多体理论的路径积分表述 V：格林函数的运动方程及其意义

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

这里我要描述一下格林函数的运动方程及其意义。假设系统的哈密尔顿量已知，为

$$\hat{H}=\sum_{k,\sigma}\epsilon_k\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k,\sigma}+\omega\sum_k\hat{a}^\dagger_k a_k+\sum_{kq,\sigma}\hat{c}^\dagger_{k+q,\sigma}c_{k,\sigma}(\hat{a}^\dagger_{-q}+\hat{a}_q)$$

这是一个描述晶格里面电声相互作用的 Holstein 模型。为了得到格林函数的运动方程，首先定义电子的格林函数为

$$G_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau,\tau')=-\langle T_\tau\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')\rangle$$

算符的虚时间海森堡表象为

$$\hat{c}(\tau)=e^{\tau\hat{H}}\hat{c}e^{-\tau\hat{H}}$$

格林函数用到了时序算符，将时序算法展开得到

$$G_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau,\tau')=-\theta(\tau-\tau')\langle\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')\rangle+\theta(\tau'-\tau)\langle\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\rangle$$

将格林函数对虚时间 τ 求微分，得到

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial\tau}G_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau,\tau')\\=&-\delta(\tau-\tau')\langle\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau)\rangle-\delta(\tau'-\tau)\langle\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau)\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\rangle\\&-\theta(\tau-\tau')\langle e^{\tau\hat{H}}[\hat{H},\hat{c}_{k,\sigma}]e^{-\tau\hat{H}}\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')\rangle+\theta(\tau'-\tau)\langle c^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')e^{\tau\hat{H}}[\hat{H},\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)]e^{-\tau\hat{H}}\rangle\end{aligned}$$

因为这两个等式：

$$\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau)+\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau)\hat{c}_{k,\sigma}(\tau)=e^{\tau\hat{H}}\{\hat{c}_{k,\sigma},\hat{c}_{k',\sigma'}\}e^{-\tau\hat{H}}=\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}$$

$$\begin{aligned}[\hat{H},\hat{c}_{k,\sigma}]&=\sum_{p,s}\epsilon_p(-\delta_{k,p}\delta_{s,\sigma})\hat{c}_{p,s}+\sum_{p,q,s}(\hat{a}^\dagger_{-q}+\hat{a}_q)(-\delta_{k,p+q}\delta_{\sigma,s})\hat{c}_{p,s}\\&=-\epsilon_k\hat{c}_{k,\sigma}-\sum_q(\hat{a}^\dagger_{-q}+\hat{a}_q)\hat{c}_{k-q,\sigma}\end{aligned}$$

所以格林函数的运动方程可以写作

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial\tau}G_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau,\tau')\\=&-\delta(\tau-\tau')\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\\&-\epsilon_k G_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau,\tau')+\sum_q\langle T_\tau\hat{\phi}_q(\tau)\hat{c}_{k-q,\sigma}(\tau)\hat{c}^\dagger_{k',\sigma'}(\tau')\rangle\end{aligned}$$

其中定义了算符 $\hat{\phi}_q=\hat{a}^\dagger_{-q}+\hat{a}_q$.

如果令 $\tau=0,\tau'=0^-,k=k',\sigma=\sigma'$ ，则有

$$\sum_q\langle\hat{\phi}_q\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k-q,\sigma}\rangle=-\delta(0^+)-\Big(\frac{\partial}{\partial\tau}+\epsilon_k\Big)G_{k,\sigma}(\tau,\tau')\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}$$

左边为电声作用能量，右边为格林函数的微分。通过这个方程，我们可以计算电声作用能量的大小。

当哈密尔顿量不显含虚时间的时候，我们有

$$G_{k,\sigma}(\tau,\tau')=G_{k,\sigma}(\tau-\tau')$$

在虚频表象下，格林函数为

$$G_{k,\sigma}(i\omega_n)=\int_0^\beta G_{k,\sigma}(\tau)e^{i\omega_n\tau}d\tau$$

它的逆变换为

$$G_{k,\sigma}(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{-i\omega_n\tau},-\beta<\tau<\beta$$

对于delta函数，我们有

$$\delta(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}e^{-i\omega_n\tau}$$

于是我们就有

$$\begin{aligned}&\Big(\frac{\partial}{\partial\tau}+\epsilon_k\Big)G_{k,\sigma}(\tau,\tau')\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}\\=&\Big(\frac{\partial}{\partial\tau}+\epsilon_k\Big)\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}\\=&\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)(-i\omega_n+\epsilon_k)e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}\\=&-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Big(G^{(0)}_{k,\sigma}(i\omega_n)\Big)^{-1}e^{i\omega_n0^+}\\=&-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Big(\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)+G^{-1}_{k,\sigma}(i\omega_n)\Big)e^{i\omega_n0^+}\\=&-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}e^{i\omega_n0^+}-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\\=&-\delta(0^+)-\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\end{aligned}$$

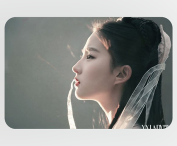
因此，得到电声作用能量在 k,σ 上的分量为

$$\begin{aligned}&\sum_q\langle\hat{\phi}_q\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k-q,\sigma}\rangle\\=&-\delta(0^+)-\Big(\frac{\partial}{\partial\tau}+\epsilon_k\Big)G_{k,\sigma}(\tau,\tau')\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}\\=&\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\end{aligned}$$

求和得到总电声作用能量为

$$\begin{aligned}&\sum_{q,k,\sigma}\langle\hat{\phi}_q\hat{c}^\dagger_{k,\sigma}\hat{c}_{k-q,\sigma}\rangle\\=&\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}\sum_{k,\sigma}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\end{aligned}$$

所以只要我们知道了格林函数的运动方程，我们就可以得到相互作用能量。这里的推导都是基于一个条件，那就是模型的哈密尔顿量是给定的。如果系统不是用哈密尔顿量表示的，而是用路径积分的作用量表示的，那么这个方法就不适用了。为了得到作用量表示的系统的相互作用能，我们需要借助于路径积分的方法。这里

李恩志：路径积分法推导格林函数的运动方程
zhuanlan.zhihu.com


我给出一个简单的 toy 模型情况下的路径积分方法推导格林函数的运动方程。接下来我打算在真实模型上使用这个方法做出相应的推导。这是下一节的内容。

编辑于 2020-06-01

量子物理 理论物理 凝聚态理论

文章被以下专栏收录

量子力学与路径积分

6 条评论

切换为时间排序

写下你的评论...

北城夜雨 2020-05-31
求问最后求格林高数关于虚时间微分时tau'怎么从0-变成0+ 了呢
赞

拉普拉斯算符 (作者) 回复 **北城夜雨** 2020-06-01
Tau′ 应该一直都是0-，有的地方是笔误，我修改一下，谢谢
赞 推荐 删除

北城夜雨 回复 **拉普拉斯算符** (作者) 2020-06-01
好的
赞

一坨狗屎 2019-04-16
点赞！[赞同]老李啥时候写一篇Finite temperature Matsubara Frequency的
赞

YYuZou 2019-04-14
所以，能说格林函数的运动方程其实就是戴森方程吗?
赞

拉普拉斯算符 (作者) 回复 **YYuZou** 2019-04-14
不是吧，只有推导能量公式的时候才用到了戴森方程
赞 推荐 删除