多体理论的路径积分表述 II: 玻色子体系的配分函数

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

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玻色子的配分函数。配分函数的定义为

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

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

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

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

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

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：

$$\begin{aligned}Z&=\sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|n\rangle\\&=\sum_n\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|\Big(\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}|\alpha\rangle\langle\bar{\alpha}|\Big)|n\rangle\\&=\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}\sum_n\langle\bar{\alpha}|n\rangle\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle\\&=\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle\end{aligned}$$

如果我们知道了矩阵元 $\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle$ 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

$$\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}}|\alpha\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta\omega)^n}{n!}\langle\bar{\alpha}|(\hat{a}^\dagger\hat{a})^n|\alpha\rangle$$

展开项中，对于 $n=0,1$ ，很容易得到

$$\langle\bar{\alpha}|(\hat{a}^\dagger\hat{a})^0|\alpha\rangle=\langle\bar{\alpha}|\alpha\rangle$$

$$\langle\bar{\alpha}|(\hat{a}^\dagger\hat{a})^1|\alpha\rangle=\bar{\alpha}\alpha\langle\bar{\alpha}|\alpha\rangle$$

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

$$\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle=\langle\bar{\alpha}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}e^{-\Delta\tau\hat{H}}\times\ldots e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha\rangle$$

插入 $N-1$ 个单位算符，得到

$$\begin{aligned}\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle&=\langle\bar{\alpha}|\prod_{k=1}^{N}e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha\rangle\\&=\langle\bar{\alpha}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}\int\frac{d\bar{\alpha}_{N-1}d\alpha_{N-1}}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}_{N-1}\alpha_{N-1}}|\alpha_{N-1}\rangle\langle\bar{\alpha}_{N-1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}\times\ldots\int\frac{d\bar{\alpha}_1d\alpha_1}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}_1\alpha_1}|\alpha_1\rangle\langle\bar{\alpha}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha\rangle\\&=\int\prod_{k=1}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}_k\alpha_k}\langle\bar{\alpha}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_{N-1}\rangle\langle\bar{\alpha}_{N-1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_{N-2}\rangle\times\ldots\langle\bar{\alpha}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha\rangle\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle&=\int\prod_{k=1}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}_k\alpha_k}\langle\bar{\alpha}_N|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_{N-1}\rangle\langle\bar{\alpha}_{N-1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_{N-2}\rangle\times\ldots\langle\bar{\alpha}_1|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_0\rangle\\&=\int\prod_{k=1}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}_k\alpha_k}\prod_{j=0}^{N-1}\langle\bar{\alpha}_{j+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_j\rangle\end{aligned}$$

其中的矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle\bar{\alpha}_{j+1}|e^{-\Delta\tau\hat{H}}|\alpha_j\rangle&\approx\langle\bar{\alpha}_{j+1}|1-\Delta\tau\hat{H}|\alpha_j\rangle\\&=\Big(1-\Delta\tau H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)\Big)\langle\bar{\alpha}_{j+1}|\alpha_j\rangle\\&\approx e^{-\Delta\tau H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)}e^{\bar{\alpha}_{j+1}\alpha_j}\\&=e^{\bar{\alpha}_{j+1}\alpha_j-\Delta\tau H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)}\end{aligned}$$

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.

所以

$$\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle=\int\prod_{k=1}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{-\sum_{j=1}^{N-1}\bar{\alpha}_j\alpha_j+\sum_{j=0}^{N-1}\left(\bar{\alpha}_{j+1}\alpha_j-\Delta\tau H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)\right)}$$

最终得到配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\int\frac{d\bar{\alpha}d\alpha}{2\pi i}e^{-\bar{\alpha}\alpha}\langle\bar{\alpha}|e^{-\beta\hat{H}}|\alpha\rangle\\&=\int\prod_{k=0}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{\sum_{j=0}^{N-1}\left(-\bar{\alpha}_j\alpha_j+\bar{\alpha}_{j+1}\alpha_j-\Delta\tau H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)\right)}\\&=\int\prod_{k=0}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}e^{\sum_{j=0}^{N-1}\left(\frac{\bar{\alpha}_{j+1}-\bar{\alpha}_j}{\Delta\tau}\alpha_j-H(\bar{\alpha}_{j+1},\alpha_j)\right)\Delta\tau}\\&=\int\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]e^{\int_0^\beta d\tau\left(\frac{\partial\bar{\alpha}}{\partial\tau}\alpha-H(\bar{\alpha},\alpha)\right)}\\&=\int\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]e^{S}\end{aligned}$$

其中定义了作用量

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

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 τ 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 $S=\int_0^\beta d\tau\Big(\frac{\partial\bar{\alpha}}{\partial\tau}\alpha-H(\bar{\alpha},\alpha)\Big)$ 也可以等价地写作Piers Coleman书中的形式：

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

示例

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。

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

$$Z=\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}=\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|e^{-\beta\hat{H}}|n\rangle=\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}}$$

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

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

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，

$$\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]=\prod_{k=0}^{N-1}\frac{d\bar{\alpha}_kd\alpha_k}{2\pi i}$$

因为 $\alpha_0=\alpha_N$ ，对虚时间做周期延拓，得到

$$\alpha_i=\alpha_{i+N},i=0,1,..,N-1\quad\alpha_i=\alpha_{i+N},i=0,1,\ldots,N-1$$

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频空间的参数值)

$$\tilde{\alpha}_n=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=0}^{N-1}\alpha_je^{\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{\beta}j\Delta\tau}$$

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

$$\alpha_j=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_ne^{-\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{\beta}j\Delta\tau}$$

这是幺正变换，所以雅克比矩阵的行列式为1. 所以就有

$$\mathcal{D}[\tilde{\alpha}^*,\tilde{\alpha}]=\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]$$

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

$$S=\sum_{k=0}^{N-1}\Big(\frac{\bar{\alpha}_{k+1}-\bar{\alpha}_k}{\Delta\tau}\alpha_k-\omega\bar{\alpha}_{k+1}\alpha_k\Big)\Delta\tau$$

其中

$$(\bar{\alpha}_{k+1}-\bar{\alpha}_k)\alpha_k=\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_me^{\sqrt{-1}(n-m)\frac{2k\pi}{N}}(e^{\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{N}}-1)$$

$$\bar{\alpha}_{k+1}\alpha_k=\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_me^{\sqrt{-1}(n-m)\frac{2k\pi}{N}}e^{\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{N}}$$

分别求和得到

$$\sum_{k=0}^{N-1}(\bar{\alpha}_{k+1}-\bar{\alpha}_k)\alpha_k=\sum_{n=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_n(e^{\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{N}}-1)$$

$$\sum_{k=0}^{N-1}\bar{\alpha}_{k+1}\alpha_k=\sum_{n=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_ne^{\sqrt{-1}\frac{2n\pi}{N}}$$

作用量为(重新用 i 表示虚数单位)

$$S=\frac{\beta}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_n\Big(\frac{e^{i\frac{2n\pi}{N}}-1}{\frac{\beta}{N}}-\omega e^{i\frac{2n\pi}{N}}\Big)$$

于是配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\prod_{n=0}^{N-1}\int\frac{d\tilde{\alpha}_n^*d\tilde{\alpha}_n}{2\pi i}e^{\frac{\beta}{N}\tilde{\alpha}_n^*\tilde{\alpha}_n\left(\frac{e^{i2n\pi/N}-1}{\beta/N}-\omega e^{i2n\pi/N}\right)}\\&=\prod_{n=0}^{N-1}\frac{1}{\frac{\beta}{N}\left(\omega e^{i2n\pi/N}-\frac{e^{i2n\pi/N}-1}{\beta/N}\right)}\end{aligned}$$

或者如Piers Coleman所做的，直接令

$$\alpha(\tau)=\frac{1}{\sqrt{\beta}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\alpha_ne^{i\frac{2n\pi}{\beta}\tau}$$

Piers Coleman说这是一个幺正变换(看着像，我没有验证), 所以就有

$$\mathcal{D}[\bar{\alpha},\alpha]=\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{d\bar{\alpha}_n\wedge d\alpha_n}{2\pi i}$$

经过傅里叶变换，配分函数为($\nu_n=2n\pi/\beta$)

$$\begin{aligned}Z&=\int\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{d\bar{\alpha}_n\wedge d\alpha_n}{2\pi i}e^{-\sum_{n=-\infty}^{\infty}(i\nu_n+\omega)\bar{\alpha}_n\alpha_n}\\&=\prod_{n=-\infty}^{\infty}\frac{1}{i\nu_n+\omega}\end{aligned}$$

编辑于 2019-03-14

物理学 量子物理

文章被以下专栏收录

量子力学与路径积分

11 条评论 切换为时间排序

写下你的评论...

Triborg 2018-12-29
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

[已重置] 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
1

大宅学家 2019-03-20
这里用相干态表象有什么优势吗？
赞

拉普拉斯算符 (作者) 回复 大宅学家 2019-03-20
可以用路径积分
赞 推荐 删除

大宅学家 回复 拉普拉斯算符 (作者) 2019-03-20
我是说这里用相干态表象做路径积分有什么优势吗？
赞

展开其他 1 条回复

Triborg 2018-12-31
有个小问题：请问如果不用周期性边条件a_0 = a_N，即考虑一个开的链，会有什么结果呢？
赞

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右边的态。
赞 推荐 删除

无影飞狐 2018-12-01
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
赞

沉迷cs的材化go 回复 无影飞狐 2018-12-30
祝你顺利[飙泪笑]
3

liming 2018-11-26
打扰了
赞