多体理论的路径积分表述 IV：一个简化的电声相互作用模型

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

苗舰舰、Triborg、BenderRodriguez、Aeroergy、yang元祐等 46 人赞同了该文章

前面的几篇文章中，我已经总结了玻色子和费米子的相干态的性质，并且用它们的相干态得到玻色子体系和费米子体系的路径积分表述。这里，我要用路径积分方法研究电子-声子的相互作用。路径积分方法的优势在于，它可以将声子积掉然后得到一个只有电子-电子相互作用的系统。当然，由于声子频率是有限的，所以这时得到的电子-电子相互作用是一个延迟势，正如在电动力学里面，如果我们把光子积掉，也会得到一个有延迟的电子-电子相互作用。

为了简单起见，这里，我们首先考虑一个简单的电声相互作用系统：

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

它所对应的配分函数为

$$Z=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=\sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|n\rangle$$

已知玻色子的恒等算符为

$$\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}|\bar{\alpha}\rangle\langle\alpha|=\mathbb{I}$$

费米子的恒等算符为

$$\int d\bar{c}dc|c\rangle\langle c|e^{-\bar{c}c}=\mathbb{I}$$

为了将声子积掉，我首先将玻色子和费米子的恒等算符插入配分函数中，得到

$$\begin{aligned}Z&=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}\\&=\sum_{n_b,n_f}\langle n_b,n_f|e^{-\beta\hat{H}}\Big(\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}|\alpha\rangle\langle\bar{\alpha}|\int d\bar{c}dc|c\rangle\langle\bar{c}|e^{-\bar{c}c}\Big)|n_b,n_f\rangle\\&=\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}d\bar{c}dce^{-\bar{c}c}\langle\bar{\alpha},-\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha,c\rangle\end{aligned}$$

其中需要计算矩阵元 $\langle\bar{\alpha},-\bar{c}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha,c\rangle$. 为此，我需要将虚时间段 $[0,\beta]$ 分割为 N 段，也就是令 $\beta=N\Delta\tau$. 仿照前面推导玻色子和费米子的路径积分的方法，也就是插入 $N-1$ 个单位算符，将 $\Delta\tau\hat{H}$ 作为一个小量展开，经过一系列繁琐的推导，最终得到

$$\begin{aligned}Z&=\int\prod_{k=0}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}\prod_{k=0}^{N-1}d\bar{c}_kdc_ke^{\Delta\tau\sum_{k=0}^{N-1}\left(\frac{\bar{c}_{k+1}-c_k}{\Delta\tau}c_k+\frac{\bar{\alpha}_{k+1}-\bar{\alpha}_k}{\Delta\tau}\alpha_k-H(\bar{\alpha}_{k+1},\alpha_k;\bar{c}_{k+1},c_k)\right)}\\&=\int\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{\int_0^\beta d\tau\left(\frac{\partial\bar{c}}{\partial\tau}c+\frac{\partial\bar{\alpha}}{\partial\tau}\alpha-H(\bar{\alpha},\alpha;\bar{c},c)\right)}\end{aligned}$$

根据 α,c 的边界条件，我们要求 $\alpha(\tau)=\alpha(\tau+\beta),c(\tau)=-c(\tau+\beta),0\le\tau\le\beta$.

在推导配分函数的路径积分表达式时，我们要求哈密尔顿量必须是well-ordered，也就是湮灭算符必须在产生算符的右边。如果不是，那么我们总是可以通过算符之间的对易关系将其调整为需要的顺序。

对于前面的电声相互作用系统，它的配分函数为

$$Z=\int\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]\mathcal{D}[\bar{c},c]e^{\int_0^\beta d\tau\left(\frac{\partial\bar{\alpha}}{\partial\tau}\alpha+\frac{\partial\bar{c}}{\partial\tau}c-\epsilon\bar{c}c-\omega\bar{a}a-g(\bar{\alpha}+\alpha)\bar{c}c\right)}$$

通过对 τ 做分部积分，配分函数还可以写作另外一个等价形式：

$$Z=\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]e^{-\int_0^\beta\left(\bar{c}(\partial_\tau+\epsilon)c+\bar{\alpha}(\partial_\tau+\omega)\alpha+g\bar{c}c(\bar{\alpha}+\alpha)\right)d\tau}$$

上面的积分中， $\alpha,\bar{\alpha}$ 在指数里面的最高次为二次，所以这是一个高斯积分，因此我们可以将 $\alpha,\bar{\alpha}$ 积掉得到一个只包含电子相互作用的有效作用量。这是一个无穷维空间中的泛函积分。为了做这个积分，我们需要将 α,c 从 τ 空间转变到虚频空间：

$$\begin{aligned}\alpha(\tau)&=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_{i\nu_n}\alpha_ne^{i\nu_n\tau},\nu_n=\frac{2n\pi}{\beta}\\c(\tau)&=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_{i\omega_n}c_ne^{i\omega_n\tau},\omega_n=\frac{(2n+1)\pi}{\beta}\end{aligned}$$

下面逐个计算作用量在虚频空间中的表述。作用量一共有三项，第一项为费米子部分：

$$\begin{aligned}&\int_0^\beta d\tau\bar{c}(\partial_\tau+\epsilon)c\\=&\int_0^\beta d\tau\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_m\bar{c}_me^{-i\omega_m\tau}(\partial_\tau+\epsilon)\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_nc_ne^{i\omega_n\tau}\\=&\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\tau\sum_{m,n}\bar{c}_mc_n(i\omega_n+\epsilon)e^{i(\omega_n-\omega_m)\tau}\\=&\sum_{m,n}\bar{c}_mc_n(i\omega_n+\epsilon)\delta_{m,n}\\=&\sum_n\bar{c}_nc_n(i\omega_n+\epsilon)\end{aligned}$$

第二项为玻色子部分：

$$\begin{aligned}&\int_0^\beta d\tau\bar{\alpha}(\partial_\tau+\omega)\alpha\\=&\sum_n\bar{\alpha}_n\alpha_n(i\nu_n+\omega)\end{aligned}$$

第三项为相互作用部分：

$$\begin{aligned}&\int_0^\beta d\tau g\bar{c}c(\bar{\alpha}+\alpha)\\=&\frac{g}{\sqrt{\beta}}\sum_{m,n,k}\bar{c}_mc_n\Big(\bar{\alpha}_k\delta_{n,m+k}+\alpha_k\delta_{n,m-k}\Big)\\=&\frac{g}{\sqrt{\beta}}\sum_{m,k}\bar{c}_mc_{m+k}\bar{\alpha}_k+\bar{c}_mc_{m-k}\alpha_k\end{aligned}$$

定义 $J_k=\sum_m\bar{c}_mc_{m+k}$ ，所以相互作用项可以写作

$$\int_0^\beta d\tau g\bar{c}c(\bar{\alpha}+\alpha)=\frac{g}{\sqrt{\beta}}\sum_k\Big(J_k\bar{\alpha}_k+J_{-k}\alpha_k\Big)$$

因为 $\bar{J}_k=\sum_m\bar{c}_{m+k}c_m=\sum_m\bar{c}_mc_{m-k}=J_{-k}$ ，所以相互作用项又可以写作

$$\int_0^\beta d\tau g\bar{c}c(\bar{\alpha}+\alpha)=\frac{g}{\sqrt{\beta}}\sum_k\Big(J_k\bar{\alpha}_k+\bar{J}_k\alpha_k\Big)$$

在频率表象下，配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}d\bar{c}_ndc_n\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{d\bar{\alpha}_nd\alpha_n}{2\pi i}e^{-S},\\S&=\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n+\sum_n\bar{\alpha}_n(i\nu_n+\omega)\alpha_n+\frac{g}{\sqrt{\beta}}\sum_k\Big(J_k\bar{\alpha}_k+\bar{J}_k\alpha_k\Big)\end{aligned}$$

为了将声子积掉，我们首先定义这样的一个平移操作(注意， 在这个定义下， $\bar{\alpha}_n$ 不是 α_n 的共轭)：

$$\begin{aligned}\alpha_n&\to\alpha_n-(i\nu_n+\omega)^{-1}\frac{gJ_n}{\sqrt{\beta}}\\\bar{\alpha}_n&\to\bar{\alpha}_n-(i\nu_n+\omega)^{-1}\frac{g\bar{J}_n}{\sqrt{\beta}}\end{aligned}$$

于是作用量变为

$$S=\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n+\sum_n\bar{\alpha}_n(i\nu_n+\omega)\alpha_n-\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n$$

平移操作的雅克比行列式为1，所以我们不需要修改积分度量。将新的作用量形式代入到配分函数中得到

$$\begin{aligned}Z&=\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}d\bar{c}_ndc_ne^{-\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n}\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{d\bar{\alpha}_nd\alpha_n}{2\pi i}e^{-\sum_n\bar{\alpha}_n(i\nu_n+\omega)\alpha_n+\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n}\\&=\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}d\bar{c}_ndc_ne^{-\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n}e^{\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n}\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{i\nu_n+\omega}\\&=\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}}\int\prod_nd\bar{c}_ndc_ne^{-\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n+\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n}\\&:=Z_0Z_{eff}\end{aligned}$$

到此为止，我们已经将声子积掉，积分结果是原来的电子-声子相互作用系统的配分函数被分解为两个乘积的形式，该乘积的第一部分是无相互作用声子的配分函数 $Z_0=\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}}$ ，第二部分是只包含了电子有效相互作用的配分函数。因为这个乘积的第一部分只依赖于声子，第二部分只依赖于电子，所以通过将声子积掉，我们可以将电-声相互作用等价地转变为有延迟的电子-电子相互作用。为了理解电子-电子相互作用有延迟这一特性，我们需要将 Z_{eff} 中用虚频表示的作用量变回到虚时间表象中。根据前面的结果，我们有

$$\begin{aligned}Z_{eff}&=\int\prod_nd\bar{c}_ndc_ne^{-\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n+\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n}\\&:=\int\prod_nd\bar{c}_ndc_ne^{-S_{eff}}\end{aligned}$$

其中用虚频表示的有效作用量为

$$S_{eff}=\sum_n\bar{c}_n(i\omega_n+\epsilon)c_n-\frac{g^2}{\beta}\sum_n\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n$$

我们可以将有效作用量中第二项的求和重新写作

$$\begin{aligned}&\sum_{n=-\infty}^{\infty}\bar{J}_n(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n\\=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_{-n}(i\nu_n+\omega)^{-1}J_n\\=&\sum_{n=-\infty}^{\infty}J_n(-i\nu_n+\omega)^{-1}J_{-n}\\=&\frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\bar{J}_n\Big(\frac{1}{i\nu+\omega}+\frac{1}{-i\nu+\omega}\Big)J_n\\=&\frac{1}{2}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\bar{J}_n\frac{2\omega}{\omega^2+\nu_n^2}J_n\end{aligned}$$

其中定义了虚频空间中的声子传播子： $D_0(i\nu_n,\omega)=\frac{2\omega}{\omega^2+\nu_n^2}$. 根据定义：

$$\begin{aligned}J_n&=\sum_m\bar{c}_mc_{m+n}\\&=\sum_m\frac{1}{\beta}\int_0^\beta\bar{c}(\tau')e^{i\omega_m\tau'}d\tau'\int_0^\beta c(\tau)e^{-i\omega_{m+n}\tau}d\tau\\&=\int_0^\beta\bar{c}(\tau')d\tau'\int_0^\beta c(\tau)d\tau\frac{1}{\beta}\sum_me^{i\omega_m\tau'}e^{-i\omega_{m+n}\tau}\\&=\int_0^\beta\bar{c}(\tau')d\tau'\int_0^\beta c(\tau)d\tau\frac{1}{\beta}\sum_me^{i\omega_m(\tau'-\tau)}e^{-i\nu_n\tau}\\&=\int_0^\beta\bar{c}(\tau')d\tau'\int_0^\beta c(\tau)d\tau e^{-i\nu_n\tau}\delta(\tau-\tau')\\&=\int_0^\beta\bar{c}(\tau)c(\tau)e^{-i\nu_n\tau}d\tau\end{aligned}$$

其中用到了关系 $\delta(\tau-\tau')=\frac{1}{\beta}\sum_ne^{i\omega_n(\tau-\tau')}$, where $\tau,\tau'\in(0,\beta)$.

很容易验证：

$$\begin{aligned}D_0(i\nu_n,\omega)&:=\frac{2\omega}{\omega^2+\nu_n^2}\\&=\int_0^\beta\Big(\frac{e^{\omega\tau}}{e^{\beta\omega}-1}+\frac{e^{-\omega\tau}}{1-e^{-\beta\omega}}\Big)e^{-i\nu_n\tau}d\tau\\&:=\int_0^\beta D_0(\tau,\omega)e^{-i\nu_n\tau}d\tau\end{aligned}$$

所以就有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\beta}\sum_n\bar{J}_nD_0(i\nu_n,\omega)J_n\\=&\frac{1}{\beta}\sum_n\int_0^\beta d\tau\bar{c}(\tau)c(\tau)e^{i\nu_n\tau}\int_0^\beta d\tau'D_0(\tau',\omega)e^{-i\nu_n\tau'}\int_0^\beta d\tau''\bar{c}(\tau'')c(\tau'')e^{-i\nu_n\tau''}\\=&\iiint d\tau d\tau'd\tau''\bar{c}(\tau)c(\tau)D_0(\tau',\omega)\bar{c}(\tau'')c(\tau'')\frac{1}{\beta}\sum_ne^{i\nu_n(\tau-\tau'-\tau'')}\\=&\iiint d\tau d\tau'd\tau''\bar{c}(\tau)c(\tau)D_0(\tau',\omega)\bar{c}(\tau'')c(\tau'')\delta(\tau-\tau'-\tau'')\\=&\iint d\tau d\tau'\bar{c}(\tau)c(\tau)D_0(\tau-\tau',\omega)\bar{c}(\tau')c(\tau')\end{aligned}$$

其中用到了恒等式 $\delta(\tau-\tau')=\frac{1}{\beta}\sum_ne^{i\nu_n(\tau-\tau')},\tau,\tau'\in(0,\beta)$. 因此，在虚时间表象下， 有效作用量可以写作

$$S_{eff}=\int_0^\beta d\tau\bar{c}(\tau)(\partial_\tau+\epsilon)c(\tau)-\frac{g^2}{2}\iint d\tau d\tau'\bar{c}(\tau)c(\tau)D_0(\tau-\tau',\omega)\bar{c}(\tau')c(\tau')$$

这个作用量描述的是一个有时间延迟的电子-电子相互作用，而且这时电子-电子的相互作用是吸引的。延迟势用虚时间表象下的声子传播子 $D_0(\tau-\tau',\omega)$ 来表示。虚时间表象下，声子传播子为

$$D_0(\tau,\omega)=\frac{e^{\omega\tau}}{e^{\beta\omega}-1}+\frac{e^{-\omega\tau}}{1-e^{-\beta\omega}}=\frac{1}{\beta}\sum_n\frac{2\omega}{\omega^2+\nu_n^2}e^{i\nu_n\tau}$$

延迟势在低频声子极限下是无穷延迟的，也就是延迟势不依赖于虚时间参数：

$$\lim_{\beta\omega\to0}\beta\omega D_0(\tau,\omega)=2$$

延迟势在高频声子极限下是瞬时的，也就是这时延迟势的时间延迟为零：

$$\lim_{\beta\omega\to\infty}\beta\omega D_0(\tau,\omega)=2\beta\delta(\tau)$$

总结：在这个简化电声相互作用模型下，系统的配分函数可以被分解为两个相互独立的配分函数的乘积形式。第一个配分函数为无相互作用的声子的配分函数，第二个配分函数 为有延迟的电子-电子相互作用系统的配分函数。因此，我们可以说，把声子积掉，我们就得到了一个只包含电子的有效作用势。当声子频率为有限值时，该势函数在虚时间表象下是时间延迟的。此时，电子之间的相互作用是吸引的。这个相互吸引的电子-电子相互作用有可能会导致Cooper电子对的形成，并且进一步导致超导现象的出现。

编辑于 2019-03-18

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 凝聚态物理

文章被以下专栏收录
量子力学与路径积分

推荐阅读
自旋液体 in a nutshell（二）
潇湘
[Gelis 2019] 10.4 例子：弱衰变的QCD修正
10.4.1 Fermi理论为具体解释算符乘积展开的应用方法，我们考虑夸克和轻子间的弱相互作用（另一个不那么直接的应用见习题10.5）。在标准模型中，带电流间的相互作用形如 \mathcal{L}_{l}=\fr...
物理学徒妖... 发表于Only ...
量子自旋霍尔效应
Zion ... 发表于飞贼克斯
二维反铁磁Dirac费米子
Yaust 发表于计算材料学

3 条评论 切换为时间排序
写下你的评论...
苗舰舰 2019-03-18
请问有参考文献吗
1
拉普拉斯算符 (作者) 回复 苗舰舰 2019-03-18
参考了Pierls Coleman 的 Many body physics.
3 推荐 删除
阿岛 2019-06-19
辛苦码字了，收获很多
赞

赞同 46 3 条评论 分享 喜欢 收藏 设置