多体理论的路径积分表述 VI: 路径积分方法计算有电声相互作用的周期性Anderson模型的总能量

拉普拉斯算符
数学话题下的优秀答主

这是系列文章的最后一篇。在前面的几篇文章里，我总结了一下玻色子和费米子相干态的性质(zhuanlan.zhihu.com/p/50..., zhuanlan.zhihu.com/p/55...)，并且用路径积分的方法推导了如何将电声相互作用模型中的声子积掉得到一个有延迟的电子-电子相互作用(zhuanlan.zhihu.com/p/58...)，还使用路径积分方法得到了简易电声相互作用模型中格林函数的运动方程。所有的这些都是为了说明，为了计算有时间延迟的模型的总能量，我们最好的选择就是用路径积分的方法。前面的一篇文章里(zhuanlan.zhihu.com/p/26...), 我将路径积分的方法用在了一个简单的电声相互作用模型上，得到了那个简单模型的总能量。在这里，我将要把同样的方法应用到真实的模型上。这里，我略掉了这个模型的物理背景，而是把重点放在理论推导上。更多的内容，包括该模型的物理背景以及参考文献可以在我的这篇文章里看到(仍然在持续更新中)：

https://arxiv.org/abs/1904.09881
arxiv.org

第一节：包含了电声相互作用的周期性Anderson模型

我们模型的Hamilton量为：

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_I \\
\hat{H}_0 &= -t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma}(c^{\dagger}_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + c^{\dagger}_{j,\sigma}c_{i,\sigma}) + \epsilon_f\sum_{i,\sigma} f^{\dagger}_{i,\sigma}f_{i,\sigma} \\
&\quad + V\sum_{i,\sigma}(c^{\dagger}_{i,\sigma}f_{i,\sigma} + f^{\dagger}_{i,\sigma}c_{i,\sigma}) + \sum_i \omega_0\hat{a}^{\dagger}_i\hat{a}_i \\
\hat{H}_I &= U\sum_i n^f_{i,\uparrow}n^f_{i,\downarrow} + g\sum_{i,\sigma}(\hat{a}^{\dagger}_i + \hat{a}_i)\hat{c}^{\dagger}_{i,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}
\end{aligned}
$$

熟悉凝聚态理论的对这些符号应该都不会陌生，我就不再详细叙述每一个符号的意义。这个模型的Hamilton量包含了两部分，一部分是无相互作用项，另一部分是包含了相互作用的项。Anderson模型包含了两类电子，一类是有晶格跳跃的 c 电子，另一类是没有晶格跳跃的 f 电子。这两类电子有一个杂化项，杂化强度用 V 表示。 f 电子之间有Hubbard相互作用，而 c 电子与晶格振动声子之间有相互作用，这就是我们要重点研究的电声相互作用项。通常的周期性Anderson模型里面没有电声相互作用项，因此研究起来更容易。我们的模型的难点就是这个电声相互作用。

为了方便，我们主要在动量空间研究这个模型。在动量空间中，该模型的Hamilton量为：

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_I \\
\hat{H}_0 &= \sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\begin{pmatrix}\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \hat{f}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \epsilon_f\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ \hat{f}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix} + \sum_{\boldsymbol{k}}\omega_0\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} \\
\hat{H}_I &= \sum_{\boldsymbol{kq}\sigma} g\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}\hat{\phi}_{\boldsymbol{q}} + U\sum_{\boldsymbol{kpq}}\hat{f}^{\dagger}_{\boldsymbol{p}\uparrow}\hat{f}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{f}^{\dagger}_{\boldsymbol{q}\downarrow}\hat{f}_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k},\downarrow} \\
\hat{\phi}_{\boldsymbol{q}} &= \hat{a}_{\boldsymbol{q}} + \hat{a}^{\dagger}_{-\boldsymbol{q}}
\end{aligned}
$$

为了用蒙特卡洛算法模拟这个模型，我们需要将声子积掉得到一个有时间延迟的电子-电子相互作用。如何将声子积掉是下一节的内容。

第二节：路径积分法处理电子-声子相互作用

在做蒙特卡洛模拟的时候，我们更倾向于将声子积掉，这样我们就可以得到一个只包含电子的模型，这种模型处理起来更方便，付出的代价是我们得到的是一个有时间延迟的电子-电子相互作用体系，而这个体系是没有哈密尔顿表述的。为了将声子积掉，我们需要使用路径积分的方法来重新表述我们的模型。使用路径积分的方法，模型的配分函数为

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

其中，作用量 S 为

$$
\begin{aligned}
S &= \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\begin{pmatrix}\bar{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \bar{f}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\partial_\tau + \epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \partial_\tau + \epsilon_f\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ f_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix} \\
&\quad + \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k}}\bar{a}_{\boldsymbol{k}}(\partial_\tau + \omega_0)a_{\boldsymbol{k}} + \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{kq}\sigma}g\bar{c}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}(a_{\boldsymbol{q}} + \bar{a}_{-\boldsymbol{q}}) \\
&\quad - U\int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{kpq}}\bar{f}_{\boldsymbol{p}\uparrow}\bar{f}_{\boldsymbol{q}\downarrow}f_{\boldsymbol{k}\uparrow}f_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k},\downarrow}
\end{aligned}
$$

作用量里面所有的 c,f 都是Grassmann number，遵循反对易法则，而所有的 a 都是普通的复数。路径积分方法的一个好处就是，我们不用再处理算符，而只需要处理数字就行了。作用量里面包含声子的部分为

$$
S_\phi = \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k}}\bar{a}_{\boldsymbol{k}}(\partial_\tau + \omega_0)a_{\boldsymbol{k}} + \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{kq}\sigma}g\bar{c}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}c_{\boldsymbol{k}\sigma}(a_{\boldsymbol{q}} + \bar{a}_{-\boldsymbol{q}})
$$

因为 S_ϕ 里面只含有 $a,\bar{a}$ 的一次项和二次项，所以对声子的积分就是一个高斯积分，我们知道高斯积分是可以得到精确解的，结果为

$$
\begin{aligned}
Z_{eff} &= \int\mathcal{D}[\bar{a},a]e^{-S_\phi} \\
&= Z_0\exp\left(-\sum_{\boldsymbol{q},m}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m}\frac{1}{i\nu_m - \omega_0}J_{\boldsymbol{q},m}\right)
\end{aligned}
$$

具体的计算细节前面的一篇文章 zhuanlan.zhihu.com/p/58... 里面已经有了，这里不再赘述。这里只对这个结果做一些说明。

上面的有效配分函数 Z_{eff} 中， Z_0 为无相互作用玻色子的配分函数，表达式为 $Z_0 = \prod_{\boldsymbol{q}}\frac{1}{1 - e^{-\beta\omega_0}}$，$J_{\boldsymbol{q},m}$ 为电流函数，表达式为

$$
\begin{aligned}
J_{\boldsymbol{q},m} &= \beta^{-1/2}g\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\sum_{i\omega_n}\bar{c}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma}(i\omega_n - i\nu_m)c_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n) \\
&= g\beta^{-1/2}\int_0^{\beta}d\tau e^{i\nu_m\tau}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\bar{c}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma}(\tau)c_{\boldsymbol{k},\sigma}(\tau)
\end{aligned}
$$

它的共轭为

$$
\bar{J}_{\boldsymbol{q},m} = g\beta^{-1/2}\int_0^{\beta}d\tau e^{-i\nu_m\tau}\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\bar{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}(\tau)c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}(\tau)
$$

这里，我们得到了一个有效作用量，为

$$
S^{\phi}_{eff} = \sum_{\boldsymbol{q},m}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m}\frac{1}{i\nu_m - \omega_0}J_{\boldsymbol{q},m}
$$

电流函数有一个重要的性质为 $J_{-\boldsymbol{q},-m} = \bar{J}_{\boldsymbol{q},m}$ ，因此有效作用量又可以重新写作

$$
\begin{aligned}
S^{\phi}_{eff} &= \sum_{\boldsymbol{q},m}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m}\frac{1}{i\nu_m - \omega_0}J_{\boldsymbol{q},m} \\
&= \sum_{-\boldsymbol{q},-m}\bar{J}_{-\boldsymbol{q},-m}\frac{1}{-i\nu_m - \omega_0}J_{-\boldsymbol{q},-m} \\
&= \sum_{\boldsymbol{q},m}J_{\boldsymbol{q},m}\frac{1}{-i\nu_m - \omega_0}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m} \\
&= \sum_{\boldsymbol{q},m}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m}\frac{1}{-i\nu_m - \omega_0}J_{\boldsymbol{q},m} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q},m}\bar{J}_{\boldsymbol{q},m}\frac{-2\omega_0}{\omega_0^2 - (i\nu_m)^2}J_{\boldsymbol{q},m}
\end{aligned}
$$

用虚时间表示，有效作用量为

$$
S^{\phi}_{eff} = \frac{1}{2}g^2\sum_{\boldsymbol{q}}\int_0^{\beta}d\tau_1\int_0^{\beta}d\tau_2\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\bar{c}_{\boldsymbol{k},\sigma}(\tau_1)c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\sum_{\boldsymbol{p},s}\bar{c}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},s}(\tau_2)c_{\boldsymbol{p},s}(\tau_2)
$$

这是一个有时间延迟的电子-电子相互用量，两个电子通过交换一个虚声子产生相互作用，声子交换函数为

$$
\begin{aligned}
D^0(\tau_1 - \tau_2) &= \frac{1}{\beta}\sum_{i\nu_m}\frac{2\omega_0}{(i\nu_m)^2 - \omega_0^2}e^{-i\nu_m(\tau_1-\tau_2)} \\
&= -\frac{1}{1 - e^{-\beta\omega_0}}(e^{-\omega_0|\tau_1-\tau_2|} + e^{-(\beta-|\tau_1-\tau_2|)\omega_0})
\end{aligned}
$$

加上原来的那部分作用量，我们最终得到系统的总的有效作用量为

$$
\begin{aligned}
S_{eff} &= \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\begin{pmatrix}\bar{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \bar{f}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\partial_\tau + \epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \partial_\tau + \epsilon_f\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ f_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix} \\
&\quad + \frac{1}{2}g^2\sum_{\boldsymbol{q}}\int_0^{\beta}d\tau_1\int_0^{\beta}d\tau_2\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\bar{c}_{\boldsymbol{k},\sigma}(\tau_1)c_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\sum_{\boldsymbol{p},s}\bar{c}_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q},s}(\tau_2)c_{\boldsymbol{p},s}(\tau_2) \\
&\quad - U\int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{kpq}}\bar{f}_{\boldsymbol{p}\uparrow}\bar{f}_{\boldsymbol{q}\downarrow}f_{\boldsymbol{k}\uparrow}f_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k},\downarrow}
\end{aligned}
$$

接下来，我要从这个作用量出发得到电子格林函数的运动方程，进一步得到系统的总能量。

第三节：Schwinger-Dyson方程法计算有电声相互作用的周期性Anderson模型的总能量

前面我们已经得到将声子积掉，得到了系统的有效作用量。这个方法的优势是，我们做蒙特卡洛模拟的时候不需要考虑模型中的声子，而只需要考虑模型中的电子，为此我们付出的代价是系统的哈密尔顿量没有了，有的只是一个有效作用量。该作用量只能用路径积分的方式给出。从这个有效作用量，我们不能得到一个明确的哈密尔顿表述。传统的计算系统总能量的方法强烈地依赖于系统的哈密尔顿量，然而，在这里，系统的哈密尔顿量是不存在的。因此，我们必须从系统的有效作用量出发来得到电子格林函数的运动方程，进而得到系统的总能量。量子场论中有一个方法，可以从系统的路径积分出发得到格林函数的运动方程。该方法最早由理论物理学家Schwinger提出，在量子场论中，该方法被称作是Schwinger-Dyson方程。

Julian Schwinger (1918 - 1994), 量子电动力学的奠基人之一，1965年诺贝尔物理学奖得主。图片来源：https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1965/schwinger/biographical/

为了得到格林函数的运动方程，考虑下面的场变量的变分：

$$
\begin{aligned}
c_{k,\sigma}(\tau) &\rightarrow c'_{k,\sigma}(\tau) = c_{k,\sigma}(\tau) + \delta c_{k,\sigma}(\tau) \\
\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) &\rightarrow \bar{c}'_{k,\sigma}(\tau) = \bar{c}_{k,\sigma}(\tau) + \delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) \\
f_{k,\sigma}(\tau) &\rightarrow f'_{k,\sigma}(\tau) = f_{k,\sigma}(\tau) + \delta f_{k,\sigma}(\tau) \\
\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) &\rightarrow \bar{f}'_{k,\sigma}(\tau) = \bar{f}_{k,\sigma}(\tau) + \delta\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)
\end{aligned}
$$

在这些变量的变分作用下，作用量的变分为

$$
S[\bar{c},c;\bar{f},f] \rightarrow S[\bar{c}',c';\bar{f}',f'] = S[\bar{c},c;\bar{f},f] + \delta S
$$

我们定义这样的一个量，这个量在场变量做变分前后保持不变。它之所以保持不变，是因为它只是对积分变量做了一个平移。这个量是一个 2×1 的矩阵，表达式为：

$$
\begin{aligned}
&\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{f},f]e^{-S[\bar{c},c;\bar{f},f]}\begin{pmatrix}\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) & \bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\end{pmatrix} \\
=&\int\mathcal{D}[\bar{c}',c']\mathcal{D}[\bar{f}',f']e^{-S[\bar{c}',c';\bar{f}',f']}\begin{pmatrix}\bar{c}'_{k,\sigma}(\tau) & \bar{f}'_{k,\sigma}(\tau)\end{pmatrix} \\
=&\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{f},f]e^{-S[\bar{c},c;\bar{f},f]-\delta S}\begin{pmatrix}\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) + \delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) & \bar{f}_{k,\sigma}(\tau) + \delta\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

将指数函数展开到一阶无穷小，消掉两边相同的项，得到

$$
0 = \int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{f},f]e^{-S}\begin{pmatrix}\delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) & \delta\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\end{pmatrix}
$$

到这里，我们得到了两个运动方程为

$$
\begin{aligned}
&\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{f},f]e^{-S}\Big[\delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{c}_{k,\sigma}(\tau)\Big] = 0 \\
&\int\mathcal{D}[\bar{c},c]\mathcal{D}[\bar{f},f]e^{-S}\Big[\delta\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\Big] = 0
\end{aligned}
$$

再将作用量的变分做展开，得到

$$
\begin{aligned}
\delta S &= \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\begin{pmatrix}\delta\bar{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \delta\bar{f}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\partial_\tau + \epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \partial_\tau + \epsilon_f\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ f_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix} \\
&+ \int_0^{\beta}d\tau\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\begin{pmatrix}\bar{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} & \bar{f}_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\partial_\tau + \epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \partial_\tau + \epsilon_f\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\delta c_{\boldsymbol{k}\sigma} \\ \delta f_{\boldsymbol{k}\sigma}\end{pmatrix} \\
&+ \frac{g^2}{2}\sum_q\sum_{k,\sigma}\sum_{p,s}\int_0^{\beta}d\tau_1\int_0^{\beta}d\tau_2\Big[\bar{c}_{k,\sigma}(\tau_1)\delta c_{k-q,\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\bar{c}_{p-q,s}(\tau_2)c_{p,s}(\tau_2) \\
&+ \delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau_1)c_{k-q,\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\bar{c}_{p-q,s}(\tau_2)c_{p,s}(\tau_2) \\
&+ \bar{c}_{k,\sigma}(\tau_1)c_{k-q,\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\bar{c}_{p-q,s}(\tau_2)\delta c_{p,s}(\tau_2) \\
&+ \bar{c}_{k,\sigma}(\tau_1)c_{k-q,\sigma}(\tau_1)D^0(\tau_1 - \tau_2)\delta\bar{c}_{p-q,s}(\tau_2)c_{p,s}(\tau_2)\Big] \\
&- U\sum_{pqk}\int_0^{\beta}d\tau\Big[\delta\bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{q,\downarrow}f_{k,\uparrow}f_{p+q-k,\downarrow} + \bar{f}_{p,\uparrow}\delta\bar{f}_{q,\downarrow}f_{k,\uparrow}f_{p+q-k,\downarrow} \\
&+ \bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{q,\downarrow}f_{k,\uparrow}\delta f_{p+q-k,\downarrow} + \bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{q,\downarrow}\delta f_{k,\uparrow}f_{p+q-k,\downarrow}\Big]
\end{aligned}
$$

将作用量的变分代入到第一个方程，因为我们可以随意选择场变量变分的数值，所以我可以令 $\delta c = 0, \delta f = 0, \delta\bar{f} = 0$ ，得到路径积分的积分量为

$$
\begin{aligned}
&\delta\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) \\
=&\int_0^{\beta}d\tau'\sum_{k',\sigma'}\delta\bar{c}_{k',\sigma'}(\tau')\Big[\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau - \tau') - \Big((\partial_{\tau'} + \epsilon_{k'})c_{k',\sigma'}(\tau')\bar{c}_{k,\sigma}(\tau) + Vf_{k',\sigma'}(\tau')\bar{c}_{k,\sigma}(\tau)\Big) \\
&- g^2\sum_q\sum_{p,s}\int_0^{\beta}d\tau_2\Big[c_{k'-q,\sigma'}(\tau')\bar{c}_{k,\sigma}(\tau)D^0(\tau' - \tau_2)\bar{c}_{p,s}(\tau_2)c_{p+q,s}(\tau_2)\Big]\Big]
\end{aligned}
$$

代入到路径积分中，得到两个格林函数的运动方程为

$$
\begin{aligned}
&-\Big\langle g^2\sum_q\sum_{p,s}\int_0^{\beta}d\tau_2\Big[c_{k'-q,\sigma'}(\tau')\bar{c}_{k,\sigma}(\tau)D^0(\tau' - \tau_2)\bar{c}_{p,s}(\tau_2)c_{p+q,s}(\tau_2)\Big]\Big\rangle \\
=& -\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau' - \tau) - \Big[(\partial_{\tau'} + \epsilon_{k'})G^{cc}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau) + VG^{fc}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau)\Big]
\end{aligned}
$$

再将作用量的变分代入到第二个方程，同样可以随意选择场变量变分的值，我可以令 $\delta f = 0, \delta c = 0, \delta\bar{c} = 0$ ，得到路径积分的积分量为

$$
\begin{aligned}
&\delta\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) - \delta S\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) \\
=&\sum_{k',\sigma'}\int_0^{\beta}d\tau'\delta\bar{f}_{k',\sigma'}(\tau')\Big[\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau - \tau') - \Big(Vc_{k',\sigma'}(\tau')\bar{f}_{k,\sigma}(\tau) + (\partial_{\tau'} + \epsilon_f)f_{k',\sigma'}(\tau')\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\Big) \\
&+ U\sum_{pq}\Big(\delta_{\sigma',\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\bar{f}_{q,\downarrow}f_{p,\uparrow}f_{k'+q-p,\downarrow} + \delta_{\sigma',\downarrow}\bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)f_{q,\uparrow}f_{p+k'-q,\downarrow}\Big)\Big]
\end{aligned}
$$

代入到路径积分里，得到了另外两个格林函数的运动方程为

$$
\begin{aligned}
&\Big\langle U\sum_{pq}\Big(\delta_{\sigma',\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\bar{f}_{q,\downarrow}f_{p,\uparrow}f_{k'+q-p,\downarrow} + \delta_{\sigma',\downarrow}\bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)f_{q,\uparrow}f_{p+k'-q,\downarrow}\Big)\Big\rangle \\
=& -\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau' - \tau) - \Big[VG^{cf}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau) + (\partial_{\tau'} + \epsilon_f)G^{ff}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau)\Big]
\end{aligned}
$$

到此为止，我们得到了联系四个格林函数的两个运动方程，这两个运动方程可以写作矩阵的形式为

$$
\begin{aligned}
&\begin{pmatrix}E^g_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau) & \phi \\ \psi & E^U_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau)\end{pmatrix} \\
=&\begin{pmatrix}-\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau' - \tau) & 0 \\ 0 & -\delta_{k,k'}\delta_{\sigma,\sigma'}\delta(\tau' - \tau)\end{pmatrix} \\
&- \begin{pmatrix}\partial_{\tau'} + \epsilon_{k'} & V \\ V & \partial_{\tau'} + \epsilon_f\end{pmatrix}\begin{pmatrix}G^{cc}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau) & G^{cf}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau) \\ G^{fc}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau) & G^{ff}_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau' - \tau)\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

其中，最左边的矩阵里面，我们只对对角线上的两个元素感兴趣，非对角上的两个元素对我们的结果没有任何影响，我就随便取了两个符号 ϕ,ψ 来表示他们。对角线上的两个元素表示系统的能量，其中 $E^g_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau)$ 表示由电声相互作用产生的那部分能量，具体的表达式为

$$
E^g_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau) = -\Big\langle g^2\sum_q\sum_{p,s}\int_0^{\beta}d\tau_2\Big[c_{k'-q,\sigma'}(\tau')\bar{c}_{k,\sigma}(\tau)D^0(\tau' - \tau_2)\bar{c}_{p,s}(\tau_2)c_{p+q,s}(\tau_2)\Big]\Big\rangle
$$

而 $E^U_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau)$ 表示由Hubbard repulsion产生的那部分能量，具体的表达式为

$$
E^U_{k,\sigma;k',\sigma'}(\tau',\tau) = \Big\langle U\sum_{pq}\Big(\delta_{\sigma',\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)\bar{f}_{q,\downarrow}f_{p,\uparrow}f_{k'+q-p,\downarrow} + \delta_{\sigma',\downarrow}\bar{f}_{p,\uparrow}\bar{f}_{k,\sigma}(\tau)f_{q,\uparrow}f_{p+k'-q,\downarrow}\Big)\Big\rangle
$$

如果此时令 $k = k', \sigma = \sigma', \tau = 0, \tau' = 0^-$ ，上面的矩阵方程可以简化为

$$
\begin{pmatrix}E^g_{k,\sigma} & \phi \\ \tilde{\phi} & E^U_{k,\sigma}\end{pmatrix} = \frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)G_{k,\sigma}(i\omega_n)e^{i\omega_n0^+}
$$

因此，系统由于电子相互产生的相互作用能，或者叫作势能，为

$$
\begin{aligned}
E_V &= \frac{1}{2}\sum_{k,\sigma}\mathrm{Tr}\begin{pmatrix}E^g_{k,\sigma} & \phi \\ \tilde{\phi} & E^U_{k,\sigma}\end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2}\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}\sum_{k,\sigma}\mathrm{Tr}\Big(\Sigma_{k,\sigma}(i\omega_n)G_{k,\sigma}(i\omega_n)\Big)e^{i\omega_n0^+}
\end{aligned}
$$

系统动能，或者就是那部分不是由于电子相互作用产生的那部分能量为

$$
E_K = \frac{1}{\beta}\mathrm{Tr}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma,i\omega_n}\begin{pmatrix}\epsilon_{\boldsymbol{k}} & V \\ V & \epsilon_f\end{pmatrix}\begin{pmatrix}G^{cc}_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n) & G^{cf}_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n) \\ G^{fc}_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n) & G^{ff}_{\boldsymbol{k},\sigma}(i\omega_n)\end{pmatrix}e^{i\omega_n0^+}
$$

两式相加即可得到系统的总能量为

$$
E = E_K + E_V
$$

参考文献

1. R. P. Feynman. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics. Rev. Mod. Phys., 20:367–387, Apr 1948.
2. Feynman’s thesis: a new approach to quantum theory
3. RP Feynman and AR Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, New York). 1965.
4. Julian Schwinger. On the green's functions of quantized fields. I. Proceedings of the National Academy of Sciences, 37(7):452–455, 1951.
5. Michael E Peskin. An introduction to quantum field theory. CRC Press, 2018.

编辑于 2019-08-03