量子开放系统理论与计算方法培训班

2017年5月22日~23日，   北京计算科学研究中心

开放系统量子力学

耗散子动力学(DEOM)理论

严以京

中国科学技术大学

教材：“Dissipation Equation of Motion Approach in Quantum Mechanics of Open Systems”, Y. J. Yan, J. S. Jin, R. X. Xu, and X. Zheng, *Front. Phys.* **11**, 110306 (2016)

提要

教材(DEOM理论**综述文章)：**“Dissipation Equation of Motion Approach in Quantum Mechanics of Open Systems”, Y. J. Yan et al, *Front. Phys.* **11**, 110306 (2016)

- **授课ppt内容包含教材的**§1-§3.41**以及**§4.1；**课堂上会有些简单但重要的现场推导。**应用DEOM研究具体体系的信息将在**ppt中给出，方便课后查阅和下载**。
- DEOM理论是开放系统量子力学的一个最新发展，涵盖了多种已有的量子耗散动力学，如级联运动方程（HEOM）和主方程理论。费米型DEOM理论能精确、高效研究如量子输运、Kondo物理、Anderson杂质等问题。
- DEOM描述(**体系+杂化环境**)的**动力学、平衡态**，以及**非平衡态**的性质。传统量子力学的Hilbert空间方法，如薛定格、海森堡、相互作用图像等，都可以很方便的拓展到DEOM空间; **参见教材的§7**。
- 本节课程为(50+10)分钟，将重点讨论DEOM理论的**物理思想**、耗散子**代数**和**定理**、以及耗散子级联运动方程的构造和方法。由于时间关系，本课程主要介绍波色型DEOM理论，并适当兼顾讨论费米型理论的特点。

课前基础知识准备

- 阅读教材，尤其是其中的§1-§2.3, §3.1, §4.1, §4.2
- 附上有关二级微扰主方程理论的一篇综述, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **56**, 187-219 (2005), 自学其中的*§1-§3.1, pp.187-194*

内容

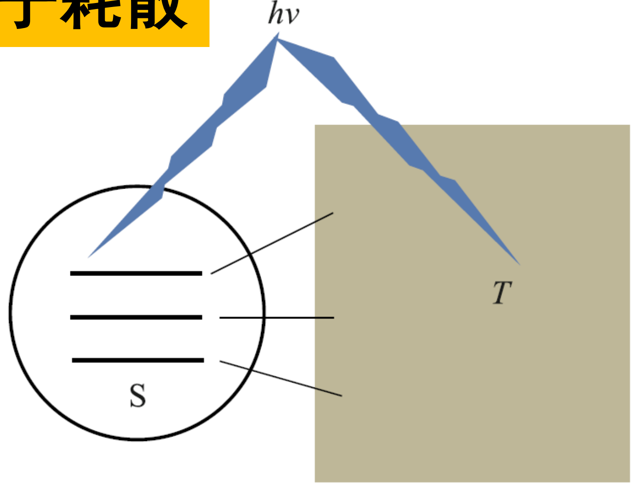
1 开放系统量子力学的研究对象和出发点

2 DEOM理论介绍和推导

3 总结以及相关方法发展简介

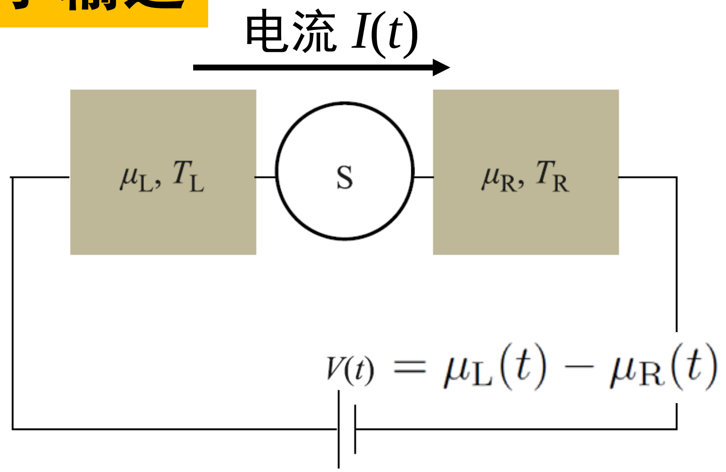
1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

量子耗散



体系S + 热庫B + 外场$E(t)$

量子输运



体系 + 电极 + 外场(电压、光等)

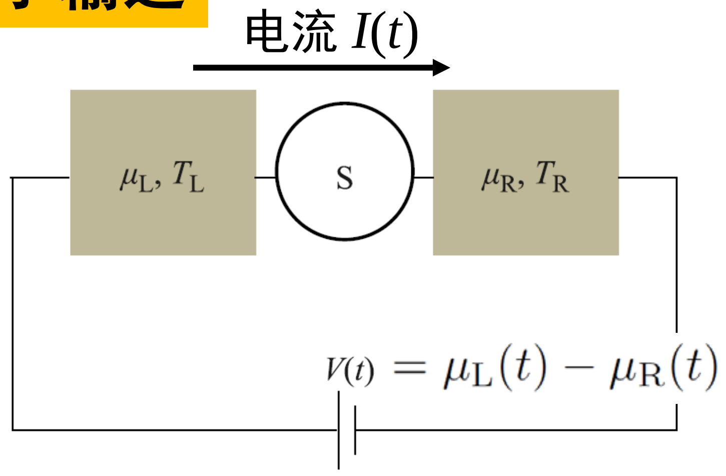
统计特性： **波色子庫** **费米子庫**

总系统哈密顿： $H_{\mathrm{T}}(t) = [H_{\mathrm{S}} - \hat{D}_{\mathrm{S}} E(t)] + h_{\mathrm{B}} + H_{\mathrm{SB}} + \underline{\hat{D}_{\mathrm{B}} E'(t)}$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + \sum_{\alpha=\mathrm{L,R}} \hat{h}_{\alpha}^{\mathrm{eff}}(t) + H_{\mathrm{SB}}$$

量子输运



体系 + 电极 + 外场(电压、光等)

$$\hat{h}_{\alpha}^{\mathrm{eff}}(t) = \sum_{k} [\epsilon_{\alpha k} + \mu_{\alpha}(t)] \hat{d}_{\alpha k}^{+} \hat{d}_{\alpha k}^{-}$$

总系统哈密顿： $H_{\mathrm{T}}(t) = [H_{\mathrm{S}} - \hat{D}_{\mathrm{S}} E(t)] + h_{\mathrm{B}} + H_{\mathrm{SB}} + \hat{D}_{\mathrm{B}} E'(t)$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + \sum_{\alpha=\mathrm{L,R}} \hat{h}^{\mathrm{eff}}_{\alpha}(t) + H_{\mathrm{SB}}$$

$$H_{\mathrm{SB}} = \sum_{\alpha u} \left(\hat{a}_u^+ \hat{F}_{\alpha u}^- + \hat{F}_{\alpha u}^+ \hat{a}_u^- \right)$$

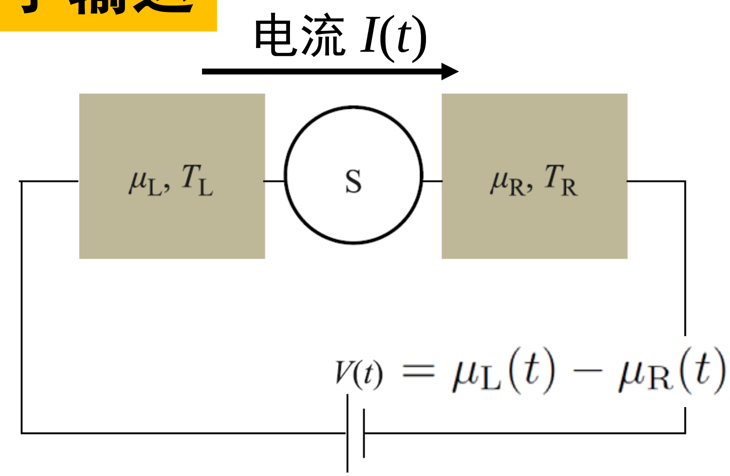
$$\hat{F}_{\alpha u}^+ \equiv \sum_k t_{\alpha k u} \hat{d}_{\alpha k}^+ = (\hat{F}_{\alpha u}^-)^\dagger$$

电流算符

$$\hat{I}_\alpha \equiv -\frac{d}{dt}\hat{N}_\alpha = -\mathrm{i}[H_{\mathrm{SB}}, \hat{N}_\alpha]$$

$$= -\mathrm{i}\sum_u \left(\hat{a}_u^+ \hat{F}_{\alpha u}^- - \hat{F}_{\alpha u}^+ \hat{a}_u^- \right)$$

量子输运



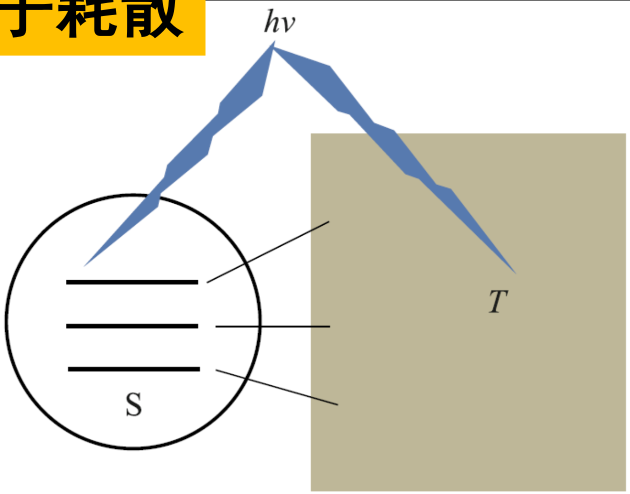
体系 + 电极 + 外场(电压、光等)

$$\hat{h}^{\mathrm{eff}}_{\alpha}(t) = \sum_k [\epsilon_{\alpha k} + \mu_\alpha(t)] \hat{d}_{\alpha k}^+ \hat{d}_{\alpha k}^-$$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

本课程讨论

量子耗散



体系S + 热庫B + 外场$E(t)$

统计特性： **波色子庫**

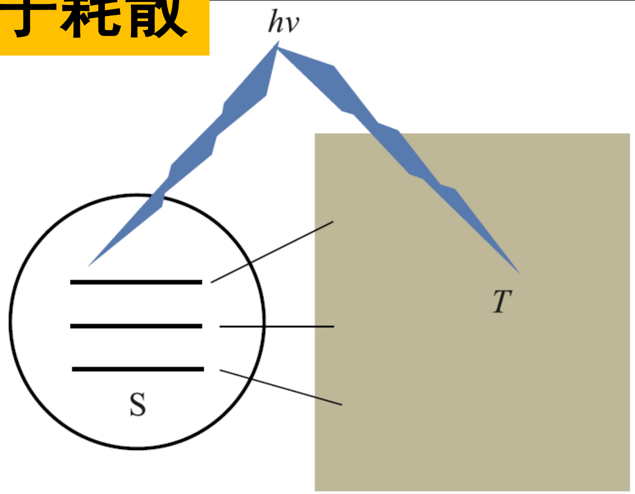
总系统哈密顿： $H_{\rm T}(t) = [H_{\rm S} - \hat{D}_{\rm S}E(t)] + h_{\rm B} + H_{\rm SB} + \underline{\hat{D}_{\rm B}E'(t)}$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

本课程讨论

量子耗散



体系S + 热庫B + 外场$E(t)$

波色子庫： $h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2}\sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

总系统哈密顿： $H_{\mathrm{T}}(t) = [H_{\mathrm{S}} - \hat{D}_{\mathrm{S}} E(t)] + h_{\mathrm{B}} + H_{\mathrm{SB}} + \underline{\hat{D}_{\mathrm{B}} E'(t)}$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

- **高斯环境影响的表征**

杂化环境谱密度函数

$$h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2} \sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

高斯环境

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

- **高斯环境影响的表征**

杂化环境谱密度函数

微观表达式 (for $\omega \geqslant 0$):

$$J_{ab}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j c_{aj} c_{bj} \delta(\omega - \omega_j)$$

热力学表达式 （波色子庫）：

$$J_{ab}(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \langle [\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t), \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)] \rangle_{\mathrm{B}}$$

这里， $\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}h_{\mathrm{B}}t/\hbar} \hat{F}_a^{\mathrm{B}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}h_{\mathrm{B}}t/\hbar}$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\mathrm{B}} \equiv \frac{\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}(\hat{O} e^{-\beta h_{\mathrm{B}}})}{\mathrm{tr}_{\mathrm{B}} e^{-\beta h_{\mathrm{B}}}}$$

$$h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2} \sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

高斯环境

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$\boxed{H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]\hat{F}_a^{\mathrm{B}}}$$

- **高斯环境影响的表征**

杂化环境谱密度函数

微观表达式 (for $\omega \geqslant 0$):

$$J_{ab}(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_j c_{aj}c_{bj}\delta(\omega - \omega_j)$$

热力学表达式 （波色子庫）：

$$J_{ab}(\omega) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle [\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t), \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)]\rangle_{\mathrm{B}}$$

$$\boxed{J_{ab}^*(\omega) = -J_{ab}(-\omega) = J_{ba}(\omega)}$$

$$h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2}\sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

高斯环境

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$\boxed{H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{F}_a^{\mathrm{B}}}$$

- **高斯环境影响的表征**

杂化环境谱密度函数

微观表达式 (for $\omega \geqslant 0$):

$$J_{ab}(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j c_{aj} c_{bj} \delta(\omega - \omega_j)$$

热力学表达式 （波色子庫）：

$$J_{ab}(\omega) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \langle [\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t), \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)] \rangle_{\mathrm{B}}$$

杂化环境关联函数，以及涨落耗散定理

$$\langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t) \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0) \rangle_{\mathrm{B}} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \frac{J_{ab}(\omega)}{1 - \mathrm{e}^{-\beta\omega}}$$

$$h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2} \sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

高斯环境

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = \underbrace{H(t)}_{\text{任意}} + h_{\mathrm{B}} + \sum_a \underbrace{[\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]}_{\text{任意}} \hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

任意

$$h_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2}\sum_j \omega_j (p_j^2 + x_j^2)$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} = \sum_j c_{aj} x_j$$

高斯环境

定理：

杂化环境关联函数完全确定了高斯环境对开放系统动力学的影响

$$\left\langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \frac{J_{ab}(\omega)}{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}}$$

1. 开放系统量子力学的研究对象和出发点

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]\hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

波色谱密度对称性：$J^*_{ab}(\omega) = -J_{ab}(-\omega) = J_{ba}(\omega)$

$$\left\langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{J_{ab}(\omega)}{1-\mathrm{e}^{-\beta\omega}}$$

逆时序对称性：$\langle \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\rangle_{\mathrm{B}} = \langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\rangle^*_{\mathrm{B}}$

内容

1 开放系统量子力学的研究对象和出发点

2 DEOM理论介绍和推导

3 总结以及相关方法发展简介

2.1 DEOM理论构建的出发点：耗散子的引入

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

波色谱密度对称性：$J_{ab}^*(\omega) = -J_{ab}(-\omega) = J_{ba}(\omega)$

$$\langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t) \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0) \rangle_{\mathrm{B}} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \frac{J_{ab}(\omega)}{1 - \mathrm{e}^{-\beta\omega}} = \sum_{k=1}^{K} \eta_{abk} \mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

逆时序对称性：$\langle \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0) \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t) \rangle_{\mathrm{B}} = \langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t) \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0) \rangle_{\mathrm{B}}^* = \sum_{k=1}^{K} \eta_{ab\bar{k}}^* \mathrm{e}^{-\gamma_k t}$

下标 $\bar{k} \in \{k = 1, \cdots, K\}$ 由 $\gamma_{\bar{k}} \equiv \gamma_k^*$ 而定义

2.2 DEOM理论构建的出发点：耗散子的引入

$$\boxed{H_{\mathrm{T}}(t)=H(t)+h_{\mathrm{B}}+\sum_a[\hat{Q}_a^{\mathrm{S}}-\zeta_a^{\mathrm{B}}E(t)]\hat{F}_a^{\mathrm{B}}}$$

给定

$$\left\langle\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\right\rangle_{\mathrm{B}}=\sum_{k=1}^{K}\eta_{abk}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

和

$$\left\langle\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\right\rangle_{\mathrm{B}}=\sum_{k=1}^{K}\eta_{ab\bar{k}}^{*}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

2.2 DEOM理论构建的出发点：耗散子的引入

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_a [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]\hat{F}_a^{\mathrm{B}}$$

给定

$$\left\langle \hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \sum_{k=1}^{K} \eta_{abk}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

和

$$\left\langle \hat{F}_b^{\mathrm{B}}(0)\hat{F}_a^{\mathrm{B}}(t)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \sum_{k=1}^{K} \eta_{ab\bar{k}}^{*}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

$\Updownarrow$

耗散子（杂化环境的统计等效准粒子），表示为 $\hat{F}_a^{\mathrm{B}} \equiv \sum_{k=1}^{K} \hat{f}_{ak}$，满足

$$\left\langle \hat{f}_{ak}(t)\hat{f}_{bj}(0)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{abk}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

和

$$\left\langle \hat{f}_{bj}(0)\hat{f}_{ak}(t)\right\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{ab\bar{k}}^{*}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

2.2 DEOM理论构建的出发点：耗散子的引入

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_{ak} [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{f}_{ak}$$

$$\hat{F}_a^{\mathrm{B}} \equiv \sum_{k=1}^{K} \hat{f}_{ak}$$

$$\langle \hat{f}_{ak}(t) \hat{f}_{bj}(0) \rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj} \eta_{abk} e^{-\gamma_k t}$$

和

$$\langle \hat{f}_{bj}(0) \hat{f}_{ak}(t) \rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj} \eta_{ab\bar{k}}^{*} e^{-\gamma_k t}$$

耗散子代数:
广义扩散方程

$$\mathrm{tr}_{\mathrm{B}} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{f}_{ak} \right)_{\mathrm{B}} \rho_{\mathrm{T}}(t) \right] = -\gamma_k \mathrm{tr}_{\mathrm{B}} \left[\hat{f}_{ak} \rho_{\mathrm{T}}(t) \right]$$

2.3 多体耗散子密度算符(DDO)和代数

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_{ak}[\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]\hat{f}_{ak}$$

$$\rho_{\boldsymbol{n}}^{(n)}(t) \equiv \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big]$$

（n体DDO）

- $\boldsymbol{n} \equiv \{n_{ak}\}$; with $n_{ak} = 0, 1, 2, \cdots$ (构型)
- $n = \sum_{ak} n_{ak}$
- $(\cdots)^{\circ}$ 不可约符号； 波色型耗散子满足 $(\hat{f}_k\hat{f}_j)^{\circ} = (\hat{f}_j\hat{f}_k)^{\circ}$

$$\langle \hat{f}_{ak}(t)\hat{f}_{bj}(0)\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{abk}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

和

$$\langle \hat{f}_{bj}(0)\hat{f}_{ak}(t)\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{ab\bar{k}}^{*}\mathrm{e}^{-\gamma_k t}$$

耗散子代数:
广义扩散方程

$$\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}_{ak}\Big)_{\mathrm{B}}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big] = -\gamma_k \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\big[\hat{f}_{ak}\rho_{\mathrm{T}}(t)\big]$$

2.3 多体耗散子密度算符(DDO)和代数

$$\boxed{H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_{ak}[\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)]\hat{f}_{ak}}$$

$$\boxed{\rho_{\boldsymbol{n}}^{(n)}(t) \equiv \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big]}$$

（n体DDO）

- $\boldsymbol{n} \equiv \{n_{ak}\}$; with $n_{ak} = 0, 1, 2, \cdots$ （构型）
- $n = \sum_{ak} n_{ak}$
- $(\cdots)^{\circ}$ 不可约符号； 波色型耗散子满足 $(\hat{f}_k\hat{f}_j)^{\circ} = (\hat{f}_j\hat{f}_k)^{\circ}$

$$\boxed{\big\langle \hat{f}_{ak}(t)\hat{f}_{bj}(0)\big\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{abk}e^{-\gamma_k t}}$$

和

$$\boxed{\big\langle \hat{f}_{bj}(0)\hat{f}_{ak}(t)\big\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{ab\bar{k}}^{*}e^{-\gamma_k t}}$$

耗散子代数:
广义扩散方程

$$\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\frac{\partial}{\partial t}\hat{f}_{ak}\Big)_{\mathrm{B}}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big] = -\gamma_k \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\big[\hat{f}_{ak}\rho_{\mathrm{T}}(t)\big]$$

$$\boxed{i\,\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big\{\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}[h_{\mathrm{B}}, \rho_{\mathrm{T}}]\Big\} = \Big(\sum_{ak} n_{ak}\gamma_k\Big)\rho_{\boldsymbol{n}}^{(n)}}$$

2.3 多体耗散子密度算符(DDO)和代数

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_{ak}[\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}}E(t)]\hat{f}_{ak}$$

$$\rho_{\boldsymbol{n}}^{(n)}(t) \equiv \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big]$$

（n体DDO）

- $\boldsymbol{n} \equiv \{n_{ak}\}$; with $n_{ak} = 0, 1, 2, \cdots$ （构型）
- $n = \sum_{ak} n_{ak}$
- $(\cdots)^{\circ}$ 不可约符号； 波色型耗散子满足 $(\hat{f}_{ak}\hat{f}_{bj})^{\circ} = (\hat{f}_{bj}\hat{f}_{ak})^{\circ}$

$\langle\hat{f}_{ak}(t)\hat{f}_{bj}(0)\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{abk}e^{-\gamma_k t}$ 和 $\langle\hat{f}_{bj}(0)\hat{f}_{ak}(t)\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{ab\bar{k}}^{*}e^{-\gamma_k t}$

广义 Wick's 定理

$$\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\hat{f}_{bj}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big] = \sum_{ak} n_{ak}\langle\hat{f}_{ak}\hat{f}_{bj}\rangle_{\mathrm{B}}^{>}\rho_{\boldsymbol{n}_{ak}^{-}}^{(n-1)}(t) + \rho_{\boldsymbol{n}_{bj}^{+}}^{(n+1)}(t)$$

$$\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\rho_{\mathrm{T}}(t)\hat{f}_{bj}\Big] = \sum_{ak} n_{ak}\langle\hat{f}_{bj}\hat{f}_{ak}\rangle_{\mathrm{B}}^{<}\rho_{\boldsymbol{n}_{ak}^{-}}^{(n-1)}(t) + \rho_{\boldsymbol{n}_{bj}^{+}}^{(n+1)}(t)$$

2.4 DEOM/HEOM的代数推导(课堂)

$$H_{\mathrm{T}}(t) = H(t) + h_{\mathrm{B}} + \sum_{ak} [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}} - \zeta_a^{\mathrm{B}} E(t)] \hat{f}_{ak}$$

$$\rho_{\boldsymbol{n}}^{(n)}(t) \equiv \mathrm{tr}_{\mathrm{B}} \Big[\Big(\prod_{ak} \hat{f}_{ak}^{n_{ak}} \Big)^{\circ} \rho_{\mathrm{T}}(t) \Big]$$

级联方程(HEOM) (推导：从薛定格-刘维尔方程出发，利用耗散子代数完成)

$$\dot{\rho}_{\mathbf{n}}^{(n)} = -\Big(i\mathcal{L}(t) + \sum_{ak} n_{ak}\gamma_k \Big) \rho_{\mathbf{n}}^{(n)} - i \sum_{ak} \Big(n_{ak} \mathcal{C}_{ak}^{\mathrm{eff}}(t) \rho_{\mathbf{n}_{ak}^-}^{(n-1)} + \mathcal{A}_a \rho_{\mathbf{n}_{ak}^+}^{(n+1)} \Big)$$

$$\mathcal{C}_{ak}^{\mathrm{eff}}(t) \equiv \mathcal{C}_{ak} - E(t) \sum_b (\eta_{abk} - \eta_{ab\bar{k}}^{*}) \zeta_b^{\mathrm{B}}, \qquad \mathcal{A}_a \hat{O} \equiv [\hat{Q}_a^{\mathrm{S}}, \hat{O}]$$

$$\mathcal{C}_{ak} \hat{O} \equiv \sum_b \big(\eta_{abk} \hat{Q}_b^{\mathrm{S}} \hat{O} - \eta_{ab\bar{k}}^{*} \hat{O} \hat{Q}_b^{\mathrm{S}} \big)$$

内容

1 开放系统量子力学的研究对象和出发点

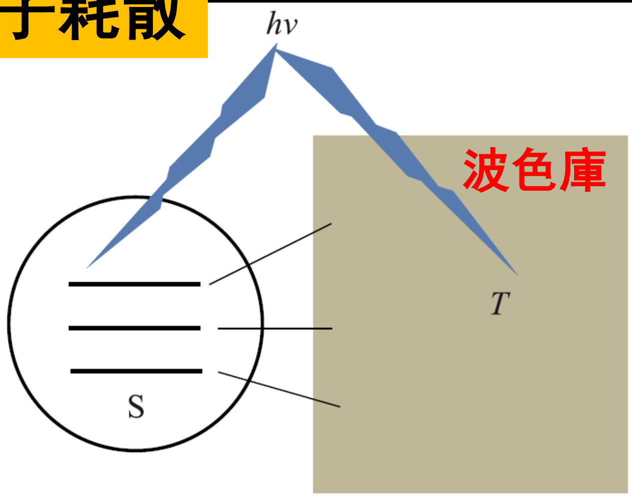
2 DEOM理论介绍和推导

3 总结以及相关方法发展简介

3.1 DEOM理论的普适性

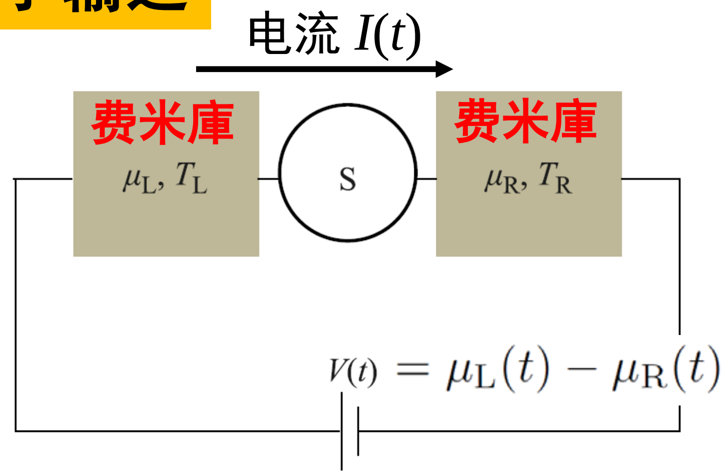
无穷自由度环境的效应 ⇒ 若干个耗散子的作用

量子耗散



体系S + 热庫B + 外场$E(t)$

量子输运



体系 + 电极 + 外场(电压、光等)

耗散子：统计独立准粒子

$$(\hat{f}_k \hat{f}_j)^{\circ} = (\hat{f}_j \hat{f}_k)^{\circ} \quad \text{(bosonic)}; \qquad (\hat{f}_k \hat{f}_j)^{\circ} = -(\hat{f}_j \hat{f}_k)^{\circ} \quad \text{(fermionic)}.$$

3.2 DEOM理论 = HEOM + 耗散子代数

HEOM

$$\boxed{\dot{\rho}^{(n)}_{\boldsymbol{n}} = -\big[i\mathcal{L}(t) + \gamma^{(n)}_{\boldsymbol{n}}\big]\rho^{(n)}_{\boldsymbol{n}} + \big\{\rho^{(n-1)}_{\boldsymbol{n}^-}\big\} + \big\{\rho^{(n+1)}_{\boldsymbol{n}^+}\big\}}$$

多体DDO

$$\boxed{\rho^{(n)}_{\boldsymbol{n}}(t) \equiv \mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big]}$$

波色型 $\big(\hat{f}_{ak}\hat{f}_{bj}\big)^{\circ} = \big(\hat{f}_{bj}\hat{f}_{ak}\big)^{\circ}$

耗散子：统计独立准粒子

$$\big\langle\hat{f}_{ak}(t)\hat{f}_{bj}(0)\big\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta_{abk}e^{-\gamma_k t}$$

$$\big\langle\hat{f}_{bj}(0)\hat{f}_{ak}(t)\big\rangle_{\mathrm{B}} = \delta_{kj}\eta^{*}_{ab\bar{k}}e^{-\gamma_k t}$$

广义Wick's定理

$$\boxed{\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}\Big[\Big(\prod_{ak}\hat{f}_{ak}^{n_{ak}}\Big)^{\circ}\hat{f}_{bj}\rho_{\mathrm{T}}(t)\Big] = \sum_{ak} n_{ak}\big\langle\hat{f}_{ak}\hat{f}_{bj}\big\rangle^{>}_{\mathrm{B}}\rho^{(n-1)}_{\boldsymbol{n}^-_{ak}}(t) + \rho^{(n+1)}_{\boldsymbol{n}^+_{bj}}(t)}$$

$$\big\langle\hat{f}_{ak}\hat{f}_{bj}\big\rangle^{>}_{\mathrm{B}} \equiv \big\langle\hat{f}_{ak}(0+)\hat{f}_{bj}\big\rangle = \delta_{kj}\eta_{abk}$$

3.3 DEOM / HEOM 方法的发展

- **波色型**HEOM最早文章为 教材中的参考文献【12】；**费米型**的为【18】。（HEOM等价于Feynman-Venon影响泛函的路径积分公式，其动力学变量，除了体系约化密度矩阵以外，仅为数学上无物理意义的辅助量）。基于HEOM、严格的化学动力学速率公式可参见 *J. Phys. Chem.* A **120**, 3241 (2016)

- 波色型HEOM的程序包可参见日本京都大学化学系Tanimura教授的网页。国内有许多研究小组也都有自己的HEOM程序

- **费米型**HEOM的程序包可参见中科大郑晓教授的网页。结合第一性原理（DFT+U)计算，HEOM-QUICK程序包已广泛用于强关联电子体系及其输运特性的研究 [参见综述 "HEOM-QUICK: A program for accurate, efficient and universal characterization of strongly correlated quantum impurity systems", L. Z Ye, X. L Wang, D. Hou, R. X Xu, X. Zheng, and Y. J. Yan, *WIREs Comp. Mol. Sci.* **6**, 608-638 (2016)]

- DEOM理论拓展了HEOM方法，使得人们可以研究体系和环境的相干/纠缠动力学，以及平衡或非平衡稳态特性；参加教材中§7。体系和环境的相干动力学可以在实验上探测 [相关研究参见教材中的【22，23】，以及*Science China Chem.* **58** (12), 1816 (2015)；*Chem. Phys.* **481**, 237 (2016); *J. Chem. Phys.***145**, 204109 (2016)]

Thanks