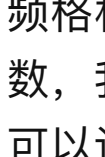




路径积分法推导格林函数的运动方程



拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

Triborg、yang元祐、Grass Little、BenderRodriguez、蔚航舰等 120 人赞同了该文章

第一节：导论

有限温度的量子多体理论中，松原格林函数是一个重要的工具。松原格林函数的定义是

$$G(r',\tau)=-\langle T\tau\hat{c}(r')\hat{c}^\dagger(r)\rangle.$$

其中已经用了时序算符 $T\tau$ ，松原格林函数以虚时间为自变量，经过一个傅里叶变换，可以得到虚频格林函数。通过虚频松原格林函数的谱表示，我们可以得到实频格林函数。通过实频格林函数，我们可以得到系统的谱函数。谱函数是一个实验可观测测量。于是，通过松原格林函数，我们可以计算出真实的实验可测数据。

我们做量子计算的时候，通常可以通过各种数值方法得到系统的格林函数，但是我们没法得到系统的总能量。为了计算出系统总能量，我们需要一个公式，这个公式可以将总能量与格林函数联系起来。在一般的量子多体理论书里面，我们可以找到这个公式，那就是(spin has been ignored for sake of simplicity)

$$E=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\sum_k\epsilon_kG_k(i\omega_n)+\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\sum_k\Sigma_k(i\omega_n)G_k(i\omega_n)$$

这个公式的推导依赖于松原格林函数的运动方程。如果我们知道系统的Hamiltonian描述，那么我们可以通过算符的对易关系得到运动方程。但是，如果系统是通过路径积分把部分自由度积掉得到的，那么我们就只有系统的作用量S，而没有算符形式的Hamiltonian，这时就不能用算符的对易关系得到运动方程了。在这种系统没有Hamiltonian算符的情况下，前面引用的公式是不是还能继续用就成了一个问题，本文就是要用路径积分推导格林函数的运动方程，并且证明即使系统没有Hamiltonian描述，上面的总能量公式仍然适用。

之所以要发展这套方法来推导总能量公式，是因为我们计算的模型里面含有声子。当我们做量子蒙特卡洛模拟的时候，我们先用路径积分的方法把声子积掉，然后得到一个有延迟的密度-密度相互作用，然后用连续时间量子蒙特卡洛来模拟我们的系统。用这种方法得到的格林函数只有电子的格林函数，而没有声子的格林函数。声子的信息包含在了电子格林函数里面。最后我们要从电子格林函数计算出系统的总能量。因为我们把声子积掉了，所以我们没有了Hamiltonian，只有一个有效作用量。我们知道教科书中总能量公式的推导依赖于系统的Hamiltonian算符表述，而这里我们根本就没有Hamiltonian算符。于是我们是否可以继续使用这个公式就成了一个问题。这里，我要从系统的作用量出发重新推导出这个公式，以此证明这个公式具有更广泛的应用。

第二节：路径积分

量子力学的路径积分表述最早起源于费曼。费曼在PhD研究中发现有的系统只能有作用量表述，不能有Hamiltonian算符表述。一个典型的例子就是通过路径积分把光子积掉，就会得到延迟的库伦势。这个系统只能用延迟作用量描述。对于这种系统，费曼说（下面的这段话摘自费曼的thesis）：

"On the other hand, an attempt to deal quantum mechanically directly with the particles, which would seem to be the most satisfactory way to proceed, is faced with the circumstance that the equations of motion of the particles are expressed classically as a consequence of a principle of least action, and cannot, it appears, be expressed in Hamiltonian form. For this reason a method of formulating a quantum analog of systems for which no Hamiltonian, but rather a principle of least action, exists has been worked out."

所以我现在遇到的跟费曼遇到问题一样，也是系统没有Hamiltonian表述，而只有路径积分表述。问题就是，如何通过系统的路径积分表述得到系统的运动方程。

第三节：简化的Holstein模型

Holstein模型用来描述晶格里面电子与声子的相互作用。作为一个例子，我这里选用一个简化的Holstein模型，它的Hamiltonian算符形式为

$$\hat{H}=\epsilon\hat{c}^\dagger\hat{c}+\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}+g(\hat{a}^\dagger+\hat{a})\hat{c}^\dagger\hat{c}$$

系统的配分函数为

$$Z=\text{Tr}e^{-\beta\hat{H}}$$

用路径积分来写，配分函数为

$$Z=\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S}$$

其中，作用量S为

$$S=\int_0^\beta d\tau\Big(\bar{c}(\partial_\tau+c)c+\bar{a}(\partial_\tau+\omega)a+g\bar{c}c(a+\bar{a})\Big)$$

接下来，我要用三种方法推导这个模型的松原格林函数的运动方程，并且证明这三种方法得到的结果是一致的。

方法I: 算符法

根据格林函数的定义，对格林函数求微分，得到

$$\frac{\partial G(r',\tau)}{\partial\tau}=-\delta(\tau'-\tau)+\epsilon(T\hat{c}(r')\hat{c}^\dagger(\tau))+g(T\hat{c}(r')\hat{\phi}(r')\hat{c}^\dagger(\tau)).$$

其中用到了算符的海森堡绘景以及算符的对易关系如下：

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

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

$$\hat{c}\hat{c}^\dagger+\hat{c}^\dagger\hat{c}=1$$

$$\partial^2=(\hat{c}^\dagger)^2=0$$

$$[\hat{c}^\dagger,\hat{c},\hat{c}]=-c$$

$$[\bar{a},\hat{c}]=[\hat{a}^\dagger,\hat{c}]=0$$

于是，格林函数的运动方程为

$$(\partial_\tau+c)G(r',\tau)=-\delta(\tau'-\tau)+g(T\hat{c}(r')\hat{\phi}(r')\hat{c}^\dagger(\tau))$$

方法II：路径积分方法

这里的路径积分方法跟下面的路径积分方法不一样。这里的路径积分没有把声子积掉，于是这个方法其实跟方法I是一样的，只不过更加累赘。之所以要这样做，是为了给下面的方法做铺垫。

为了推导路径积分情况下的运动方程，我们需要借助于Schwinger-Dyson方程。考虑下面的变换以及变换下的不变量：

$$c\rightarrow c'=c+\delta c,$$

$$\bar{c}\rightarrow\bar{c}'=\bar{c}+\delta\bar{c},$$

$$\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]\bar{c}(\tau)e^{-S[\bar{c},c,\bar{a},a]}=\int\mathcal{D}[\bar{c}',c']\mathcal{D}[\bar{a},a]\bar{c}'(\tau)e^{-S[\bar{c}',c',\bar{a},a]}$$

展开到一阶无穷小，我们可以得到

$$\begin{aligned}S[\bar{c}',c';\bar{a},a]&=S[\bar{c},c;\bar{a},a] \\&+\int_0^\beta d\tau\Big(\delta\bar{c}(\partial_\tau+c)c+\bar{c}(\partial_\tau+c)\delta c+g\delta\bar{c}c(a+\bar{a})+g\bar{c}\delta c(a+\bar{a})\Big) \\&=:S[\bar{c},c;\bar{a},a]+\delta S\end{aligned}$$

消去两边相同的量，得到Schwinger-Dyson方程

$$0=\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S}(\delta\bar{c}(\tau)-\bar{c}(\tau)\delta S)$$

因为 $\delta c,\delta\bar{c}$ 可以是任意的无穷小量，可以令 $\delta c=0$,于是得到

$$\begin{aligned}&\delta\bar{c}(\tau)-\bar{c}(\tau)\delta S \\&=\delta\bar{c}(\tau)-\bar{c}(\tau)\int_0^\beta d\tau'\Big(\delta\bar{c}(\partial_\tau+c)c+g\delta\bar{c}c(a+\bar{a})\Big) \\&=\int_0^\beta d\tau'\Big(\delta(\tau'-\tau)\delta\bar{c}(\tau)-\delta\bar{c}(\tau')(\partial_\tau+c)c(\tau')\bar{c}(\tau)-g\delta\bar{c}(\tau')c(\tau')(a+\bar{a})\bar{c}(\tau)\Big)\end{aligned}$$

代入到Schwinger-Dyson方程，得到

$$\begin{aligned}&\int_0^\beta d\tau'\Bigg[\delta(\tau-\tau')-(\partial_\tau+c)\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S}c(\tau')\bar{c}(\tau) \\&\quad -g\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S}c(\tau')\phi(\tau')\bar{c}(\tau)\Bigg]\delta\bar{c}(\tau')=0\end{aligned}$$

于是最终得到了格林函数的运动方程为 $(\partial_\tau+c)G(r',\tau)-g(T\hat{c}(r')\hat{\phi}(r')\hat{c}^\dagger(\tau))=-\delta(\tau'-\tau')$

这个运动方程与方法I得到的完全相同。这里我们用的是路径积分方法，没有借助于Hamiltonian算符以及算符之间的对易关系。这就为下面的方法做了铺垫。接下来我要把声子积掉，于是系统只能用有效作用量描述，我要从有效作用量推导出格林函数的运动方程。

方法III：积分掉声子之后的路径积分法

系统的配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S} \\&=Z_0\int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{-S_{eff}}\end{aligned}$$

其中 $Z_0=\left(1-e^{-\beta\omega}\right)^{-1}$ 为无相互作用声子的配分函数，有效作用量为

$$S_{eff}=\int_0^\beta d\tau\bar{c}(\partial_\tau+c)c+\frac{1}{2}g^2\int_0^\beta d\tau_1\int_0^\beta d\tau_2\bar{c}(\tau_1)c(\tau_1)D^0(\tau_1-\tau_2)\bar{c}(\tau_2)c(\tau_2)$$

同样定义无穷小任意变换以及变换下的不变量

$$c\rightarrow c'=c+\delta c,$$

$$\bar{c}\rightarrow\bar{c}'=\bar{c}+\delta\bar{c},$$

$$\int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{-S_{eff}[\bar{c},c]}\bar{c}(\tau)=\int\mathcal{D}[\bar{c}',c']e^{-S_{eff}[\bar{c}',c']}\bar{c}'(\tau)$$

展开到一阶无穷小，得到Schwinger-Dyson方程

$$0=\int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{-S_{eff}[\bar{c},c]}(-\delta S_{eff}\bar{c}(\tau)+\delta\bar{c}(\tau))$$

仍然令 $\delta c=0$ ，得到有效作用量的变分为

$$\delta S_{eff}=\int_0^\beta d\tau\delta\bar{c}(\partial_\tau+c)c+g^2\int_0^\beta d\tau_1\int_0^\beta d\tau_2\delta\bar{c}(\tau_1)c(\tau_1)D^0(\tau_1-\tau_2)\bar{c}(\tau_2)c(\tau_2)$$

于是就有

$$\begin{aligned}&\delta\bar{c}(\tau)-\delta S_{eff}\bar{c}(\tau) \\&=\int_0^\beta d\tau'\delta\bar{c}(\tau')\Bigg[\delta(\tau-\tau')-(\partial_\tau+c)c(\tau')\bar{c}(\tau)-g^2c(\tau')\bar{c}(\tau)\int_0^\beta d\tau_2D^0(\tau'-\tau_2)\bar{c}(\tau_2)c(\tau_2)\Bigg]\end{aligned}$$

代入到Schwinger-Dyson方程里面，我们就得到格林函数的运动方程为

$$\begin{aligned}&(\partial_\tau+c)G(r',\tau) \\&-g^2\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{-S_{eff}}\Bigg[c(\tau)\bar{c}(\tau)\int_0^\beta d\tau_2D^0(\tau'-\tau_2)\bar{c}(\tau_2)c(\tau_2)\Bigg]=- \delta(\tau'-\tau)\end{aligned}$$

根据这个公式，就可以得到系统的相互作用能量为

$$\begin{aligned}&g^2\frac{1}{Z}\int\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{-S_{eff}}\Bigg[\bar{c}(0)c(0)\int_0^\beta d\tau_2D^0(\tau_2)\bar{c}(\tau_2)c(\tau_2)\Bigg] \\&=-(\partial_\tau+c)G(r')\Big|_{\tau=0^+}-\delta(0^+) \\&=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\Sigma(i\omega_n)G(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}\end{aligned}$$

第四节：总结

以上三种方法都可以得到同一个结果，就是系统的相互作用能可以写成

$$E_V=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\Sigma(i\omega_n)G(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}$$

我们知道，系统的动能部分很容易求出，就是

$$E_K=\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}\epsilon G(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}$$

于是，我们就可以根据格林函数的运动方程求出系统的总能量。而且这三种方法得到了完全一样的结果。方法直接用算符求出格林函数的运动方程；方法II用路径积分方法求出同样的结果，但是这里声子部分并没有被积掉；方法III则首先积掉声子，然后得到有效作用量，同样利用有效作用量得到与前两种方法一样的结果。这表明，我们既可以用算符法求出运动方程，也可以用路径积分法求出运动方程。如果系统既可以用Hamiltonian算符来表示，又可以用路径积分表示，那么无论是用算符法还是用路径积分法都可以得到我们期待的结果。但是如果系统只能用路径积分表示，那么我们就不能用算符法了，而只能应用路径积分法。本文表明，路径积分法和算符法一样有效，于是通常教科书中的总能量公式只可以应用到将声子积掉的情形中。

这里的方法也可以推广到其他更复杂的模型，例如真实的Holstein模型，Hubbard-Holstein model, periodic Anderson model with Holstein phonons, etc. 这些模型里面运动方程的推导跟文中描述的一样，但是公式形式更为复杂。这里简单的公式编辑似乎都已经快要卡死了，复杂的公式就不在此列举了。

编辑于 2017-08-28

开启赞赏

赞赏开启后，读者将可以付费支持你的创作。

物理学理论物理量子多体理论

赞同 120

25 条评论

分享

喜欢

收藏

设置

赞同 120

25 条评论

分享

喜欢

收藏

设置

赞同 120

25 条评论

分享

喜欢

收藏

设置