\text{s}}(t)]_{uv}, \quad (\text{A.3})$$

$$\chi_{uv}^{\alpha\alpha'}(t) \equiv i\langle[\hat{F}_{\alpha u}(t), \hat{F}_{\alpha'v}(0)]\rangle \equiv [\chi^{\alpha\alpha'}(t)]_{uv}. \quad (\text{A.4})$$

这里的 $\langle(\cdot)\rangle = \text{Tr}[(\cdot)\rho^{\text{st}}]$ ，且 Heisenberg 绘景中令 $t_0 = 0$ ，因此响应函数有时间平移不变性，即

$$\chi_{AB}(t - t') = i\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle. \quad (\text{A.5})$$

体系环境纠缠定理表述为

$$\chi^{\alpha\text{s}}(t) = - \int_0^t d\tau \phi^\alpha(t - \tau) \chi^{\text{ss}}(\tau) \quad (\text{A.6})$$

和

$$\chi^{\text{s}\alpha}(t) = - \int_0^t d\tau \chi^{\text{ss}}(\tau) \phi^\alpha(t - \tau), \quad (\text{A.7})$$

这里 $[\phi^\alpha(t)]_{uv} \equiv \phi_{uv}^\alpha(t)$ 。除此之外，还有

$$\langle\hat{F}_{\alpha u}\rangle = - \sum_v \eta_{uv} \langle\hat{Q}_v\rangle, \quad (\text{A.8})$$

这里

$$\eta_{uv} \equiv \int_0^\infty dt \phi_{uv}^\alpha(t), \quad (\text{A.9})$$

描述了体系和环境平均值的纠缠。

-
- [1] U. Harbola and S. Mukamel. Superoperator nonequilibrium green' s function theory of many-body systems; applications to charge transfer and transport in open junctions. *Physics Reports*, 465:191–222, 2008.
 - [2] C Niu, D L Lin, and T-H Lin. Equation of motion for nonequilibrium green functions. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 11:1511–1521, 1999.
 - [3] Zhao-Bin Su, Lu Yu, and Liao-Yuan Chen. Closed time path green's function and its applications in transport theory. In *Thermal Field Theories*, North-Holland Delta Series, pages 107–121. Elsevier, Amsterdam, 1991.
 - [4] H. Umezawa. *Advanced Field Theory: Micro, Macro, and Thermal Physics*. Springer, New York, 1995.
 - [5] 王怀玉. 量子系统格林函数法的理论与应用. 中国科学技术大学出版社, 合肥, 2020.
 - [6] 郝柏林等. 统计物理进展. 科学出版社, 北京, 1981.