拉普拉斯算符 🥸 数学话题下的优秀答主 Simpler、Triborg 等 45 人赞同了该文章

玻色子的配分函数。配分函数的定义为

这里首先推导一下玻色子系统的路径积分表述,然后试图从路径积分出发计算一下无相互作用的

 $Z={
m Tr}e^{-eta\hat{H}}$

假设我们有一组完备(不一定正交)基矢量 $|n\rangle$,那么配分函数在这组基矢量下的表象为

 $Z = \sum_{n} \langle n | e^{-eta \hat{H}} | n
angle$

 $Z=\sum_{n}\langle n|e^{-eta\hat{H}}|n
angle$

 $=\intrac{dar{lpha}dlpha}{2\pi i}e^{-ar{lpha}lpha}\langlear{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle$ 如果我们知道了矩阵元 $\langle ar{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle$ 那么就可以直接通过算上面的积分得到配分函数。但是相干

 $\langlear{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle=\langlear{lpha}|\prod^N e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha
angle$

 $\langlear{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle = \int\prod_{i=1}^{N-1}rac{dar{lpha}_k dlpha_k}{2\pi i}e^{-ar{lpha}_k lpha_k}\langlear{lpha}_N|e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha_{N-1}
angle\langlear{lpha}_{N-1}|e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha_{N-2}
angle imes\ldots\langlear{lpha}_1|e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha_0
angle$

其中的矩阵元为 $\langlear{lpha}_{j+1}|e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha_{j}
anglepprox\langlear{lpha}_{j+1}|1-\Delta au\hat{H}|lpha_{j}
angle$

所以 $\langlear{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle = \int\prod_{r=1}^{N-1}rac{dar{lpha}_kdlpha_k}{2\pi i}e^{-\sum_{j=1}^{N-1}ar{lpha}_jlpha_j+\sum_{j=0}^{N-1}\left(ar{lpha}_{j+1}lpha_j-\Delta au H(ar{lpha}_{j+1},lpha_j)
ight)}$

 $=\int\prod_{k=0}^{N-1}rac{dar{lpha}_kdlpha_k}{2\pi i}e^{\sum_{j=0}^{N-1}\left(-ar{lpha}_jlpha_j+ar{lpha}_{j+1}lpha_j-\Delta au H(ar{lpha}_{j+1},lpha_j)
ight)}$ $=\int\prod_{k=0}^{N-1}rac{dar{lpha}_kdlpha_k}{2\pi i}e^{\sum_{j=0}^{N-1}\left(rac{ar{lpha}_{j+1}-ar{lpha}_j}{\Delta au}lpha_j-H(ar{lpha}_{j+1},lpha_j)
ight)\!\Delta au}$

最终得到配分函数为

其中定义了作用量

 $Z=\intrac{dar{lpha}dlpha}{2\pi i}e^{-ar{lpha}lpha}\langlear{lpha}|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle$

的连续函数,该函数需要满足这样的条件: $\alpha(0) = \alpha(\beta)$ 这个条件起源于 $\alpha_0 = \alpha_N$. 因此,配分函数里面中的作用量 $S=\int_0^\beta d au\Big(rac{\partial ar{lpha}}{\partial au}lpha-H(ar{lpha},lpha)\Big)$ 也可以等价地写作Piers Coleman

的推导必然会有一些自相矛盾的地方。不过路径积分的方法一般都是用来推导传播子,而不是计 算配分函数的具体数值。Piers Coleman 的多体物理书里面也有关于配分函数的推导,感觉不怎 么严谨,我自己推导一次,仍然觉得不严谨。我试图从有限维的结果推广到无穷维,但是跟无穷 维的结果对不上。这里的推导只是为了备份。

这里需要用到一些不严谨的泛函积分。到目前为止,泛函积分的理论体系仍然不完备,所以这里

 $Z = \int \mathcal{D}[ar{lpha},lpha] e^{\int_0^eta d au \left(rac{\partial ar{lpha}}{\partial au}lpha - \omega ar{lpha}lpha
ight)}$

因为 $\alpha_0 = \alpha_N$, 对虚时间做周期延拓, 得到 $lpha_i=lpha_{i+N}, i=0,1,\ldots,N-1 \quad lpha_i=lpha_{i+N}, i=0,1,\ldots,N-1$

 $\mathcal{D}[ilde{lpha}^*, ilde{lpha}]=\mathcal{D}[ar{lpha},lpha]$

 $ar{lpha}_{k+1}lpha_k=rac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{n=0}^{N-1} ilde{lpha}_n^* ilde{lpha}_me^{\sqrt{-1}(n-m)rac{2k\pi}{N}}e^{\sqrt{-1}rac{2n\pi}{N}}$

 $S = rac{eta}{N} \sum_{n=0}^{N-1} ilde{lpha}_n^* ilde{lpha}_n \Big(rac{e^{irac{2n\pi}{N}} - 1}{rac{eta}{N}} - \omega e^{irac{2n\pi}{N}} \Big)$

 $lpha(au) = rac{1}{\sqrt{eta}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} lpha_n e^{irac{2n\pi}{eta} au}$

 $=\prod_{n=-\infty}^{\infty}rac{1}{i
u_n+\omega}$

文章被以下专栏收录 量子力学与路径积分

写下你的评论...

1 大宅学家 这里用相干态表象有什么优势吗? **炒** 拉普拉斯算符 (作者) 回复 大宅学家 可以用路径积分 **ゅ** 赞 ★ 推荐 **□** 删除

2019-03-20

Triborg 2018-12-31 有个小问题:请问如果不用周期性边条件 $a_0 = a_1 N$,即考虑一个开的链,会有什么结果 呢? **炒** 拉普拉斯算符 (作者) 回复 Triborg 2018-12-31 不能这么做吧,因为配分函数是在求trace,也就是要求积分时最左边的态一定等于最

无影飞狐 大二的想看懂,,有点难,不过我大三之前一定要学完朗道十卷 **持** 🌌 沉迷cs的材化go 回复 无影飞狐

多体理论的路径积分表述 Ⅱ: 玻色子体系的配分函数

 $=\int \prod_{k=1}^{N-1} rac{dar{lpha}_k dlpha_k}{2\pi i} e^{-ar{lpha}_k lpha_k} \langle ar{lpha}| e^{-\Delta au\hat{H}} |lpha_{N-1}
angle \langle ar{lpha}_{N-1}| e^{-\Delta au\hat{H}} |lpha_{N-2}
angle imes \ldots \langle ar{lpha}_1| e^{-\Delta au\hat{H}} |lpha
angle$ 记 $\alpha = \alpha_0, \bar{\alpha} = \bar{\alpha}_N$,这个条件意味着 $\alpha_0 = \alpha_N$. 上面的式子可以重新写作

 $S = \int_0^eta d au \Big(rac{\partial ar{lpha}}{\partial au} lpha - H(ar{lpha}, lpha)\Big).$ 在推导配分函数的过程中,当 $N \to \infty$ 时,离散的 $\alpha_j, j=0,1,\ldots,N$ 成为了一个关于虚时间 au

假设有一个简单的玻色子体系($\hbar = 1$): $\hat{H} = \omega \hat{a}^{\dagger} \hat{a}$ 我这里要计算这个体系的配分函数。这个是一个简单的玻色子体系,我们知道这个体系的本征态

 $Z={
m Tr}e^{-eta\hat{H}}=\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|e^{-eta\hat{H}}|n
angle=rac{1}{1-e^{-eta\omega}}.$

我们不知道如何做泛函积分,因为我们不知道如何做无穷维空间的微积分,所以我们首先依然假 设虚时间是离散的。根据定义,在离散的虚时间 τ 空间中, $\mathcal{D}[ar{lpha},lpha]=\prod_{k=0}^{N-1}rac{dar{lpha}_kdlpha_k}{2\pi i}$

 $ilde{lpha}_n = rac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} lpha_j e^{\sqrt{-1} rac{2n\pi}{eta} j \Delta au}$ 很显然, $\tilde{\alpha}_{n+N} = \tilde{\alpha}_n$. 所以可以要求 $n=0,1,2,\ldots,N-1$. 它的逆变换为

频空间的参数值)

 $lpha_j = rac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} ilde{lpha}_n e^{-\sqrt{-1}rac{2n\pi}{eta}j\Delta au}$

 $S = \sum_{k=0}^{N-1} \Big(rac{ar{lpha}_{k+1} - ar{lpha}_k}{\Delta au} lpha_k - \omega ar{lpha}_{k+1} lpha_k \Big) \Delta au$ 其中

接下来要算作用量在频率空间的表达式。离散时间下,无相互作用的玻色子作用量为

 $\sum_{k=0}^{N-1}(arlpha_{k+1}-arlpha_k)lpha_k=\sum_{n=0}^{N-1} ildelpha_n^* ildelpha_n(e^{\sqrt{-1}rac{2n\pi}{N}}-1)$

分别求和得到

于是配分函数为

Piers Coleman说这是一个幺正变换(看着像,我没有验证), 所以就有 $\mathcal{D}[ar{lpha},lpha]=\prod_{n=-\infty}^{\infty}rac{dar{lpha}_{n}\wedge dlpha_{n}}{2\pi i}$

物理学 量子物理

开启赞赏

赞赏开启后,读者将可以付费支持你的创作。

11 条评论

用狄拉克符号或可直接得到布

洛赫定理

東雲正樹

2018-11-25 沙发,话说我高中物理还没学完怎么给我推送这个[流泪]逼乎这推荐机制有毒啊 2019-03-20 2019-03-20

 $i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$

虚时间演化法 (imaginary-time

propagation method) 计算...

qinghuake

2018-12-01 2018-12-30 2018-11-26

配分函数与基矢量的选取无关。已知玻色子的相干态可以构成一个完备基,也就是 $\int rac{dar{lpha}dlpha}{2\pi i} e^{-ar{lpha}lpha} |lpha
angle \langlear{lpha}|=\mathbb{I}$ 这里 α 是一个复数, $\bar{\alpha}$ 为它的共轭。用相干态作为基矢量,配分函数重新写作:

 $=\sum_{m{lpha}}\langle n|e^{-eta\hat{H}}|\Big(\intrac{dar{lpha}dlpha}{2\pi i}e^{-ar{lpha}lpha}|lpha
angle\langlear{lpha}|\Big)|n
angle$ $=\intrac{dar{lpha}dlpha}{2\pi i}e^{-ar{lpha}lpha}\sum_{n}\langlear{lpha}|n
angle\langle n|e^{-eta\hat{H}}|lpha
angle$

态只是湮灭算符的本征态,而不是哈密尔顿量的本征态,所以这个矩阵元计算起来并不容易。 例如对于无相互作用的玻色子体系, $\hat{H}=\omega\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$,将指数展开得到

 $\langle ar{lpha} | e^{-eta \omega \hat{a}^\dagger \hat{a}} | lpha
angle = \sum_{n=0}^{\infty} rac{(-eta \omega)^n}{n!} \langle ar{lpha} | (\hat{a}^\dagger \hat{a})^n | lpha
angle$

展开项中,对于 n=0,1 ,很容易得到

 $\langle ar{lpha} | (\hat{a}^\dagger \hat{a})^0 | lpha
angle = \langle ar{lpha} | lpha
angle$ $\langle ar{lpha} | (\hat{a}^\dagger \hat{a})^1 | lpha
angle = ar{lpha} lpha \langle ar{lpha} | lpha
angle$

对于更高阶的展开项,将会很难计算。为此,可以想办法将展开系数截断在 n=1 处。为此, 我们需要令展开系数为一个无穷小量。为了得到无穷小量,我们可以令 $\beta = N\Delta \tau$,于是矩阵元

可以写作 $\langle ar{lpha} | e^{-eta \hat{H}} | lpha
angle = \langle ar{lpha} | e^{-\Delta au \hat{H}} e^{-\Delta au \hat{H}} imes \ldots e^{-\Delta au \hat{H}} | lpha
angle$

插入 N-1 个单位算符,得到 $\hat{m g} = \langle ar{lpha} | e^{-\Delta au \hat{H}} \int rac{dar{lpha}_{N-1} dlpha_{N-1}}{2\pi i} e^{-ar{lpha}_{N-1} lpha_{N-1}} |lpha_{N-1}
angle \langle ar{lpha}_{N-1} | e^{-\Delta au \hat{H}} imes \ldots \int rac{dar{lpha}_1 dlpha_1}{2\pi i} e^{-ar{lpha}_1 lpha_1} |lpha_1
angle \langle ar{lpha}_1 | e^{-\Delta au \hat{H}} |lpha
angle \langle ar{lpha}_{N-1} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au \hat{H}} |lpha
angle \langle ar{lpha}_{N-1} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au \hat{H}} | e^{-\Delta au} | e^{-\Delta$

 $=\int\prod_{i=1}^{N-1}rac{dar{lpha}_kdlpha_k}{2\pi i}e^{-ar{lpha}_klpha_k}\prod_{i=0}^{N-1}\langlear{lpha}_{j+1}|e^{-\Delta au\hat{H}}|lpha_j
angle$

 $= \Big(1 - \Delta au H(ar{lpha}_{j+1}, lpha_j)\Big) \langle ar{lpha}_{j+1} | lpha_j
angle$ $pprox e^{-\Delta au H(\bar{lpha}_{j+1},lpha_j)} e^{\bar{lpha}_{j+1}lpha_j}$ 这里的 \hat{H} 必须满足一个条件, 就是湮灭算符一定要在产生算符的右边。如果不是,那么可以通 过对易关系将湮灭算符置换到产生算符的右边。这样的哈密尔顿量称作是well-ordered.

 $=\int \mathcal{D}[ar{lpha},lpha]e^{\int_0^eta d au\left(rac{\partial ar{lpha}}{\partial au}lpha-H(ar{lpha},lpha)
ight)}$ $=\int \mathcal{D}[ar{lpha},lpha]e^S$

书中的形式: $S=\int_{0}^{eta}\Big(-ar{lpha}rac{\partiallpha}{\partial au}-H(ar{lpha},lpha)\Big)d au$ 示例

接下来要用路径积分的方法计算该体系的配分函数。 根据前面的公式, 我们得到

为 $|n\rangle$,对应的本征值为 $\hat{H}|n\rangle = n|n\rangle$. 所以配分函数为

做离散傅里叶变换得到(为了避免混淆,用 $\sqrt{-1}$ 表示虚数单位, $\alpha, \tilde{\alpha}$ 分别表示虚时间空间和虚

这是幺正变换,所以雅克比矩阵的行列式为1. 所以就有

 $(ar{lpha}_{k+1} - ar{lpha}_k)lpha_k = rac{1}{N} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} ilde{lpha}_n^* ilde{lpha}_m e^{\sqrt{-1}(n-m)rac{2k\pi}{N}} \left(e^{\sqrt{-1}rac{2n\pi}{N}} - 1
ight)$

 $\sum_{k=0}^{N-1}ar{lpha}_{k+1}lpha_k=\sum_{n=0}^{N-1} ilde{lpha}_n^* ilde{lpha}_ne^{\sqrt{-1}rac{2n\pi}{N}}$ 作用量为(重新用 i 表示虚数单位)

 $Z = \prod_{n=0}^{N-1} \int rac{d ilde{lpha}_n^* d ilde{lpha}_n}{2\pi i} e^{rac{eta}{N} ilde{lpha}_n^* ilde{lpha}_n \left(rac{e^{i2n\pi/N}-1}{eta/N} - \omega e^{i2n\pi/N}
ight)}$ $=\prod_{n=0}^{N-1}rac{1}{rac{eta}{N}\Big(\omega e^{i2n\pi/N}-rac{e^{i2n\pi/N}-1}{eta/N}\Big)}$ 或者如Piers Coleman所做的,直接令

经过傅里叶变换,配分函数为($\nu_n=2n\pi/eta$) $Z=\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}rac{dar{lpha}_{n}\wedge dlpha_{n}}{2\pi i}e^{-\sum_{n=-\infty}^{\infty}(i
u_{n}+\omega)ar{lpha}_{n}lpha_{n}}$ 编辑于 2019-03-14

推荐阅读 $V_i \vec{\alpha}_i = \langle \vec{r} |$

狄拉克方程中的流密度

就来四矢量 j^\mu = (\rho,

gmachine1729

协变性请参考 [2]。四维形...

我们将构建在狄拉克方程中为粒子

密度 \rho 和粒子流密度 \mathbf{j}

的量。在相对论理论,这些量形成

\mathbf{j}), 其详解包括其洛伦兹

多体配分函数很难算。我熟悉的模拟一般通过路径积分弄一个等效哈密顿出来,然后做蒙卡 或者MD。玻色子路径积分推荐P. N. Roy的工作。 1 1 [已重置]

Triborg

大宅学家 回复 拉普拉斯算符(作者) 我是说这里用相干态表象做路径积分有什么优势吗? **炒** 赞

展开其他 1条回复

右边的态。

┢ 赞

祝你顺利[飙泪笑] **1** 3 liming 打扰了

ゆ 赞 ★ 推荐 🗇 删除

▲ 赞同 45 **●** 11 条评论 **▼** 分享 **●** 喜欢 ★ 收藏 **♦** 设置

量子力学(2):基本假设

上一节我们整理了形式理论,为本

节打下基础 本节我们将根据量子力

学的几个基本假设建立整个量子力

学体系框架 下面是几个量子力学基

本假设(不完整版本,一些表述在

发表于量子力学

之后会进一步完善): 1、...

众眇之门

➡ 切换为时间排序

2018-12-29