

## 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

苗舰舰、Triborg、yang元祐等 53 人赞同了该文章

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

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

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

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

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

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

将格林函数对虚时间  $\tau$  求微分，得到

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

因为这两个等式：

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

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

所以格林函数的运动方程可以写作

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

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

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

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

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

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

因此，得到电声作用能量在  $k,\sigma$  上的分量为

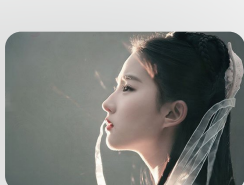
$$\begin{aligned}&\sum_q\langle\hat{\phi}_q\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger\hat{c}_{k-q,\sigma}\rangle\\&=-\delta(0^+)-\left(\frac{\partial}{\partial\tau}+\epsilon_k\right)G_{k,\sigma}(\tau,\tau')\Big|_{\tau=0,\tau'=0^-}\\&=\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\end{aligned}$$

求和得到总电声作用能量为

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

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

开启赞赏

赞赏开启后，读者将可以付费支持你的创作。

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

推荐阅读

## 算符及其运算规则

在物理学中，算符是一个函数，它作用于物理系统的物理态，使其转变到另一个态。算符的应用最简单的例子就是关于对称性的研究。因此，它们是经典力学中非常有用的工具。算符在量子力学中...

yang元祐

## [T.P.C/L.F.L.]场量子化基础 (1.1.2) :相互作用绘景与格...

本专栏中的文章是T. P. Cheng和L. F. Li所著《Gauge Theory of Elementary Particle Physics》[1]一书的读书笔记。Mynor：[T.P.C/L.F.L.]场量子化基础 (1.1)：正则量子化形式回顾例2：标量...

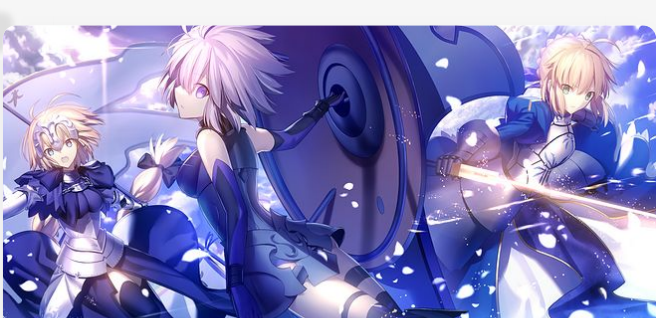
Mynor

发表于Parti...

## 量子力学学习笔记——维势场模型 (1)

这一部分会介绍一些典型的一维势阱模型，包括无限深势阱、半无限深势阱、有限深势阱和 \delta 势阱。求解的方法并不复杂，在会求解薛定谔方程的前提下，加入势能函数  $V(x)$  的具体表达式，...

Constant137



## 高等量子理论笔记-路径积分 (3)

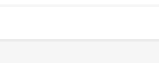
Helga...

发表于Yme的学...

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[▲](#) 赞同 53[●](#) 6 条评论[🔗](#) 分享[❤](#) 喜欢[★](#) 收藏[⚙](#) 设置