



《量子多体理论》笔记

Quantum Theory of Many-Particle System

教师：金彪

作者：张迎姬 李佩璇

单位：中国科学院物理研究所



2022年7月28日

This page is intentionally left blank.

前　　言

本资料是笔者 2021-2022 学年春季学期在中国科学院大学物理科学学院金彪老师讲授的《量子多体理论》课程上留下的笔记。

由于笔者能力有限，本资料中一定还存在着大量错误，若发现欢迎联系邮箱：lipeduan21@mails.ucas.ac.cn、zhangyingji21@mails.ucas.ac.cn。

主要参考文献：

- A.A.Abrikosov 等: *Quantum Field Theory in Statistical Physics*, 1963.
- A.L.Fetter and J.D.Walecka: *Theory of Many – Particle System*, 1991.
- G.D.Mahan: *Many – Particle Physics*, 1990.
- 王怀玉: 凝聚态物理的格林函数理论, 2008.

目 录

3 零温单粒子格林函数, 费曼图技术及其应用	1
3.1 零温单粒子格林函数	1
3.1.1 零温单粒子格林函数的定义	2
3.1.2 对称性质	2
3.1.3 物理意义	3
3.2 物理量的表示	3
3.2.1 单体算符的基态平均	3
3.2.2 基态能 (两种方法求解)	4
3.3 单粒子格林函数的相互作用绘景	12
3.3.1 变换关系	13
3.3.2 相互作用的绝热引入 ($T = 0$)	13
3.4 Wick 定理	16
3.4.1 正规乘积	18
3.4.2 两个算符的收缩	20
3.4.3 辅助定理	22
3.4.4 Wick 定理	25
3.5 坐标空间单粒子格林函数的费曼图技术	27
3.5.1 费曼图的基本概念	27
3.5.2 坐标空间的费曼图规则	30
3.6 动量空间单粒子格林函数的费曼图技术	33
3.6.1 傅立叶变换	33
3.6.2 动量空间 n 阶费曼图规则	34
3.7 Dyson 方程	35
3.7.1 坐标空间中的 Dyson 方程	35
3.7.2 动量空间中的 Dyson 方程	38
3.7.3 正规自能骨架图	38
3.7.4 极化图	39
3.8 费曼图技术在凝胶模型中的应用	40
3.8.1 Hatree-Fock 近似	41
3.8.2 无规相 (最强发散项) 近似	43
3.8.3 密度关联格林函数	57

第3章 零温单粒子格林函数, 费曼图技术及其应用

3.1 零温单粒子格林函数

薛定谔绘景中引入场算符 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$, 表示在空间某点 \mathbf{r} 湮灭或产生一个自旋为 σ 的粒子, 可以在一组正交完备集 $\{\phi_k(\mathbf{r})\}$ (注意这里 k 是表征完备基的量子数) 下展开:

$$\begin{cases} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \equiv \sum_k \phi_k(\mathbf{r}) \hat{C}_{k\sigma}, \\ \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \equiv \sum_k \phi_k^*(\mathbf{r}) \hat{C}_{k\sigma}^\dagger. \end{cases} \quad (3.1)$$

这里只考虑正常态, 不包括超导态、玻色-爱因斯坦凝聚态等复杂状态. 完备基的选择视具体情况而定, 通常可以选择平面波表象、布洛赫表象和瓦尼尔表象, $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger$ 和 $\hat{C}_{k\sigma}$ 则是相应表象下的产生和湮灭算符.

选择布洛赫表象时, 体系有多条能带, 对于费米子通常选择最靠近费米面的能带. 需要强调的是 $\{\phi_k(\mathbf{r})\}$ 是全同粒子体系中单体算符的正交完备基, 这样的全同粒子体系可能是由实物粒子如电子等组成, 也可能是由非实物粒子如声子等元激发组成. 具体表象下产生湮灭算符间有如下对易关系:

$$[\hat{C}_{k\sigma}, \hat{C}_{k'\sigma'}^\dagger]_\mp = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad [\hat{C}_{k\sigma}, \hat{C}_{k'\sigma'}]_\mp = [\hat{C}_{k\sigma}^\dagger, \hat{C}_{k'\sigma'}^\dagger]_\mp = 0, \quad (3.2)$$

其中 $-$ 表示玻色子算符间的对易关系, $+$ 表示费米子的反对易关系. 这里和之后将这两种关系写在一起, 代表玻色子的符号在上, 代表费米子的符号在下. 利用这些关系和基底间的正交完备性可以得到场算符间的对易关系:

$$[\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.3)$$

$$[\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}')]_\mp = [\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{x}')]_\mp = 0. \quad (3.4)$$

利用海森伯绘景和薛定谔绘景中算符的变换关系, 可以得到海森伯绘景下场算符 $\hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{x}, t)$ 与薛定谔绘景下场算符 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x})$ 的关系:

$$\hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{x}, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t}, \quad (3.5)$$

这里的哈密顿量不显含时间.

3.1.1 零温单粒子格林函数的定义

定义 3.1 零温单粒子格林函数

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv -i \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle. \quad (3.6)$$

 **注意** 有文献也称这种形式的格林函数为因果格林函数, 它是最常用的格林函数, 可以用图形技术来处理. 由于格林函数中含有两个时间, 一般地我们也称其为双时格林函数. 对于热力学因果格林函数来说, 它的物理意义是在 N 个粒子的统计系综中, 在 t' 时刻 \mathbf{x}' 位置处产生一个粒子, 它运动到 t 时刻在 \mathbf{x} 处湮灭的传播概率. 这第 $N+1$ 个粒子与 N 个粒子是有相互作用的. 如果有外场, 或者相互作用与自旋有关, 粒子在运动过程中由于受到散射或外场作用, 自旋可能会改变. 由于相互作用的存在, 该运动粒子与裸粒子(即无相互作用时)的能谱会不同. 我们将这样的粒子称为准粒子, 它的能谱由格林函数的极点确定.

当时间 $t' > t$ 时, 格林函数表明先湮灭一个粒子然后再产生它, 这完全遵守因果关系. 零温的因果格林函数则表示在 N 个粒子的基态中产生再湮灭一个粒子的传播概率幅.

格林函数的极点是粒子的能量, 亦即哈密顿量的本征值. 一般来说本征值是实数. 但由于现在产生的是准粒子, 准粒子在运动过程中由于与其他粒子的相互作用, 可能会衰变. 所以准粒子是有寿命的, 这一点在格林函数上表示为极点是个复数. 实部表示准粒子的能量, 虚部的倒数是准粒子的寿命. 当粒子不衰变时, 虚部是无穷小量, 寿命无限长.

这里的 $|\psi_H^0\rangle$ 与我们之前定义的 $|E_g\rangle$ 同为基态, 这样表示是为了强调式中所有物理量都在海森伯绘景中.

$|\psi_H^0\rangle$ 的本征值方程是

$$\hat{H} |\psi_H^0\rangle = E_g |\psi_H^0\rangle. \quad (3.7)$$

引入编时算符 \hat{T} , 定义为

$$\begin{aligned} \hat{T} [\hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t')] &= \begin{cases} \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t'), & t > t', \\ \pm \hat{B}_H(t') \hat{A}_H(t), & t < t' \end{cases} \\ &= \theta(t - t') \hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \pm \theta(t' - t) \hat{B}_H(t') \hat{A}_H(t), \end{aligned} \quad (3.8)$$

且有

$$\hat{T} [\hat{A}(t) \hat{B}(t')] = \hat{T} [\pm \hat{B}(t') \hat{A}(t)]. \quad (3.9)$$

3.1.2 对称性质

零温单粒子格林函数在有对称性的体系下, 形式可以简化, 具体体现在其所依赖的参数减少:

1. \hat{H} 不显含时间, 具有时间对称性

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t - t'). \quad (3.10)$$

2. 空间均匀 ($[\hat{H}, \hat{P}]_- = 0$), 具有平移对称性

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; t, t'). \quad (3.11)$$

3. 相互作用与自旋无关

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.12)$$

其中

$$G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv \frac{\sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')}{\sum_{\alpha} 1} = \frac{\sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')}{2S + 1}. \quad (3.13)$$

4. 具备以上三个对称性

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; t - t') \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.14)$$

3.1.3 物理意义

假设 $t > t'$, 将场算符化为在薛定谔绘景下的表示:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= -i \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= -i \left\langle \psi_H^0 \left| e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') e^{-i\hat{H}t'} \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= -ie^{iE_g(t-t')} \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \right| \psi_H^0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

这样, 零温单粒子格林函数的物理意义便是: t' 时刻基态中 \mathbf{x}' 位置产生一个自旋为 β 的粒子, 然后经过 $t - t'$ 的演化在 t 时刻这一粒子在 \mathbf{x} 处且自旋为 α 消灭的几率幅.

3.2 物理量的表示

3.2.1 单体算符的基态平均

单体算符可以利用场算符写为(二次量子化):

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{\alpha\beta} \int \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.16)$$

其在(零温)基态下的均值为:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{F}^{(1)} \right| \psi_H^0 \right\rangle &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}) \right| \psi_H^0 \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.17)$$

注意这里 $\hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x})$ 只作用在后面与 \mathbf{x} 有关的项, 所以上面的等式是成立的. 进一步, 写成海森伯绘景中的形式:

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{F}^{(1)} \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}') e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_{H\beta}(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t} \right| \psi_H^0 \right\rangle \quad (3.18) \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t) \hat{\psi}_{H\beta}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle. \end{aligned}$$

为了与单粒子零温格林函数联系, 可以引入时间的极限:

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{F}^{(1)} \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\beta}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\beta}(\mathbf{x}, t) \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \pm \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\beta}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \pm i \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) G_{\beta\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'). \quad (3.19) \end{aligned}$$

例 3.1 总动能算符的基态平均.

总动能算符是单体算符, 可以写为:

$$\hat{T}_K = \sum_{\alpha} \int \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (3.20)$$

这里暗含:

$$\hat{f}_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = -\frac{\nabla^2}{2m} \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.21)$$

总动能算符的基态平均为:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T}_K \right| \psi_H^0 \right\rangle &= \pm i \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \delta_{\alpha\beta} \right) G_{\beta\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \\ &= \pm i \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'). \quad (3.22) \end{aligned}$$

3.2.2 基态能 (两种方法求解)

(i) 方法之一

全同费米子体系的哈密顿量是

$$\hat{H} = \hat{T}_K + \hat{V}, \quad (3.23)$$

其中动能项和势能项分别为

$$\begin{aligned} \hat{T}_K &= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{x}), \\ \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}') \hat{V}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \hat{\psi}_{\beta}(\mathbf{x}') \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

于是系统的基态能可以表示为

$$E_g = \langle \psi_H^0 | \hat{H} | \psi_H^0 \rangle = \langle \psi_H^0 | \hat{T}_K | \psi_H^0 \rangle + \langle \psi_H^0 | \hat{V} | \psi_H^0 \rangle, \quad (3.25)$$

其中动能项的基态平均是

$$\langle \psi_H^0 | \hat{T}_K | \psi_H^0 \rangle = -i \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\sigma\sigma}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'), \quad (3.26)$$

但是势能项的基态平均 $\langle \psi_H^0 | \hat{V} | \psi_H^0 \rangle$ 需要详细计算。下面利用运动方程求解。

场算符的海森伯运动方程是

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) = [\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t), \hat{H}]_-, \quad (3.27)$$

其中右式需要先换到薛定谔景下求解对易子，再通过时间演化算符换回含时的形式，即

$$[\hat{\psi}_{H\alpha}, \hat{H}]_- = e^{i\hat{H}t} [\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \hat{H}]_- e^{-i\hat{H}t}, \quad (3.28)$$

其中右边的对易式可以写成：

$$[\hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \hat{H}]_- = \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{z}') \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{z}') \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}). \quad (3.29)$$

习题 1

证明式(3.29)成立。

代回运动方程，得到

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{H\sigma}^{\dagger}(\mathbf{z}', t) \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{z}', t) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t). \quad (3.30)$$

对等式两边左乘 $\hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t')$ 然后取基态平均, 得到

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \left\langle \psi_H^0 \left| \sum_{\sigma} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\sigma}^\dagger(\mathbf{z}', t) \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{z}', t) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.31)$$

两边取极限 $\lim_{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}$, $\lim_{t' \rightarrow t^+}$, 然后对 α 求和, 对 \mathbf{x} 积分, 得到

$$\begin{aligned} & \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left\langle \psi_H^0 \left| \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t') \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left\langle \psi_H^0 \left| \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}', t) \hat{\psi}_{H\sigma}^\dagger(\mathbf{z}', t) \right. \right. \\ & \quad \times \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{z}', t) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \left. \right| \psi_H^0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.32)$$

等式左方可以写成:

$$-i \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'), \quad (3.33)$$

右方直接取极限后, 可以写成:

$$\left\langle \psi_H^0 \left| \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\sigma}^\dagger(\mathbf{z}', t) \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{H\sigma}(\mathbf{z}', t) \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \right| \psi_H^0 \right\rangle. \quad (3.34)$$

考虑绘景变换, 即

$$\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t}, \quad (3.35)$$

带入等式右方, 就能得到与最初的哈密顿量中相互作用项相似的形式, 即

$$\left\langle \psi_H^0 \left| \sum_{\alpha} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{z}' \hat{\psi}_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_{\sigma}^\dagger(\mathbf{z}') \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{z}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{z}') \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \right| \psi_H^0 \right\rangle = 2 \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{V} \right| \psi_H^0 \right\rangle. \quad (3.36)$$

代回运动方程, 就得到了相互作用项基态平均用格林函数表示的形式

$$\left\langle \psi_H^0 \left| \hat{V} \right| \psi_H^0 \right\rangle = -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'). \quad (3.37)$$

于是基态能的表达式可以写成

$$\begin{aligned} E_g &= \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T}_k \right| \psi_H^0 \right\rangle + \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{V} \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= -i \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \\
& = -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'). \tag{3.38}
\end{aligned}$$

(ii) 方法之二 (利用 Hellmann-Feynmann 定理)

首先构造含有参量 λ 的哈密顿量

$$\hat{H}(\lambda) \equiv \hat{T}_K + \lambda \hat{V}, \quad (0 \leq \lambda \leq 1) \tag{3.39}$$

当 λ 取 0 和 1 时, 具有实际的物理意义, 即

$$\hat{H}(\lambda = 1) = \hat{H}, \quad \hat{H}(\lambda = 0) = \hat{T}_K. \tag{3.40}$$

基态的本征方程是

$$\hat{H}(\lambda) |\psi_H^0(\lambda)\rangle = E_g(\lambda) |\psi_H^0(\lambda)\rangle, \tag{3.41}$$

其中的基态和基态能都依赖于 λ , 有

$$E_g(\lambda = 1) = E_g, \quad E_g(\lambda = 0) = E_g^0, \quad \langle \psi_H^0(\lambda) | \psi_H^0(\lambda) \rangle = 1. \tag{3.42}$$

基态能的表达式为

$$E_g(\lambda) = \langle \psi_H^0(\lambda) | \hat{H}(\lambda) | \psi_H^0(\lambda) \rangle, \tag{3.43}$$

对参量 λ 求导数, 得到

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\lambda} E_g(\lambda) &= \left(\frac{d}{d\lambda} \langle \psi_H^0(\lambda) | \right) \hat{H}(\lambda) |\psi_H^0(\lambda)\rangle + \langle \psi_H^0(\lambda) | \left(\frac{d}{d\lambda} \hat{H}(\lambda) \right) |\psi_H^0(\lambda)\rangle \\
&\quad + \langle \psi_H^0(\lambda) | \hat{H}(\lambda) \left(\frac{d}{dt} |\psi_H^0(\lambda)\rangle \right) \\
&= \left(\frac{d}{d\lambda} \langle \psi_H^0(\lambda) | \right) |\psi_H^0(\lambda)\rangle E_g(\lambda) + \langle \psi_H^0(\lambda) | \left(\frac{d}{d\lambda} \hat{H}(\lambda) \right) |\psi_H^0(\lambda)\rangle \\
&\quad + E_g(\lambda) \langle \psi_H^0(\lambda) | \left(\frac{d}{dt} |\psi_H^0(\lambda)\rangle \right) \\
&= E_g(\lambda) \frac{d}{d\lambda} (\langle \psi_H^0(\lambda) | \psi_H^0(\lambda) \rangle) + \langle \psi_H^0(\lambda) | \left(\frac{d}{d\lambda} \hat{H}(\lambda) \right) |\psi_H^0(\lambda)\rangle \\
&= \langle \psi_H^0(\lambda) | \left(\frac{d}{d\lambda} \hat{H}(\lambda) \right) |\psi_H^0(\lambda)\rangle \\
&= \langle \psi_H^0(\lambda) | \hat{V} |\psi_H^0(\lambda)\rangle,
\end{aligned} \tag{3.44}$$

即

$$\frac{d}{d\lambda} E_g(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \langle \psi_H^0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_H^0(\lambda) \rangle, \tag{3.45}$$

等式两边对 λ 从 0 到 1 积分得到

$$\begin{aligned} \int_0^1 d\lambda \frac{d}{d\lambda} E_g(\lambda) &= \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \psi_H^0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_H^0(\lambda) \rangle \\ \Rightarrow E_g(\lambda) \Big|_0^1 &= \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \underbrace{\langle \psi_H^0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_H^0(\lambda) \rangle}_{\text{系统相互作用的基态平均值}}, \end{aligned} \quad (3.46)$$

这样, 基态能就可以用格林函数表示为

$$\begin{aligned} E_g(\lambda) &= E_g^0 + \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \psi_H^0(\lambda) | \lambda \hat{V} | \psi_H^0(\lambda) \rangle \\ &= E_g^0 + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \left[-\frac{i}{2} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{t' \rightarrow t^+ \\ \mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t'; \lambda) \right]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

这样就得到了基态能的第二种表达式.

例 3.2 自由粒子系统的基态能 E_g^0 的计算.

哈密顿量用场算符表示为

$$\hat{H} = \hat{T}_K = \sum_{\sigma} \int \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} \right) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (3.48)$$

场算符选取平面波表象, 即

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\sigma}, \quad \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger}. \quad (3.49)$$

哈密顿量变成

$$\hat{H} = \hat{T}_K = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k^0 \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger} \hat{C}_{k\sigma}, \quad \left(\epsilon_k^0 \equiv \frac{k^2}{2m} \right) \quad (3.50)$$

由于基态的粒子数是固定的, 因此这里不需要引入巨正则系综的化学势. 系统的基态用平面波表象的算符表示为

$$|\Phi^0\rangle = \prod_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ \sigma}} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger} |0\rangle, \quad (3.51)$$

其中 $|0\rangle$ 表示粒子的真空态, 具有性质

$$\langle 0|0\rangle = 1, \quad \hat{C}_{k\sigma}|0\rangle = 0. \quad (3.52)$$

格林函数可以表示成

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \langle \Phi^0 | \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \right] | \Phi^0 \rangle \\ &= \theta(t - t') \langle \Phi^0 | \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') | \Phi^0 \rangle \\ &\quad - \theta(t' - t) \langle \Phi^0 | \hat{\psi}_{H\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) | \Phi^0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.53)$$

其中场算符用平面波表象表示为

$$\begin{aligned}
 \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) &= e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}) e^{-i\hat{H}t} \\
 &= e^{i\hat{H}t} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\alpha} \right) e^{-i\hat{H}t} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\hat{H}t} \hat{C}_{k\alpha} e^{-i\hat{H}t} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\alpha}(t),
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

其中 $\hat{C}_{k\alpha}(t)$ 需要利用算符对易关系的 Baker-Campbell-Hausdorff 公式, 即

$$e^{-\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]_- + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]_-]_- + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]_-]_-]_- + \dots, \tag{3.55}$$

或通过建立运动方程的方式进行求解.

下面用运动方程法求解. 建立运动方程, 有

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \hat{C}_{k\alpha}(t) &= [\hat{C}_{k\alpha}(t), \hat{H}]_- \\
 &= e^{i\hat{H}t} [\hat{C}_{k\alpha}, \hat{H}]_- e^{-i\hat{H}t} \\
 &= e^{i\hat{H}t} \left[\hat{C}_{k\alpha}, \sum_{k'\alpha'} \epsilon_{k'}^0 \hat{C}_{k'\alpha'}^\dagger \hat{C}_{k'\alpha'} \right]_- e^{-i\hat{H}t} \\
 &= \sum_{k',\alpha'} e^{i\hat{H}t} [\hat{C}_{k\alpha}, \epsilon_{k'}^0 \hat{C}_{k'\alpha'}^\dagger \hat{C}_{k'\alpha'}]_- e^{-i\hat{H}t} \\
 &= \sum_{k',\alpha'} e^{i\hat{H}t} [\hat{C}_{k\alpha}, \hat{C}_{k'\alpha'}^\dagger]_- \hat{C}_{k'\alpha'} e^{-i\hat{H}t} \epsilon_{k'}^0 \\
 &= \sum_{k',\alpha'} e^{i\hat{H}t} \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} \hat{C}_{k'\alpha'} e^{-i\hat{H}t} \epsilon_{k'}^0 \\
 &= e^{i\hat{H}t} \hat{C}_{k\alpha} e^{-i\hat{H}t} \epsilon_k^0 \\
 &= \epsilon_k^0 \hat{C}_{k\alpha}(t),
 \end{aligned} \tag{3.56}$$

即运动方程可以写成

$$i \frac{d}{dt} \hat{C}_{k\alpha}(t) = \epsilon_k^0 \hat{C}_{k\alpha}(t), \tag{3.57}$$

利用初始条件 $\hat{C}_{k\alpha}(t=0) = \hat{C}_{k\alpha}$, 对时间积分得到

$$\begin{aligned}
 \ln \hat{C}_{k\alpha}(t) \Big|_0^t &= -i\epsilon_k^0 t \\
 \Rightarrow \ln \hat{C}_{k\alpha}(t) &= -i\epsilon_k^0 t + \ln \hat{C}_{k\alpha} \\
 \Rightarrow \hat{C}_{k\alpha}(t) &= e^{-i\epsilon_k^0 t} \hat{C}_{k\alpha},
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

将这一结果代回场算符的表达式中, 得到

$$\begin{cases} \hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\epsilon_k^0 t} \hat{C}_{k\alpha}, \\ \hat{\psi}_{H\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{i\epsilon_k^0 t} \hat{C}_{k\alpha}^\dagger. \end{cases} \quad (3.59)$$

代回到格林函数的表达式中, 就得到了

$$\begin{aligned} & iG_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \\ &= \theta(t - t') \left\langle \Phi^0 \left| \left\{ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \hat{C}_{k\alpha} e^{-i\epsilon_k^0 t} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right\} \left\{ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k'} \hat{C}_{k'\beta}^\dagger e^{i\epsilon_{k'}^0 t'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} \right\} \right| \Phi^0 \right\rangle \right. \\ & \quad \left. - \theta(t' - t) \left\langle \Phi^0 \left| \left\{ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{k'} \hat{C}_{k'\beta}^\dagger e^{i\epsilon_{k'}^0 t'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} \right\} \left\{ \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \hat{C}_{k\alpha} e^{-i\epsilon_k^0 t} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \right\} \right| \Phi^0 \right\rangle \right. \\ &= \frac{1}{V} \sum_{k,k'} \left\langle \Psi^0 \left| \hat{C}_{k\alpha} \hat{C}_{k'\beta}^\dagger \right| \Phi^0 \right\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} e^{-i\epsilon_k^0 t} e^{i\epsilon_{k'}^0 t'} \theta(t - t') \\ & \quad - \frac{1}{V} \sum_{k,k'} \left\langle \Psi^0 \left| \hat{C}_{k'\beta}^\dagger \hat{C}_{k\alpha} \right| \Phi^0 \right\rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} e^{-i\epsilon_{k'}^0 t} e^{i\epsilon_k^0 t'} \theta(t - t') \\ &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0 (t-t')} \theta(t - t') \\ & \quad - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0 (t-t')} \theta(t' - t), \end{aligned} \quad (3.60)$$

代回到基态能的表达式中, 有

$$\begin{aligned} E_g^0 &= -\frac{i}{2} \sum_\alpha \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \\ &= -\frac{i}{2} \sum_\alpha \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) \left[\frac{i}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0 (t-t')} \right] \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\alpha,k} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0 (t-t')} \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{\alpha,k} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left[\frac{k^2}{2m} + \epsilon_k^0 \right] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0 (t-t')} \\ &= \sum_{\alpha,k} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \epsilon_k^0. \end{aligned} \quad (3.61)$$

由于前面对 t' 取极限的方式是 $\lim_{t' \rightarrow t^+}$, 因此上式第二步只有包括 $\theta(t' - t)$ 的一项非零, 另一项等于零直接略去.

以下考虑空间均匀的情况, 即

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = G_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t'), \quad (3.62)$$

引入对格林函数的傅立叶变换, 有

$$\begin{cases} G_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') = \frac{1}{V} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-\omega(t-t')]}, \\ G_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \int d(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \int d(t - t') G_{\alpha\beta}(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t - t') e^{-i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-\omega(t-t')]} \end{cases} \quad (3.63)$$

代入基态能的表达式中, 有

$$\begin{aligned} E_g &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{x} - \mathbf{x}'; t - t') \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\nabla^2}{2m} \right) \frac{1}{V} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-\omega(t-t')]} \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, k} \int d\mathbf{x} \lim_{\substack{\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x} \\ t' \rightarrow t^+}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{V} \frac{d\omega}{2\pi} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-\omega(t-t')]} \left(\omega + \frac{k^2}{2m} \right) \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha, k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega) \left(\omega + \frac{k^2}{2m} \right) e^{i\omega\eta}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

这样就得到了在频率表象下, 带有参量 λ 的基态能的另一种表达式, 即

$$E_g = E_g^0 - \frac{i}{2} \sum_{\alpha, k} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\omega - \frac{k^2}{2m} \right) G_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \omega; \lambda) e^{i\omega\eta}. \quad (3.65)$$

下面仍以自由粒子为例, 证明经傅立叶变换后, 上式给出相同的系统基态能. 前面已经推导过, 自由粒子的格林函数可以写成

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0(t-t')} \theta(t - t') \\ &\quad - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} e^{-i\epsilon_k^0(t-t')} \theta(t' - t), \end{aligned} \quad (3.66)$$

经傅立叶变换后, 格林函数可以写成

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) &= \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \epsilon_k^0 - i\eta} \right] \\ &= \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta \operatorname{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F)}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

其中符号函数 $\operatorname{sgn}(x)$ 的定义式为

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases} \quad (3.68)$$

习题 2

证明格林函数傅立叶变换后能够写成式(3.67)的形式.

将格林函数带入自由粒子基态能的表达式中, 得到

$$\begin{aligned} E_g^0 &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha,k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G_{\alpha\alpha}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \left(\omega + \frac{k^2}{2m} \right) e^{i\omega\eta} \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha,k} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_k^0 - i\eta} \right] \left(\omega + \frac{k^2}{2m} \right) e^{i\omega\eta}, \end{aligned} \quad (3.69)$$

这里可以对 ω 进行解析延拓, 代换成复变量 z , 由约当引理, 这里要取上半圆围道积分. 根据留数定理, 上式变成

$$\begin{aligned} E_g^0 &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha,k} \oint \frac{dz}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \epsilon_k^0 - i\eta} \right] \left(z + \frac{k^2}{2m} \right) e^{iz\eta} \\ &= -\frac{i}{2} \sum_{\alpha,k} \frac{1}{2\pi} \cdot 2\pi i \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \left(\epsilon_k^0 + i\eta + \frac{k^2}{2m} \right) e^{i(\epsilon_k^0 + i\eta)\eta} \\ &= \sum_{\alpha,k} \epsilon_k^0 \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \epsilon_k^0 \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{k_F} dk \frac{k^4}{2m} \\ &= \frac{V}{\pi^2} \frac{1}{5} \frac{k_F^5}{2m} \\ &= \frac{3}{5} N \epsilon_F, \end{aligned} \quad (3.70)$$

其中有费米波矢 $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$.

3.3 单粒子格林函数的相互作用绘景

首先回顾一下已知的内容. 单粒子格林函数定义为

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv -i \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{H\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{H\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle, \quad (3.71)$$

其中 $|\psi_H^0\rangle$ 是系统的基态, 满足

$$\hat{H} |\psi_H^0\rangle = E_g |\psi_H^0\rangle. \quad (3.72)$$

考虑哈密顿量 \hat{H} 可以写为不包含相互作用的 \hat{H}_0 和包含相互作用的 \hat{V} 两项:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (3.73)$$

其中 \hat{V} 相对于 \hat{H}_0 是小量, 有

$$\hat{H}_0 |\Phi^0\rangle = E_g^0 |\Phi^0\rangle, \quad (3.74)$$

其中 E_g^0 对应自由粒子系统的基态能, $|\Phi^0\rangle$ 是无相互作用哈密顿量的基态.

这些结果都是在海森堡绘景下得到的, 在微扰论的框架下计算时, 需要考虑到无穷阶修正. 为此, 需要使用费曼图技术来计算格林函数, 下面引入相互作用绘景中的格林函数.

3.3.1 变换关系

设相互作用绘景中的时间演化算符为 $\hat{U}_I(t, t')$, 满足以下变换关系:

$$\hat{U}_I(t, t') = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{U}_S(t, t') e^{-i\hat{H}_0 t'}, \quad (3.75)$$

则相互作用绘景和海森伯绘景中算符间的变换关系为:

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}_I^\dagger(t, 0) \hat{A}_I(t) \hat{U}_I(t, 0). \quad (3.76)$$

同样可以得到态矢量间的关系:

$$|\Psi_H\rangle = \hat{U}_I(0, t) |\Psi_I(t)\rangle. \quad (3.77)$$

特别地, 取 $t \rightarrow \pm\infty$, 有:

$$|\Psi_H\rangle = \hat{U}_I(0, \pm\infty) |\Psi_I(\pm\infty)\rangle. \quad (3.78)$$

3.3.2 相互作用的绝热引入 ($T = 0$)

前面我们获得了海森伯绘景与相互作用绘景中算符和态矢量间的关系. 考虑系统总的 \hat{H} 可以表示为不含时的可解哈密顿量 \hat{H}_0 和微扰 \hat{V} 的求和, 一般情况下有:

$$\hat{H}_0 |\Phi^0\rangle = E_g^0 |\Phi^0\rangle, \hat{H} |\psi_H^0\rangle = E_g |\psi_H^0\rangle. \quad (3.79)$$

接下来, 尝试用 \hat{H}_0 的基态 $|\Phi^0\rangle$ 表示 \hat{H} 的基态 $|\psi_H^0\rangle$. 为此引入如下含有参数的随时间变化的哈密顿量:

$$\hat{H}_\varepsilon(t) = \hat{H}_0 + \hat{V} e^{-\varepsilon|t|}, \quad (3.80)$$

其中 $\varepsilon \rightarrow 0^+$ 是一个正的小量, 在特殊的时间点有:

- $t \rightarrow \pm\infty$ 时, $\hat{H}_\varepsilon(\pm\infty) = \hat{H}_0$;
- $t = 0$ 时, $\hat{H}_\varepsilon(0) = \hat{H}$.

可以看出当 ε 足够小时, $\hat{H}_\varepsilon(t)$ 随时间的演化将十分缓慢, 相当于是一个绝热过程. 利用量子力学的绝热定理: 假设体系哈密顿量由 \hat{H}_i 绝热演化到 \hat{H}_f , 如果量子客体开始处于 \hat{H}_i 的第 n 个本征态, 它将演化至 \hat{H}_f 的第 n 个本征态(假定演化过程中谱是分立的并且不简并, 即态的次序不会混淆). 这里考虑哈密顿量为 $\hat{H}_\varepsilon(t)$ 的体系从 $t_0 \rightarrow -\infty$ 时的基态 $|\Phi^0\rangle$ 开始绝热演化, 所以体系将一直处于各个时期哈密顿量的基态. 假设 $t = 0$ 时就会演化到实际哈密顿量的基态 $|\psi_H^0\rangle$. 在 $t \rightarrow -\infty$ 时有本征方程:

$$\hat{H}_0 |\Phi^0\rangle = E_g^0 |\Phi^0\rangle, \quad (3.81)$$

在薛定谔绘景下的态矢量 $|\psi_S^0(t)\rangle$ 满足薛定谔方程:

$$i \frac{d}{dt} |\psi_S^0(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_S^0(t)\rangle. \quad (3.82)$$

因为 \hat{H}_0 是不含时的, 所以对于 $t_0 \leq t \leq 0$, 近似有:

$$|\psi_S^0(t)\rangle = e^{-iE_g^0(t-t_0)} |\Phi^0\rangle. \quad (3.83)$$

由相互作用绘景中态矢量和薛定谔绘景中态矢量间的关系, 有:

$$|\psi_I^0(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0(t-t_0)} |\psi_S^0(t)\rangle = |\Phi^0\rangle, \quad (3.84)$$

注意现在考虑的是 $t = t_0 \rightarrow -\infty$ 的情况, 有:

$$|\psi_I^0(-\infty)\rangle = |\Phi^0\rangle. \quad (3.85)$$

利用相互作用绘景中态矢量的演化式, 可以得到 $t = 0$ 时的态矢量:

$$|\psi_I^0(0)\rangle = \hat{U}_I(0, -\infty) |\psi_I^0(-\infty)\rangle = \hat{U}_I(0, -\infty) |\Phi^0\rangle, \quad (3.86)$$

利用海森伯绘景中态矢量与相互作用绘景中态矢量间的关系可以得到:

$$|\psi_H^0\rangle = |\psi_I^0(0)\rangle = \hat{U}_I(0, -\infty) |\Phi^0\rangle, \quad (3.87)$$

此即实际哈密顿量的基态 $|\psi_H^0\rangle$ 与已知的 $|\Phi^0\rangle$ 间的关系.

同样地, 可以令哈密顿量从 $t_0 = 0$ 绝热演化到 $t \rightarrow +\infty$, 这样基态 $|\psi_H^0\rangle$ 可以演化到 $|\Phi^0\rangle$, 这时两者可能相差一个相位. 利用相互作用绘景中态矢量的与薛定谔绘景中态矢量的关系, 可以得到 $t \rightarrow +\infty$ 时相互作用绘景中的态矢量:

$$|\psi_I^0(+\infty)\rangle = e^{i\hat{H}(+\infty)} |\psi_S^0(+\infty)\rangle = e^{iL} |\Phi^0\rangle, \quad (3.88)$$

这里 L 是可能的相位差. 利用相互作用绘景中态矢量的演化式, 可以得到 $t \rightarrow +\infty$ 时的

态矢量:

$$e^{iL} |\Phi^0\rangle = |\psi_I^0(+\infty)\rangle = \hat{U}_I(+\infty, 0) |\psi_I^0(0)\rangle = \hat{U}_I(+\infty, 0) |\psi_H^0\rangle, \quad (3.89)$$

这样我们就得到了 $|\psi_H^0\rangle$ 与 $|\Phi^0\rangle$ 间的另一关系式. 定义 $|\psi_H^0\rangle$ 的左矢, 取上式的厄米共轭得到:

$$\langle \psi_H^0 | = \langle \Phi^0 | \hat{U}_I^\dagger(0, +\infty) e^{-iL} = e^{-iL} \langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, 0). \quad (3.90)$$

由 $\langle \psi_H^0 | \psi_H^0 \rangle$ 归一, 得到:

$$\begin{aligned} \mathbb{1} &= \langle \psi_H^0 | \psi_H^0 \rangle = e^{-iL} \langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, 0) \hat{U}_I(0, -\infty) |\Phi^0\rangle \\ &= e^{-iL} \langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, -\infty) |\Phi^0\rangle. \end{aligned} \quad (3.91)$$

定义 $\hat{S} \equiv \hat{U}_I(+\infty, -\infty)$ 为散射算符, 可以得到:

$$\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle = e^{iL}, \quad (3.92)$$

$$\langle \psi_H^0 | = \frac{\langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, 0)}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}. \quad (3.93)$$

前面得到了 $|\psi_H^0\rangle$ 和 $|\Phi^0\rangle$ 的关系, 下面利用这一关系将海森伯绘景下的格林函数转化为相互作用绘景下的格林函数. 为此, 需要计算 $\langle \psi_H^0 | \hat{T} [\hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t')] | \psi_H^0 \rangle$.

首先计算 $t > t'$ 的情况:

$$\begin{aligned} &\langle \psi_H^0 | \hat{T} [\hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t')] | \psi_H^0 \rangle \\ &= \frac{\langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, 0) \hat{U}_I(0, t) \hat{A}_I(t) \hat{U}_I(t, 0) \hat{U}_I(0, t') \hat{B}_I(t') \hat{U}_I(t', 0) \hat{U}_I(0, -\infty) | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi^0 | \hat{U}_I(+\infty, t) \hat{A}_I(t) \hat{U}_I(t, t') \hat{B}_I(t') \hat{U}_I(t', -\infty) | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle} \\ &= \frac{\langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{U}_I(+\infty, t) \hat{A}_I(t) \hat{U}_I(t, t') \hat{B}_I(t') \hat{U}_I(t', -\infty)] | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

考虑到时间演化算符具有哈密顿量的 e 指数形式, 由于 \hat{H} 中只有费米子算符的偶数次项乘积 (\hat{H}_0 为二次项, \hat{V} 为四次项), 因此算符 $\hat{A}_I(t)$ 或 $\hat{B}_I(t')$ 在时序乘积下对换不会有符

号问题. 故

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle \\ &= \frac{\left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{A}_I(t) \hat{B}_I(t') \hat{U}_I(+\infty, t) \hat{U}_I(t, t') \hat{U}_I(t', -\infty) \right] \right| \Phi^0 \right\rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle} \\ &= \frac{\left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{A}_I(t) \hat{B}_I(t') \hat{S} \right] \right| \Phi^0 \right\rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

可以证明当 $t < t'$ 时, 结果同上. 故有:

$$\left\langle \psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{A}_H(t) \hat{B}_H(t') \right] \right| \psi_H^0 \right\rangle = \frac{\left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{A}_I(t) \hat{B}_I(t') \hat{S} \right] \right| \Phi^0 \right\rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}. \quad (3.96)$$

取 $\hat{A}_I(t) = \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t)$, $\hat{B}_I(t') = \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t')$, 则可以得到零温单粒子格林函数在相互作用绘景下的表示:

$$iG_{\alpha\beta}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \frac{\left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{S} \right] \right| \Phi^0 \right\rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}. \quad (3.97)$$

3.4 Wick 定理

本节的讨论都是对于费米子体系而言的.

由量子力学知识, 可以得到散射算符 \hat{S} 的表示:

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \hat{T} \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) \right] \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \hat{T} \left[\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) \cdots \hat{V}_I(t_n) \right], \end{aligned} \quad (3.98)$$

其中 $\hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t} \hat{V} e^{-i\hat{H}_0 t}$. 对于两体相互作用有:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}_\beta^\dagger(\mathbf{x}') \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\psi}_\beta(\mathbf{x}') \hat{\psi}_\alpha(\mathbf{x}), \quad (3.99)$$

故

$$\hat{V}_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t) \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \hat{\psi}_{I\beta}(\mathbf{x}', t) \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t). \quad (3.100)$$

引入含时的二体相互作用:

$$\hat{U}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \equiv \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (3.101)$$

可知 \hat{U} 与 \hat{V} 有如下关系:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{U}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(t - t') = \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad (3.102)$$

则两体相互作用可重新表示为:

$$\hat{V}_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \iint d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{I\beta}(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t), \quad (3.103)$$

进一步对时间进行积分可以得到:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint d\mathbf{x} dt \iint d\mathbf{x}' dt' \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(\mathbf{x}', t') \hat{U}(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{I\beta}(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}_{I\alpha}(\mathbf{x}, t). \quad (3.104)$$

上式就是散射矩阵 \hat{S} 展开后的一阶项, 可以看出共有四个场算符.

引入四维坐标, 令 $x \equiv (\mathbf{x}, t)$, 则

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint dx dx' \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{U}(x; x') \hat{\psi}_{I\beta}(x') \hat{\psi}_{I\alpha}(x). \quad (3.105)$$

格林函数式(3.97)可写为

$$iG_{\alpha\beta}(x; x') = \frac{\langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S}] | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}, \quad (3.106)$$

上式分子可以展开为:

$$\begin{aligned} & \langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S}] | \Phi^0 \rangle \\ &= \langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')] | \Phi^0 \rangle \\ &+ (-i) \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{V}_I(t_1) \right] \right| \Phi^0 \right\rangle \\ &+ \frac{(-i)^2}{2} \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{V}_I(t_1) \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \hat{V}_I(t_2) \right] \right| \Phi^0 \right\rangle + \dots, \end{aligned} \quad (3.107)$$

可以看出格林函数的分子展开后将总是偶数个场算符编时乘积的基态平均. 对于第二项, 有

$$\begin{aligned} & (-i) \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \hat{V}_I(t_1) \right] \right| \Phi^0 \right\rangle \\ &= \frac{-i}{2} \sum_{\alpha_1, \beta_1} \iint dx_1 dx'_1 \hat{U}(x_1; x'_1) \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{\psi}_{I\alpha_1}^\dagger(x_1) \hat{\psi}_{I\beta_1}^\dagger(x'_1) \hat{\psi}_{I\beta_1}(x'_1) \hat{\psi}_{I\alpha_1}(x_1) \right] \right| \Phi^0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.108)$$

3.4.1 正规乘积

为计算编时乘积我们引入正规乘积. 为此先把场算符分解为“产生”算符和“消灭”算符之和. 这里的“产生”算符和“消灭”算符是定义在自由粒子体系的基态 $|\Phi^0\rangle$ 上的, 而不是定义在真空态 $|0\rangle$ 上, 具体有:

- 若 $\hat{A}|\Phi^0\rangle = 0$, 则称 \hat{A} 为“消灭”算符;
- 若 $\hat{A}|\Phi^0\rangle \neq 0$, 则称 \hat{A} 为“产生”算符.

例 3.3 考虑自由费米子体系, 对于真空态的产生和消灭算符为 $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger$ 和 $\hat{C}_{k\sigma}$, 体系基态为:

$$|\Phi^0\rangle = \prod_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F \\ \sigma}} \hat{C}_{k\sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (3.109)$$

分两种情况考虑:

1. $|\mathbf{k}| > k_F$:

- $\hat{C}_{k\sigma}|\Phi^0\rangle = 0$, 此时 $\hat{C}_{k\sigma}$ 是“消灭”算符.
- $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger|\Phi^0\rangle \neq 0$, 此时 $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger$ 是“产生”算符.

2. $|\mathbf{k}| \leq k_F$:

- $\hat{C}_{k\sigma}|\Phi^0\rangle \neq 0$, 此时 $\hat{C}_{k\sigma}$ 是“产生”算符.
- $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger|\Phi^0\rangle = 0$, 此时 $\hat{C}_{k\sigma}^\dagger$ 是“消灭”算符.

通常 \hat{H}_0 可以写为二次量子化形式:

$$\hat{H}_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_k^0 \hat{C}_{k\sigma}^\dagger \hat{C}_{k\sigma}, \quad (3.110)$$

对于相互作用绘景下的场算符进行平面波展开, 可以得到:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{I\sigma}(x) &= e^{i\hat{H}_0 t} \hat{\psi}_\sigma(x) e^{-i\hat{H}_0 t} \\ &= e^{i\hat{H}_0 t} \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\sigma} \right) e^{-i\hat{H}_0 t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\hat{H}_0 t} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\sigma} e^{-i\hat{H}_0 t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{C}_{k\sigma} e^{-i\epsilon_k^0 t} \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}. \end{aligned} \quad (3.111)$$

对于费米子体系, 场算符可以分成如下“消灭”算符和“产生”算符的和:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{I\sigma}(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma} + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma} \\ &\equiv \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) + \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x), \end{aligned} \quad (3.112)$$

其中定义了

$$\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}, \quad \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}. \quad (3.113)$$

同样, 可以得到:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger}(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger} + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger} \\ &\equiv \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) + \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x), \end{aligned} \quad (3.114)$$

其中

$$\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger}, \quad \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}| \leq k_F} e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}^{\dagger}. \quad (3.115)$$

可证 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x)$ 、 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x)$ 是“消灭”算符, $\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x)$ 、 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x)$ 是“产生”算符, 满足如下关系:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) |\Phi^0\rangle &= 0, & \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x) |\Phi^0\rangle &= 0; \\ \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) |\Phi^0\rangle &\neq 0, & \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) |\Phi^0\rangle &\neq 0. \end{aligned} \quad (3.116)$$

正规乘积是指将所有“产生”算符排在所有“消灭”算符左边的表示, 用 \hat{N} 表示. 例如有如下的正规乘积:

$$\begin{aligned} \hat{N} [\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x)] &= \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x), \\ \hat{N} [\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x)] &= (-1)^4 \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x) \\ &= -\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x) \hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x). \end{aligned} \quad (3.117)$$

对于费米型算符 A, B, C, D, \dots , 正规乘积具有性质:

$$\hat{N}[ABCD \dots] = (-1)^q \hat{N}[C_q(ABCD \dots)], \quad (3.118)$$

其中 C_q 表示算符乘积一组排列, q 是初始的排列变为正规乘积所需要进行的对换数, 例如:

$$\hat{N}[ABCD] = (-1)^3 \hat{N}[CADB]. \quad (3.119)$$

特别地, 对于两个和三个算符的正规乘积有:

$$\begin{aligned} \hat{N}[AB] &= -\hat{N}[BA], \\ \hat{N}[ABC] &= -\hat{N}[BAC] = -\hat{N}[ACB] = \hat{N}[CAB]. \end{aligned} \quad (3.120)$$

当 C 为“消灭”算符时, 有

$$\hat{N}[ABC] = \hat{N}[AB]C, \quad (3.121)$$

当 A 为“产生”算符时, 有

$$\hat{N}[ABC] = A\hat{N}[BC]. \quad (3.122)$$

3.4.2 两个算符的收缩

为计算编时乘积, 我们引入两个算符间的收缩 (contraction):

$$\overline{AB} \equiv \hat{T}[AB] - \hat{N}[AB]. \quad (3.123)$$

收缩的性质:

- $\overline{AB} = -\overline{BA}$.
- 若 $[A(t_A), B(t_B)]_+ = 0$, 则可以得到 $\overline{AB} = 0$.

证明 由于

$$[A(t_A), B(t_B)]_+ = 0, \quad (3.124)$$

所以

$$B(t_B)A(t_A) = -A(t_A)B(t_B). \quad (3.125)$$

又

$$\begin{aligned} \overline{AB} &= \hat{T}[A(t_A)B(t_B)] - \hat{N}[A(t_A)B(t_B)] \\ &= \theta(t_A - t_B)A(t_A)B(t_B) - \theta(t_B - t_A)B(t_B)A(t_A) - \hat{N}[A(t_A)B(t_B)] \\ &= [\theta(t_A - t_B) + \theta(t_B - t_A)]A(t_A)B(t_B) - \hat{N}[A(t_A)B(t_B)] \\ &= A(t_A)B(t_B) - \hat{N}[A(t_A)B(t_B)], \end{aligned} \quad (3.126)$$

注意到

$$\hat{N}[A(t_A)B(t_B)] = \begin{cases} A(t_A)B(t_B), & \text{若 } A(t_A) \text{ 是“产生”算符,} \\ -B(t_B)A(t_A) = A(t_A)B(t_B), & \text{若 } A(t_A) \text{ 是“消灭”算符,} \end{cases} \quad (3.127)$$

则证得

$$\overline{AB} = 0. \quad (3.128)$$

□

推论 3.1

$$\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x)\hat{\psi}_{I\sigma'}^{(2)}(x') = 0, \quad \hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x)\hat{\psi}_{I\sigma'}^{\dagger(2)}(x') = 0. \quad (3.129)$$

证明 考虑到收缩的性质, 可以计算算符间的反对易关系, 如果结果为零, 则推论成立. 将

$\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x)$ 、 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{(2)}(x)$ 、 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(2)}(x)$ 和 $\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x)$ 的表达式代入到反对易式中得到:

$$\begin{aligned}
 [\hat{\psi}_{I\sigma}^{(1)}(x), \hat{\psi}_{I\sigma'}^{(2)}(x')]_+ &= \left[\frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\epsilon_k^0 t)} \hat{C}_{k\sigma}, \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{|\mathbf{k}'|\leq k_F} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'-\epsilon_{k'}^0 t')} \hat{C}_{k'\sigma'}^\dagger \right]_+ \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} \sum_{|\mathbf{k}'|\leq k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\epsilon_k^0 t)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'-\epsilon_{k'}^0 t')} [\hat{C}_{k\sigma}, \hat{C}_{k'\sigma'}^\dagger]_+ \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} \sum_{|\mathbf{k}'|\leq k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\epsilon_k^0 t)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'-\epsilon_{k'}^0 t')} \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{3.130}$$

同样, 有:

$$[\hat{\psi}_{I\sigma}^{\dagger(1)}(x), \hat{\psi}_{I\sigma'}^{\dagger(2)}(x')]_+ = 0, \tag{3.131}$$

这样就验证了费米子体系的“产生”算符间的收缩和“消灭”算符间的收缩都为零. \square

下面计算两个场算符的收缩 $\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(y)$:

$$\begin{aligned}
 \hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(y) &= [\hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) + \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger(2)}(x)] [\hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) + \hat{\psi}_{I\beta}^{(2)}(y)] \\
 &= \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) + \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{(2)}(y) + \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{(2)}(y) + \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \\
 &= \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) + \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger(2)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{(2)}(y).
 \end{aligned} \tag{3.132}$$

分别计算这两项. 对第一项:

$$\begin{aligned}
 \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) &= \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y)] - \hat{N} [\hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y)] \\
 &= \theta(t_x - t_y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) - \theta(t_y - t_x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) + \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \\
 &= \theta(t_x - t_y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) - [1 - \theta(t_x - t_y)] \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) + \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \\
 &= \theta(t_x - t_y) [\hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) + \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y) \hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x)] \\
 &= \theta(t_x - t_y) [\hat{\psi}_{I\alpha}^{(1)}(x), \hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger(1)}(y)]_+ \\
 &= \theta(t_x - t_y) \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} \sum_{|\mathbf{k}'|>k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\epsilon_k^0 t_x)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}-\epsilon_{k'}^0 t_y)} [\hat{C}_{k\alpha}, \hat{C}_{k'\beta}^\dagger]_+ \\
 &= \theta(t_x - t_y) \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} \sum_{|\mathbf{k}'|>k_F} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\epsilon_k^0 t_x)} e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}-\epsilon_{k'}^0 t_y)} \delta_{kk'} \delta_{\alpha\beta} \\
 &= \theta(t_x - t_y) \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)] e^{-i\epsilon_k^0(t_x - t_y)} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})},
 \end{aligned} \tag{3.133}$$

类似可求得第二项:

$$\hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger(2)}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^{(2)}(y) = -\theta(t_y - t_x) \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) e^{-i\epsilon_k^0(t_x - t_y)} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}, \quad (3.134)$$

故

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger}(y) &= \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k [1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} e^{-i\epsilon_k^0(t_x - t_y)} \theta(t_x - t_y) \\ &\quad - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} e^{-i\epsilon_k^0(t_x - t_y)} \theta(t_y - t_x) \\ &\equiv iG_{\alpha\beta}^{(0)}(\mathbf{x}, t_x; \mathbf{y}, t_y). \end{aligned} \quad (3.135)$$

这个结果正是前面得到的自由费米子体系零温格林函数表达式(3.60), 为一常数. 同样地, $\hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger}(y)$ 亦为一常数.

习题 3

证明:

$$\hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger}(y) = 0, \quad \hat{\psi}_{I\alpha}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^{\dagger}(y) = 0. \quad (3.136)$$

3.4.3 辅助定理

证明 Wick 定理之前, 先引入辅助定理:

定理 3.1 辅助定理

设有一组 ($n + 1$ 个) 海森伯绘景中的“产生”和“消灭”算符: A_1, A_2, \dots, A_n, B , 其中算符 B 的时刻比其它算符的时刻都小, 即 $t_B < t_{A_1}, t_{A_2}, \dots, t_{A_n}$. 有如下关系:

$$\begin{aligned} \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_{n-1} A_n] B &= \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_{n-1}] \overbrace{A_n B} \\ &\quad - \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_{n-2} A_n] \overbrace{A_{n-1} B} \\ &\quad + \cdots \\ &\quad + (-1)^{n-1} \hat{N}[A_2 \cdots A_{n-1} A_n] \overbrace{A_1 B} \\ &\quad + \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_{n-1} A_n B]. \end{aligned} \quad (3.137)$$



下面分两种情况证明辅助定理.

证明 (1) B 为“消灭”算符

这时任意的 A_j 与 B 的正规乘积为:

$$\hat{N}[A_j B] = A_j B, \quad (3.138)$$

考虑到 B 的时间比 A 小, 可以得到两者的收缩为:

$$\hat{A}_j B = \hat{T}[A_j B] - \hat{N}[A_j B] = A_j B - A_j B = 0. \quad (3.139)$$

上面结果代回到辅助定理 (3.8.36) 中我们得到:

$$\text{右} = \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_n B] = \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_n] B = \text{左}, \quad (3.140)$$

辅助定理成立.

(2) B 为“产生”算符

这时可以只考虑 $A_1, A_2 \cdots, A_n$ 是“消灭”算符的情况. 下面以 $n = 4$ 的情况对这一点进行说明, 并假设 A_2 是“产生”算符, 其余为“消灭”算符.

当 $n = 4$ 时, 要证明的辅助定理为

$$\begin{aligned} \hat{N}[A_1 A_2 A_3 A_4] B &= \hat{N}[A_1 A_2 A_3] \overline{A_4 B} - \hat{N}[A_1 A_2 A_4] \overline{A_3 B} \\ &\quad + \hat{N}[A_1 A_3 A_4] \overline{A_2 B} - \hat{N}[A_2 A_3 A_4] \overline{A_1 B} \\ &\quad + \hat{N}[A_1 A_2 A_3 A_4 B], \end{aligned} \quad (3.141)$$

注意“产生”算符与“产生”算符之间的收缩为 0, 则

$$\begin{aligned} \text{右} &= \hat{N}[A_1 A_2 A_3] \overline{A_4 B} - \hat{N}[A_1 A_2 A_4] \overline{A_3 B} \\ &\quad - \hat{N}[A_2 A_3 A_4] \overline{A_1 B} + \hat{N}[A_1 A_2 A_3 A_4 B], \end{aligned} \quad (3.142)$$

利用正规乘积的性质式(3.118)和式(3.122), 有

$$\text{右} = -A_2 \left\{ \hat{N}[A_1 A_3] \overline{A_4 B} - \hat{N}[A_1 A_4] \overline{A_3 B} \right. \\ \left. - \hat{N}[A_3 A_4] \overline{A_1 B} + \hat{N}[A_1 A_3 A_4 B] \right\}. \quad (3.143)$$

同样地, 对左边, 有

$$\text{左} = -\hat{N}[A_2 A_1 A_3 A_4] B = -A_2 \hat{N}[A_1 A_3 A_4] B. \quad (3.144)$$

比较上两式, 可以发现我们只需要证明

$$\begin{aligned} \hat{N}[A_1 A_3 A_4] B &= \hat{N}[A_1 A_3] \overline{A_4 B} - \hat{N}[A_1 A_4] \overline{A_3 B} \\ &\quad - \hat{N}[A_3 A_4] \overline{A_1 B} + \hat{N}[A_1 A_3 A_4 B], \end{aligned} \quad (3.145)$$

即不需要考虑“产生”算符.

下面用数学归纳法进行证明.

首先验证 $n = 1$ 时定理成立. $n = 1$ 时定理为

$$\hat{N}[A_1]B = A_1 \overline{B} + \hat{N}[A_1B], \quad (3.146)$$

利用收缩的定义式, 有

$$\begin{aligned} \text{左} &= \hat{N}[A_1]B = A_1B = \hat{T}[A_1B], \\ \text{右} &= A_1 \overline{B} + \hat{N}[A_1B] = \hat{T}[A_1B], \end{aligned} \quad (3.147)$$

即 $n = 1$ 时辅助定理是成立的.

下面假设 $n = m (m \geq 1)$ 时辅助定理成立, 即有如下等式:

$$\begin{aligned} \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_m]B &= \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_{m-1}]A_m \overline{B} - \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_{m-2}A_m]A_{m-1} \overline{B} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{m-1}\hat{N}[A_2 \cdots A_m]A_1 \overline{B} + \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB]. \end{aligned} \quad (3.148)$$

接下来用这一关系证明 $n = m + 1$ 时的辅助定理, 即要证明:

$$\begin{aligned} \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_m]B &= \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_{m-1}]A_m \overline{B} - \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_{m-2}A_m]A_{m-1} \overline{B} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{m-1}\hat{N}[AA_2 \cdots A_m]A_1 \overline{B} \\ &\quad + (-1)^m\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_m]\overline{AB} + \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_mB]. \end{aligned} \quad (3.149)$$

由于 A, A_1, \dots, A_m 均为“消灭”算符, 正规乘积里没有“产生”算符时可以提到括号外, 故可以利用 $n = m$ 时的公式可以计算上式左边:

$$\begin{aligned} \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_m]B &= A\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB] \\ &= A \left\{ \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_{m-1}]A_m \overline{B} - \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_{m-2}A_m]A_{m-1} \overline{B} + \cdots \right. \\ &\quad \left. + (-1)^{m-1}\hat{N}[A_2 \cdots A_m]A_1 \overline{B} + \hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB] \right\} \\ &= \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_{m-1}]A_m \overline{B} - \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_{m-2}A_m]A_{m-1} \overline{B} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{m-1}\hat{N}[AA_2 \cdots A_m]A_1 \overline{B} \\ &\quad + A\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB]. \end{aligned} \quad (3.150)$$

对比要证明的式子, 我们只需证明:

$$A\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB] = (-1)^m\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB]\overline{AB} + \hat{N}[AA_1A_2 \cdots A_mB]. \quad (3.151)$$

可以直接从左边证明:

$$\begin{aligned} \text{左} &= A\hat{N}[A_1A_2 \cdots A_mB] \\ &= (-1)^m A\hat{N}[BA_1A_2 \cdots A_m] \end{aligned} \quad (3.152)$$

$$\begin{aligned}
&= (-1)^m AB \hat{N} [A_1 A_2 \cdots A_m] \quad (B \text{ 是 “产生” 算符}) \\
&= (-1)^m \hat{T}[AB] A_1 A_2 \cdots A_m \quad (A_i \text{ 都是 “消灭” 算符且 } B \text{ 时间最小}) \\
&= (-1)^m (AB + \hat{N}[AB]) A_1 A_2 \cdots A_m \\
&= (-1)^m A_1 A_2 \cdots A_m \overline{AB} + (-1)^m (-1) \hat{N}[BA] A_1 A_2 \cdots A_m \quad (\text{收缩是个常数}) \\
&= (-1)^m \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_m] \overline{AB} + (-1)^{m+1} \hat{N}[BAA_1 A_2 \cdots A_m] \\
&= (-1)^m \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_m] \overline{AB} + \hat{N}[AA_1 A_2 \cdots A_m B] = \text{右.}
\end{aligned}$$

这样就证明了 B 是“产生”算符时的辅助定理.

综上, 辅助定理成立. □

3.4.4 Wick 定理

定理 3.2 Wick 定理

一组费米子“产生”和“消灭”算符 A_1, A_2, \dots, A_n 的编时乘积可以表示为对其中若干对算符取收缩, 而其余算符取正规乘积的所有可能取值之和:

$$\begin{aligned}
&\hat{T}[A_1 A_2 \cdots A_n] \\
&= \hat{N}[A_1 A_2 \cdots A_n] \quad (\text{没有收缩}) \\
&+ \sum_{i < j} (-1)^P \overline{A_i A_j} \hat{N}[A_1 \cdots \cancel{A_i} \cdots \cancel{A_j} \cdots A_n] \quad (\text{一对收缩}) \\
&+ \sum_{i < j} \sum_{k < l}^{(k > i)} (-1)^P \overline{A_i A_j} \overline{A_k A_l} \hat{N}[A_1 \cdots \cancel{A_i} \cdots \cancel{A_j} \cdots \cancel{A_k} \cdots \cancel{A_l} \cdots A_n] \quad (\text{两对收缩}) \\
&+ \cdots \\
&+ \sum_{i < j} \sum_{k < l}^{(k > i)} \cdots \sum_{l < m}^{(l > k)} (-1)^P \overline{A_i A_j} \overline{A_k A_l} \cdots \overline{A_m A_n} \quad (\text{全部收缩})
\end{aligned}$$



这里每一项中的 P 是计算缩并的时候, 算符交换的次数, 统一用一个符号表示 (可以推广到玻色子情况, 就没有这一系数了). 这里的全部收缩项中, 如果是偶数个算符的编时乘积, 就得到一个数; 如果是奇数个算符, 则全部收缩项是单个“产生”算符和“消灭”算符的线性组合. 通常用到的编时乘积只涉及偶数个算符, 例如前面格林函数中编时乘积的算符就是偶数个的. 或者可以这样考虑, 我们总是要对编时乘积计算基态平均, 奇数个“产生”和“消灭”算符的基态平均总是零.

例 3.4 $n = 4$ 时的 Wick 定理:

$$\begin{aligned} \hat{T}[A_1 A_2 A_3 A_4] &= \hat{N}[A_1 A_2 A_3 A_4] \\ &+ \overline{A_1 A_2} \hat{N}[A_3 A_4] - \overline{A_1 A_3} \hat{N}[A_2 A_4] + \overline{A_1 A_4} \hat{N}[A_2 A_3] \\ &+ \overline{A_2 A_3} \hat{N}[A_1 A_4] - \overline{A_2 A_4} \hat{N}[A_1 A_3] + \overline{A_3 A_4} \hat{N}[A_1 A_2] \\ &+ \overline{A_1 A_2} \overline{A_3 A_4} - \overline{A_1 A_3} \overline{A_2 A_4} + \overline{A_1 A_4} \overline{A_2 A_3}. \end{aligned} \quad (3.153)$$

下面用数学归纳法证明 Wick 定理.

证明 验证初始 $n = 2$ 时的 Wick 定理:

$$\begin{aligned} \text{左} &= \hat{T}[A_1 A_2] \\ \text{右} &= \hat{N}[A_1 A_2] + \overline{A_1 A_2}. \end{aligned} \quad (3.154)$$

可以看出这时的 Wick 定理就是收缩的定义式, 所以 $n = 2$ 时, Wick 定理是成立的. 按照数学归纳法的步骤, 应该假设 $n = m (m \geq 2)$ 时的 Wick 定理成立, 以此证明 $n = m + 1$ 时的 Wick 定理成立. 为了简单明了, 我们展示以下步骤: 假设 $n = 3$ 时的 Wick 定理成立来验证 $n = 4$ 的 Wick 定理. 这与假设 $n = m$ 时的 Wick 定理成立来验证 $n = m + 1$ 的 Wick 定理步骤类似. 假设 $t_{A_4} < t_{A_3}, t_{A_2}, t_{A_1}$, 有:

$$\hat{T}[A_1 A_2 A_3 A_4] = \hat{T}[A_1 A_2 A_3] A_4, \quad (3.155)$$

假设 $n = 3$ 时成立, 有:

$$\hat{T}[A_1 A_2 A_3 A_4] = \left\{ \hat{N}[A_1 A_2 A_3] + \overline{A_1 A_2} A_3 - \overline{A_1 A_3} A_2 + \overline{A_2 A_3} A_1 \right\} A_4. \quad (3.156)$$

利用辅助定理可以分别得到右边每一项为:

$$\begin{aligned} \text{第一项} &= \hat{N}[A_1 A_2 A_3] A_4 \\ &= \hat{N}[A_1 A_2] \overline{A_3 A_4} - \hat{N}[A_1 A_3] \overline{A_2 A_4} + \hat{N}[A_2 A_3] \overline{A_1 A_4} + \hat{N}[A_1 A_2 A_3 A_4], \\ \text{第二项} &= \overline{A_1 A_2} A_3 A_4 = \overline{A_1 A_2} \hat{T}[A_3 A_4] = \overline{A_1 A_2} \overline{A_3 A_4} + \overline{A_1 A_2} \hat{N}[A_3 A_4], \\ \text{第三项} &= -\overline{A_1 A_3} A_2 A_4 = -\overline{A_1 A_3} \hat{T}[A_2 A_4] = -\overline{A_1 A_3} \overline{A_2 A_4} - \overline{A_1 A_3} \hat{N}[A_2 A_4], \\ \text{第四项} &= \overline{A_2 A_3} A_1 A_4 = \overline{A_2 A_3} \hat{T}[A_1 A_4] = \overline{A_2 A_3} \overline{A_1 A_4} + \overline{A_2 A_3} \hat{N}[A_1 A_4], \end{aligned} \quad (3.157)$$

合起来则得到式(3.153), 即 $n = 4$ 的 Wick 定理. \square

3.5 坐标空间单粒子格林函数的费曼图技术

3.5.1 费曼图的基本概念

前面得到了零温单粒子格林函数在相互作用绘景下的表达式:

$$iG_{\alpha\beta}(x; x') = \frac{\langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S}] | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle}, \quad (3.158)$$

其中 \hat{S} 是散射矩阵:

$$\begin{aligned} \hat{S} &\equiv \hat{T} \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) \right] \\ &= \mathbb{1} - i \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) + \frac{(-i)^2}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \hat{T} [\hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2)] + \dots . \end{aligned} \quad (3.159)$$

对于两体相互作用, 有

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{V}_I(t) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \iint dx dx' \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{U}(x; x') \hat{\psi}_{I\beta}(x') \hat{\psi}_{I\alpha}(x), \quad (3.160)$$

注意这里对 x 和 x' 的积分是对四维时空进行的, $\hat{U}(x; x')$ 是四维势. 格林函数中分母可以认为是一个常数, 分子中对散射矩阵展开后得到的第一项为:

$$\begin{aligned} \text{分子第一项} &= \langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')] | \Phi^0 \rangle \\ &= \left\langle \Phi^0 \left| \hat{N} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')] + \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \right| \Phi^0 \right\rangle \\ &= \left\langle \Phi^0 \left| \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{\psi}_{I\alpha}(x) \right| \Phi^0 \right\rangle + \left\langle \Phi^0 \left| \hat{\psi}_{I\alpha}^\dagger(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \right| \Phi^0 \right\rangle \\ &= 0 + iG_{\alpha\beta}^0(x - x') = iG_{\alpha\beta}^0(x - x'). \end{aligned} \quad (3.161)$$

同样可以得到分子的第二项为:

分子第二项

$$= -\frac{i}{2} \sum_{\gamma, \delta} \iint dy dz \hat{U}(y - z) \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y) \hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z) \hat{\psi}_{I\delta}(z) \hat{\psi}_{I\gamma}(y)] \right| \Phi^0 \right\rangle. \quad (3.162)$$

这一项中的编时乘积用 Wick 定理展开, 带有正规乘积的项全都在基态平均中为零, 只剩下完全收缩的项. 进一步考虑“产生”算符间的收缩和“消灭”算符间的收缩为零, 我们只需要考虑完全收缩项中只包含“产生”和“消灭”算符间收缩的项, 有如下六项:

(a)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= iG_{\alpha\beta}^0(x-x')(-1)iG_{\gamma\gamma}^0(y-y)(-1)iG_{\delta\delta}^0(z-z); \end{aligned} \quad (3.163)$$

(b)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= iG_{\alpha\beta}^0(x-x')iG_{\delta\gamma}^0(z-y)(-1)iG_{\gamma\delta}^0(y-z); \end{aligned} \quad (3.164)$$

(c)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= (-1)iG_{\alpha\gamma}^0(x-y)iG_{\delta\beta}^0(z-x')(-1)iG_{\gamma\delta}^0(y-z); \end{aligned} \quad (3.165)$$

(d)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= (-1)iG_{\alpha\gamma}^0(x-y)(-1)iG_{\gamma\beta}^0(y-x')(-1)iG_{\delta\delta}^0(z-z); \end{aligned} \quad (3.166)$$

(e)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= iG_{\alpha\delta}^0(x-z)iG_{\delta\beta}^0(z-x')(-1)iG_{\gamma\gamma}^0(y-y); \end{aligned} \quad (3.167)$$

(f)

$$\begin{aligned} & \hat{\psi}_{I\alpha}(x)\hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x')\hat{\psi}_{I\gamma}^\dagger(y)\hat{\psi}_{I\delta}^\dagger(z)\hat{\psi}_{I\delta}(z)\hat{\psi}_{I\gamma}(y) \\ &= iG_{\alpha\delta}^0(x-z)(-1)iG_{\gamma\beta}^0(y-x')(-1)iG_{\delta\gamma}^0(z-y). \end{aligned} \quad (3.168)$$

这里需要注意收缩的顺序, 如果顺序交换将产生负号. 另外, 算符收缩后就是一个数, 在计算多个收缩时需要注意不重复交换. 这样分子第二项的贡献可以写为:

$$\begin{aligned} & -\frac{i}{2}\sum_{\gamma,\delta}\iint dydz\hat{U}(y-z)\langle\Phi^0|[(a)+(b)+(c)+(d)+(e)+(f)]|\Phi^0\rangle \\ &= -\frac{i}{2}\sum_{\gamma,\delta}\iint dydz\hat{U}(y-z)[(a)+(b)+(c)+(d)+(e)+(f)] \\ &\equiv \hat{L}\hat{U}(y-z)[(a)+(b)+(c)+(d)+(e)+(f)], \end{aligned} \quad (3.169)$$

其中定义了 $\hat{L} \equiv -\frac{i}{2}\sum_{\gamma,\delta}\iint dydz$. 下面用费曼图表示上式中的各项, 为此, 先引入一些简单的费曼图, 然后利用这些简单的费曼图表示分子的一阶展开, 进而得到全部的费曼图规则:

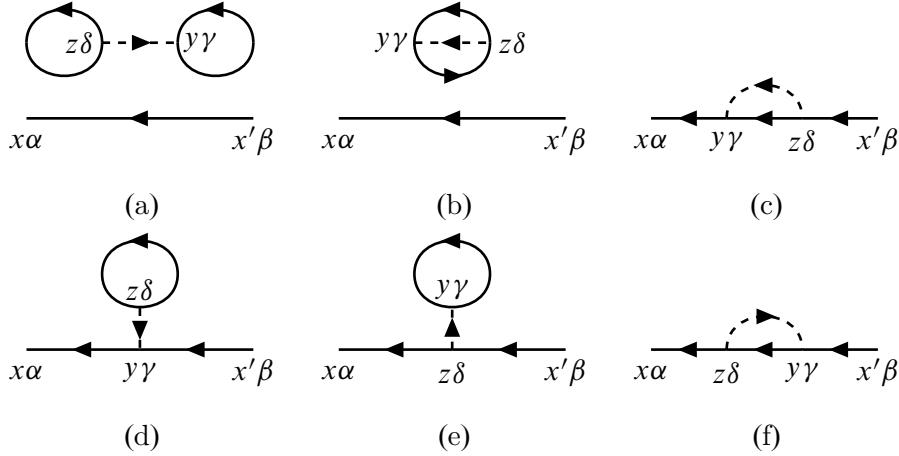
$x\alpha$ —————— $x'\beta$

y - - - - - z

$G_{\alpha\beta}^0(x-x')$

$\hat{U}(y-z) = \hat{V}(y,z)\delta(t_y-t_z)$

注意这里费曼图中的方向, 表示格林函数 $G_{\alpha\beta}^0(x - x')$ 的费曼图(也称粒子线)是从 $x'\beta$ 指向 $x\alpha$, 从格林函数的表达式中看, 可以理解为在 x' 产生的粒子传播到 x . 利用简单的费曼图规则, 可以表示出分子第二项的各部分贡献:



下面借用这 6 个费曼图, 我们介绍一些基本概念:

1. 相连图和非相连图

可以看到分子一阶展开得到的费曼图中 (a)(b) 分成两个部分, 彼此不相连, 而费曼图 (c)(d)(e)(f) 彼此相连. 像 (c)(d)(e)(f) 这样所有坐标点通过实线或点线与外线相连的图叫做连接图. 这里的外线是与点 x, x' 相连的线, 这样的点称为外点. 外点的一般定义, 可以认为是费曼图中只与一条线相连的点, 同样可以定义内点是与至少两条线相连的点. 相反地, (a)(b) 即为非连接图, 后面将证明非连接图对格林函数没有贡献.

2. 真空涨落图和传播图

费曼图 (a)(b) 中的圈图 $\text{O} - \text{O}$ 和 $\text{-} \text{O}$ 最终积分后将得到常数, 只留下自由传播子, 这样的图也称为真空涨落图. 与之对应的是传播图, 即存在与外点相连内点的图, 如 (c)(d)(e)(f).

下面说明非连接图对格林函数没有贡献. 格林函数的分子部分可以用费曼图写为:

$$\begin{aligned} \text{分子} &= \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S} \right] \right| \Phi^0 \right\rangle \\ &= \left(\begin{array}{c} \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} \\ + \text{---} + \text{---} + \text{二阶及以上相连图} \end{array} \right) \quad (3.170) \\ &\times \left(1 + \text{O} - \text{O} + \text{-O} + \text{二阶及以上真空涨落图} \right), \end{aligned}$$

而分母部分可以写为:

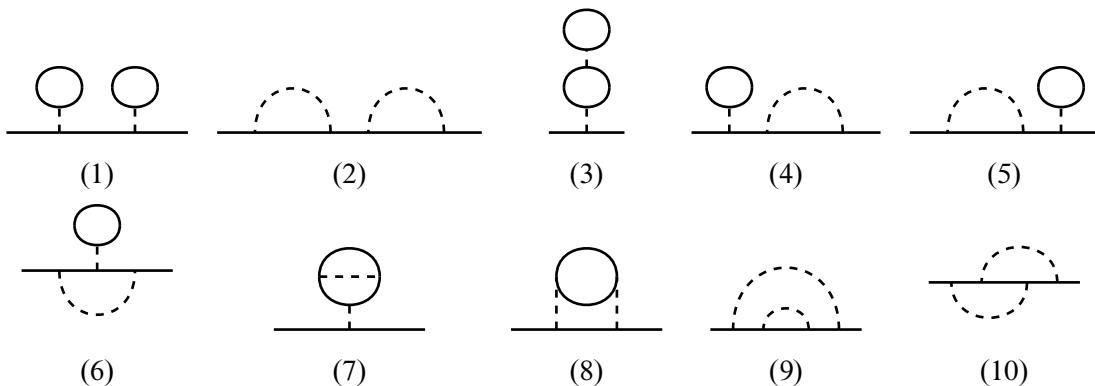
$$\text{分母} = \langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle = 1 + \text{O} - \text{O} + \text{-O} + \text{二阶及以上真空涨落图}, \quad (3.171)$$

则:

$$\begin{aligned} iG_{\alpha\beta}(x; x') &= \frac{\langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S}] | \Phi^0 \rangle}{\langle \Phi^0 | \hat{S} | \Phi^0 \rangle} \\ &= \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow + \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow \quad (3.172) \\ &\quad + \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow \text{---} \leftarrow + \text{二阶及以上相连图} \\ &\equiv \langle \Phi^0 | \hat{T} [\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S}] | \Phi^0 \rangle_C. \end{aligned}$$

这里的 C 是 Connected, 即相连的意思. 可以看到, 在计算格林函数时, 分子分母中不相连的真空涨落图相消, 只留下相连图.

二阶拓扑不等价相连图一共有十个, 分别是:



3.5.2 坐标空间的费曼图规则

下面对坐标空间中 n 阶图形的费曼图规则作简要总结.

(i) 画出所有含 n 条点线, $2n + 1$ 条实线的拓扑等价的相连图, 实线对应 $G_{\alpha\beta}^0$:

$$x\alpha \xrightarrow{} x'\beta$$

$$G_{\alpha\beta}^0(x - x'),$$

点线对应 U :

$$x \dashrightarrow x'$$

$$U(x' - x) = V(x - x') \delta(x - x').$$

(ii) 对所有内部时空变量积分, 对所有内部自旋变量求和.

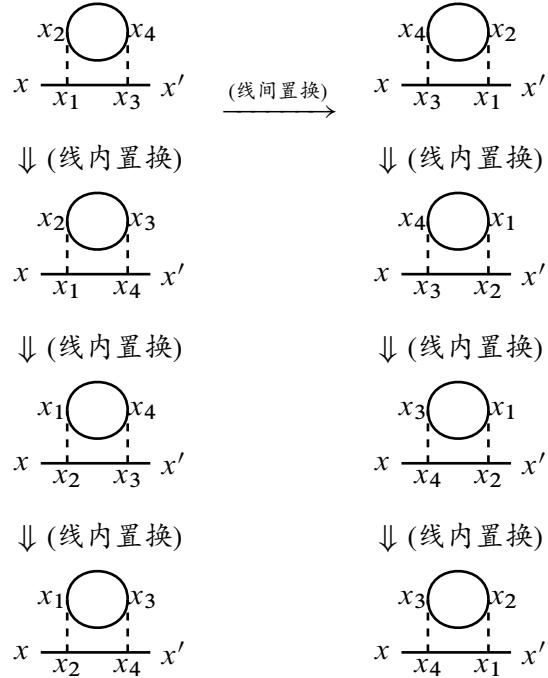
(iii) 所得结果前乘因子 $(i^n)(-1)^F$, 其中 F 为图中闭合实线环数目.

(iv) 规定 $G_{\alpha\alpha}^0(y - y) = G_{\alpha\alpha}^0(-\eta)$, 其中 $\eta = 0^+$.

注意 这里 i^n 的来源有四处:

(1) 前面考虑的是 $iG_{\alpha\beta}(x, x')$, 在计算实际格林函数时要乘以 $-i$ 消去前面的 i .

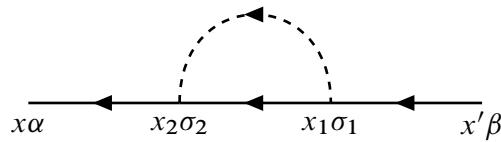
- (2) $2n+1$ 条实线对应 $2n+1$ 个 iG , 故提供了 $(i)^{2n+1}$.
- (3) 格林函数的 n 阶展开式的系数是 $(-i)^n / (n!2^n)$, 其中 $1/2^n$ 来自两体相互作用的展开式.
- (4) n 阶图中含有 $n!2^n$ 个拓扑等价图. 以 $n=2$ 的一个图为例, 一共有八种拓扑等价图:



综上, 总系数是

$$(-i) \times (i)^{2n+1} \times \frac{(-i)^n}{n!2^n} \times n!2^n = i^n. \quad (3.173)$$

例 3.5 处理如下费曼图内部自旋变量:



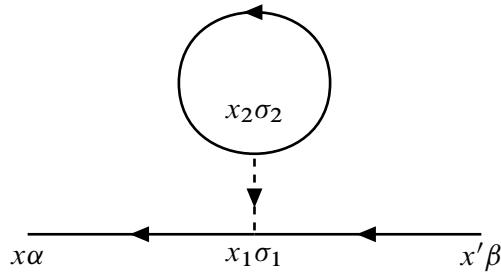
图中没有闭合实线环, 有一条点线. 按费曼图规则得到

$$\begin{aligned} & i \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \iint dx_1 dx_2 G_{\alpha \sigma_2}^0(x - x_2) G_{\sigma_2 \sigma_1}^0(x_2 - x_1) G_{\sigma_1 \beta}^0(x_1 - x') U(x_2 - x_1) \\ &= i \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \iint dx_1 dx_2 \delta_{\alpha \sigma_2} G^0(x - x_2) \delta_{\sigma_2 \sigma_1} G^0(x_2 - x_1) \delta_{\sigma_1 \beta} G^0(x_1 - x') U(x_2 - x_1) \\ &= i \sum_{\sigma_1} \iint dx_1 dx_2 G^0(x - x_2) \delta_{\alpha \sigma_1} G^0(x_2 - x_1) \delta_{\sigma_1 \beta} G^0(x_1 - x') U(x_2 - x_1) \quad (\text{对 } \sigma_2 \text{ 求和}) \\ &= i \delta_{\alpha \beta} \iint dx_1 dx_2 G^0(x - x_2) G^0(x_2 - x_1) G^0(x_1 - x') U(x_2 - x_1), \quad (\text{对 } \sigma_1 \text{ 求和}) \end{aligned} \quad (3.174)$$

其中

$$G^0(x-x') = -i \frac{1}{V} \sum_k [(1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)) \theta(t - t') - \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(t' - t)] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} + i\epsilon_k^0(t-t'). \quad (3.175)$$

例 3.6 计算如下一阶图形:



图中有一个实线环, 一条点线, 故有:

$$\begin{aligned} & -i \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \iint dx_1 dx_2 G_{\alpha \sigma_1}^0(x - x_1) G_{\sigma_1 \beta}^0(x_1 - x') G_{\sigma_2 \sigma_2}^0(x_2 - x_2) U(x_2 - x_1) \\ &= -i \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \iint dx_1 dx_2 \delta_{\alpha \sigma_1} G^0(x - x_1) \delta_{\sigma_1 \beta} G^0(x_1 - x') \delta_{\sigma_2 \sigma_2} G^0(x_2 - x_2) U(x_2 - x_1) \\ &= -i \sum_{\sigma_1} \iint dx_1 dx_2 \delta_{\alpha \sigma_1} G^0(x - x_1) \delta_{\sigma_1 \beta} G^0(x_1 - x') G^0(x_2 - x_2) U(x_2 - x_1) (2S + 1) \\ &= -i(2S + 1) \delta_{\alpha \beta} \iint dx_1 dx_2 G^0(x - x_1) G^0(x_1 - x') G^0(x_2 - x_2) U(x_2 - x_1) \\ &= -i(2S + 1) \delta_{\alpha \beta} \iint dx_1 dx_2 G^0(x - x_1) G^0(x_1 - x') G^0(-\eta) U(x_2 - x_1), \end{aligned} \quad (3.176)$$

其中, $G^0(-\eta)$ 可以用

$$G^0(x-x') = -i \frac{1}{V} \sum_k [(1 - \theta(k_F - |\mathbf{k}|)) \theta(t - t') - \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(t' - t)] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} + i\epsilon_k^0(t-t') \quad (3.177)$$

计算出来, 即

$$\begin{aligned} G^0(0, -\eta) &= (-i) \frac{1}{V} \sum_k [\theta(|\mathbf{k}| - k_F) \theta(-\eta) - \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(\eta)] e^{-i\epsilon_k^0(-\eta)} \\ &= i \frac{1}{V} \sum_k \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(\eta) e^{i\epsilon_k^0 \eta} \\ &= \frac{i}{2S + 1} \left(\frac{N}{V} \right) e^{i\epsilon_k^0 \eta} \\ &= \frac{i}{2S + 1} n e^{i\epsilon_k^0 \eta}, \end{aligned} \quad (3.178)$$

这表明实线圈与体系的粒子数密度有关. 其中 ϵ_k^0 是有限值, η 是无穷小量, 故 e 指数上趋

于零。将这一结果代回到表达式中，得到计算结果

$$n\delta_{\alpha\beta} \iint dx_1 dx_2 G^0(x - x_1) G^0(x_1 - x') U(x_2 - x_1). \quad (3.179)$$

在实际进一步计算过程中，对实空间积分的计算过于繁琐，因此下面考虑傅立叶变换到动量空间中的费曼图技术。

习题 4

计算十个二阶拓扑不等价相连图，只要求完成对内部自旋变量求和。

3.6 动量空间单粒子格林函数的费曼图技术

3.6.1 傅立叶变换

定义四维坐标：

$$x = \{\mathbf{x}, t\}, \quad dx = d\mathbf{x} dt, \quad (3.180)$$

以及四维动量：

$$k = \{\mathbf{k}, \omega\}, \quad dk = d\mathbf{k} d\omega. \quad (3.181)$$

于是有格林函数的傅里叶变换及逆变换

$$\begin{cases} G_{\alpha\beta}(x - y) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} G_{\alpha\beta}(k) e^{ik(x-y)}, \\ G_{\alpha\beta}(k) = \int d(x-y) G_{\alpha\beta}(x-y) e^{-ik(x-y)}. \end{cases} \quad (3.182)$$

相互作用项的傅里叶变换是

$$U(x - y) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} U(k) e^{ik(x-y)}, \quad (3.183)$$

逆变换是

$$\begin{aligned} U(k) &= \int d(x-y) U(x-y) e^{-ik(x-y)} \\ &= \int d(\mathbf{x}-\mathbf{y}) d(t_x - t_y) V(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \delta(t_x - t_y) e^{-\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y}) + i\omega(t_x - t_y)} \\ &= \int d(\mathbf{x}-\mathbf{y}) V(\mathbf{x}-\mathbf{y}) e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})} \\ &= V(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (3.184)$$

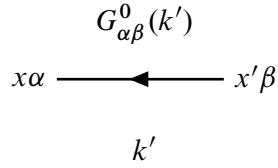
即 $U(k) = V(\mathbf{k})$ 。

当 $t_2 - t_1 = -\eta$ 时,

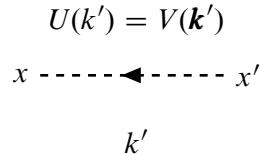
$$G_{\sigma_2\sigma_1}^0(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, -\eta) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} G_{\sigma_2\sigma_1}^0(k) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)} e^{i\omega\eta}. \quad (3.185)$$

3.6.2 动量空间 n 阶费曼图规则

(i) 画出所有含 n 条点线, $2n + 1$ 条实线的拓扑不等价的相连图. 实线对应 $G_{\alpha\beta}^0(k')$:

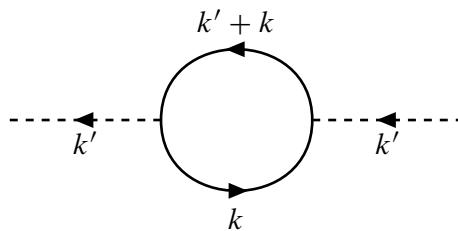


点线对应 U :



两条外线对应着 $G_{\alpha\beta}^0(k)$.

(ii) 对每一个顶点, 四维动量保持守恒, 如下图所示.



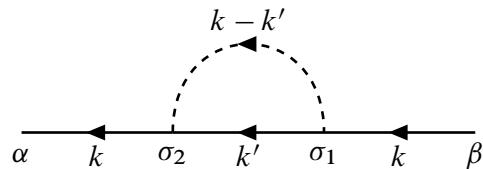
(iii) 对所有内部动量积分, 对所有内部自旋求和.

(iv) 所得结果前乘上因子 $\frac{i^n(-1)^F}{(2\pi)^{4n}}$.

(v) 形成闭合环的 $G^0(k')$ 以及两端与同一相互作用线相连的 $G^0(k')$ 对应着 $G^0(k')e^{i\omega'\eta}$.

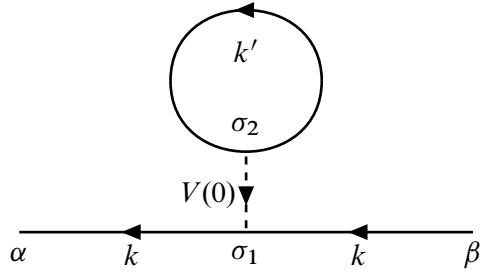
下面按照这些规则, 重新写出前一节给出的两种费曼图.

(a)



$$G_{\alpha\beta}^{(a)} = \frac{i}{(2\pi)^4} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int dk' G_{\alpha\sigma_2}^0(k) G_{\sigma_2\sigma_1}^0(k') G_{\sigma_1\beta}^0(k) V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{i\omega'\eta}, \quad (3.186)$$

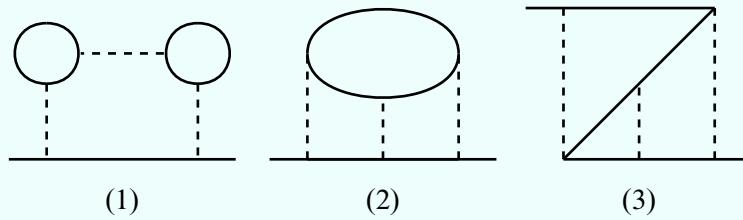
(b)



$$G_{\alpha\beta}^{(b)}(k) = -\frac{i}{(2\pi)^4} \sum_{\sigma_1\sigma_2} \int dk' G_{\alpha\sigma_1}^0(k) G_{\sigma_1\beta}^0(k) G_{\sigma_1\sigma_2}^0(k') V(0) e^{i\omega'\eta}. \quad (3.187)$$

习题 5

按费曼图规则写出下列动量空间费曼图各顶点和线的标记，并对自旋求和。



3.7 Dyson 方程

3.7.1 坐标空间中的 Dyson 方程

坐标空间中的全格林函数写作

$$G_{\alpha\beta}(x - x') = -i \left\langle \Phi^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_{I\alpha}(x) \hat{\psi}_{I\beta}^\dagger(x') \hat{S} \right] \right| \Phi^0 \right\rangle_c. \quad (3.188)$$

分别定义全格林函数和自由格林函数的费曼图：

$$\begin{array}{c} G_{\alpha\beta}(x - x') \\ \hline\hline x\alpha & x'\beta \end{array}, \quad \begin{array}{c} G_{\alpha\beta}^0(x - x') \\ \hline x\alpha & x'\beta \end{array}.$$

于是全格林函数的展开式可以用费曼图表示为

$$\begin{aligned}
 \overline{\overline{G}} &= \overline{G} + \underbrace{\dots}_{\text{一阶不等价相连图} \times 2} + \underbrace{\dots}_{\text{二阶不等价相连图} \times 10} + \dots \\
 &\quad + \underbrace{\dots}_{\text{三阶不等价相连图} \times 74} + \dots
 \end{aligned} \tag{3.189}$$

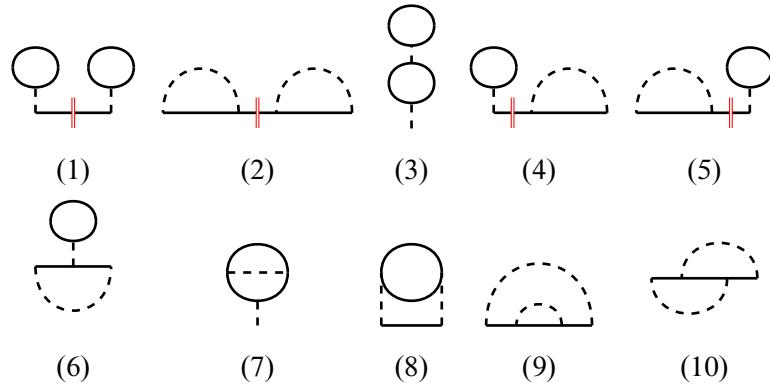
上式的等价形式是

$$\overline{\overline{G}} = \overline{G}_0 + \overline{G}_0 \Sigma \overline{G}_0, \tag{3.190}$$

其中, 称  为自能 (self energy), 记作 Σ , 有

$$\Sigma = \underbrace{\dots}_{\text{一阶自能图}} + \text{二阶自能图} + \dots \tag{3.191}$$

其中十个二阶自能图的具体形式为



如图所示, 第 1, 2, 4, 5 个二阶自能图可以通过断开一条 G^0 线, 分成两个低阶自能图. 由此, 自能图可以分为两类: 正规自能图和非正规自能图.

定义 3.2 正规自能图

若一个自能图不能通过断开一条 G^0 线而分成两部分, 则称其为正规自能图 Σ^* , 记作 , 展开式为:

$$\begin{aligned}
 \text{Diagram} &= \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 \\
 &+ \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4 + \text{Diagram}_5 + \text{Diagram}_6 + \text{Diagram}_7 \\
 &+ \dots
 \end{aligned} \tag{3.192}$$



自能图  可以用正规自能  表示, 即

$$\text{Diagram} = \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 - \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4 - \text{Diagram}_5 + \dots \tag{3.193}$$

于是全格林函数可以表示成

$$\begin{aligned}
 \text{Diagram} &= \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 - \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4 - \text{Diagram}_5 + \dots \\
 &= \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 - \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4 - \text{Diagram}_5 + \text{Diagram}_6 - \text{Diagram}_7 + \dots \\
 &= \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 \left\{ - \text{Diagram}_3 + \text{Diagram}_4 - \text{Diagram}_5 + \text{Diagram}_6 - \text{Diagram}_7 + \dots \right\} \\
 &= \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2,
 \end{aligned} \tag{3.194}$$

这样就得到了 Dyson 方程的另一种形式:

$$x\alpha \xrightarrow{x'} \beta = x\alpha \xrightarrow{x'} \beta + x\alpha \xrightarrow{z\gamma} \text{Diagram} \xrightarrow{z'\gamma'} x' \beta, \tag{3.195}$$

对应的数学表达式为

$$G_{\alpha\beta}(x-x') = G_{\alpha\beta}^0(x-x') + \sum_{\gamma\gamma'} \iint dz dz' G_{\alpha\gamma}^0(x-z) \Sigma_{\gamma\gamma'}^*(z-z') G_{\gamma'\beta}(z'-x'), \tag{3.196}$$

实空间下的这一方程是积分方程, 难以求解. 为简化起见, 下面引入动量空间中的 Dyson 方程.

3.7.2 动量空间中的 Dyson 方程

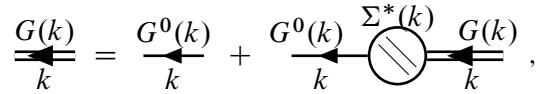
格林函数, 相互作用势和正规自能的傅里叶变换表达式分别为

$$\begin{cases} G_{\alpha\beta}(x-y) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} G_{\alpha\beta}(k) e^{ik(x-y)}, \\ U(x-y) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} U(k) e^{ik(x-y)}, \\ \Sigma_{\gamma\gamma'}^*(x-y) = \int \frac{dk}{(2\pi)^4} \Sigma_{\gamma\gamma'}^*(k) e^{ik(x-y)}. \end{cases} \quad (3.197)$$

于是有

$$G_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} G(k), \quad \Sigma_{\gamma\gamma'}^* = \delta_{\gamma\gamma'} \Sigma^*(k), \quad (3.198)$$

Dyson 方程在动量空间中是一个代数方程:



$$G(k) = G^0(k) + \frac{G^0(k)}{k} \Sigma^*(k) \frac{G(k)}{k}, \quad (3.199)$$

从中可以解出 $G(k)$:

$$\begin{aligned} G(k) &= \frac{1}{[G^0(k)]^{-1} - \Sigma^*(k)} \\ &= \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta \text{sgn}(|k| - k_F) - \Sigma^*(k)}, \end{aligned} \quad (3.200)$$

其中

$$G^0(k) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta \text{sgn}(|k| - k_F)}. \quad (3.201)$$

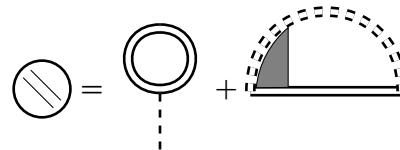
一般来说, $\Sigma^*(k)$ 具有有限大的虚部, 因此无穷小的虚部 $i\eta$ 可以舍去, 这样就有

$$G(k) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 - \Sigma^*(k)}, \quad (3.202)$$

其中, Σ^* 一般取到一阶或二阶. 这样, 求解格林函数的问题就归结为了求解正规自能.

3.7.3 正规自能骨架图

Dyson 方程中的正规自能本身同样很复杂, 为方便后续处理, 将它拆分为两部分:



$$\Sigma^* = \Sigma_0 + \Sigma_1 \quad (3.203)$$

下面具体分析其中每一部分.

(a) 对粒子线的修正.

对粒子线的修正有如下两部分.

$$\begin{array}{c}
 \text{Diagram 1} = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
 \\
 + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} + \dots
 \end{array} \quad (3.205)$$

(b) 对相互作用线的修正.

相互作用 $\tilde{U}(k)$ 的各阶修正分别是

$$\begin{aligned} \cdots & \leftarrow \cdots = \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \textcircled{\text{O}} \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \textcircled{\text{I}} \cdots \leftarrow \cdots \\ & + \cdots \leftarrow \textcircled{\text{O}} \cdots \leftarrow \textcircled{\text{O}} \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \textcircled{\text{X}} \cdots \leftarrow \cdots + \cdots . \end{aligned} \quad (3.206)$$

(c) 顶角修正.

剩余不能归为粒子线修正或相互作用线修正的项,统称为顶角修正.有:

$$\begin{array}{c}
 \text{Diagram showing a shaded quarter-circle being decomposed into four smaller dashed quarter-circles, plus a remainder term} \\
 = \text{Diagram of a dashed quarter-circle} + \text{Diagram of a dashed quarter-circle} + \text{Diagram of a dashed quarter-circle} \\
 + \text{Diagram of a dashed quarter-circle} + \cdots
 \end{array} \tag{3.207}$$

3.7.4 极化图

进一步讨论相互作用线，首先可以把它写成

$$\cdots \leftarrow \cdots = \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \text{circle with X} \leftarrow \cdots, \quad (3.208)$$

其中,  称为极化图, 记作 Π , 各阶展开分别是

$$\text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} + \dots \quad (3.209)$$

与前面对正规自能图的定义类似, 可以将极化图分成正规极化图和非正规极化图.

定义 3.3 正规极化图

不能通过断开一条相互作用线而分成两部分的极化图称为正规极化图 Π^* , 费曼图记作 .



极化图用正规极化图表示为

$$\begin{aligned} \text{Diagram} &= \text{Diagram} + \text{Diagram} - \text{Diagram} + \text{Diagram} - \text{Diagram} - \text{Diagram} + \dots \\ &= \text{Diagram} + \text{Diagram} - \text{Diagram}, \end{aligned} \quad (3.210)$$

对应的方程为

$$\Pi = \Pi^* + \Pi^* U \Pi, \quad (3.211)$$

解出:

$$\Pi(k) = \frac{\Pi^*(k)}{1 - U(k)\Pi^*(k)}. \quad (3.212)$$

相互作用线也可以用极化图和正规极化图表示:

$$\begin{aligned} \cdots \leftarrow \cdots &= \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \cdots \\ &= \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \cdots \\ &\quad + \cdots \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \cdots + \cdots \\ &= \cdots \leftarrow \cdots + \cdots \leftarrow \text{Diagram} \leftarrow \cdots, \end{aligned} \quad (3.213)$$

从中可以解出

$$\tilde{U}(k) = \frac{U(k)}{1 - \Pi^*(k)U(k)}. \quad (3.214)$$

3.8 费曼图技术在凝胶模型中的应用

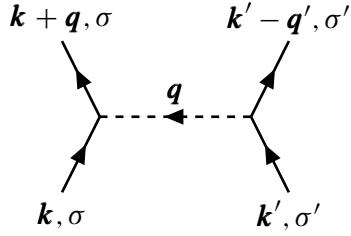
凝胶模型的哈密顿量是

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k^0 \hat{C}_{k\sigma}^\dagger \hat{C}_{k\sigma} + \frac{1}{2V} \sum_{kk'} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{q \neq 0} v(\mathbf{q}) \hat{C}_{k+q,\sigma}^\dagger \hat{C}_{k'-q,\sigma'}^\dagger \hat{C}_{k'\sigma'} \hat{C}_{k\sigma}, \quad (3.215)$$

其中库伦相互作用的形式为

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad (3.216)$$

两体相互作用可以用费曼图表示为



正规自能骨架图写成

$$\Sigma^*(k) = \text{(loop diagram with } \mathbf{q} = 0) + \text{(triangle diagram with } \mathbf{k} - \mathbf{k}' \text{)} \quad (3.217)$$

但由于凝胶模型的哈密顿量中不包含 $\mathbf{q} = 0$ 一项, 所以只有后一个骨架图.

处理凝胶模型时常用的近似有 Hatree-Fock 近似 (HFA) 和无规相近似 (Random Phase Approximation, RPA), 下面逐一介绍.

3.8.1 Hatree-Fock 近似

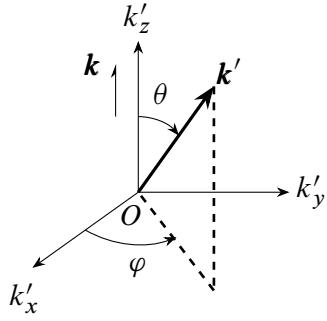
Hatree-Fock 近似将骨架图处理为:

$$\text{(triangle diagram with } \mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx \text{(semicircle diagram with } \mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (3.218)$$

对应的自能函数表示为

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{HF}}^*(k) &= i \int \frac{dk'}{(2\pi)^4} G^0(k') V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') e^{i\omega' \eta} \\ &= i \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}'| - k_F)}{\omega' - \epsilon_{k'}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}'|)}{\omega' - \epsilon_{k'}^0 - i\eta} \right] \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} e^{i\omega' \eta} \\ &= i \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{2\pi i}{2\pi} \theta(k_F - |\mathbf{k}'|) \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \\ &= -4\pi e^2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}'|)}{k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (3.219)$$

采用球极坐标, 并取极轴沿 \mathbf{k} 方向, 即



正规自能可以进一步写成

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{HF}}^*(k) &= -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3} \int \frac{k'^2 dk' \sin \theta d\theta d\varphi}{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} \theta(k_F - |\mathbf{k}'|) \quad (\text{令 } x \equiv \cos \theta.) \\ &= -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^3} \cdot 2\pi \int_0^{k_F} k'^2 dk' \int_{-1}^1 dx \frac{1}{k^2 + k'^2 - 2kk'x} \\ &= -\frac{e^2 k_F}{\pi} \left[1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| \right], \quad (\text{其中 } y = \frac{|\mathbf{k}|}{k_F}).\end{aligned}\quad (3.220)$$

得到 HF 近似的正规自能:

$$\Sigma_{\text{HF}}^*(k) = -\frac{e^2 k_F}{\pi} \left[1 + \frac{1-y^2}{2y} \ln \left| \frac{1+y}{1-y} \right| \right], \quad (3.221)$$

此时只取了正规自能最简单的形式, 得到的结果不依赖于 ω , 且当 $y = 1$ 时, $\Sigma_{\text{HF}}^*(\mathbf{k}, \omega)$ 的一阶导将发散. 由于 Σ_{HF}^* 没有虚部, 所以格林函数的无穷小虚部不能略去, 即有

$$G_{\text{HF}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 - \Sigma_{\text{HF}}^*(\mathbf{k}, \omega) + i\eta \text{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F)}, \quad (3.222)$$

上式的极点方程是

$$\omega - \epsilon_k^0 - \Sigma_{\text{HF}}^*(\mathbf{k}, \omega) + i\eta \text{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F) = 0, \quad (3.223)$$

其中给定了 \mathbf{k} 值. 将 $\omega = \epsilon_{\text{HF}}(\mathbf{k}) - i\gamma_{\text{HF}}(\mathbf{k})$ 带入, 其中实部描述准粒子的能量, 虚部描述准粒子的寿命. 并分别令实部和虚部等于零, 得到

$$\epsilon_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = \epsilon_k^0 + \Sigma_{\text{HF}}^*(\mathbf{k}), \quad \gamma_{\text{HF}}(\mathbf{k}) = 0, \quad (3.224)$$

但考虑到准粒子的寿命 $\tau_{\text{HF}}(\mathbf{k}) \propto \gamma_{\text{HF}}^{-1}(\mathbf{k})$ 是无穷大, 这是一个不自然的结果.

下面再来考虑 HF 近似的定容比热.

设准粒子的有效质量是 m_{HF}^* , 当温度不高时, 自由粒子的能量可以在费米面附近展

开, 有

$$\begin{aligned}\epsilon_k^0 &= \frac{k^2}{2m} \approx E_F + \left. \frac{\partial \epsilon_k^0}{\partial k} \right|_{k=k_F} (k - k_F) \\ &= E_F + \frac{k_F}{m} (k - k_F),\end{aligned}\quad (3.225)$$

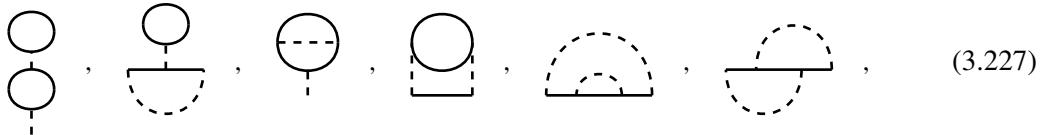
从而定义准粒子有效质量

$$\begin{aligned}m^* &\equiv \frac{k_F}{\left[\frac{\partial}{\partial k} \epsilon_{HF}(\mathbf{k}) \right]_{k=k_F}} \\ &= \frac{k_F}{\left[\frac{\partial}{\partial k} \epsilon_k^0(\mathbf{k}) \right]_{k=k_F} + \left[\frac{\partial \Sigma_{HF}^*(k)}{\partial k} \right]_{k=k_F}},\end{aligned}\quad (3.226)$$

在费米面附近将有 $m^* \rightarrow 0$ 以及 $N^*(0) \rightarrow 0$. 因此将有比热趋于零, 电导趋于无穷大, 这与金属的实际情况不符. 造成这一结论的原因是 HF 近似忽略了电子间的运动关联, 没有考虑屏蔽效应. 为了进一步修正, 下面继续考虑自能图的各阶修正, 从而引入无规相近似.

3.8.2 无规相(最强发散项)近似

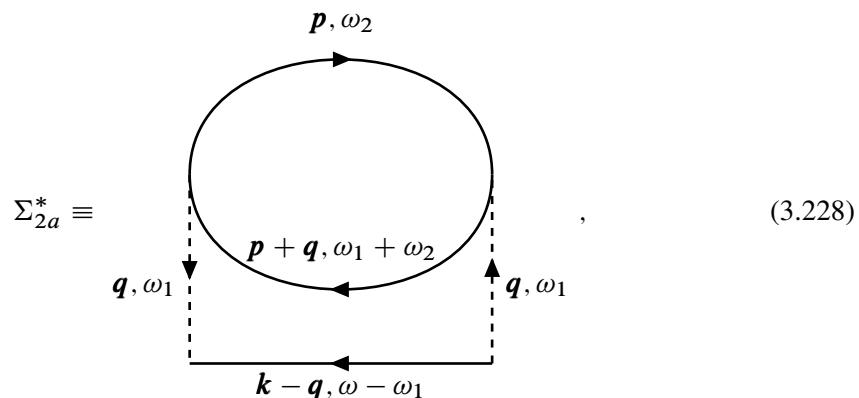
二阶正规自能图有六个, 分别是



其中前三项存在 $V(0)$, 不考虑贡献. 第四项正规自能本身存在红外发散, 第五项和第六项

正规自能不发散. 记红外发散图 为 Σ_{2a}^* , 下面具体分析这一项的贡献.

正规自能写成



其中由于有两条相互作用线 $V(\mathbf{q}) \propto \frac{1}{q^2}$, 因此积分 $\int \frac{d\mathbf{q}}{q^4}$ 将要发散.

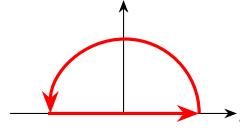
下面具体考虑计算. 按图写出正规自能的表达式:

$$\Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) = \frac{-2i^2}{(2\pi)^8} \int d\mathbf{q} d\mathbf{p} \int d\omega_1 d\omega_2 V^2(\mathbf{q}) G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1) G^0(\mathbf{p}, \omega_2) G^0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \omega_2+\omega_1). \quad (3.229)$$

先对 ω_2 积分:

$$\begin{aligned} I &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G^0(\mathbf{p}, \omega_2) G^0(\mathbf{p}+\mathbf{q}, \omega_2+\omega_1) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F)}{\omega_2 - \epsilon_p^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|)}{\omega_2 - \epsilon_p^0 - i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}| - k_F)}{\omega_2 + \omega_1 - \epsilon_{p+q}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{\omega_2 + \omega_1 - \epsilon_{p+q}^0 - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.230)$$

被积函数一共有四项相乘, 只有当一个极点在上, 一个极点在下时, 乘积不为零. 由于每一项都以 $1/|\omega|$ 的形式在无穷远处趋于零, 因此积分可以加上一个半弧形成回路. 此处取上半回路



并利用留数定理, 积分变成

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F)}{\omega_2 - \epsilon_p^0 + i\eta} \cdot \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{\omega_2 + \omega_1 - \epsilon_{p+q}^0 - i\eta} \right] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \left[\frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|)}{\omega_2 - \epsilon_p^0 - i\eta} \cdot \frac{\theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}| - k_F)}{\omega_2 + \omega_1 - \epsilon_{p+q}^0 + i\eta} \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} 2\pi i \left[\frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{-\omega_1 + \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_p^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 + i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.231)$$

将这一结果代回到 $\Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega)$ 中, 得到

$$\begin{aligned} \Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= -2i \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}}{(2\pi)^6} \underbrace{\int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1)}{\omega_1 + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - i\eta} V^2(\mathbf{q}) \theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}_{I_a} \\ &\quad + 2i \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}}{(2\pi)^6} \underbrace{\int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1)}{\omega_1 + \epsilon_p^0 - \epsilon_{q+p}^0 + i\eta} V^2(\mathbf{q}) \theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}| - k_F)}_{I_b}, \end{aligned} \quad (3.232)$$

首先完成对 ω_1 的积分, 先计算

$$\begin{aligned}
 I_b &\equiv \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{G^0(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega-\omega_1)}{\omega_1 + \epsilon_p^0 - \epsilon_{q+p}^0 + i\eta} \\
 &= \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}-\mathbf{q}| - k_F)}{\omega - \omega_1 - \epsilon_{k-q}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}-\mathbf{q}|)}{\omega - \omega_1 - \epsilon_{k-q}^0 - i\eta} \right] \cdot \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 + i\eta} \\
 &= -i \frac{\theta(|\mathbf{k}-\mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 + i\eta}.
 \end{aligned} \tag{3.233}$$

同理可得另一项

$$I_a = i \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}-\mathbf{q}|)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 - i\eta}. \tag{3.234}$$

代回到原式 $\Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega)$ 中, 得到

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= 2 \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 - i\eta} \\
 &\quad + 2 \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F) \theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 + i\eta},
 \end{aligned} \tag{3.235}$$

作变量代换, 取 $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$, $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$, 表达式变成

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= 2 \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k+q}^0 - i\eta} \\
 &\quad + 2 \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k+q}^0 + i\eta},
 \end{aligned} \tag{3.236}$$

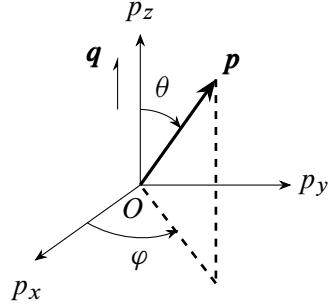
然后对 \mathbf{p} 积分, 改写成

$$\begin{aligned}
 \Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= 2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k+q}^0 - i\eta} \\
 &\quad + 2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k+q}^0 + i\eta},
 \end{aligned} \tag{3.237}$$

下面讨论这一结果的实部. 讨论取 $q \rightarrow 0$ 极限后, $\text{Re}\Sigma_{2a}^*$ 的发散行为:

$$\begin{aligned}
 \lim_{q \rightarrow 0} \text{Re}\Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= 2\mathcal{P} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\omega - \epsilon_{k+q}^0} \underbrace{\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|)}_{I_A} \\
 &\quad + 2\mathcal{P} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega - \epsilon_{k+q}^0} \underbrace{\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F)}_{I_B},
 \end{aligned} \tag{3.238}$$

分别计算其中两项与 \mathbf{p} 有关的积分, 选取如下球极坐标:



积分可以进一步写成

$$\begin{aligned} I_A &\equiv \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|) \\ &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int p^2 dp \int \sin \theta d\theta, \end{aligned} \quad (3.239)$$

其中径向分量在 $\begin{cases} p > k_F, \\ |\mathbf{p} + \mathbf{q}| < k_F \end{cases}$ 限制下求积分. 由于

$$\begin{aligned} |\mathbf{p} + \mathbf{q}| &= \sqrt{p^2 + q^2 + 2 \cos \theta pq} \\ &\approx p \sqrt{1 + \frac{2q}{p} \cos \theta} \\ &\approx p \left[1 + \frac{1}{2} \frac{2q}{p} \cos \theta \right] \\ &= p + q \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.240)$$

约束条件也就变成 $\cos \theta < 0$. 积分就是

$$\begin{aligned} I_A &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\cos \theta < 0} \sin \theta d\theta \int_{k_F}^{k_F - q \cos \theta} p^2 dp \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\cos \theta < 0} \sin \theta d\theta \left. \frac{p^3}{3} \right|_{k_F}^{k_F - q \cos \theta} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\cos \theta < 0} \sin \theta d\theta \cdot \frac{1}{3} [-3k_F^2 q \cos \theta] \\ &= -\frac{k_F^2 q}{(2\pi)^2} \int_{\cos \theta < 0} \sin \theta d\theta \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.241)$$

然后令 $x \equiv \cos \theta$, 有

$$I_A = \frac{-k_F^2 q}{(2\pi)^2} \int_{-1}^0 dx \cdot x = \frac{k_F^2 q}{2(2\pi)^2}. \quad (3.242)$$

同理可以得到另一项

$$I_B = \frac{k_F^2 q}{2(2\pi)^2}. \quad (3.243)$$

代回到自能实部 $\text{Re}\Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega)$ 中, 得到

$$\begin{aligned} \text{Re}\Sigma_{2a}^* &= 2\mathcal{P} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\omega - \epsilon_{k+q}^0} \cdot \frac{k_F^2 q}{2(2\pi)^2} \\ &\quad + 2\mathcal{P} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega - \epsilon_{k+q}^0} \cdot \frac{k_F^2 q}{2(2\pi)^2} \\ &= \frac{k_F^2}{(2\pi)^5} \frac{(4\pi e^2)^2}{\omega - \epsilon_{k+q}^0} \int \frac{q^3 dq}{q^4} \propto \int \frac{dq}{q} \propto \ln q \Big|_0^c, \end{aligned} \quad (3.244)$$

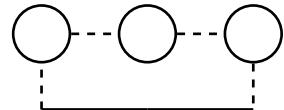
即自能实部以对数形式发散.

下面继续分析更高阶正规自能修正, 寻找规律并利用重整化方法得到合适的结果. 三阶自能图有



其中 和 以 $\ln q$ 形式发散, 而最后一个图 中三条相互作用线具有相同的动量 \mathbf{q} , 因此发散最强, 以 $\int \frac{dq}{q^3}$ 形式发散.

类似地, 四阶最强发散项是



我们考虑的近似方法是, 在每阶近似中只考虑发散最强的项并对它们求和. 各阶最强发散

项分别是

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{二阶: } \\ \text{三阶: } \\ \text{四阶: } \\ \vdots \\ n \text{ 阶: } \end{array} \right. \quad \begin{array}{c} \text{,} \\ \text{,} \\ \text{,} \\ \vdots \\ \overbrace{\text{,}}^{n-1 \text{ 个实线环.}} \end{array} \quad (3.245)$$

所有项求和构成不发散的几何级数。这种处理方法构成凝胶模型的另一个近似，一般称作最强发散项 (Most Divergent, MD) 近似，环图 (Ring) 近似或无规相 (Random Phase, RP) 近似。这种近似下的正规自能处理成如下形式：

$$\Sigma_{\text{MD}}^*(k, \omega) = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots \quad (3.246)$$

其中双点线是有效相互作用 \tilde{U}_{MD} ，在最强发散项近似下取为

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots, \quad (3.247)$$

也就是满足迭代方程

$$\text{---} = \text{---} + \text{---}, \quad (3.248)$$

对比严格的双点线

$$\text{---} = \text{---} + \text{---}, \quad (3.249)$$

其中正规自能展开为

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots, \quad (3.250)$$

可以看出，最强发散项近似下的双点线是对严格双点线的一种近似。与严格的正规自能相

比, 有

$$\tilde{U} \approx \tilde{U}_{\text{MD}} \quad (3.251)$$

令:

$$\Pi_{\text{MD}}^* = \text{Diagram with a circle and two arrows} \equiv \Pi^{*(0)}, \quad (3.252)$$

得到相互作用势的近似表达式

$$\tilde{U}_{\text{MD}}(k) = \frac{U(k)}{1 - U(k)\Pi^{*(0)}(k)}. \quad (3.253)$$

标记好动量空间下的费曼图:

写出正规极化的表达式:

$$\begin{aligned} \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) &= -2i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{(2\pi)} G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega + \omega_1) G^0(\mathbf{k}, \omega_1) \\ &= -2i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)}{\omega_1 + \omega - \epsilon_{k+q}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\omega_1 + \omega - \epsilon_{k+q}^0 - i\eta} \right] \\ &\quad \times \left[\frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega_1 - \epsilon_k^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega_1 - \epsilon_k^0 - i\eta} \right] \\ &= -2i \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{2\pi i}{2\pi} \left[\frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega + \epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0 + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{-\omega + \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0 + i\eta} \right] \\ &= 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F)\theta(k_F - |\mathbf{k}|) \left[\frac{1}{\omega - \omega_{kq} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{kq} - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.254)$$

其中最后一步进行了变量代换, 取 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} - \mathbf{q}$, 并令 $\omega_{kq} \equiv \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0$. 这一结果与自由粒子的密度关联格林函数有类似的形式, 被称为 Lindhard 函数, 也称因果格林函数.

下面用这一近似计算准粒子的寿命和能谱. 格林函数

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (3.255)$$

极点方程是

$$\omega - \epsilon_k^0 - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (3.256)$$

其中给定了 \mathbf{k} 值. 先写出形式解:

$$\omega = E_k - i\gamma(\mathbf{k}), \quad (3.257)$$

其中 E_k 对应准粒子能谱, $\gamma^{-1}(\mathbf{k})$ 对应准粒子寿命. 设 $E_k \gg \gamma(\mathbf{k})$, 下面推导验证这一假设自洽.

近似后的格林函数是

$$G_{\text{MD}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 - \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (3.258)$$

极点方程是

$$E_k - i\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_k^0 - \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) = 0. \quad (3.259)$$

$E_k \gg \gamma(\mathbf{k})$ 时, 有

$$E_k - i\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_k^0 - \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) = 0. \quad (3.260)$$

令实部和虚部分别相等, 有

$$\begin{cases} E_k = \epsilon_k^0 + \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k), \\ \gamma(\mathbf{k}) = -\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k). \end{cases} \quad (3.261)$$

直接给出色散关系的计算结果 (D. Pines, Many-Body Problem, 1967):

$$E(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m} - 0.166r_s(\ln r_s + 0.203)\frac{k_F k}{2m} + \text{const.}, \quad (3.262)$$

以及有效质量

$$m_{\text{MD}}^* = \frac{k_F}{\left(\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k}\right)_{k=k_F}} = \frac{m}{1 - 0.083r_s(\ln r_s + 0.203)}. \quad (3.263)$$

这里将粒子所占空间用等体积球表示, 则 r_s 的定义是

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi r_0^3}{3}, \quad r_0 = r_s a_H, \quad (3.264)$$

其中 a_H 是玻尔半径, r_0 是每个粒子的平均半径, r_s 是表征粒子半径的量子数.

下面考虑准粒子的寿命, 即正规自能的虚部. 利用关系式



$$\dots \rightarrow \dots = \dots \rightarrow \dots + \dots \rightarrow \circlearrowleft \rightarrow \dots, \quad (3.265)$$

正规自能图可以重新表示为

$$\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) : \text{Diagram} = \text{Diagram}_1 + \text{Diagram}_2 \quad (3.266)$$

为简单起见, 虚部取为

$$\text{Im} \Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) \Rightarrow \text{Im} \text{Diagram}_2 \Rightarrow \text{Im} \text{Diagram}_1 \quad (3.267)$$

二阶近似后的实部发散, 但虚部不发散, 用单线计算时结果仅差一常数.

前面已经得到正规自能的表达式

$$\begin{aligned} \Sigma_{2a}^*(\mathbf{k}, \omega) &= 2 \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(|\mathbf{p}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{p} + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k} - \mathbf{q}|)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 - i\eta} \\ &\quad + 2 \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \frac{\theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F) \theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F)}{\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0 + i\eta} \quad (3.268) \\ &\equiv \Sigma_{2(a-1)}^* + \Sigma_{2(a-2)}^*, \end{aligned}$$

其中, 记第一项积分为 $\Sigma_{2(a-1)}^*$, 第二项积分为 $\Sigma_{2(a-2)}^*$. 第二项的虚部是:

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_{2(a-2)}^* &= -2\pi \int \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{q}) \theta(k_F - |\mathbf{p}|) \theta(|\mathbf{k} - \mathbf{q}| - k_F) \quad (3.269) \\ &\quad \times \theta(|\mathbf{p} + \mathbf{q}| - k_F) \delta(\omega + \epsilon_p^0 - \epsilon_{p+q}^0 - \epsilon_{k-q}^0), \end{aligned}$$

其中, 作变量代换, 令 $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{k}_1$, $\mathbf{p} = \mathbf{k}_2$, 则有 $\mathbf{k} - \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 + \mathbf{p} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, 代回表达式中, 有

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_{2(a-2)}^*(\mathbf{k}, \omega) &= -2\pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \theta(k_F - |\mathbf{k}_2|) \theta(|\mathbf{k}_1| - k_F) \quad (3.270) \\ &\quad \times \theta(|\mathbf{k}_3| - k_F) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \delta(\omega + \epsilon_{k_2}^0 - \epsilon_{k_1}^0 - \epsilon_{k_3}^0), \end{aligned}$$

再令 $v_1 = \epsilon_{k_1}^0 - E_F$, $v_2 = E_F - \epsilon_{k_2}^0$, $v_3 = \epsilon_{k_3}^0 - E_F$, 由于阶跃函数的限制, 应有 $v_1, v_2, v_3 > 0$ 成立. 再取 $v = \omega - E_F$, 有

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_{2(a-2)}^*(\mathbf{k}, \omega) &= -2\pi \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3}{(2\pi)^6} V^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \theta(k_F - |\mathbf{k}_2|) \theta(|\mathbf{k}_1| - k_F) \theta(|\mathbf{k}_3| - k_F) \\ &\quad + \delta(v - v_1 - v_2 - v_3) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3), \quad (3.271) \end{aligned}$$

其中, 三项对动量的积分分别可以写成

$$\int \frac{d\mathbf{k}_1}{2\pi} (\dots) \rightarrow \rho(0) \int_0^\infty dv_1 \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} (\dots), \quad (3.272)$$

其中, Ω 是立体角, 这里只考虑费米面附近的电子, 可以用费米面上的电子态密度 $\rho(0)$ 代表各电子态密度. 等式变成

$$\begin{aligned}
 \text{Im}\Sigma_{2(a-2)}^*(\mathbf{k}, \omega) &= -2\pi\rho^3(0) \int_0^\infty dv_1 \int_0^\infty dv_2 \int_0^\infty dv_3 \delta(v - v_1 - v_2 - v_3) \\
 &\quad \times \int \frac{d\Omega_1}{4\pi} \int \frac{d\Omega_2}{4\pi} \int \frac{d\Omega_3}{4\pi} V^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \\
 &\quad \times \theta(k_F - |\mathbf{k}_2|) \theta(|\mathbf{k}_1| - k_F) \theta(|\mathbf{k}_3| - k_F) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3) \\
 &= -2C_k \int_0^\infty dv_1 \int_0^\infty dv_2 \int_0^\infty dv_3 \delta(v - v_1 - v_2 - v_3) \\
 &= -2C_k \int_0^\infty dv_1 \int_0^\infty dv_2 \int_0^\infty dv_3 (-1) \frac{d}{dv_3} \theta(v - v_1 - v_2 - v_3) \\
 &= -2C_k \int_0^\infty dv_1 \int_0^\infty dv_2 \theta(v - v_1 - v_2) \\
 &= -2C_k \int_0^v dv_1 \int_0^{v-v_1} dv_2 \\
 &= -2C_k \int_0^v dv_1 (v - v_1) \\
 &= -2C_k \frac{v^2}{2} \\
 &= -2C_k \frac{(\omega - E_F)^2}{2} \\
 &= -C_k (\omega - E_F)^2, \quad (\omega > E_F),
 \end{aligned} \tag{3.273}$$

类似地可以得到

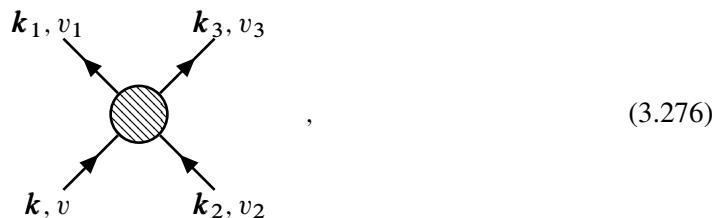
$$\text{Im}\Sigma_{2(a-2)}^*(\mathbf{k}, \omega) = C_k (\omega - E_F)^2, \quad (\omega < E_F). \tag{3.274}$$

于是得到总的正规自能虚部是

$$\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) = -C_k \text{sgn}(\omega - E_F) (\omega - E_F)^2, \tag{3.275}$$

其中 C_k 是一个与 \mathbf{k} 有关的常数, 且 $C_k \geq 0$. 根据表达式可以看出, 距离费米面越近, 粒子的寿命越长. 这一结果的物理图像如图 3.1 所示. 可以认为有一动量为 \mathbf{k} 的电子, 它可能来自外界, 也可能是费米面上激发得到的. 它与费米面内动量为 \mathbf{k}_2 的电子发生相互作用, 二者激发到费米面外动量为 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_3 的能级上.

这一过程对应的费曼图是



我们考虑的问题是, 是否费米球内的粒子都会和 \mathbf{k}, v 粒子相互作用, 以及能够发生相互作

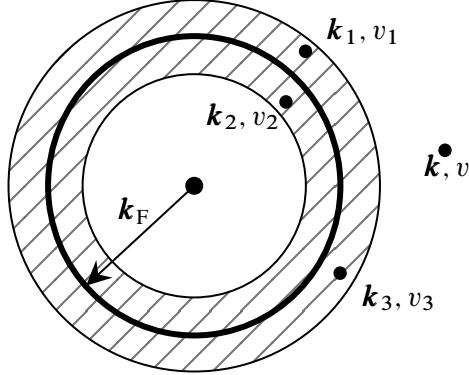


图 3.1: 最强发散项近似下, 费米面附近电子相互作用的示意图.

用的粒子具有什么样的能量. 根据费曼图, 相互作用过程应保持能量守恒, 即

$$v - v_2 = v_1 + v_3, \quad (3.277)$$

这要求 v_2 不能很大, 只有在 $0 \sim -v$ 窄壳层能的粒子才能产生相互作用. 这一要求对靶粒子和散射态粒子都有限制. 相应的跃迁几率大约是

$$N' = N \left(\frac{v}{E_k} \right)^2 \approx N \cdot 10^{-8}, \quad (3.278)$$

也就是只有很少的电子能够发生相互作用. 这一结果与费米液体理论得到的结果相同.

下面考虑最强发散项近似下基态电子的分布函数. 自由系统中的粒子分布是

$$n_k = \langle \Psi_H^0 | \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k | \Psi_H^0 \rangle, \quad (3.279)$$

其中自由粒子的基态波函数是

$$|\Psi_H^0\rangle = |\Phi^0\rangle = \prod_{\substack{k\sigma \\ |\mathbf{k}| \leq k_F}} \hat{C}_{k\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (3.280)$$

对应的无相互作用的基态粒子分布函数应为一阶跃函数. 而我们所讨论的单粒子格林函数的表达式为

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') &= -i \left\langle \Psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{\psi}_H(\mathbf{x}, t) \hat{\psi}_H^\dagger(\mathbf{x}', t') \right] \right| \Psi_H^0 \right\rangle \\ &= \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} G(\mathbf{k}, t - t'), \end{aligned} \quad (3.281)$$

其中:

$$G(\mathbf{k}, t - t') = -i \left\langle \Psi_H^0 \left| \hat{T} \left[\hat{C}_k(t) \hat{C}_k^\dagger(t') \right] \right| \Psi_H^0 \right\rangle, \quad (3.282)$$

其中时间变量取为 $t' = t + \eta$, 于是

$$G(\mathbf{k}, -\eta) = i \left\langle \Psi_H^0 \left| \hat{C}_k^\dagger \hat{C}_k \right| \Psi_H^0 \right\rangle = i n_k, \quad (3.283)$$

从而可以利用格林函数计算基态粒子分布, 即

$$n_k = -i G(\mathbf{k}, -\eta). \quad (3.284)$$

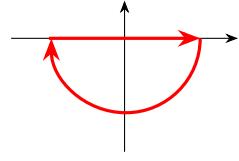
格林函数转到频率表象下是

$$\begin{aligned} G^0(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} G^0(\mathbf{k}, \omega) d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{\omega - \epsilon_k^0 + i\eta \operatorname{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F)}, \end{aligned} \quad (3.285)$$

分为以下两种情况考虑.

(i) $t \geq 0$

极点在下半平面, 增加下半平面圆弧构成围道积分, 即

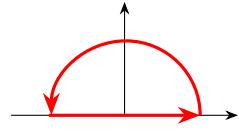


于是有

$$\begin{aligned} G^0(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \oint dz \frac{e^{-izt}}{z - \epsilon_k + i\eta \operatorname{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F)} \\ &= \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) e^{-i\epsilon_k^0 t} \theta(|\mathbf{k}| - k_F) \\ &= -i e^{-i\epsilon_k^0 t} \theta(|\mathbf{k}| - k_F). \end{aligned} \quad (3.286)$$

(ii) $t < 0$

极点在上半平面, 增加上半平面圆弧构成围道积分, 有



于是有

$$\begin{aligned} G^0(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \oint \frac{dz e^{-izt}}{z - \epsilon_k^0 + i\eta \operatorname{sgn}(|\mathbf{k}| - k_F)} \\ &= \frac{1}{2\pi} (2\pi i) e^{-i\epsilon_k^0 t} \theta(k_F - |\mathbf{k}|). \end{aligned} \quad (3.287)$$

综上, 有

$$\begin{aligned} G^0(\mathbf{k}, t) &= -i e^{-i\epsilon_k^0 t} \theta(|\mathbf{k}| - k_F) \theta(t) \\ &\quad + i e^{-i\epsilon_k^0 t} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(-t), \end{aligned} \quad (3.288)$$

取 $t = -\eta$, 有

$$G^0(\mathbf{k}, -\eta) = i e^{i\epsilon_k^0 \eta} \theta(k_F - |\mathbf{k}|) = i \theta(k_F - |\mathbf{k}|). \quad (3.289)$$

相应地有分布函数 $n_k^0 = -iG^0(\mathbf{k}, -\eta)$ 是一阶跃函数, 所以这一结果是正确的.

下面将以上得到的结果带入最强发散项近似中, 整理.

$$G_{\text{MD}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k^0 - \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega)} \equiv \tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, \omega) + F(\mathbf{k}, \omega), \quad (3.290)$$

其中 \tilde{G}_{MD} 是极点附近的格林函数:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, \omega) &= \left[\omega - \underbrace{(\epsilon_k^0 + \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega))}_{E_k} - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{\omega=E_k} (\omega - E_k) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) \right]^{-1} \\ &= \left[\omega - E_k - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{\omega=E_k} (\omega - E_k) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}(\mathbf{k}, E_k) \right]^{-1} \\ &= \left[\left(1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{\omega=E_k} \right) (\omega - E_k) - i\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) \right]^{-1} \\ &= \frac{z_k}{\omega - E_k + i\Gamma_k}, \end{aligned} \quad (3.291)$$

其中,

$$z_k \equiv \left[1 - \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, \omega) \Big|_{\omega=E_k} \right]^{-1} \quad (3.292)$$

称为重整化因子, 是一个与 \mathbf{k} 有关的平滑缓变函数, 并且 $0 < z_k \leq 1$. 以及有:

$$\begin{aligned} \Gamma_k &\equiv -\text{Im}\Sigma_{\text{MD}}^*(\mathbf{k}, E_k) z_k \\ &= z_k \gamma_k \\ &= z_k C_k \text{sgn}(E_k - \mu)(E_k - \mu)^2 \\ &= \tilde{C}_k \text{sgn}(E_k - \mu)(E_k - \mu)^2, \end{aligned} \quad (3.293)$$

其中最后一步取 $\tilde{C}_k = z_k C_k$.

格林函数可以表示为:

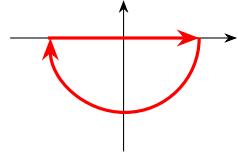
$$G_{\text{MD}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{z_k}{\omega - E_k + i\gamma_k} + F(\mathbf{k}, \omega), \quad (3.294)$$

即任意函数可以展开为极点处的平滑函数和其他连续部分之和. 与自由粒子情况类似, 有

$$\begin{aligned} G_{\text{MD}}(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \left[\frac{z_k}{\omega - E_k + i\Gamma_k} + F(\mathbf{k}, \omega) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{z_k}{\omega - E_k + i\Gamma_k} + F(\mathbf{k}, t). \end{aligned} \quad (3.295)$$

\tilde{G}_{MD} 有下面两种情况.

(i) $t > 0$, 极点在下半平面, 增加下半平面圆弧构成围道积分, 即



于是有

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, t) &= \frac{1}{2\pi} \oint dz \frac{e^{-izt} z_k}{z - E_k + i\tilde{C}_k \text{sgn}(E_k - \mu)(E_k - \mu)^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} (-2\pi i) e^{-i(E_k - i\Gamma_k)t} \theta(E_k - \mu) \\ &= -iz_k e^{-iE_k t} e^{-\tilde{C}_k (E_k - \mu)^2 t} \theta(E_k - \mu),\end{aligned}\quad (3.296)$$

其中第二步取 $\Gamma_k \equiv \tilde{C}_k \text{sgn}(E_k - \mu)(E_k - \mu)^2$.

(ii) $t < 0$, 此时取上半平面围道积分, 有

$$\tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, t) = iz_k e^{-iE_k t} e^{\tilde{C}_k (E_k - \mu)^2 t} \theta(\mu - E_k). \quad (3.297)$$

综上,

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, t) &= -iz_k e^{-iE_k t} e^{\tilde{C}_k (E_k - \mu)^2 t} \theta(E_k - \mu) \theta(t) \\ &\quad + iz_k e^{-iE_k t} e^{\tilde{C}_k (E_k - \mu)^2 t} \theta(\mu - E_k) \theta(-t),\end{aligned}\quad (3.298)$$

如果令 t 为一负小量 $-\eta$, 有

$$\tilde{G}_{\text{MD}}(\mathbf{k}, -\eta) = iz_k e^{iE_k \eta} e^{-\tilde{C}_k (E_k - \mu)^2 \eta} \theta(\mu - E_k) = iz_k \theta(\mu - E_k). \quad (3.299)$$

带入粒子分布函数表达式中, 有

$$\tilde{n}_k = -i G_{\text{MD}}(\mathbf{k}, -\eta) = z_k \theta(\mu - E_k), \quad (3.300)$$

以及考虑到相互作用对分布函数有一修正, 得到

$$n_k = \tilde{n}_k - i F(\mathbf{k}, -\eta) \equiv \tilde{n}_k + \tilde{\tilde{n}}_k. \quad (3.301)$$

这一分布函数对应的图像如图 3.2 所示, 函数在费米面处有跳跃, 但不是阶跃函数. 凝胶模型的最强发散项近似能够反映系统的等离振荡. 但进一步考虑该模型电子关联, 需要利用密度关联格林函数, 得到介电函数的零点, 即格林函数的极点. 下面利用费曼图对这一方法进行讨论.

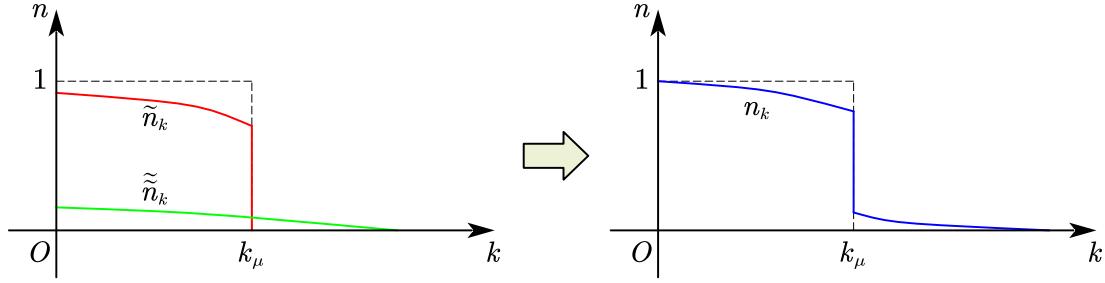


图 3.2: 最强发散项近似的基态电子分布函数示意图.

3.8.3 密度关联格林函数

回顾前面得到的, 电子间严格的有效相互作用的费曼图是

$$\text{---} \rightarrow \text{---} = \text{---} \rightarrow \text{---} + \text{---} \rightarrow \text{---} \text{ (3.302)}$$

对应的表达式:

$$\tilde{U}(k) = \frac{U(k)}{1 - U(k)\Pi^*(k)} = \frac{V(\mathbf{k})}{1 - V(\mathbf{k})\Pi^*(k)}, \quad (3.303)$$

严格的总极化图展开式为

$$\text{---} \otimes \text{---} = \text{---} \otimes \text{---} + \text{---} \otimes \text{---} \text{ (3.304)}$$

对应的表达式为

$$\Pi(k) = \frac{\Pi^*(k)}{1 - U(k)\Pi^*(k)} = \frac{\Pi^*(k)}{1 - V(\mathbf{k})\Pi^*(k)}. \quad (3.305)$$

最强发散项近似的有效相互作用表达式为

$$\text{---} \rightarrow \text{---} = \text{---} \rightarrow \text{---} + \text{---} \rightarrow \text{---} \text{ (3.306)}$$

对应的数学表达式为

$$\tilde{U}_{\text{MD}}(k) = \frac{U(k)}{1 - U(k)\Pi^{*(0)}(k)} = \frac{V(\mathbf{k})}{1 - V(\mathbf{k})\Pi^{*(0)}(k)}. \quad (3.307)$$

在这一近似下, 极化图展开为

$$\text{---} \otimes \text{---} = \text{---} + \text{---} \otimes \text{---} \text{ (3.308)}$$

对应的表达式为

$$\Pi_{\text{MD}}(k) = \frac{\Pi^{*(0)}(k)}{1 - U(k)\Pi^{*(0)}(k)} = \frac{\Pi^{*(0)}(k)}{1 - V(\mathbf{k})\Pi^{*(0)}(k)}. \quad (3.309)$$

总极化 $\Pi_{\text{MD}}(k)$ 对应着(因果)密度关联格林函数, $\Pi^{*(0)}$ 是 Lindhard 函数. 这一形式可以

得出与上一章相同的结果.

有效相互作用可以进一步改写成

$$\tilde{U}(k) \equiv \frac{U(k)}{\epsilon(k)} = \frac{V(\mathbf{k})}{\epsilon(k)}, \quad (3.310)$$

其中有

$$\epsilon(k) = 1 - V(\mathbf{k})\Pi^*(k) \quad (3.311)$$

称为系统介电函数. 最强发散项近似下有

$$\epsilon_{\text{MD}}(k) = 1 - V(\mathbf{k})\Pi^{*(0)}(k). \quad (3.312)$$

于是有一般成立的关系式:

$$\frac{1}{\epsilon(k)} = 1 + V(\mathbf{k})\Pi(k) \Rightarrow \frac{1}{\epsilon_{\text{MD}}(k)} = 1 + V(\mathbf{k})\Pi_{\text{MD}}(k). \quad (3.313)$$

下面具体计算在几种极限下的 Lindhard 函数.

(A) 长波极限 ($q \rightarrow 0$).

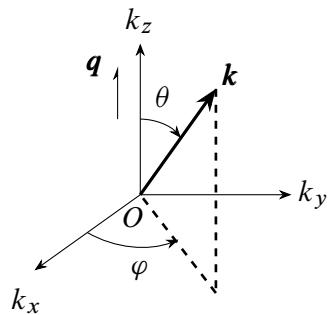
根据之前的计算, 得到

$$\begin{aligned} \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) &= 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \\ &\times \left[\frac{1}{\omega - \omega_{kq} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \omega_{kq} - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.314)$$

其中

$$\omega_{kq} \equiv \epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0 = \frac{1}{2m} (q^2 - 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}). \quad (3.315)$$

采用球极坐标



Lindhard 函数进一步写成

$$\begin{aligned} \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) = & 2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_{\substack{|\mathbf{k}| \leq k_F, \\ |\mathbf{k} + \mathbf{q}| > k_F}} k^2 dk \\ & \times \left[\frac{1}{\omega - \frac{1}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta) + i\eta} - \frac{1}{\omega + \frac{1}{2m}(q^2 + 2kq \cos \theta) - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.316)$$

在长波极限下, \mathbf{q} 取值很小, 相应有 $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}_F$. 取极限 $k \rightarrow k_F$, q 只保留到一次项, $q^2 = 0$. 于是积分与 k 无关. 利用对 k 的限制:

- $k \leq k_F$,
- $\sqrt{k^2 + q^2 + 2kq \cos \theta} > k_F \Rightarrow k + q \cos \theta > k_F \Rightarrow \cos \theta > 0$,
- $k > k_F - q \cos \theta$,

积分式可以写成

$$\begin{aligned} \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_{k_F - q \cos \theta}^{k_F} k_F^2 dk \\ & \times \left[\frac{1}{\omega - \frac{1}{2m}(2k_F q \cos \theta) + i\eta} - \frac{1}{\omega + \frac{1}{2m}(2k_F q \cos \theta) - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.317)$$

令 $x = \cos \theta$, 有

$$\begin{aligned} \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{q k_F^2}{2\pi^2} \int_0^1 dx x \\ & \times \left[\frac{1}{\omega - \frac{k_F q x}{m} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \frac{k_F q x}{m} - i\eta} \right], \end{aligned} \quad (3.318)$$

再引入 $\xi \equiv \frac{m\omega}{k_F q}$, 得到

$$\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{m k_F}{2\pi^2} \int_0^1 dx x \left[\frac{1}{\xi - x + i\eta} - \frac{1}{\xi + x - i\eta} \right]. \quad (3.319)$$

利用柯西主值积分, 第一项:

$$\begin{aligned} \int_0^1 dx x \frac{1}{\xi - x + i\eta} = & \int_0^1 dx x \left[\frac{\mathcal{P}}{\xi - x} - i\pi \delta(\xi - x) \right] \\ = & -\mathcal{P} \int_0^1 dx \frac{x - \xi + \xi}{\xi - x} - i\pi \xi \theta(1 - \xi) \\ = & -1 - \mathcal{P}\xi \int_0^1 \frac{dx}{x - \xi} - i\pi \xi \theta(1 - \xi), \end{aligned} \quad (3.320)$$

其中, 当 $0 < \xi < 1$ 时, 有

$$\mathcal{P} \int_0^1 \frac{dx}{x - \xi} = \int_0^{\xi - \delta} \frac{dx}{x - \xi} + \int_{\xi + \delta}^1 \frac{dx}{x - \xi} = \ln \left| \frac{1 - \xi}{\xi} \right|. \quad (3.321)$$

代回第一项积分, 有

$$\int_0^1 dx \frac{x}{\xi - x + i\eta} = -1 - \xi \ln \left| \frac{1-\xi}{\xi} \right| - i\pi\xi\theta(1-\xi), \quad (0 < \xi < 1). \quad (3.322)$$

类似地, 有第二项

$$\begin{aligned} -\int_0^1 dx \frac{x}{\xi + x - i\eta} &= -1 + \xi \ln \left| \frac{1+\xi}{\xi} \right| + i\pi\xi\theta(1+\xi), \quad (-1 < \xi < 0) \\ &= -1 + \xi \ln \left| \frac{1+\xi}{\xi} \right| - i\pi|\xi|\theta(1-|\xi|). \end{aligned} \quad (3.323)$$

两项合并, 得到

$$\int_0^1 dx x \left[\frac{1}{\xi - x + i\eta} - \frac{1}{\xi + x - i\eta} \right] = -2 + \xi \ln \left| \frac{1+\xi}{1-\xi} \right| - i\pi\theta(1-|\xi|)|\xi|. \quad (3.324)$$

代回 Lindhard 函数中, 有

$$\Pi^*(\mathbf{q}, \omega) = \frac{-mk_F}{\pi^2} \left[1 - \frac{\xi}{2} \ln \left| \frac{1+\xi}{1-\xi} \right| + \frac{i\pi}{2} |\xi| \theta(1-|\xi|) \right], \quad (3.325)$$

其中有 $\xi \equiv \frac{m\omega}{k_F q}$, $q \rightarrow 0$, $\xi \rightarrow \infty$. 考虑小量展开

$$\ln \left| \frac{1+\xi}{1-\xi} \right| \approx \frac{2}{\xi} + \frac{2}{3} \frac{1}{\xi^2}, \quad (3.326)$$

有

$$\Pi^{*(0)}(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega) = \frac{mk_F}{\pi^2} \frac{1}{3\xi} \left(\frac{k_F q}{m\omega} \right)^2 = \frac{nq^2}{m\omega^2}, \quad n = \frac{N}{V}. \quad (3.327)$$

总极化的表达式

$$\Pi_{MD}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - V(\mathbf{q})\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega)}, \quad (3.328)$$

等离激元的振荡频率由上式的极点方程给出, 即

$$\begin{aligned} 1 &= V(\mathbf{q})\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, \omega), \\ \Rightarrow 1 &= \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{nq^2}{m\omega^2}, \\ \Rightarrow \omega^2 &= \frac{4\pi e^2 n}{m} = \omega_p^2, \\ \Rightarrow \omega_p &= \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}}, \end{aligned} \quad (3.329)$$

即得等离振荡频率, 也就是系统集体激发的准粒子能谱.

(B) 静电屏蔽 ($\omega = 0$).

Lindhard 函数:

$$\begin{aligned}\Pi^{*(0)} &= -4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(|\mathbf{k} + \mathbf{q}| - k_F) \theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0} \\ &= -4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{[1 - \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)] \theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0},\end{aligned}\quad (3.330)$$

其中, 虚部始终为零. 考虑括号中第二项:

$$A = 4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\epsilon_{k+q}^0 - \epsilon_k^0}, \quad (3.331)$$

作变量代换, 有 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} - \mathbf{q}$, 得到

$$A = 4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|) \theta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|)}{\epsilon_k^0 - \epsilon_{k+q}^0}, \quad (3.332)$$

这里得到的结果, 分子不变, 分母差一负号, 即有 $A = -A \Rightarrow A = 0$. 于是 $\Pi^{*(0)}$ 表达式中只需要考虑第一项. 有:

$$\begin{aligned}\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, 0) &= -4 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\frac{1}{2m}(q^2 + 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})} \\ &= -\frac{2m}{\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^1 \frac{dx}{q^2 + 2qkx} \\ &= -\frac{m}{\pi^2 q} \int_0^{k_F} k dk \ln \left| \frac{q^2 + 2qk}{q^2 - 2qk} \right|,\end{aligned}\quad (3.333)$$

其中第二步取 $x \equiv \cos \theta$. 再利用积分公式

$$\int dx x \ln |x + a| = \frac{1}{2}(x^2 - a^2) \ln |x + a| - \frac{x^2}{4} + \frac{ax}{2}, \quad (3.334)$$

表达式进一步写成

$$\Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, 0) = -\frac{mk_F}{2\pi^2} \left[1 + \frac{1}{y} \left(1 - \frac{y^2}{4} \right) \ln \left| \frac{1 + \frac{y}{2}}{1 - \frac{y}{2}} \right| \right], \quad (3.335)$$

其中有 $y \equiv q/k_F$. 下面利用这一结果来讨论系统的效果相互作用.

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{\text{MD}}(\mathbf{q}, 0) &= \frac{V(\mathbf{q})}{1 - V(\mathbf{q}) \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, 0)} \\ &= \frac{V(\mathbf{q})}{\epsilon_{\text{MD}}(\mathbf{q}, 0)} \\ &= \frac{4\pi e^2}{q^2 - 4\pi e^2 \Pi^{*(0)}(\mathbf{q}, 0)},\end{aligned}\quad (3.336)$$

傅里叶变换到实空间下, 有

$$\tilde{U}_{\text{MD}}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \tilde{U}_{\text{MD}}(\mathbf{q}, 0) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3}, \quad (3.337)$$

在 $r \rightarrow \infty$ 时振荡衰减. 这一结果常称为 Friedel 震荡, 如图3.3所示.

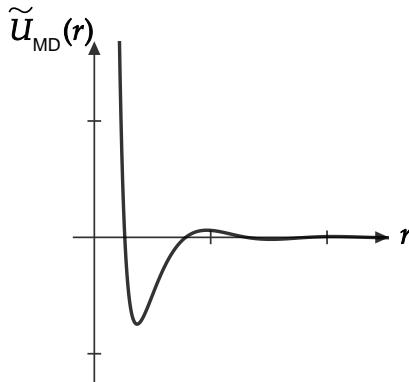


图 3.3: Friedel 震荡函数.

下面讨论 $q \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$ 的情况:

$$\Pi^{*(0)}(\mathbf{q} \rightarrow 0, 0) = -\frac{mk_F}{\pi^2}, \quad (3.338)$$

$$\tilde{U}_{\text{MD}}(\mathbf{q} \rightarrow 0, 0) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + 4\pi e^2 \frac{mk_F}{\pi^2}} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \lambda^2}, \quad (3.339)$$

其中有

$$\lambda^2 \equiv \frac{4e^2 mk_F}{\pi} = \frac{6\pi n e^2}{E_F}, \quad n = \frac{N}{V}, \quad (3.340)$$

我们称

$$\lambda^{-1} = \frac{1}{\sqrt{\frac{6\pi n e^2}{E_F}}} \quad (3.341)$$

为 Thomas-Fermi 屏蔽长度. 并有

$$\tilde{U}_{\text{MD}}(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{r} e^{-\lambda r} \quad (3.342)$$

称为汤川 (Yukawa) 屏蔽势, 如图3.4所示.

 注意 下面讨论一下最强发散项近似的成立条件.

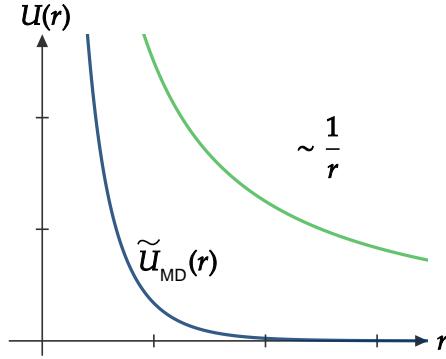
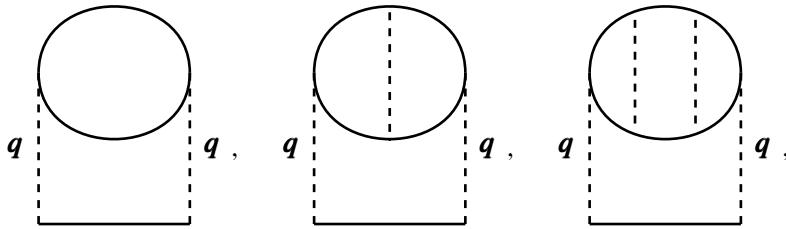


图 3.4: 汤川屏蔽势和库仑势.

考虑这样三种自能图:



这三种图的发散程度相同, 但我们在取近似时, 只考虑了第一种, 而忽略了后两种. 这是因为在高密度情况下, 第一项的贡献要远大于其它项. 下面证明这一结论.

在高密度近似下, 假设一个电子所占据的体积可以用等体积的球来描述, 即有

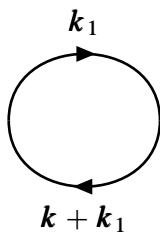
$$\frac{V}{N} \equiv \frac{4}{3}\pi r_0^3. \quad (3.343)$$

引入无量纲参数 r_s , 令 $r_0 \equiv r_s a_H$, 其中 a_H 是氢原子玻尔第一轨道半径, 有 $a_H = \hbar^2/m e^2$. 高密度近似对应着 $r_s \ll 1$, 即

$$r_s = \frac{\left(\frac{9}{4}\pi\right)^{1/3}}{a_H k_F} \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{a_H k_F} \ll 1. \quad (3.344)$$

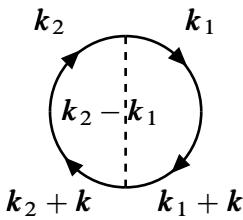
下面主要分析  和  的贡献.

(a)



$$\Pi^{*(0)}(k) = -2i \int \frac{dk_1}{(2\pi)^4} G^0(k+k_1) G^0(k_1). \quad (3.345)$$

(b)



$$\begin{aligned}\Pi^{*(1)}(k) &= -2i^2 \int \frac{dk_1}{(2\pi)^4} \int \frac{dk_2}{(2\pi)^4} G^0(k_1+k) G^0(k_1) V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) G^0(k_2+k) G^0(k_2) \\ &= -2i^2 \frac{4\pi e^2}{k_F^2} \left[\int \frac{dk_1}{(2\pi)^4} G^0(k_1+k) G^0(k_1) \right] \left[\int \frac{dk_2}{(2\pi)^4} G^0(k_2+k) G^0(k_2) \right],\end{aligned}\quad (3.346)$$

可以看出, 两个表达式的关系为

$$\left| \Pi^{*(1)}(k) \right| \sim \frac{e^2}{k_F^2} \left| \Pi^{*(0)}(k) \right|^2, \quad (3.347)$$

考虑两个函数的比值, 有

$$\frac{\left| \Pi^{*(1)}(k) \right|}{\left| \Pi^{*(0)}(k) \right|} \sim \frac{e^2}{k_F^2} \left| \Pi^{*(0)}(k) \right| = \frac{e^2}{k_F^2} m k_F = \frac{m e^2}{k_F} = \frac{1}{k_F a_H}. \quad (3.348)$$

上式在高密度极限下远小于 1. 于是有 $|\Pi^{*(1)}(k)| \ll |\Pi^{*(0)}(k)|$ 可以忽略, 对应着电子的无规则相位最强. 这是近似成立的条件.

习题 6

计算下面两个动量空间费曼图, 要求对所有内部自旋求和, 所有内部频率积分.

