现代物理基础丛书 86

开放量子系统的电子计数统计理论

薛海斌 著

科学出版社

现代物理基础丛书 86

开放量子系统的电子计数统计理论

薛海斌 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书基于时间局域的量子主方程，介绍了开放量子系统的电子计数统计理论. 主要包括：密度矩阵理论、量子主方程、二阶非马尔可夫的电子计数统计理论、四阶非马尔可夫的电子计数统计理论和非马尔可夫电子计数统计理论的应用：顺序隧穿极限和共隧穿极限. 此外，书末 12 个附录给出了相关计算和推导过程中的关键细节.

本书读者对象为从事凝聚态物理相关研究方向的科研工作者、研究生，以及高年级本科生.

图书在版编目（CIP）数据

开放量子系统的电子计数统计理论/薛海斌著. —北京：科学出版社，2018. 12
(现代物理基础丛书)
ISBN 978-7-03-059914-8

Ⅰ. ①开… Ⅱ. ①薛… Ⅲ. ①量子统计力学-研究 Ⅳ. ①O414.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 271501 号

责任编辑：周 涵 田轶静／责任校对：杨 然
责任印制：吴兆东／封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

北京建宏印刷有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2018 年 12 月第 一 版 开本：720 × 1000 B5
2018 年 12 月第一次印刷 印张：14
字数：283 000

定价：98.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前言

随着半导体微加工技术的进步和微纳器件实验设计水平的提高, 单分子器件已在实验上实现, 并且相关的实验技术也在快速发展. 对处于纳米尺度的开放量子系统, 电流涨落和电子关联将对其量子输运产生重要影响, 特别是, 电流噪声可以提供比平均电流和微分电导更多的关于该系统量子输运的微观机制信息. 因而, 从基础物理研究和实际应用的角度来看, 仅仅知道其电流和电导特性是不够的. 目前, 在实验上, 已在单量子点中实现高质量地实时测量电子通过单量子点的极微小电流, 并能够给出传输电子数目的前 15 阶瞬态累积矩及其有限频率的高阶累积矩. 因此, 电子通过受限小量子系统的全计数统计已成为量子输运领域的一个研究热点, 并且成为表征其量子输运性质的重要手段.

事实上, 在开放量子系统中, 电子的非平衡输运过程在本质上是一个量子统计随机过程, 因而, 在一段时间范围内该系统的传输电子数目是一个随机涨落量, 并且其分布函数完全依赖于该量子系统的内在属性. 若知道此分布函数, 就可以完全获得该系统的量子输运性质及其内部信息, 例如, 系统的内部能量标度及其内在动力学信息. 但是, 获取此分布函数是不可能完全做到的. 幸运的是, 起源于量子光学的光子计数统计理论在原则上可以计算出所有的零频电流关联, 即传输电子数目的所有阶累积矩. 由统计理论可知, 利用电流的各阶累积矩可以反推其分布函数, 例如, 前四阶累积矩分别对应于平均电流 (刻画传输电子数目分布峰的位置)、散粒噪声 (刻画传输电子数目分布峰的峰宽)、偏斜度 (刻画传输电子在其平均传输电子数附近分布的不对称性) 以及峭度 (刻画传输电子数目分布峰的峭度).

本书基于时间局域的量子主方程和瑞利–薛定谔微扰理论, 给出了开放量子系统在顺序隧穿和共隧穿极限下的电子计数统计理论, 尤其是, 以单量子点、串联耦合双量子点和 T 型双量子点三个系统为例, 给出了计算开放量子系统电子计数统计的计算流程, 以及相关的关键计算过程和细节, 其相关内容均来自作者的研究课题. 全书内容由 6 章和 12 个附录组成: 第 1 章介绍了与量子主方程相关的密度矩阵理论; 第 2 章介绍并详细推导了费米黄金规则 (T 矩阵)、率方程、马尔可夫量子主方程以及时间局域的非马尔可夫量子主方程, 并对推导过程中涉及的相关近似进行了讨论和说明; 第 3 章在顺序隧穿极限下给出了二阶时间局域的粒子数分辨量子主方程, 并基于此方程给出了两种计算开放量子系统电子全计数统计的方法; 第 4 章在共隧穿极限下给出了四阶时间局域的粒子数分辨量子主方程; 第 5 章以单量子点、串联耦合双量子点和 T 型双量子点三个系统为例, 讨论了非马尔可夫效应

和量子相干性对其电子计数统计的影响; 第 6 章以 T 型双量子点为例, 在顺序隧穿占主导地位的偏压区域内, 讨论了共隧穿过程和量子相干性对其电子计数统计的影响. 为方便读者, 在最后一部分的 12 个附录中, 给出了计算开放量子系统电子计数统计涉及的关键主值积分计算、一些关键公式推导的细节, 以及作为例子的量子点系统的条件性约化密度矩阵的矩阵元运动方程.

作者要特别感谢合作者以及课题组成员给予的支持与帮助. 另外, 还要感谢山西省高等学校优秀青年学术带头人支持计划 (2016)、山西省自然科学基金 (批准号: 201601D011015), 以及国家自然科学基金 (批准号: 11204203) 的资金支持. 由于开放量子系统的电子计数统计理论属于不断发展的前沿领域, 并且研究方法和内容在不断更新和发展, 书中难免有疏漏和不妥之处, 恳请读者批评指正, 作者邮箱: xuehaibin@tyut.edu.cn 和 xuehaibintyut@126.com.

薛海斌

2018 年 8 月于太原

目　录

第 1 章　密度矩阵理论

一般情况下, 对于一个开放量子系统, 由于量子力学本身的物理特性或者统计物理性质, 其所处的状态不能用一个确定的量子态描述, 而是各个量子态以一定的概率出现. 本章介绍用密度算符描述量子系统微观状态的基本方法和相关理论 [1-4].

1.1　纯态和混合态

在量子力学中, 微观粒子的状态可以用希尔伯特空间中的态矢量描述. 若一个量子系统的态可以用一个态矢量 $|\Psi\rangle$ 描写, 则这种态称为纯态. 此外, 几个纯态 $|\Psi_i\rangle$ 通过叠加得到的新的态

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\Psi_i\rangle, \tag{1.1}$$

也是纯态. 因而, 只要能够用希尔伯特空间中一个态矢量描写的状态都是纯态.

若一个量子系统的状态以一定的概率 p_i 处于态矢量 $|\Psi_i\rangle\,(i = 1, 2, \cdots, N)$ 描写的态中, 即

$$\begin{cases} |\Psi_1\rangle : p_1 \\ |\Psi_2\rangle : p_2 \\ \quad\vdots \\ |\Psi_N\rangle : p_N \end{cases}, \tag{1.2}$$

则上面这种无法用一个态矢量描写的状态, 称为混合态.

为说明纯态和混合态的不同, 这里考虑任意一个力学量 A 的平均值. 在式 (1.1) 的纯态中, 力学量 A 的平均值为

$$\begin{aligned} \langle A\rangle &= \langle\Psi| A |\Psi\rangle = \sum_{i,j} \langle\Psi_i| c_i^* A c_j |\Psi_j\rangle \\ &= \sum_{i=j} |c_i|^2 \langle\Psi_i| A |\Psi_i\rangle + \sum_{i\neq j} c_i^* c_j \langle\Psi_i| A |\Psi_j\rangle, \end{aligned} \tag{1.3}$$

而在式 (1.2) 的混合态中, 力学量 A 的平均值为

$$\langle\langle A\rangle\rangle = \sum_i p_i \langle\Psi_i| A |\Psi_i\rangle. \tag{1.4}$$

由式 (1.3) 和式 (1.4) 可知, 在纯态中, 不同的两个态 $|\Psi_i\rangle$ 和 $|\Psi_j\rangle$ 之间发生干涉现象, 而在混合态情形下不发生干涉现象. 因此, 纯态是其各组分态的相干叠加, 而混合态是其各组分态的非相干叠加. 此外, 从式 (1.4) 还可以看出, 在一个混合态中求力学量的平均值应该分两步：第一, 对每个组分态求相应力学量的量子平均值; 第二, 求各组分态在混合态中出现概率的统计平均.

1.2 密度矩阵

为更方便地描写混合态, 引入一个称之为密度算符的力学量来代替式 (1.2). 对于纯态, 其是混合态的一个特例, 即某一态矢量以 100% 的概率出现. 在态矢量 $|\Psi\rangle$ 描写的纯态中, 力学量 A 的平均值为

$$\langle A\rangle = \langle\Psi|\,A\,|\Psi\rangle\,. \tag{1.5}$$

取态矢量 $|\Psi\rangle$ 的一组基矢 $\{|n\rangle\}$, 利用其完全性关系 $\sum\limits_n |n\rangle\langle n| = 1$, 将式 (1.5) 写为

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \langle\Psi|\,A\,|\Psi\rangle = \sum_n \langle\Psi|\,|n\rangle\langle n|\,A\,|\Psi\rangle \\ &= \sum_n \langle n|\,A\,|\Psi\rangle\langle\Psi|\,|n\rangle = \sum_n \langle n|\,A\rho\,|n\rangle = \mathrm{tr}\,(A\rho)\,,\end{aligned} \tag{1.6}$$

其中

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|\,. \tag{1.7}$$

式 (1.7) 中的 ρ 称为密度算符, 其性质由态矢量 $|\Psi\rangle$ 决定. 这里需要注意的是, 构造密度算符时必须使用归一化的态矢量. 另外, 力学量 A 在态矢量 $|\Psi\rangle$ 中取 $|n\rangle$ 的概率 W_n 为

$$W_n = |\langle n|\,|\Psi\rangle|^2 = \langle n|\,|\Psi\rangle\langle\Psi|\,|n\rangle = \langle n|\,\rho\,|n\rangle\,, \tag{1.8}$$

式 (1.8) 中的概率即为密度算符在本征态 $|n\rangle$ 中的平均值. 因此, 对于一个纯态, 密度算符 ρ 跟态矢量 $|\Psi\rangle$ 一样可以完全描述纯态的相关性质.

下面, 基于式 (1.4) 讨论混合态的密度算符. 为方便讨论, 同样选取 $\{|n\rangle\}$ 为基矢组, 相应地式 (1.4) 可以表示为

$$\begin{aligned}\langle\langle A\rangle\rangle &= \sum_n\sum_i p_i\,\langle\Psi_i|\,|n\rangle\langle n|\,A\,|\Psi_i\rangle \\ &= \sum_n \langle n|\,A\left[\sum_i |\Psi_i\rangle\,p_i\,\langle\Psi_i|\right]|n\rangle\end{aligned}$$

$$= \sum_n \langle n| A\rho |n\rangle = \mathrm{tr}\,(A\rho) = \mathrm{tr}\,(\rho A)\,, \tag{1.9}$$

其中

$$\rho = \sum_i |\Psi_i\rangle\, p_i \,\langle\Psi_i|. \tag{1.10}$$

式 (1.10) 中的 ρ 称为混合态的密度算符. 此时, 在混合态中, 力学量 A 的平均值可以表示为与纯态相同的形式, 即

$$\langle\langle A\rangle\rangle = \mathrm{tr}\,(A\rho)\,. \tag{1.11}$$

这里, 需要说明的是, 密度算符并不能给出混合态描写的粒子的位置分布概率, 但是, 在许多情况下, 采用统计平均的方法足以掌握系统的基本性质.

1.3 密度算符的性质

一般情况下, 一个混合态可以表示为

$$\rho = \sum_i |\Psi_i\rangle\, p_i \,\langle\Psi_i|, \tag{1.12}$$

其中 $\sum\limits_i p_i = 1$, $|\Psi_i\rangle\,(i = 1, 2, \cdots)$ 是构成混合态的纯态 (通常为系统哈密顿量的本征态), p_i 是相应的权重. 由于态 $|\Psi_i\rangle$ 在混合态中出现的概率 p_i 是实数, 因而

$$\rho^\dagger = \rho. \tag{1.13}$$

下面, 讨论密度算符的迹. 由完全性关系 $\sum\limits_n |n\rangle\langle n| = 1$ 可知

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,(\rho) &= \sum_n \langle n| \sum_i |\Psi_i\rangle\, p_i \,\langle\Psi_i|\, |n\rangle = \sum_n \sum_i \langle n|\, |\Psi_i\rangle\, p_i \,\langle\Psi_i|\, |n\rangle \\ &= \sum_i p_i \langle\Psi_i| \sum_n |n\rangle \langle n|\, |\Psi_i\rangle = \sum_i p_i \langle\Psi_i|\, |\Psi_i\rangle = \sum_i p_i = 1,\end{aligned} \tag{1.14}$$

上式称为密度算符的归一化条件. 这里, 只利用了基矢组 $\{|n\rangle\}$ 的完全性关系, 并不需要基矢组中的态矢量两两相互正交. 另外, 由完全性关系还可得

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,(\rho^2) &= \sum_n \langle n| \sum_i |\Psi_i\rangle\, p_i \,\langle\Psi_i| \sum_j |\Psi_j\rangle\, p_j \,\langle\Psi_j|\, |n\rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle\Psi_i|\, |\Psi_j\rangle \langle\Psi_j| \sum_n |n\rangle \langle n|\, |\Psi_i\rangle\, p_i p_j\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{i,j} \langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | | \Psi_i \rangle p_i p_j \\
&= \sum_i p_i \left[\sum_j \left| \langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle \right|^2 p_j \right],
\end{aligned} \tag{1.15}
$$

上式右边最后一项中的 $|\langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle|^2$ 在 $i \neq j$(非纯态) 情形下, 其数值一定小于 1, 即

$$
\sum_j \left| \langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle \right|^2 p_j < \sum_j p_j = 1, \tag{1.16}
$$

将式 (1.16) 代入式 (1.15), 并考虑到 $p_i < 1$, 可得

$$
\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) < \sum_i p_i = 1. \tag{1.17}
$$

对于纯态的情形, 则有

$$
\begin{aligned}
\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) &= \sum_n \langle n | | \Psi \rangle \langle \Psi | | \Psi \rangle \langle \Psi | | n \rangle \\
&= \sum_n \langle n | | \Psi \rangle \langle \Psi | | n \rangle \\
&= \langle \Psi | \sum_n | n \rangle \langle n | | \Psi \rangle = \langle \Psi | | \Psi \rangle = 1,
\end{aligned} \tag{1.18}
$$

由式 (1.17) 和式 (1.18) 可知, 密度算符具有如下性质:

$$
\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) \begin{cases} = 1, & \text{纯态} \\ < 1, & \text{混合态} \end{cases}. \tag{1.19}
$$

上式可以作为微观状态是否为纯态的一个判据.

另外, 若构成混合态的各组分纯态相互正交, 即 $\langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle = \delta_{i,j}$, 由密度算符的定义可知

$$
\rho | \Psi_j \rangle = \sum_i | \Psi_i \rangle p_i \langle \Psi_i | | \Psi_j \rangle = p_j | \Psi_j \rangle . \tag{1.20}
$$

上式表明, 密度算符的本征矢为构成混合态的各组分纯态的态矢量, 本征值为相应的组分态在混合态中的概率. 因此, 在构成混合态的各组分纯态相互正交时, 可以通过密度矩阵了解该混合态的状态分布.

1.4 密度算符的运动方程

一般情况下, 需要进一步研究量子态随时间的演化问题, 因此, 继续讨论密度算符在不同绘景中的演化方程. 在薛定谔绘景中, 密度算符是一个含时算符

$$
\rho(t) = \sum_i | \Psi_i(t) \rangle_{\mathrm{S}}\, p_i \; {}_{\mathrm{S}}\langle \Psi_i(t) |, \tag{1.21}
$$

其中 p_i 不随时间变化 (平衡态情形). 对式 (1.21) 求关于时间的微分可得

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_{\mathrm{S}}(t)}{\partial t} &= \sum_i\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}}}{\partial t}\right]p_i\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)| \\
&\quad -\sum_i\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}}p_i\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)|}{\partial t}\right] \\
&= \sum_i H\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}}p_i\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)| - \sum_i\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}}p_i\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)|\,H \\
&= H\rho_{\mathrm{S}}(t)-\rho_{\mathrm{S}}(t)\,H = [H,\rho_{\mathrm{S}}(t)],
\end{aligned}
\tag{1.22}
$$

上式即为密度算符的运动方程, 又称刘维尔方程. 这里, 需要注意区分密度算符的运动方程与海森伯绘景中描述力学量算符的运动方程之间的不同. 在能量表象中, 若设

$$
H\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle, \tag{1.23}
$$

则刘维尔方程可以表示为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\left\langle n\right|\rho_{\mathrm{S}}(t)\left|m\right\rangle}{\partial t} &= \left\langle n\right|H\rho_{\mathrm{S}}(t)\left|m\right\rangle - \left\langle n\right|\rho_{\mathrm{S}}(t)\,H\left|m\right\rangle \\
&= (E_n-E_m)\left\langle n\right|\rho_{\mathrm{S}}(t)\left|m\right\rangle,
\end{aligned}
\tag{1.24}
$$

求解上式可得

$$
\rho^{\mathrm{S}}_{n,m}(t) = \left\langle n\right|\rho_{\mathrm{S}}(t)\left|m\right\rangle = \rho^{\mathrm{S}}_{n,m}(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n-E_m)t/\hbar}. \tag{1.25}
$$

在海森伯绘景中, 态矢量不随时间变化, 力学量算符将随时间变化. 利用薛定谔绘景和海森伯绘景之间态矢量的变换关系

$$
\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}} = U(t,0)\left|\Psi_i\right\rangle_{\mathrm{H}}, \tag{1.26}
$$

可得密度算符在薛定谔绘景和海森伯绘景之间的变换关系

$$
\begin{aligned}
\rho_{\mathrm{S}}(t) &= \left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}}p_i\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)| \\
&= U(t,0)\left|\Psi_i\right\rangle_{\mathrm{H}}p_i\ {}_{\mathrm{H}}\langle\Psi_i|\,U^{-1}(t,0) = U(t,0)\,\rho_{\mathrm{H}}U^{-1}(t,0),
\end{aligned}
\tag{1.27}
$$

其中, $U(t,0)$ 为系统的时间演化算符.

现在, 讨论密度算符在相互作用绘景中的运动方程. 若系统的哈密顿量在薛定谔绘景中可以分解为

$$
H_{\mathrm{S}} = H^{\mathrm{S}}_0 + H^{\mathrm{S}}_1, \tag{1.28}
$$

其中, H^{S}_0 为主要部分, 通常不含时且其性质已知; H^{S}_1 为微扰部分, 仅对整个系统有比较小的影响. 由相互作用绘景和薛定谔绘景之间态矢量的变换关系

$$
\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{S}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H^{\mathrm{S}}_0t/\hbar}\left|\Psi_i(t)\right\rangle_{\mathrm{I}}, \tag{1.29}
$$

可得密度算符在相互作用绘景和薛定谔绘景之间的变换关系

$$\begin{aligned}\rho_{\mathrm{S}}(t) &= |\Psi_i(t)\rangle_{\mathrm{S}}\, p_i\ {}_{\mathrm{S}}\langle\Psi_i(t)| \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\,|\Psi_i(t)\rangle_{\mathrm{I}}\, p_i\ {}_{\mathrm{I}}\langle\Psi_i(t)|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{I}}(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar},\end{aligned} \tag{1.30}$$

即

$$\rho_{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{S}}(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}, \tag{1.31}$$

对上式求关于时间的微分可得

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_{\mathrm{I}}(t)}{\partial t} \\ =&\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\left(-H_0^{\mathrm{S}}\right)\rho_{\mathrm{S}}(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ &+\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_{\mathrm{S}}(t)}{\partial t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{S}}(t)\,H_0^{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ =&\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\left[\rho_{\mathrm{S}}(t)\,H_0^{\mathrm{S}}-H_0^{\mathrm{S}}\rho_{\mathrm{S}}(t)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ &+\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\left[H_{\mathrm{S}}\rho_{\mathrm{S}}(t)-\rho_{\mathrm{S}}(t)\,H_{\mathrm{S}}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ =&\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\left[\left(H_{\mathrm{S}}-H_0^{\mathrm{S}}\right)\rho_{\mathrm{S}}(t)-\rho_{\mathrm{S}}(t)\left(H_{\mathrm{S}}-H_0^{\mathrm{S}}\right)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ =&\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}H_1^{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{S}}(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar} \\ &-\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{S}}(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}H_1^{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar},\end{aligned} \tag{1.32}$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho_{\mathrm{I}}(t)}{\partial t} = \left[H_1^{\mathrm{I}}(t)\,,\rho_{\mathrm{I}}(t)\right], \tag{1.33}$$

其中 H_1^{I} 和 $\rho_{\mathrm{I}}(t)$ 均为相互作用绘景中的算符, 即

$$H_1^{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}H_1^{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}, \tag{1.34}$$

$$\rho_{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}\rho_{\mathrm{S}}(t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0^{\mathrm{S}}t/\hbar}, \tag{1.35}$$

式 (1.33) 即为密度算符在相互作用绘景中的运动方程, 通过求解该方程, 即可确定在相互作用绘景中混合态随时间变化的动力学性质.

最后, 讨论基于密度矩阵在三种绘景中求力学量 A 的平均值. 在薛定谔绘景中, 密度算符随时间变化, 力学量不随时间变化, 由式 (1.9) 可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\langle A\rangle\rangle}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{tr}\left[\rho(t)\,A\right] = \mathrm{tr}\left[\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}A\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left([H,\rho]\,A\right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left[H\rho A-\rho HA\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left[\rho AH-\rho HA\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left(\rho\,[A,H]\right),\end{aligned} \tag{1.36}$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\langle\langle A\rangle\rangle}{\partial t} = \langle[A,H]\rangle\,. \tag{1.37}$$

在海森伯绘景中, 密度算符不随时间变化, 而力学量随时间变化, 因而有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\langle A\rangle\rangle}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{tr}\left[\rho A(t)\right] = \mathrm{tr}\left[\rho\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left(\rho\left[A,H\right]\right) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\left[A,H\right]\right\rangle,\end{aligned} \tag{1.38}$$

由式 (1.37) 和式 (1.38) 可知, 力学量 A 的平均值在薛定谔绘景和海森伯绘景中遵循相同的方程. 对于相互作用绘景, 密度算符和力学量均随时间变化, 因此有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\langle\langle A\rangle\rangle}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\mathrm{tr}\left[\rho(t)A(t)\right] = \mathrm{tr}\left[\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}A(t) + \rho(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left(\left[H_1,\rho\right]A + \rho\left[A,H_0\right]\right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left[H_1\rho A + \rho A H_0 - \rho H_1 A - \rho H_0 A\right] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left[\rho A\left(H_0+H_1\right) - \rho\left(H_0+H_1\right)A\right] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left(\rho\left[A,\left(H_0+H_1\right)\right]\right) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{tr}\left(\rho\left[A,H\right]\right).\end{aligned} \tag{1.39}$$

因此, 在密度矩阵理论框架下, 力学量 A 的平均值在三种绘景中遵循相同的方程.

1.5 相干叠加与非相干叠加

对于一个量子系统, 假设其密度矩阵可以用态矢量 $\{|\Psi_i\rangle\}$ 的表象描述. 若在 $\{|\Psi_i\rangle\}$ 表象中, 其密度矩阵 ρ 含有非对角元, 则称该系统是态矢量 $|\Psi_i\rangle$ 的相干叠加; 特别的, 若系统是一个纯态, 则称之为完全相干叠加. 反之, 若系统的密度矩阵 ρ 仅有对角元, 则称该系统是态矢量 $|\Psi_i\rangle$ 的非相干叠加. 事实上, 区分 "完全相干" 和 "相干" 没有特别重要的意义, 并且在文献中 "相干" 一词通常使用于上面的两种情况. 因此, 在本书中, 遵循上述传统, 使用 "相干" 一词时, 不再考虑系统是否处于纯态或者混合态.

由上面分析可知, "相干叠加" 的概念取决于量子系统密度矩阵的表象选择. 例如, 式 (1.12) 描述的混合态是态矢量 $|\Psi_i\rangle$ 的非相干叠加. 但是, 在满足完全性条件

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1, \tag{1.40}$$

和正交性

$$\langle\phi_n||\phi_m\rangle = \delta_{n,m}, \tag{1.41}$$

的态矢量 $\{|\phi_n\rangle\}$ 表象中, 式 (1.12) 描述的混合态可以表示为

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_i |\Psi_i\rangle\, p_i\, \langle\Psi_i| \\ &= \sum_i \sum_{n,m} c_{i,n}\, |\phi_n\rangle p_i\, \langle\phi_m| c_{i,m}^* = \sum_{i,n,m} p_i c_{i,n} c_{i,m}^*\, |\phi_n\rangle\, \langle\phi_m|.\end{aligned} \tag{1.42}$$

考虑上式中的密度算符在态 $|\phi_k\rangle$ 和 $\langle\phi_j|$ 中的矩阵元, 并考虑其正交性条件可得

$$\begin{aligned}\langle\phi_j|\, \rho\, |\phi_k\rangle &= \sum_{i,n,m} p_i\, \langle\phi_j|\, c_{i,n} c_{i,m}^*\, |\phi_n\rangle\, \langle\phi_m|\, |\phi_k\rangle \\ &= \sum_{i,n,m} p_i c_{i,n} c_{i,m}^* \delta_{j,n} \delta_{m,k} = \sum_i p_i c_{i,j} c_{i,k}^*.\end{aligned} \tag{1.43}$$

由式 (1.43) 可知, 式 (1.12) 描述的混合态也可以表示为态矢量 $|\phi_n\rangle$ 的相干叠加. 因此, 在密度矩阵理论中, 密度矩阵的非对角元刻画了基矢组中不同态矢量之间的相干性 [3]. 在本书后面的章节中, 重点讨论量子系统约化密度矩阵的非对角元, 即量子相干性对其非马尔可夫电子计数统计特性的影响 [5,6].

参 考 文 献

[1] 徐在新. 高等量子力学. 上海: 华东师范大学出版社, 1994: 2-13, 80-94.

[2] 喀兴林. 高等量子力学. 北京: 高等教育出版社, 2001: 42-51, 155-168, 192-205.

[3] Blum K. Density Matrix Theory and Applications. 3rd ed. Dordrecht: Springer, 2012: Chap. 1 and Chap. 2.

[4] Schaller G. Open Quantum Systems Far from Equilibrium. Dordrecht: Springer, 2014: 10-16.

[5] Xue H B, Jiao H J, Liang J Q, et al. Non-Markovian full counting statistics in quantum dot molecules. Sci. Rep., 2015, 5: 8978.

[6] Xue H B, Liang J Q, Liu W M. Non-Markovian full counting statistics of cotunneling assisted sequential tunneling in a side-coupled double quantum dot system. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2019, 109: 39-51.