无相互作用系统非平衡定态解析解

吴金闪

北京师范大学系统科学学院

2014年9月13日

主要内容

1. 背景
   1. 实验与理论两个方面的动机
   2. 基本问题和基本框架：Influence Functional方法，非平衡格林函数方法（NEGF）、Keldysh公式、相互作用的处理（密度泛函理论）
   3. 有效运动方程的框架：Lindblad、Redfield
   4. 运动方程的求解：直接方法、Monte Carlo方法、类BBGKY链（基于运动方程的格林函数方法）
2. 相干态表象下的随机微分方程
3. 无相互作用系统的精确解
4. 相互作用系统的数值解
5. 有待研究的问题：有限大小热浴的效果，在热传导问题上的应用
6. 致谢
7. 广告时间

研究的动机

- 基本问题：一个中心系统耦合到多个热浴耦合，研究通过中心系统的粒子流、热流

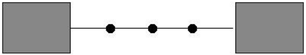


Figure: 基本问题的草图

- 输运性质的实验，传统理论（Kubo formula，Landauer-Buttiker formula）框架的问题，“热势”，相互作用
- 非平衡统计的基本问题：平衡态有系综理论，已知微观系统的描述和宏观参量能够得到宏观状态；非平衡态没有这样的框架。
- 最低要求：一个具有操作性和计算性的框架

几种基本框架

- Keldysh公式，NEGF，微扰计算：左侧系统处于一个平衡态，右侧系统处于另一个，把两侧之间的连接作为微扰。这样的微扰计算需要闭路Green函数，相互作用作为另一个微扰。
- Influence Functional方法：从整体系统的Schrödinger方程出发

$$\frac{d}{dt}\rho^{SB_LB_R} = \left[L_{H_S} + L_{B_L}(T_L) + L_{B_R}(T_R)\right]\rho^{SB_LB_R}. \tag{1}$$

得到约化演化算子

$$\mathcal{F}\left[q, q'\right] = Tr^{B_L,B_R}\left(\rho^{B_L}\otimes\rho^{B_R}U^{\dagger}_{B_{L,R}}\left[q'\right]U_{B_{L,R}}[q]\right). \tag{2}$$

目前在非平衡态的计算上，这个方法仅仅在非常小的非常特殊的系统上被使用过。国内，苏肇冰等人研究了关于Keldysh和IF方法的等价性。

几种基本框架，续

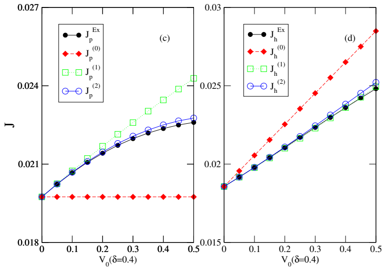
- Lindblad和Redfield运动方程：推广单热浴投影算符方法到多个热浴的情形：中心系统的约化方程，相当于在Influence Functional的基础上做了近似，保留二级微扰以内的项。
- 约化密度矩阵的量子master方程，稳态解，$L_{H_S} = -i[H_S, \cdot]$,

$$\frac{d}{dt}\rho = L\rho = [L_{H_S} + L_L(T_L) + L_R(T_R)]\,\rho \qquad (3)$$

热浴算符L_L和L_R的形式按照近似程度的不同可以不一样。
- 简单直接计算方法：转化为线性系统$L\rho(\infty) = 0$或者$\bar{L}\rho(\infty) = [1, 0, 0, \cdots]^T$ $(tr(\rho) = 1)$
- 难点：对于N-qubit系统，要求解4^N维的线性方程，极限大约$N = 10$

几种基本框架，续

- 我们自己提出来的类BBGKY方法：避开直接处理密度矩阵，求解Green函数，例如$G_1\left(m^\dagger,n\right)=tr\left(c_m^\dagger c_n\rho\left(\infty\right)\right)$。
- 最近在二阶BBGKY上，$G_2\left(m^\dagger,n^\dagger,i,j\right)=tr\left(c_m^\dagger c_n^\dagger c_i c_j\rho\left(\infty\right)\right)$，已经实现。顺便做个广告：大家有空可以看看我的学生的张贴报告——2阶BBGKY用于Redfield和Lindblad方程



热浴中的Bose-Hubbard模型的Redfield方程

- 通过例子来展示方法：1维Bose-Hubbard模型左右两端耦合到热浴上的Redfield方程

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = -i[\mathcal{H}_S, \rho(t)]$$
$$-\lambda^2 \sum_{\gamma=L,R} \left\{ \left[a_\gamma^\dagger, \hat{m}_\gamma \rho(t)\right] + \left[a_\gamma, \hat{\hat{m}}_\gamma \rho(t)\right] + h.c. \right\}, \quad (4)$$

其中

$$\hat{m}_\gamma = \sum_m \mathfrak{D}_{\gamma;m} a_m + U \sum_{m_1 m_2 m_3} \mathfrak{D}_{\gamma;m_1 m_2 m_3} a_{m_1}^\dagger a_{m_2} a_{m_3} + O\left(U^2\right) \quad (5a)$$
$$\hat{\hat{m}}_\gamma = \sum_m \bar{\mathfrak{D}}_{\gamma;m} a_m^\dagger + U \sum_{m_1 m_2 m_3} \mathfrak{D}_{\gamma;m_1 m_2 m_3} a_{m_3}^\dagger a_{m_2}^\dagger a_{m_1} + O\left(U^2\right), \quad (5b)$$

- 也就是一堆产生湮灭算符所构成的方程。如果$U=0$（$\mathcal{H}_S$中无相互作用），那么$\hat{m}$只有一阶项，$\mathcal{H}_S$只有二阶项。

相干态表象下的量子随机微分方程

- 从量子master方程到随机微分方程：利用相干态表象，产生湮灭算符成为导数算符，密度矩阵变成广义密度分布函数，

$$a\rho \leftrightarrow \alpha P(\alpha), \rho a^{\dagger} \leftrightarrow \alpha^{*} P(\alpha),$$
$$a^{\dagger}\rho \leftrightarrow \left(\alpha^{*} - \frac{\partial}{\partial\alpha}\right) P(\alpha), \rho a \leftrightarrow \left(\alpha - \frac{\partial}{\partial\alpha^{*}}\right) P(\alpha). \tag{6}$$

- 因此，当$U=0$的时候，Eq. (4)就成了关于复数域上的广义分布函数$P\left(\vec{\alpha}, \vec{\alpha^{*}}\right)$最高二阶的微分方程

$$\frac{\partial}{\partial t}P = \sum_{i,j}\left[-\frac{\partial}{\partial\alpha_i}\Gamma_{ij}\alpha_j + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\alpha_i\partial\alpha_j^{*}}\mathscr{D}_{ij} + c.c.\right]P. \tag{7}$$

无相互作用系统的解析解

- 这个Fokker-Planck方程有解析解。

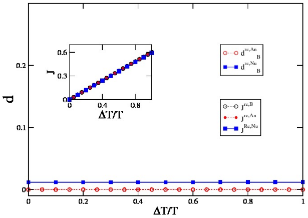
$$P(\vec{\alpha}) = \frac{1}{Z} e^{-\alpha^T \sigma^{-1} \alpha}, \tag{8}$$

其中的系数矩阵σ满足，Γ和$\mathscr{D}$是给定的，

$$\sigma\Gamma + \Gamma^T \sigma^T = \mathscr{D}. \tag{9}$$

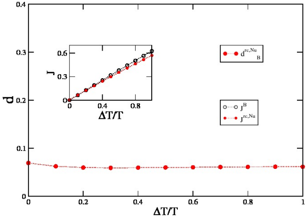
- 对于熟悉相干态表象的研究者来说，这个复数域上的高斯分布，也正是无相互作用系统的平衡态的分布函数（这个时候σ就是给定温度和给定能级上的平均粒子数）。
- 而且，可以证明当热浴参数（温度、化学势）相同的时候，这个方程求解出来的σ正好就是平衡态的参数。
- 到现在为止，至少无相互作用系统的分布函数，尽管在通常的位置-动量相空间没有解析表达式，在相干态表象下找到了解析表达式。

无相互作用系统的解析解与精确数值解的对比



- 无相互作用系统非平衡定态的解析解，与BBGKY解对比，BBGKY解对于无相互作用系统是精确的，只是没有解析表达式，只能求数值解
- 关注$d_B^{re,An}$，以及$J^{re,An}$与$J^{re,B}$。解析解与BBGKY数值解两者吻合的非常好。

相互作用系统的数值解与BBGKY数值解的对比



- 当$U \neq 0$的时候，热浴算符$\hat{m}$存在高阶项，广义FPE存在高于二阶的微分。可能需要其它相干态表象。
- 非常粗糙的做法是直接转化成为近似的Langevin方程，把无穷维的问题转化为求解大量$2N$维的线性方程本征值的问题
- 准确性可以和类BBGKY方法相比，$J^{re,Nu}$与$J^{re,B}$非常接近。但是，U比较大的时候会发散

小结

1. 非平衡定态的计算是基本问题。
2. 相干态表象可以把有效动力学方程转化为量子随机微分方程
3. 对于无相互作用系统，量子随机微分方程可以解析求解，得到非平衡定态的解析表达式
4. 这个解析解在平衡的时候回到Boltzmann分布，非平衡的时候是复数域上的高斯分布
5. 这个解析解，尽我们所知，没有其他人得到过
6. 对于相互作用系统，这个方法还需要进一步发展

短期和长期可开展的工作

- 发展量子随机微分方程的技术：从波色子到费米子
- 研究趋向平衡的充分必要条件：在随机方法中，热浴可以作为系统的一部分，研究热浴大小的影响，热浴初始状态的影响，相互作用形式的影响（系统内的或者系统与热浴之间的）等问题。
- 这些方法与Influence Functional的对比，与NEGF的对比

请批评指正

- 参考文献：

1. K. Saito, S. Takesue, and S. Miyashita. Energy transport in the integrable system in contact with various types of phonon reservoirs. Phys. Rev. E, 61:2397–2409 (2000).
2. Jinshan Wu, Quantum Transport Through Open Systems, PH.D. dissertation, UBC, 2011.
3. Jinshan Wu and Mona Berciu, Heat transport in quantum spin chains: the relevance of integrability, Phys. Rev. B 83(2011), 214416.
4. Jinshan Wu and Mona Berciu, Kubo formula for open finite-size systems, Europhysics Letters, 92(2010), 30003.
5. Jinshan Wu, Non-equilibrium stationary states from the equation of motion of open systems, New Journal of Physics, 12(2010), 083042.

- 感谢合作者：Mona Berciu、王馨、敖滨、张江等
- 感谢组织者的邀请。给我这样一个机会
- 感谢大家的支持，请大家不吝赐教

复杂性研究欢迎来自物理学的你

- 通俗说法"从还原论到整体论"：认识分子原子不等于了解器官、组织，思想，同时，没有还原的整体论是伪科学。
- 对一个系统的认识，做到从整个系统到每一个层次上系统的单元、相互作用，然后再回到整体系统，是整个复杂性研究（也是物理学）的最大的梦想。
- 物理学的概念与方法可以用在其他领域。
- 例如平衡态，从非平衡趋向平衡，从一个平衡态转变为另一个平衡态，相变等概念。
- 例如从微观动力学的，宏观观测量的动力学，从微观到宏观的统计或者随机过程的分析方法。
- 再如从无相互作用的系统的处理，到有相互作用系统的处理。

要了解我更多

- 请访问“系统科学人之吴金闪”，http://systemsci.org/jinshanw
- 涉猎其他领域：量子力学基本问题、博弈论、复杂网络、投入产出分析、科学计量学、汉字构形学
- 研究工作就要面对要么一门学科**深刻的基本的问题**，要么来自于**现实世界的可以解决现实世界的问题的其他人没有问过的问题**，或者没有回答好的问题
- 顺便做另一个广告：有空请看一下我的学生的墙报：利用投入产出分析研究科学领域之间的关系