多体理论的路径积分表述 III：费米子的相干态与配分函数

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

这是系列文章的第三篇。前面两篇已经总结了玻色子的相干态的性质以及玻色子的配分函数，这里总结一下费米子相干态的一些性质，以及如何用路径积分法计算费米子的配分函数。有了这些内容，就可以为计算电子-声子相互作用做好准备。

第一：费米子的相干态是费米子湮灭算符的本征态

定义费米子的产生与湮灭算符为 $\hat{c}^\dagger, \hat{c}$. 定义费米子的相干态为

$$|c\rangle = e^{\hat{c}^\dagger c}|0\rangle$$

相干态为湮灭算符的本征态，证明如下：

首先将湮灭算符作用在相干态上，得到

$$\begin{aligned}\hat{c}|c\rangle &= \hat{c}e^{\hat{c}^\dagger c}|0\rangle \\ &= \hat{c}(1+\hat{c}^\dagger c)|0\rangle \\ &= \hat{c}|0\rangle + (1-\hat{c}^\dagger\hat{c})c|0\rangle \\ &= c|0\rangle\end{aligned}$$

再将Grassmann number 作用在相干态上，得到

$$\begin{aligned}c|c\rangle &= c(1+\hat{c}^\dagger c)|0\rangle \\ &= c|0\rangle\end{aligned}$$

所以就有

$$\hat{c}|c\rangle = c|c\rangle$$

第二：相干态的模

已知

$$|c\rangle = e^{\hat{c}^\dagger c}|0\rangle = (1+\hat{c}^\dagger c)|0\rangle$$

它的共轭为

$$\langle\bar{c}| = \langle 0|(1+\bar{c}\hat{c}) = \langle 0|e^{\bar{c}\hat{c}}$$

求内积得到

$$\langle\bar{c}|c\rangle = \langle 0|0\rangle(1+\bar{c}c) = e^{\bar{c}c}$$

第三：相干态的完备性

因为费米子算符需要满足反对易关系，所以费米子的态只有两个，分别为 $|0\rangle, |1\rangle = \hat{c}^\dagger|0\rangle$.

定理： $\int d\bar{c}dc|c\rangle\langle\bar{c}|e^{-\bar{c}c} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \mathbb{I}$

证明： $|c\rangle\langle\bar{c}| = |0\rangle\langle 0| + \hat{c}^\dagger c|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0|\bar{c}\hat{c} + \hat{c}^\dagger c|0\rangle\langle 0|\bar{c}\hat{c}$

代入到积分中，我们可以得到如下四个积分：

$$\begin{aligned}\int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}|0\rangle\langle 0| &= |0\rangle\langle 0|\int d\bar{c}dc(1-\bar{c}c) \\ &= |0\rangle\langle 0|\int d\bar{c}dcc\bar{c} \\ &= |0\rangle\langle 0|\end{aligned}$$

其中用到了 Grassmann 积分的两个定义：

$$\begin{aligned}&\int dc = 0 \\ &\int dcc = 1\end{aligned}$$

第二个积分项为

$$\begin{aligned}\int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\hat{c}^\dagger c|0\rangle\langle 0| &= \int d\bar{c}dc(1-\bar{c}c)\hat{c}^\dagger c|0\rangle\langle 0| \\ &= -\int d\bar{c}dcc\hat{c}^\dagger|0\rangle\langle 0| \\ &= 0\end{aligned}$$

相似的，第三个积分也为零.

第四个积分为

$$\begin{aligned}&\int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\hat{c}^\dagger c|0\rangle\langle 0|\bar{c}\hat{c} \\ =&\int d\bar{c}dc(1-\bar{c}c)c\bar{c}|1\rangle\langle 1| \\ =&\int d\bar{c}dc(c\bar{c}-0)|1\rangle\langle 1| \\ =&|1\rangle\langle 1|\end{aligned}$$

把这四个积分加起来就得到了恒等算符。证明完毕。

第四节：费米子的配分函数

这里已经得到费米子相干态的三条重要性质。由于费米子的反对易特性，所以推导费米子的相干态性质比推导玻色子的简单很多。有了这几条性质，我们就可以接下来计算自由费米子的配分函数。

费米子的配分函数为

$$\begin{aligned}Z &= \mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}} \\ &= \sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|n\rangle \\ &= \sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}\int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}|c\rangle\langle\bar{c}||n\rangle \\ &= \int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle\langle\bar{c}|n\rangle \\ &= \int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\sum_n\langle -\bar{c}|n\rangle\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle \\ &= \int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\langle -\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle\end{aligned}$$

这里需要计算 $\langle -\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle = \langle -\bar{c}|e^{-\frac{\beta}{N}N\hat{H}}|c\rangle$. 定义 $\Delta\tau = \frac{\beta}{N}$ ，得到

$$\begin{aligned}&\langle -\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle \\ =&\langle -\bar{c}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}\times\ldots\times e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c\rangle \\ =&\langle -\bar{c}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}\int d\bar{c}_{N-1}dc_{N-1}e^{-\bar{c}_{N-1}c_{N-1}}|c_{N-1}\rangle\langle\bar{c}_{N-1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}\times\ldots\times\int d\bar{c}_1dc_1e^{-\bar{c}_1c_1}|c_1\rangle\langle\bar{c}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c\rangle \\ =&\int\prod_{k=1}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N-1}\bar{c}_kc_k}\langle -\bar{c}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_{N-1}\rangle\prod_{k=1}^{N-2}\langle\bar{c}_{k+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_k\rangle\langle\bar{c}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c\rangle\end{aligned}$$

定义 $c = c_0, -\bar{c} = \bar{c}_N$ ，上面的式子可以重新写作

$$\begin{aligned}&\langle -\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle \\ =&\int\prod_{k=1}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N-1}\bar{c}_kc_k}\langle -\bar{c}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_{N-1}\rangle\prod_{k=1}^{N-2}\langle\bar{c}_{k+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_k\rangle\langle\bar{c}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c\rangle \\ =&\int\prod_{k=1}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N-1}\bar{c}_kc_k}\prod_{k=0}^{N-1}\langle\bar{c}_{k+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_k\rangle \\ =&\int\prod_{k=1}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N-1}\bar{c}_kc_k}e^{\sum_{k=0}^{N-1}\left(\bar{c}_{k+1}c_k-\Delta\tau H(\bar{c}_{k+1},c_k)\right)}\end{aligned}$$

于是配分函数为

$$\begin{aligned}Z &= \int d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\langle -\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|c\rangle \\ &= \int d\bar{c}_Ndc_Ne^{-\bar{c}_Nc_N}\int\prod_{k=1}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N-1}\bar{c}_kc_k}e^{\sum_{k=0}^{N-1}\left(\bar{c}_{k+1}c_k-\Delta\tau H(\bar{c}_{k+1},c_k)\right)} \\ &= \int\prod_{k=1}^{N}d\bar{c}_kdc_ke^{-\sum_{k=1}^{N}\bar{c}_kc_k}e^{\sum_{k=0}^{N-1}\left(\bar{c}_{k+1}c_k-\Delta\tau H(\bar{c}_{k+1},c_k)\right)} \\ &= \int\prod_{k=1}^{N}d\bar{c}_kdc_ke^{\Delta\tau\sum_{k=0}^{N-1}\left(\frac{\bar{c}_{k+1}-\bar{c}_k}{\Delta\tau}c_k-H(\bar{c}_{k+1},c_k)\right)} \\ &= \int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{\int_0^\beta d\tau\left(\frac{\partial\bar{c}}{\partial\tau}c-H(\bar{c}_{\tau^+},c_\tau)\right)} \\ &= \int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^S\end{aligned}$$

其中定义了作用量

$$S = \int_0^\beta d\tau\Big(\frac{\partial\bar{c}}{\partial\tau}c - H(\bar{c}_{\tau^+},c_\tau)\Big)$$

推导的过程中我们要求这个式子成立：

$$\langle c_{k+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|c_k\rangle = e^{\bar{c}_{k+1}c_k-\Delta\tau H(\bar{c}_{k+1},c_k)}$$

该式子成立的条件是 $\Delta\tau\to 0$ 并且哈密尔顿量 $\hat{H}$ 是well-ordered. Well-ordered 意思是，所有的湮灭算符必须在产生算符的右边。如果不是，那么就可以用反对易关系调整算符的次序直至符合条件。另外，根据边界条件 $c = c_0, -\bar{c} = \bar{c}_N$ ，我们要求Grassmann number满足反周期条件 $c(\tau=0) = -c(\tau=\beta)$.

到此为止，我已经总结了费米子和玻色子的相干态性质以及它们的配分函数的计算。下一篇文章里，我将会推导如何将电声相互作用中的声子积掉，最终得到一个只含有电子相互作用的体系。由于声子的频率是有限的，所以得到的电子相互作用将会有时间延迟。这就对应了在电动力学里面，由于光速是有限的，所以我们将光子积掉后就得到了一个有延迟的库伦相互作用。

编辑于 2019-01-23