

# 有限温度场论基础

## (理论物理方向研究生一年级用)

Leo Auris the Magna  
fengli@lzu.edu.cn

February 7, 2022



Figure 1: Dr. Leo Auris the Magna (学术垃圾)

---

# CONTENTS

---

- 1 正文章节
  - 1 有限温度场论及其运用场景 7
  - 2 混合态、密度矩阵与配分函数 9
    - 2.1 纯态与混合态 9
    - 2.2 力学量的系综期望与冯诺伊曼熵 11
    - 2.3 热平衡下的密度矩阵与配分函数 12
    - 2.4 习题 14
  - 3 泛函与路径积分 15
    - 3.1 泛函与多元函数 15
    - 3.2 线性泛函 16
    - 3.3 变分 19
    - 3.4 路径积分 23
      - 3.4.1 高斯型路径积分 23
      - 3.4.2 变量代换与量子反常 24
      - 3.4.3 高斯型积分的矩 25
      - 3.4.4 非高斯型的路径积分——微扰法 26
      - 3.4.5 非高斯型的路径积分——拉普拉斯积分法 26
      - 3.4.6 对称积分与规范固定 28
    - 3.5 Grassmann 代数与积分 35
      - 3.5.1 反交换律与 Grassmann 数 35
      - 3.5.2 左导数与右导数 35
      - 3.5.3 Grassmann 数域上的积分 36
      - 3.5.4 Grassmann 数域上的高斯积分 39
      - 3.5.5 Grassmann 函数域上高斯型泛函的路径积分 40
    - 3.6 习题 42
  - 4 一维振子的热力学 45

5	玻色与费米场的热力学	47
6	规范场的热力学	49
7	玻色化与平均场近似	51
8	尺度与重整化群	53
9	五花八门的关联函数	55
9.1	久保-马丁-施温格 (KMS) 关系	55
9.2	松原格林函数及其与其他格林函数的关系	57
10	线性响应理论	59
10.1	态、密度矩阵、力学量期望值的系综平均的时间演化	59
10.2	线性响应理论——格林-久保方程	62
10.3	一个例子：欧姆定律	63
10.4	高温（经典）极限	65
10.5	量子力学修正下的等离子体震荡频率	68

Part I

正文章节



---

## 有限温度场论及其运用场景

---

统计力学的发展是 19 世纪末最引人注目的物理学成就之一。作为微观与宏观世界的桥梁，统计力学给出了从微观哈密顿量出发，计算一群粒子所构成系统的热力学性质的一般方法。然而除了粒子，构成系统的还有场，譬如电磁场、流场、密度场等，并且伴随着量子场论在 20 世纪中叶逐步完善，人们意识到这个世界最基本的自由度实质上是场，粒子不过是经典极限下对场的近似描述，于是自然有了建立关于场的统计力学的需求。这种关于场的统计力学便是有限温度场论。

与统计力学一样，有限温度场论提供了从底层拉格朗日量出发，计算系统热力学性质（诸如物态方程、热容、压缩系数等）的一般方法，并可由此推演关于系统相变时的丰富物理性质。同时，有限温度场论也可用于计算介质与环境对一些力学量的影响（譬如有限温环境对粒子质量的修正，介质对相互作用势的屏蔽效应等等）。另外，借助线性响应理论，人们还可以利用有限温度场论去计算系统在近平衡态的输运性质（诸如电导率、粘滞系数等），以及介质震荡（譬如等离子体震荡）的色散关系。因此，有限温度场论在核物理、凝聚态物理以及等离子体物理中有着广泛的应用。

学习有限温度场论需要一定的量子场论基础作为前提，我们在后面的讨论中将直接援引量子场论中出现过的拉氏量而不作特别说明。对于拉氏量中各项物理意义感兴趣的读者可以阅读一些量子场论的入门教材。但即便没有学习过量子场论，也并不妨碍理解这篇笔记的主要逻辑。我们将会从一维振子的路径积分出发来阐述有限温度场论的基本思想。而由一维振子向场的延拓在数学上是直接的。

为了书写方便，这篇笔记采用自然单位制，即真空中的磁导率、介电常数、光速、玻尔兹曼常数、以及  $\hbar$  皆取 1。故如此，相空间体积元所包含的最小相格的数目便可作如下缩写

$$\int \frac{d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}}{h^3} = \int \frac{d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \int \frac{d^3\mathbf{x}d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \quad (1)$$

笔记中所有三维向量皆由正粗体，譬如  $\mathbf{a}$  表示，而斜手写体，譬如  $a$ ，则按场景表示三维向量的模长或四维向量。

这篇笔记的主要内容参考 Michel Le Bellac 所著的《Thermal field theory》前六章。

那么，开始叭。



---

## 混合态、密度矩阵与配分函数

---

### 2.1 纯态与混合态

密度矩阵是用来表示混合态的数学工具。混合态并不描述任何具体的孤立量子系统，相反它是对一组**相似但不同**的量子系统的抽象的封装描述。“自然光”是一个典型的混合态。自然界中任何一个具体的光子要么是线偏光，要么是圆偏光，要么是椭圆偏光，而并不存在名为“自然光”的光子。所谓“自然光”是对上述所有光子的封装描述。

一个容易与混合态混淆的概念是叠加态。叠加态是两个或两个以上量子态的线性叠加。它们本身也是一个量子态，描述的是一个孤立具体的量子系统。著名的“薛定谔的猫态”在**测量发生前**就是一个生与死的叠加态。一些科普书里“猫在测量前同时处于生死两个态上”的说法是不确切的。因为叠加态是一个有别于生死俩态的量子态，只是在生死俩态上的投影都非零而已。类似地，“东偏北  $50^\circ$ ”是一个方向，它只是在东与北两个基准方向上的投影都非零而已，说它“同时处于向东与向北两个方向上”是不确切的。但**测量过后**，**系综**的状态便转化为混合态了。这里说“系综”而非“系统”的原因在于，对于一个具体的测量后系统而言，它要么是处在“活”或“死”态，而“测量后的猫态”是对这堆活猫死猫的封装描述，而不描述某个具体的系统。

由于混合态并不是一个具体系统的量子态，所以并不能由态矢来表示。但与态矢类似地，我们也可以在一组基矢下写下混合态的分量：

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{i,j} \rho_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2)$$

其中  $\hat{\rho}$  便是密度矩阵， $\rho_{ij}$  则是在基矢下的分量。密度矩阵的物理意义在对角化后便清晰了，这在稍后的段落中会提及。

密度矩阵不单可以描述混合态，也可以描述所有系统都处于唯一量子态，或者说纯态的系统。在表示纯态时，

$$\hat{\rho}_P = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (3)$$

其中  $|\psi\rangle$  便是被表示的态的态矢。设  $\psi$  为叠加态

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (4)$$

则对应的写在以  $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$  为基矢的密度矩阵为

$$\begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

不难推得，表示纯态的密度矩阵对角化后一定是

$$\rho_{PD} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

这正是写在以该唯一量子态为基矢下的矩阵表示。而写在任意基矢下的纯态密度矩阵皆可表达为  $\rho_{PD}$  的相似变换，即  $\rho_P = U\rho_{PD}U^{-1}$ ，由此可以推得**纯态密度矩阵的平方**便是其自身：

$$\rho_P^2 = U\rho_{PD}U^{-1}U\rho_{PD}U^{-1} = U\rho_{PD}^2U^{-1} = U\rho_{PD}U^{-1} = \rho_P \quad (7)$$

方程 (7) 是纯态密度矩阵的判据。不满足方程 (7) 的密度矩阵表示的便是混合态。

对角化后的混合态密度矩阵有着一般的形式：

$$\rho_{\text{MD}} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

其中  $p_i$  的物理意义是在系综中任意抽取一个处于  $i$  态的系统的概率，满足归一化条件  $\sum_i p_i = 1$ ，因此密度矩阵的迹亦为 1。由此可见“纯态”的意味是：系综中的所有系统都以百分之百的几率处于唯一的量子态。

## 2.2 力学量的系综期望与冯诺伊曼熵

我们可以在密度矩阵对角化的表象下写下密度矩阵与一个物理算符  $O$  的乘积的迹：

$$\text{Tr} \hat{\rho} \hat{O} = \sum_{i,j} \text{Tr} p_i \delta_{ij} |i\rangle \langle j| \hat{O} = \sum_i p_i \langle i | \hat{O} | i \rangle \quad (9)$$

其意义正是力学量  $O$  的期望值的系综平均。虽然该意义是在密度矩阵对角化的表象下被揭示的，但考虑到算符迹的取值本身不依赖于表象的选取，因而上述命题的成立与表象无关。

最后讨论一下冯诺伊曼熵的定义：

$$S \equiv \text{Tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n+1}}{n} \text{Tr} \hat{\rho} (I - \hat{\rho})^n \quad (10)$$

若系综处于纯态，则对于自然数  $n \geq 1$  都有  $\hat{\rho}^n = \hat{\rho}$ ，不难推得  $\hat{\rho}(I - \hat{\rho})^n = \hat{\rho}(I - \hat{\rho}) = \hat{\rho} - \hat{\rho} = 0$ 。因此纯态的冯诺伊曼熵为零。

更多关于纯态、混合态密度矩阵的讨论可以参考 Richard Feynman 的《Statistical Mechanics》。

### 2.3 热平衡下的密度矩阵与配分函数

在最一般的情形下,人们并不对密度矩阵的形式作假设,以此前提探讨力学量期望值及其关联函数演化的理论,被称为非平衡态场论,有兴趣的读者可参阅 J.Rammer 的《Quantum Field Theory of Non-equilibrium States》。然而在本讲义之后的讨论中,我们将话题局限于一类特殊的系综与密度矩阵——热平衡下的系综与密度矩阵,仅在最后一个章节,我们将会利用线性响应理论,通过解析延拓的方法,探讨近平衡系统的输运问题。

热平衡下,系综的密度矩阵具有形式

$$\hat{\rho} = Z^{-1} e^{-\beta(\hat{H} - \sum_i \mu_i \hat{Q}_i)} = Z^{-1} e^{-\beta \hat{H}'}, \quad (11)$$

其中  $\hat{H}$  是体系哈密顿量算符,  $\beta$  是温度的倒数,  $\hat{Q}_i$  是各种守恒荷算符,  $\mu_i$  是对应的化学势,  $\hat{H}' = \hat{H} - \sum_i \mu_i \hat{Q}_i$  是有效哈密顿算符,  $Z$  则被称为配分函数。计算配分函数是统计力学的核心课题之一,由配分函数出发,人们可以推得体系的物态方程、热容、压缩系数等热力学性质。

由  $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$  可得,

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}'} = \sum_i \langle a_i | e^{-\beta \hat{H}'} | a_i \rangle, \quad (12)$$

其中  $\{|a_i\rangle\}$  为  $A$ -表象的表象基矢,即算符  $\hat{A}$  的本征态完备集,满足

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (13)$$

$$\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = I. \quad (14)$$

回顾一下量子力学中的俩绘景:

	薛定谔绘景	海森堡绘景
态矢	$ \psi(t)\rangle_S = e^{-i\hat{H}t} \psi(0)\rangle_S$	$ \psi(t)\rangle_H =  \psi(0)\rangle_H$
算符	$O_S(t) = O_S(0)$	$O_H(t) = e^{i\hat{H}t}O_H(0)e^{-i\hat{H}t}$
基矢	$ a_n(t)\rangle_S =  a_n(0)\rangle_S$	$ a_n(t)\rangle_H = e^{i\hat{H}t} a_n(0)\rangle_H$

因此，将时间在虚轴上作延拓后，在海森堡绘景下式 (12) 可被进一步表达为：

$$Z = \sum_i \langle a_i(0) | a_i(i\beta) \rangle_H. \quad (15)$$

由于哈密顿量并不是一个洛伦茨不变量，其不同惯性参考系下的形式不同，由方程 (12) 或 (15) 给出的配分函数必须定义在特定的参考系下，**通常来说，这个参考系与介质保持相对静止**。当介质呈现出复杂的流速分布时，“热平衡”的概念只在流场的局部有定义，在那里，我们可以选取一个局部流速为 0 的参考系。

在热平衡下，力学量  $O$  期望值测的系综平均为

$$\bar{O} = \text{Tr} \hat{O} \hat{\rho} = Z^{-1} \text{Tr} \hat{O} e^{-\beta H'} = Z^{-1} \partial_j \text{Tr} e^{-\beta H' + j \hat{O}}|_{j=0}, \quad (16)$$

其中  $j$  只是一个额外引入的与  $\hat{O}$  耦合的参数（而非力学量算符）。通过进一步延拓配分函数的定义为

$$Z(j) = \text{Tr} e^{-\beta H' + j \hat{O}} \quad (17)$$

$O$  的系综平均可被简练地表达为：

$$\bar{O} = \partial_j \ln Z(j)|_{j=0} \quad (18)$$

仅仅掌握延拓后的配分函数，而非密度矩阵的全貌，我们便可依据方程 (18) 来计算力学量的系综平均，这个技巧被称为生成函数法，将会在之后的章节中被反复运用。

最后值得一提的是，当即便在薛定谔绘景中哈密顿量亦显含时间，譬如系统被置于周期性的外部扰动下时，方程 (12) 与 (15) 并不完全一致。此时，

$$|a_i(t)\rangle_H = T e^{i \int_0^t d\tau \hat{H}(\tau)} |a_i(0)\rangle_H \quad (19)$$

其中  $T$  为时序算符，在线性响应理论的章节中会有详述。这种景况下，由于无法确定应当选取何者时间片段下的  $H$ ，配分函数无法由方程 (12) 给定，而方程 (15) 则是更合适的配分函数的计算式。在接下来的章节中，我们将利用方程 (15) 在位形（或坐标）表象下计算一维振子的热力学性质。

## 2.4 习题

- 利用  $\hat{\rho}_A = \sum_{i,j} \rho_A^{ij} |i\rangle\langle j|$ ,  $\hat{\rho}_B = \sum_{i,j} \rho_B^{ij} |i\rangle\langle j|$ , 以及  $\hat{\rho}_{A\oplus B} = \sum_{i,j,l,m} \rho_A^{ij} \rho_B^{lm} (|i\rangle\langle l| \otimes |j\rangle\langle m|)$ , 证明冯诺伊曼熵是广延量, 即  $S_{A\oplus B} = S_A + S_B$
- 证明海森堡绘景下, 表象基矢满足  $\hat{A}_H(t) |a_n(t)\rangle_H = a_n |a_n(t)\rangle_H$ ,  $\langle a_i(t) | a_j(t) \rangle_H = \delta_{ij}$
- 系统在粒子数表象下  $\{|n\rangle\}$  的哈密顿量为  $H = \omega a^\dagger a + v^* a^\dagger + v a$ , 其中  $a$  满足  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  是粒子湮灭算符,  $a^\dagger$  满足  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$  是粒子产生算符。设  $n \in \{0, 1\}$ , 即  $a^\dagger|1\rangle = a|0\rangle = 0$ , 求系统在热平衡下的配分函数。

## 泛函与路径积分

在后面的章节中，我们将利用路径积分来计算一维振子与场的配分函数。路径积分是一类特殊的积分，它是无穷元积分的连续极限，亦被称为泛函积分。路径积分是量子场论与有限温度场论中核心的数学技巧，值得先花一章节简略叙述。熟悉泛函与路径积分的读者可以跳过本章节，或在之后章节中遇到相关式子时，再阅读关联段落。

### 3.1 泛函与多元函数

考虑积分

$$I[f] = \int_0^1 f^2(x) dx, \quad (20)$$

积分值  $I[f]$  显然取决于函数  $f(x)$  的具体形式。譬如  $f(x) = x$  时， $I[f] = \frac{1}{3}$ ，而  $f(x) = x^2$  时， $I[f] = \frac{1}{5}$ ，此时我们称  $I$  是关于函数  $f$  的泛函。

描述系统整体性质的物理量基本都是泛函。譬如光程  $S$  是光线  $(x(t), y(t), z(t))$  的泛函：

$$S[x, y, z] = \int d\ln(x, y, z) = \int dt n(x, y, z) \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2}, \quad (21)$$

其中  $n$  为折射率；作用量  $S$  是粒子轨道  $q(t)$  的泛函：

$$S[q] = \int dt L(q, \dot{q}, t), \quad (22)$$

其中  $L$  是拉格朗日量；香农熵  $S$  是概率分布  $f$  的泛函：

$$S[f] = - \int \frac{dx dp}{2\pi} f(x, p) \ln f(x, p), \quad (23)$$

等等。

泛函可被视为无穷多元函数的连续极限。以方程 (20) 为例，离散化后

$$I[f] = \lim_{n \rightarrow \infty} I(f_1, \dots, f_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i^2, \quad (24)$$

其中  $f_i \equiv f(\frac{i-1/2}{n})$ 。显然泛函  $I[f]$  是多元函数  $I(f_1, \dots, f_n)$  的连续极限。类似地，函数  $f(x)$  亦可视为向量  $\{f_1, \dots, f_n\}$  的无穷维连续极限。

好比多元函数的应变量本身也可以是一个向量甚至张量（这通常被称为向量场，譬如流速场  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  即是流速向量  $\mathbf{u}$  关于位置向量  $\mathbf{x}$  的函数），泛函并不一定都如方程 (20) 一般是一个数，而有可能本身也是一个函数，记作  $g(k)[f]$ ，譬如积分变换

$$g(k) = \int dx A(k, x) f(x) \quad (25)$$

不难发现倘若  $A(k, x) = e^{ikx}$ ，方程 (25) 便是傅里叶变换。因此，一如函数是从数（组）到数（组）的映射，**泛函最一般的定义便是从函数到函数的映射**。考虑到常数亦是函数的一种，方程 (20) 也被涵盖在该定义中。

### 3.2 线性泛函

一类常见的泛函满足

$$g(k)[af] = ag(k)[f], \quad (26)$$



( $\alpha$  是常数) 被称为线性泛函。方程 (25) 就是一个线性泛函, 它离散化后显然地类似于线性代数中的方程

$$g(k) = \lim_{n \rightarrow \infty} g_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{L_x}{n} \sum_{j=1}^n A_{ij} f_j, \quad (27)$$

其中  $g_i = g(k_0 + iL_k/n)$ ,  $f_j = f(x_0 + jL_x/n)$  以及  $A_{ij} = A(k_0 + iL_k/n, x_0 + jL_x/n)$  ( $L_x$  与  $L_k$  分别为变量  $x$  与  $k$  的取值范围)。倘使  $A(k, x) = A(k - x)$ , 方程 (25) 被称为卷积, 离散化后有

$$A_{ij} = \sum_n a_n \delta_{i+n, j} \quad (28)$$

从这个例子中可以看出, 关于函数  $f$  的线性泛函, 可被视为对向量  $\vec{f}$  线性变换的连续极限, 这其中包括  $f$  的导数——没错, 求导也是泛函的一种, 与之相似的线性变换为:

$$\frac{d}{dx} f(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (f_i - f_{i-1}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \sum_j (\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j}) f_j, \quad (29)$$

其中  $f_j = f(x_0 + j\epsilon)$ 。比对方程 (29) 与 (27, 28), 不难察觉方程 (29) 恰为  $A_{ij} = (\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j})/\epsilon^2$  的特殊情况, 也就是说, 从泛函的角度看, 微分竟是一种特殊的积分变换, 并且还是一个卷积。

与表示线性变换类似, 关于  $f$  的线性泛函可以简练地表达为

$$g = A \circ f, \quad (30)$$

其中  $A$  被称为算子。在导数的例子中,  $A$  便是微分算子。而在积分变换的例子中,  $A(k, x)$  便是积分变换算子  $A$  在  $(k, x)$  表象下的分量, 类似于矩阵的分量  $A_{ij}$ 。与矩阵类似, 算子  $A$  也可被视为一般线性群  $GL_\infty$  的元素, 因此其乘积  $A \circ A$  也是一个线性泛函的算子。倘若  $A$  是微分算子  $d/dx$ , 则

$A \circ A = d^2/dx^2$ , 而若  $A$  是一个积分变换, 则乘积的表象分量为

$$(A \circ A)(z, x) = \int dk A(z, k) A(k, x). \quad (31)$$

作为练习, 读者可以自证卷积算子的乘积也是卷积算子。借助诸如  $A \circ A$ 、 $A \circ A \circ A$  之类的多项式, 我们可以利用泰勒展开来定义关于算子的一般函数  $h(A)$ :

$$\begin{aligned} h[A] &= h[A_0]I + h'[A_0](A - A_0) \\ &\quad + \frac{1}{2}h''[A_0](A - A_0) \circ (A - A_0) + \cdots, \end{aligned} \quad (32)$$

其中算子  $I$  为么元, 满足  $f = I \circ f$ , 其表象分量为

$$I(x, y) = \delta(x - y), \quad (33)$$

并可继而定义算子  $A$  的逆元  $A^{-1}$ , 后者满足

$$A \circ A^{-1} = A^{-1} \circ A = I \quad (34)$$

算子逆的表象分量也被称为该算子的格林函数。读者可以自行证明微分算子的逆元为卷积算子。

我们同样可以仿照矩阵的相关定义来定义算子  $A$  的迹:

$$\text{Tr}[A] = \int dx A(x, x). \quad (35)$$

算子的行列式似乎不是那么容易直接定义, 但借助线性代数中的恒等式

$$\ln \text{Det}[A] = \text{Tr}[\ln A], \quad (36)$$

我们仍可以计算算子  $A$  的行列式:

$$\begin{aligned} \text{Det}[A] &= \exp(\text{Tr}[\ln A]) \\ &= \exp(\text{Tr}[\ln(I + a)]) \\ &= \exp\left(\text{Tr}\left[a - \frac{a \circ a}{2} + \frac{a \circ a \circ a}{3} + \cdots\right]\right), \end{aligned} \quad (37)$$

$a = U \cdot U^\dagger$

$\hookrightarrow \text{Tr}\left[a - \frac{a \cdot a}{2} + \cdots\right]$

其中  $a = A - I$ 。读者请自行证明，当  $A$  为卷积算子，即  $A(x, y) = A(x - y)$  时，

$$\text{Det}[A] = \exp \left( \int \frac{dx d\omega}{2\pi} \ln \tilde{A}(\omega) \right), \quad (38)$$

其中的  $\ln$  表示取普通函数的自然对数，而

$$\tilde{A}(\omega) = \int dt A(t) e^{i\omega t} \quad (39)$$

是函数  $A(x - y)$  的傅里叶变换式。

$$\begin{aligned} & \int dt \tilde{A}(\omega) e^{i\omega t} \\ &= \int dt \int \frac{d\eta}{2\pi} \int \frac{d\xi}{2\pi} \tilde{A}(\eta) \tilde{A}(\xi) e^{it(\omega - \eta - \xi)} \\ &= \int \frac{d\eta}{2\pi} \int \frac{d\xi}{2\pi} \tilde{A}(\eta) \tilde{A}(\xi) \delta(\omega - \eta - \xi) \\ &= \int \frac{d\eta}{2\pi} \tilde{A}(\eta) \tilde{A}(\omega - \eta) \end{aligned}$$

### 3.3 变分

仿效多元函数偏导数的定义，人们定义了泛函上的导数，即变分。与偏导类似，变分之间，变分与导数，变分与积分之间皆可交换顺序，且类似于  $\partial f_i / \partial f_j = \delta_{ij}$ ，有

$$\delta f(x) / \delta f(y) = \delta(x - y) \quad (40)$$

。掌握了以上规律便可很容易地计算泛函的变分。比方说对方程 (20) 的变分为：

$$\begin{aligned} \frac{\delta I[f]}{\delta f(x)} &= \int_0^1 d\bar{x} \frac{\delta f(\bar{x})^2}{\delta f(x)} = \int_0^1 d\bar{x} \frac{2f(\bar{x}) \delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} \\ &= \int_0^1 d\bar{x} 2f(\bar{x}) \delta(x - \bar{x}) = 2f(x) \end{aligned} \quad (41)$$

上式中  $x \in (0, 1)$ , 否则变分为 0。再举一个带有导数的泛函作变分的例子:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\delta}{\delta f(x)} \int_a^b d\bar{x} f(\bar{x}) f'(\bar{x})^2 = \int_a^b d\bar{x} \frac{\delta}{\delta f(x)} (f(\bar{x}) f'(\bar{x})^2) \\
 &= \int_a^b d\bar{x} \frac{\delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} f'(\bar{x})^2 + \int_a^b d\bar{x} 2f(\bar{x}) f'(\bar{x}) \frac{d}{d\bar{x}} \frac{\delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} \\
 &= f'(x)^2 + \int_a^b d\bar{x} \frac{d}{d\bar{x}} \left( 2f(\bar{x}) f'(\bar{x}) \frac{\delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} \right) \\
 &\quad - \int_a^b d\bar{x} \frac{d}{d\bar{x}} (2f(\bar{x}) f'(\bar{x})) \frac{\delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} \\
 &= f'(x)^2 + \left( 2f(\bar{x}) f'(\bar{x}) \frac{\delta f(\bar{x})}{\delta f(x)} \right) \Big|_{\bar{x}=a}^{\bar{x}=b} - \frac{d}{dx} (2f(x) f'(x)) \\
 &= -f'(x)^2 - 2f(x) f''(x) + 2f(b) f'(b) \delta(b-x) \\
 &\quad - 2f(a) f'(a) \delta(a-x) \tag{42}
 \end{aligned}$$

上式中后两项是边界项。在许多问题中, 边界  $a, b$  会被分别推至正负无穷, 以至于变量  $x \in (a, b)$  永远在俩边界间取值, 于是  $\delta(a-x)$  与  $\delta(b-x)$  取零, 边界项因此被略去, 例如

$$\frac{\delta}{\delta f(x)} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} f(\bar{x}) f'(\bar{x})^2 = -f'(x)^2 - 2f(x) f''(x) \tag{43}$$

泛函取极值时变分为零 (**反过来未必成立**)。因此, 取变分为零通常被用于求解满足最小 (大) 化原则的函数或径迹, 譬如取距离的变分为零可解得曲面上的短程线; 取光程的变分为零可解得介质中满足费马原理的光线; 取作用量的变分为零可解得满足最小作用原理的经典轨迹; 取熵的变分为零可解得热平衡下的粒子数分布等等。

另一种常见的情形是, 在函数  $f$  满足一系列约束条件:  $I_i[f] = C_i$  的前提下, 求解最大或最小化泛函  $S[f]$  的函数。让我们再一次借助多元函数中的类似例子来探寻解决这类问题的方法。考虑一个如图2所示的二元函数  $h(x_1, x_2)$ , 倘不对

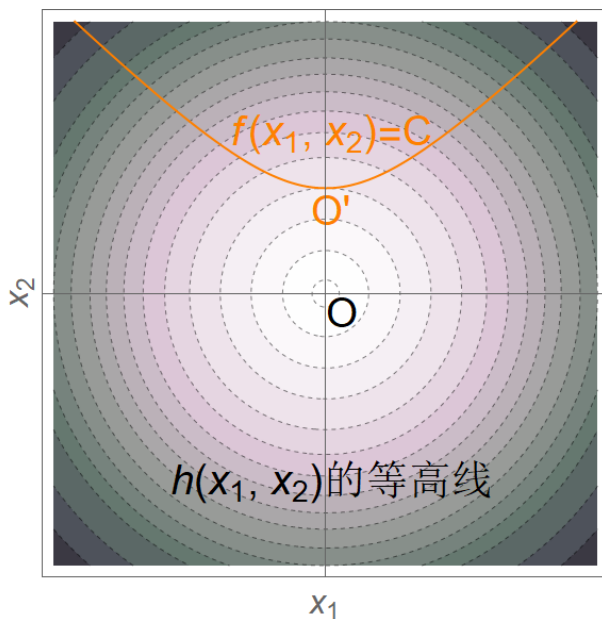


Figure 2: 某二元函数  $h(x_1, x_2)$  的色温图，颜色越深表示函数值越大，其等高（值）线由虚线标出，最小值在  $O$  点取得， $O$  点处函数  $h$  的梯度为零。但倘若  $\{x_1, x_2\}$  的取值被限制在径迹  $f(x_1, x_2) = C$ （图中橙红曲线）上，则函数  $h$  的最小值在  $O'$  取得，径迹在此处与  $h$  函数的某条等高线相切。

$\{x_1, x_2\}$  的取值范围作任何限制, 那  $h$  函数的极值在图2中的  $O$  点取得, 此处  $h$  的梯度为零, 即  $\partial_{x_1} h = \partial_{x_2} h = 0$ , 但倘若数组  $\{x_1, x_2\}$  被限制在图2中的橙色径迹  $f(x_1, x_2) = C$  上, 则  $h$  的最小值须在图2中的  $O'$  点处取得。简单的几何直觉告诉我们, 在  $O'$  处, 径迹  $f(x_1, x_2) = C$  与  $h$  函数的某条等高线相切, 用数学语言表达便是俩梯度向量平行:  $(\partial_{x_1} h, \partial_{x_2} h) \parallel (\partial_{x_1} f, \partial_{x_2} f)$  或  $(\partial_{x_1} h, \partial_{x_2} h) + \lambda(\partial_{x_1} f, \partial_{x_2} f) = 0$ , 其中  $\lambda$  为引入的额外参数。综上, 求取  $O'$  坐标的联立方程为

$$\begin{cases} \partial_{x_1} h + \lambda \partial_{x_1} f = 0 \\ \partial_{x_2} h + \lambda \partial_{x_2} f = 0 \\ f(x_1, x_2) = C \end{cases}, \quad (44)$$

三个方程恰好可以求解  $\{x_1, x_2, \lambda\}$  三个未知数。那么类似的, 倘要在约束条件下取泛函  $S[f]$  的极值, 则应当解下列联立方程:

$$\begin{cases} \frac{\delta S[f]}{\delta f(x)} + \sum_i \lambda_i \frac{\delta I_i[f]}{\delta f(x)} = 0 \\ I_i[f] = C_i \end{cases}. \quad (45)$$

这被称为拉格朗日乘法, 读者在初等统计力学中应当已经遇到过。

然而自然界并不完全遵从最小(大)化原则。波动光学告诉我们, 光并不只沿着费马原则给定的路线传播, 实际上光的波动充斥于空间的每一个角落, 而光程与波长之商给出了光沿某条路径传播所积累的相位变化(菲涅尔原则)。粒子也并不一定沿着最小化作用量的轨迹运动, 事实上空间中任何一条粒子运动轨线都是被量子力学所允许的, 只是不同轨迹呈现的几率不同。而为了讨论这类问题, 我们需要用到下一小节介绍的技术——路径积分。

### 3.4 路径积分

与变分类似，路径积分是多元积分在连续极限的延拓：

$$\int D[f] I[f] = \lim_{n \rightarrow \infty} \int df_1 \cdots df_n I(f_1, \cdots, f_n) \quad (46)$$

上式中左边即表示路径积分，而右边则是其离散化后的多元函数积分。大部分路径积分仅能依靠离散化为多元函数积分来数值计算，被称为格点法。真正能解析计算的路径积分只有一类：

$$Z_{\text{Gauss}} \equiv \int D[f] \exp(-f \circ A \circ f), \quad (47)$$

为一高斯型积分。

#### 3.4.1 高斯型路径积分

将高斯积分恒等式：

$$\int df_1 \cdots df_n \exp(-\vec{f} \cdot A \cdot \vec{f}) = \pi^{n/2} \sqrt{\text{Det}(A^{-1})}, \quad (48)$$

推广到连续极限并结合方程 (37) 后有

$$\int D[f] \exp(-f \circ A \circ f) = C_{\infty} \exp\left(\frac{1}{2} \text{Tr} \ln[A^{-1}]\right), \quad (49)$$

其中  $C_{\infty}$  为一趋于无穷的常数，尽管其值很大，却与我们关心的物理无甚干系，真正重要的是路径积分对算子  $A$  的依赖关系。利用方程 (49)，读者可自证

$$\begin{aligned} Z[\eta] &\equiv \int D[f] \exp(-f \circ A \circ f - \eta \circ f) \\ &= C_{\infty} \exp\left(\frac{1}{2} \text{Tr} \ln[A^{-1}] + \frac{1}{4} \eta \circ A^{-1} \circ \eta\right), \end{aligned} \quad (50)$$

$(\bar{\eta} \circ A \circ \eta + \bar{z} \circ \eta + \bar{\eta} \circ z)$   
 $\eta \rightarrow \eta + A^{-1} z$   
 $(\bar{\eta}' \circ A \circ \eta') \rightarrow \bar{\eta}' \circ A \circ \eta' + \bar{z} \circ \eta + \bar{\eta} \circ z + \bar{z} \circ A^{-1} z$

其中  $\eta$  是与  $f$  地位一样的函数。

$\frac{\delta Z}{\delta \bar{z}_x \delta z_y} = A^{-1}$

## 3.4.2 变量代换与量子反常

方程 (50) 的证明需要用到变量代换

$$f \rightarrow f' = f + \frac{1}{2} A^{-1} \circ \eta, \quad (51)$$

在此变换下, 方程 (50) 的被积泛函将会化作标准高斯型, 而积分元  $D[f] \rightarrow D[f']$  并未有任何形式上的变化。但并不是所有的变量代换皆如此。与多元积分的变量代换类似, 在一般变量代换  $f \rightarrow f'[f]$  下, 积分元将额外获得雅可比因子:

$$D[f] \rightarrow D[f'] \text{Det} \left| \frac{\delta f}{\delta f'} \right| = D[f'] \exp \left( \text{Tr} \ln \left[ \frac{\delta f}{\delta f'} \right] \right), \quad (52)$$

将积分元变换式 (52) 用于变量代换 (51), 不难得到后者的雅可比行列式为 1, 因此积分元保持形式不变。再比如倘使  $f' = U \circ f$ , 则

$$D[f] \rightarrow D[f'] \exp (\text{Tr} \ln [U^{-1}]). \quad (53)$$

这将导致一个有趣的结论。一般来说, 当作用量  $S[f]$  在变换  $f \rightarrow f'$  下保持形式不变, 即  $S[f] \rightarrow S[f']$  时, 我们说系统呈现出对应于此种变换的对称性。结合前一节的内容看, 当  $S$  取得极值, 即  $\delta S = 0$  时, 由于  $S[f]$  与  $S[f']$  形式相同,  $f$  与  $f'$  将遵从同一个运动方程, 这正是经典力学框架下对称的意义。然而, 由于产生了额外雅可比因子, 在此变换下, 路径积分

$$Z \equiv \int D[f] e^{iS[f]} \rightarrow \int D[f'] e^{iS'[f']}, \quad (54)$$

其中,

$$S'[f'] = S[f'] - i \text{Tr} \ln \left[ \frac{\delta f}{\delta f'} \right] \quad (55)$$

可见由积分元变换产生的雅可比因子可以被吸收进作用量。于是, 原本在变化下保持形式不变的作用量, 却因为路径积



分积分元的变换而等效地改变了，换言之，系统原本在经典力学（变分取零）框架下所呈现的对称性，却在量子力学（路径积分）框架下被破坏了，这被称为量子反常效应，其中最著名的是与手征变换关联的手征反常效应，后者正是  $\pi^0$  介子向双光子衰变的重要机制。

### 3.4.3 高斯型积分的矩

敏锐的读者也许已经注意到方程 (50) 与生成函数法中的配分函数 (17) 的类似。对  $Z[\eta]$  中的  $\eta$  求变分变可得到高斯型积分的各阶矩，比如

$$\begin{aligned}\langle f(x) \rangle_{\text{Gauss}} &\equiv \int D[f] f(x) \exp(-f \circ A \circ f) \\ &= - \left. \frac{\delta Z[\eta]}{\delta \eta(x)} \right|_{\eta=0} = 0,\end{aligned}\tag{56}$$

$$\begin{aligned}\langle f(x)f(y) \rangle_{\text{Gauss}} &\equiv \int D[f] f(x)f(y) \exp(-f \circ A \circ f) \\ &= \left. \frac{\delta^2 Z[\eta]}{\delta \eta(x)\delta \eta(y)} \right|_{\eta=0} \\ &= \frac{1}{4} (A^{-1}(x, y) + A^{-1}(y, x)) Z[\eta = 0],\end{aligned}\tag{57}$$

读者可以自行计算更高阶的矩，譬如  $\langle f(x)f(y)f(z) \rangle_{\text{Gauss}}$ ， $\langle f(x)f(y)f(z)f(w) \rangle_{\text{Gauss}}$  等。

## 3.4.4 非高斯型的路径积分——微扰法

非高斯型的路径积分，倘若被积泛函与高斯型的接近，可用微扰展开将其表达为高斯型积分各阶矩积分的求和，譬如当  $\lambda$  很小时，

$$\begin{aligned}
 & \int D[f] \exp \left( -f \circ A \circ f + \lambda \int dx f(x)^4 \right) \\
 & \approx \int D[f] \exp \left( -f \circ A \circ f \right) \left( 1 + \lambda \int dx f(x)^4 \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\lambda^2}{2} \left( \int dx f(x)^4 \right)^2 + O(\lambda^3) \right) \\
 & = Z_{\text{Gauss}} + \lambda \int dx \langle f(x)^4 \rangle_{\text{Gauss}} \\
 & \quad + \frac{\lambda^2}{2} \int dx dy \langle f(x)^4 f(y)^4 \rangle_{\text{Gauss}} + O(\lambda^3) \quad (58)
 \end{aligned}$$

由于  $\lambda$  为小量，越高阶的贡献越不重要。

## 3.4.5 非高斯型的路径积分——拉普拉斯积分法

形式远离高斯型的路径积分是否有近似的求值方法呢？

在一元积分中有这样一个技巧。考虑积分

$$I(\lambda) = \int dt g(t) e^{\lambda f(t)}, \quad (59)$$

其中  $f(t)$  连续且有界。设  $f(t)$  在  $t_0$  处取得最大值。当  $\lambda$  很大时，若  $t$  的取值稍偏离  $t_0$ ，因子  $e^{\lambda f(t)}$  相较于  $e^{\lambda f(t_0)}$  会被严重压低，因此， $t = t_0$  附近的被积函数贡献了几乎全部积分。于是，对  $f(t)$  在  $t_0$  附近作泰勒展开，保留至平方阶（由

于  $f'(t_0) = 0$ ,  $t_0$  处的线性阶消失, 因此平方阶是含  $t$  的领头阶) 后, 上述积分近似等于

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\approx g(t_0)e^{\lambda f(t_0)} \int dt e^{\frac{\lambda}{2} f''(t_0)(t-t_0)^2} \\ &= g(t_0)e^{\lambda f(t_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda f''(t_0)}}. \end{aligned} \quad (60)$$

以上被称为一元积分的拉普拉斯积分法, 不难将其推广用以估算路径积分:

$$I(\lambda) = \int D[f] G[f] e^{\lambda S[f]}. \quad (61)$$

当  $\lambda \rightarrow \infty$  为一大数时, 上述路径积分几乎完全由  $f_0$  附近的被积泛函贡献, 而  $f_0$  则由极值条件  $\delta S[f_0]/\delta f_0 = 0$  确定。展开  $S[f]$  至  $f - f_0$  的平方项, 并运用高斯型路径积分的通式 (49), 我们得到:

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\approx G[f_0] e^{\lambda S[f_0]} \int D[f] e^{\frac{\lambda}{2} (f-f_0) \circ \frac{\delta^2 S[f_0]}{\delta f_0 \delta f_0} \circ (f-f_0)} \\ &\propto G[f_0] \exp \left( \lambda S[f_0] + \frac{1}{2} \text{Tr} \ln \left[ \frac{\delta^2 S[f_0]}{\delta f_0 \delta f_0} \right]^{-1} \right). \end{aligned} \quad (62)$$

方程 (62) 建立起了波动-几何光学, 或量子-经典力学之间的桥梁。

在波动光学中, 依据惠根斯-菲涅尔原理, 固定时刻下光场中某一点的复振幅等于光沿各种路径抵达该点的复振幅的叠加, 即

$$\int D[\mathbf{r}] e^{\frac{iS[\mathbf{r}]}{\lambda}}, \quad (63)$$

其中  $S[\mathbf{r}]$  为光沿径迹  $\mathbf{r}$  走过的光程, 而  $\lambda$  为波长。当  $i/\lambda \rightarrow \infty$  或  $\lambda \rightarrow 0$  时, 固定时刻下光场中某一点的复振幅, 主要来自于沿着最小化光程, 即满足费马原理  $\delta S[\mathbf{r}_0]/\delta \mathbf{r}_0 = 0$ , 的光线

的贡献,换言之,在短波极限下,波动光学将与几何光学达成一致。

类似地,在量子力学中,初末态的重叠(overlap,其模方为初态向末态坍缩的几率)也由路径积分

$$\int D[q] e^{\frac{iS[q]}{\hbar}} \quad (64)$$

给出,其中  $S[q]$  是系统的作用量。当  $i/\hbar \rightarrow \infty$  或  $\hbar \rightarrow 0$  时,初末态重叠主要来自于最小化作用量 ( $\delta S[q_0]/\delta q_0 = 0$ ) 的粒子轨迹,即经典轨迹,的贡献,量子力学在此极限 ( $\hbar \rightarrow 0$ ) 下退化至经典力学。

### 3.4.6 对称积分与规范固定

在本小节最后的篇幅里,我们来研究一些被积泛函含有某种对称性的路径积分,读者将会在规范场的量子化理论中遇到这样的路径积分。

与之前类似,我们将再一次地通过熟悉的多元积分的例子来探寻处理这类对称积分的思路。

考虑带参数的二元积分:

$$I(\alpha) = \int dx dy F(x^2 + y^2; \alpha), \quad (65)$$

显然被积函数  $F$  在变换

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = U(\theta) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (66)$$

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (67)$$

下保持不变,或者说被积函数包含旋转对称性。

通常我们会在极坐标系下化简这个积分，但这次我们尝试这样的坐标变换：

$$\begin{pmatrix} x(t, \theta) \\ y(t, \theta) \end{pmatrix} = U(\theta) \begin{pmatrix} t \\ t^\gamma \end{pmatrix}. \quad (68)$$

注意当  $\theta$  固定，譬如取  $\theta = 0$  时， $\{x, y\}$  点落在一条形如  $y = x^\gamma$  的曲线上，这是一条扭曲的“经线”。取不同的  $\theta$  值，“经线”的形状相同，只是与  $x$  轴的夹角不同而已。由于旋转对称，被积函数沿任意两条“经线”的积分值相同。而当  $t$  固定，点  $\{x, y\}$  随  $\theta$  变化勾勒出一条圆形的“纬线”。显然，若  $\gamma = 1$ ，上述变换便是熟悉的自直角向极坐标系的变换。

在此变换下，积分元

$$dx dy = \det \left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(t, \theta)} \right| dt d\theta = (t + \gamma t^{2\gamma-1}) dt d\theta \quad (69)$$

于是

$$I(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\theta I_\gamma(\alpha) = 2\pi I_\gamma(\alpha), \quad (70)$$

其中

$$I_\gamma(\alpha) = \int dt (t + \gamma t^{2\gamma-1}) F(t^2 + t^{2\gamma}; \alpha) \quad (71)$$

是沿“经线”的积分。实际  $I_\gamma$  并不真正依赖于  $\gamma$ ，这可通过引入  $R = t^2 + t^{2\gamma}$  将  $I_\gamma$  化作

$$I_\gamma(\alpha) = \frac{1}{2} \int dR F(R; \alpha) \quad (72)$$

来看出，换言之沿“经线”的积分值与“经线”的形状无关。这并不奇怪。由于沿纬角的积分  $\int d\theta$  总是等于  $2\pi$ ，因此无论经线如何扭曲，沿经线积分的值总是总积分的  $1/2\pi$ 。这就像是从中心出发切下  $1/2\pi$  份的披萨可以有各种扭曲的划刀方法一样。

让我们用更形式化的方法重新审视上述案例积分。

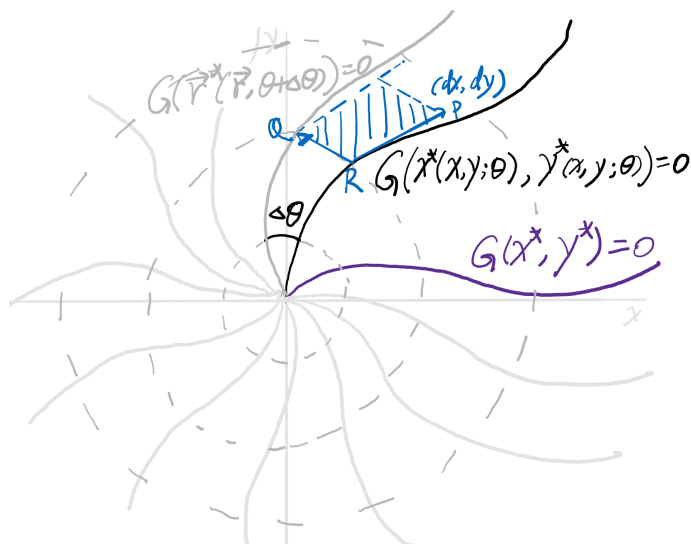


Figure 3: 以一簇扭曲的“经线”与圆形纬线为参数网笼罩的二维平面。单根“经线”由图中紫色曲线表示，其上的点满足方程  $G(x^*, y^*) = 0$ ，其余“经线”则由该紫色经线绕原点旋转得到，其上的点  $\{x, y\}$  满足方程  $G(x^*(x, y; \theta), y^*(x, y; \theta)) = 0$ 。此参数网切割平面得到的面积元由图中阴影四边形表示，其值近似等于  $|\vec{RQ} \times \vec{RP}|$ 。倘若二元积分的被积函数含有关于原点的旋转对称性，那妥善考虑面积元后，其沿任意“经线”的一元积分值皆相同，原本的二元积分也可因此被写作常数与上述一元积分的乘积。

当一个  $N$  元积分的被积函数呈现某种对称性（譬如旋转对称）时，此积分可退化为沿某超曲面（或线，譬如上例中的“经线”）的  $N - n$  元积分与常数的乘积，其中  $n$  为对称变换的参数个数，譬如二维平面上的旋转变换含有 1 个参数——即旋转角  $\theta$ 。超曲面可由一个或一组约束方程

$$G_a(x_1^*, \dots, x_N^*; \{\gamma\}) = 0 \quad (73)$$

给出，方程数目等于对称变换的参数个数，譬如球对称的三元积分就可借助两个约束方程退化为沿球径的一元积分。参数(组) $\gamma$ ，一如前例中的幂指数，用以调制超曲面的形状。这些约束方程也被称为“规范固定条件”，一如方程 (72) 所展示的，将积分元的变换考虑进来后，沿满足规范固定条件的超面上的积分并不真正依赖于约束的形式，以及参数组  $\{\gamma\}$  的取值。

对于二元积分，这个约束条件可写作

$$G(x^*, y^*; \gamma) = 0, \quad (74)$$

满足该规范固定条件的点集  $\{x^*, y^*\}$  由图3中的紫色曲线表示。倘使被积函数所蕴含的是旋转对称，那么该点集正是之前提及的“经线”。在前例中，

$$G(x^*, y^*; \gamma) = y^* - x^{*\gamma}. \quad (75)$$

而满足

$$G(x^*(x, y; \theta), y^*(x, y; \theta); \gamma) = 0, \quad (76)$$

的点集  $\{x, y\}$  则构成了图3中的灰或黑色经线簇，其中点  $\{x, y\}$  与紫色“经线”上的  $\{x^*, y^*\}$  由一个转动关联起来：

$$\begin{pmatrix} x^*(x, y; \theta) \\ y^*(x, y; \theta) \end{pmatrix} = U^{-1}(\theta) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (77)$$

$$\begin{pmatrix} x(x^*, y^*; \theta) \\ y(x^*, y^*; \theta) \end{pmatrix} = U(\theta) \begin{pmatrix} x^* \\ y^* \end{pmatrix}. \quad (78)$$

方程 (76) 可反解出约束下  $x, y$  坐标间的关系:

$$y = y(x; \theta). \quad (79)$$

由这簇经纬网所切割出的面积元在图3中由蓝色阴影表示, 其大小约等于  $|\vec{RQ} \times \vec{RP}|$ , 其中  $\vec{RP}$  与“经线”相切, 等于

$$\vec{RP} = (dx, dy) = dx \left( 1, -\frac{\left(\frac{\partial G}{\partial x}\right)_{\theta, y}}{\left(\frac{\partial G}{\partial y}\right)_{\theta, x}} \right), \quad (80)$$

而

$$\vec{RQ} = d\theta \left( \left( \frac{\partial x}{\partial \theta} \right)_{x^*, y^*}, \left( \frac{\partial y}{\partial \theta} \right)_{x^*, y^*} \right), \quad (81)$$

不难得到面积元

$$|\vec{RQ} \times \vec{RP}| = \frac{\left| \left( \frac{\partial G}{\partial \theta} \right)_{x, y} \right|}{\left| \left( \frac{\partial G}{\partial y} \right)_{x, \theta} \right|} d\theta dx. \quad (82)$$

尽管方程82右边似乎有着相当复杂的  $\theta$  依赖, 但不难从“经线簇”的旋转对称中看出, 积分元的大小实际上与  $\theta$  的取值无关。结合以上所有元素得到积分

$$I(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\theta I_G(\alpha) = 2\pi I_G(\alpha), \quad (83)$$



其中

$$\begin{aligned}
 I_G(\alpha) &= \int_0^\infty dx \int dy \delta(y - y(x; \theta)) \frac{\left| \left( \frac{\partial G}{\partial \theta} \right)_{x,y} \right|}{\left| \left( \frac{\partial G}{\partial y} \right)_{x,\theta} \right|} F(x^2 + y^2; \alpha) \\
 &= \int dx dy \left| \left( \frac{\partial G}{\partial \theta} \right)_{x,y} \right| F(x^2 + y^2; \alpha) \\
 &\quad \times \delta(G(x^*(x, y; \theta), y^*(x, y; \theta); \gamma)) \quad (84)
 \end{aligned}$$

为沿着规范固定超曲面的积分，并不真的依赖变换群参数  $\theta$ 。上式最后一步用到了恒等式

$$\frac{\delta(y - y(x; \theta))}{\left| \left( \frac{\partial G}{\partial y} \right)_{x,\theta} \right|} = \delta(G(x^*(x, y; \theta), y^*(x, y; \theta); \gamma)). \quad (85)$$

不加证明地向更多元以及更多重对称性的情形推广，有

$$I(\alpha) = \int d\theta_1 \cdots d\theta_n I_G(\alpha), \quad (86)$$

其中

$$\begin{aligned}
 I_G(\alpha) &= \int dx_1 \cdots dx_N \left| \det \left( \frac{\partial G_a}{\partial \theta_b} \right)_{\{x\}} \right| F(\{x\}; \alpha) \\
 &\quad \times \Pi_{a=1}^n \delta(G_a(\{x_i^*(\{x\}; \{\theta\}); \{\gamma\})). \quad (87)
 \end{aligned}$$

正如我们一再展示与强调的，满足规范约束的超曲面上的积分  $I_G(\alpha)$  并不真正依赖超曲面的形状调制参数组  $\gamma$ ，因此，

$$\begin{aligned}
 I_G(\alpha) &\propto \int dx_1 \cdots dx_N \left| \det \left( \frac{\partial G_a}{\partial \theta_b} \right)_{\{x\}} \right| F(\{x\}; \alpha) \quad (88) \\
 &\quad \times \int \{d\gamma\} \Pi_{a=1}^n v_a(\gamma) \delta(G_a(\{x^*(\{x\}; \{\theta\}); \{\gamma\})),
 \end{aligned}$$

其中  $v_a(\gamma)$  为一系列有界收敛的函数。方程 (88) 的右边被称为**规范固定后的积分**。

在上述一系列铺垫后，让我们回到真正感兴趣的问题。设有一个被积泛函  $S[f; \alpha]$  在变换  $f \rightarrow f' = f'[\theta]$  下保持不变，那对应的规范固定的路径积分是什么呢？将方程 (88) 推广至连续极限后，我们便有了答案：

$$Z_G[\alpha] \propto \int D[f] \left| \det \left( \frac{\delta G}{\delta \theta} \right) \right| S[f; \alpha] \quad (89)$$

$$\times \int D[\gamma] v[\gamma] \delta[G[f^*[f; \theta]; \gamma]],$$

其中  $G[f^*[f; \theta]; \gamma] = 0$  为规范固定条件，而

$$\delta[f] \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \Pi_{i=1}^n \delta(f_i) \quad (90)$$

为  $\delta$ - 函数的泛函推广。你可能会质疑如此折腾的意义，毕竟方程 (89) 比起原本的积分

$$\int D[f] S[f; \alpha] \quad (91)$$

来，看上去复杂得可不止一星半点，但后者看似简单的积分实际上并不是良好定义的。**规范固定之所以在关于对称泛函的路径积分中重要，是由于与普通积分不同，沿对称群参数族（即前例中的“纬线”族）的路径积分  $\int D[\theta]$  发散，离开规范固定的话，我们将会迷失在各种无穷大中。**

最后需要注意的是，前述讨论都基于“**对称变换群紧致，即群参数取值范围有界**”这一前提。对称群非紧致的情形可能会很不同。

### 3.5 GRASSMANN 代数与积分

#### 3.5.1 反交换律与 Grassmann 数

之前讨论的泛函与路径积分所涉及的函数都是由复（实）数（组）到复（实）数（组）的映射。复数或实数都满足乘积的交换律，即  $c_1 c_2 = c_2 c_1$  或  $[c_1, c_2] = 0$ ，其中  $[, ]$  是对易符号。而在本节，我们将接触一类新的数，它们满足乘积反交换律，即  $\eta_1 \eta_2 = -\eta_2 \eta_1$  或  $\{\eta_1, \eta_2\} = 0$ ，其中  $\{, \}$  是反对易符号。这样的数被称为 Grassmann 数。费米子的场函数  $\psi(x)$  就是由时空坐标  $x$  向 Grassmann 数（列）的映射。

在本小节中，若不加特别说明，默认以英文字母表示普通实（复）数，而用希腊字母表示 Grassmann 数。

由乘积的反交换律可推得 Grassmann 数的很多特性。

譬如偶数个 Grassmann 数的乘积是一个普通数，而奇数个 Grassmann 数的乘积则也是一个 Grassmann 数。

再譬如 Grassmann 数的平方  $\eta^2 = \{\eta, \eta\}/2 = 0$ ，因此， $\eta^n$  对于  $n \geq 2$  都是零。这导致任意关于 Grassmann 数的函数  $f(\eta)$  都只能泰勒展开至线性阶：

$$f(\eta) = f(0) + \eta f'(0). \quad (92)$$

注意，上式等号严格成立！

#### 3.5.2 左导数与右导数

方程 (92) 中的  $f'(0)$  是  $\overrightarrow{d/d\eta}f|_{\eta=0}$  的缩写，表示微分算子从**左至右**对  $f(\eta)$  作关于 Grassmann 数  $\eta$  的**导数**。有从**左至右**的导数，自然也有**从右至左**的导数，写作  $\overleftarrow{d/d\eta}$ ，对于  $f = \eta$  的情形有

$$\overrightarrow{d/d\eta}\eta = -\eta\overleftarrow{d/d\eta} = 1. \quad (93)$$

关于 Grassmann 数的导数算子与 Grassmann 数，以及这些导数算子之间，都是反对易的，因此每当关于 Grassmann 数的导数算子穿过一个 Grassmann 数（无论其是否为被微分对象）时都会产生一个额外的负号，这导致 Grassmann 导数的乘法法则与普通导数的不同，例如

$$\overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \eta_i}}(\eta_j \eta_k) = \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \eta_i}} \eta_j \eta_k - \eta_j \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \eta_i}} \eta_k = \delta_{ij} \eta_k - \delta_{ik} \eta_j \quad (94)$$

但此当关于 Grassmann 数的导数算子穿过一个普通数时则不会产生额外负号。

### 3.5.3 Grassmann 数域上的积分

定义在 Grassmann 数域上的积分也与通常意义的不同。“积分等于被积函数图像与横轴所围面积”的直观诠释不再适用。我们须要从一些更抽象的原则去定义 Grassmann 数的积分。由于任意关于 Grassmann 数的函数都只有常数与线性项两项，只要给出  $\int d\eta$  与  $\int d\eta \eta$  的合理定义，我们便可严格计算对任意  $f(\eta)$  在无穷域上的积分  $\int d\eta f(\eta)$ 。

第一个原则是：沿横轴平移被积函数并不会改变其在无穷域上的积分值，即

$$\int d\eta f(\eta) = \int d\eta f(\eta + \eta_0) \quad (95)$$

由此可得我们第一个重要结论，即

$$\int d\eta = 0. \quad (96)$$

第二个原则是积分的线性性：

$$\int d\eta (af(\eta) + bg(\eta)) = a \int d\eta f(\eta) + b \int d\eta g(\eta), \quad (97)$$

由此得到的推论是  $\int d\eta\eta$  须是一个与被积函数无关的普通数，而为了方便，我们按惯例将这个数取为一：

$$\int d\eta\eta = 1. \quad (98)$$

结合方程 (96, 98) 与 (92) 后有：

$$\int d\eta f(\eta) = f'(0) \quad (99)$$

Grassmann 数域上的无穷积分竟与求导形式相同！

Grassmann 积分在坐标变换下的行为也与普通积分不同。考虑坐标变换  $\eta \rightarrow \eta' = a\eta$ ，其中  $a$  为普通复数。积分元也因此会有变换  $d\eta = d\eta'b$ ，其中  $b$  为待定参数。我们要求无穷域上的积分在坐标变换下保持不变：

$$1 = \int d\eta\eta = \int d\eta' \frac{b}{a} \eta' = \frac{b}{a} \quad (100)$$

由此可见  $b = a = \overrightarrow{d/d\eta}\eta'$ ，换言之，其积分元在坐标变换下变化为

$$d\eta \rightarrow d\eta' \frac{\overrightarrow{d}}{d\eta} \eta' = \frac{d\eta'}{\overrightarrow{d/d\eta'}\eta} \quad (101)$$

用类似的方法可将前述的积分元变换法则推广至多元积分：考虑坐标变换  $\eta_i \rightarrow \eta'_i = \sum_j a_{ij}^{-1} \eta_j$ ， $\eta_i = \sum_j a_{ij} \eta'_j$ ，设积分元变换为  $d\eta_1 \cdots d\eta_n = d\eta'_1 \cdots d\eta'_n b$ ，其中  $b$  为待定参数。我们同样要求无穷域上的积分值不随坐标变换而改变：

$$\begin{aligned} 1 &= \int d\eta_1 \cdots d\eta_n \eta_n \cdots \eta_1 \\ &= b \sum_{\{j_n \cdots j_1\}} \int d\eta'_1 \cdots d\eta'_n a_{nj_n} \cdots a_{1j_1} \eta'_{j_n} \cdots \eta'_{j_1} \end{aligned} \quad (102)$$

注意方程 (102) 的下标组合  $\{j_n \cdots j_1\}$  中，倘若出现两（或更多）下标等值的情况，则对应的积分项由于其中呈现  $\eta_j^2$  而为

零。余下的  $\{j_n \cdots j_1\}$  两两不等值的组合可被分为两类：一类可经由偶数次交换而转换为  $\{n \cdots 1\}$  (简称偶排列)，在此情形下乘积  $\eta'_{j_n} \cdots \eta'_{j_1} = \eta'_n \cdots \eta'_1$ ；另一类可经由奇数次交换而转换为  $\{n \cdots 1\}$  (简称奇排列)，此时  $\eta'_{j_n} \cdots \eta'_{j_1} = -\eta'_n \cdots \eta'_1$ 。于是，藉由 levi-civita 符号

$$\epsilon_{j_n \cdots j_1} \equiv \begin{cases} +1 & \text{偶排列} \\ -1 & \text{奇排列} \end{cases}, \quad (103)$$

我们可将方程 (102) 继续表达成

$$\begin{aligned} 1 &= b \sum_{\{j_1 \cdots j_n\}} \int d\eta'_1 \cdots d\eta'_n \epsilon_{j_n \cdots j_1} a_{nj_n} \cdots a_{1j_1} \eta'_n \cdots \eta'_1 \\ &= b \sum_{\{j_1 \cdots j_n\}} \epsilon_{j_n \cdots j_1} a_{nj_n} \cdots a_{1j_1}. \end{aligned} \quad (104)$$

依照行列式的定义：

$$\sum_{\{j_1 \cdots j_n\}} \epsilon_{j_n \cdots j_1} a_{nj_n} \cdots a_{1j_1} = \det(a), \quad (105)$$

我们可解出待定参数  $b$ ：

$$b = \frac{1}{\det(a)}. \quad (106)$$

因此，在坐标变换下，Grassmann 数域上的积分元变化为

$$d\eta_1 \cdots d\eta_n \rightarrow \frac{d\eta'_1 \cdots d\eta'_n}{\det\left(\frac{\partial(\eta_1, \dots, \eta_n)}{\partial(\eta'_1, \dots, \eta'_n)}\right)}. \quad (107)$$

注意，定义在 Grassmann 数域上的无穷积分，在坐标变换下，其积分元须除以，而非乘以一个雅可比行列式，并且无需取行列式的绝对值。

## 3.5.4 Grassmann 数域上的高斯积分

以上述结论为基础, 我们可以计算在 Grassmann 数域上的高斯积分

$$\int d\eta d\eta^* \exp(\eta^* a \eta), \quad (108)$$

其中  $\eta = \eta_1 + i\eta_2$ ,  $\eta^* = \eta_1 - i\eta_2$  为一对“共轭” Grassmann 数。

首先是积分元的变换:

$$d\eta d\eta^* \rightarrow \frac{d\eta_1 d\eta_2}{\det \frac{\partial(\eta, \eta^*)}{\partial(\eta_1, \eta_2)}} = \frac{1}{-2i} d\eta_1 d\eta_2. \quad (109)$$

注意  $\eta_1^2 = \eta_2^2 = 0$ , 于是有

$$\begin{aligned} & \int d\eta d\eta^* \exp(\eta^* a \eta) \\ &= \frac{1}{-2i} \int d\eta_1 d\eta_2 \exp(ia\eta_1\eta_2 - ia\eta_2\eta_1) \\ &= \frac{1}{-2i} \int d\eta_1 d\eta_2 (1 - 2ia\eta_2\eta_1) \\ &= a. \end{aligned} \quad (110)$$

以及二元的高斯积分：

$$\begin{aligned}
 & \int d\eta_1 d\eta_1^* d\eta_2 d\eta_2^* \exp \left( (\eta_1^*, \eta_2^*) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} \right) \\
 &= \int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 e^{a\eta_1^* \eta_1} e^{b\eta_1^* \eta_2} e^{c\eta_2^* \eta_1} e^{d\eta_2^* \eta_2} \\
 &= \int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 (1 + a\eta_1^* \eta_1)(1 + b\eta_1^* \eta_2) \\
 &\quad \times (1 + c\eta_2^* \eta_1)(1 + d\eta_2^* \eta_2) \\
 &= \int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 (ad\eta_1^* \eta_1 \eta_2^* \eta_2 + bc\eta_1^* \eta_2 \eta_2^* \eta_1) \\
 &= \int d\eta_1^* d\eta_1 d\eta_2^* d\eta_2 (ad - bc) \eta_1^* \eta_1 \eta_2^* \eta_2 \\
 &= (ad - bc) \\
 &= \det \left[ \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \right]. \tag{111}
 \end{aligned}$$

借助坐标变换法则，读者可以证明本小节最重要的方程，即 Grassmann 数域上任意高维的高斯积分满足：

$$\int d\eta_1 d\eta_1^* \cdots d\eta_n d\eta_n^* \exp(\vec{\eta}^\dagger \cdot A \cdot \vec{\eta}) = \det(A). \tag{112}$$

### 3.5.5 Grassmann 函数域上高斯型泛函的路径积分

将方程 (112) 推广至连续极限后有：

$$\int D[\eta, \bar{\eta}] \exp(\bar{\eta} \circ A \circ \eta) = \det[A] = \exp(\text{Tr} \ln[A]), \tag{113}$$

其中  $\bar{\eta}$  可暂且理解为  $\eta$  的共轭，而

$$\int D[\eta, \bar{\eta}] \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\eta_1 d\bar{\eta}_1 \cdots d\eta_n d\bar{\eta}_n. \tag{114}$$

对比普通函数域上高斯型泛函的路径积分 (49)，注意到方程 (112) 中取行列式的对象是  $A$  而非  $A^{-1}$ 。



由于 Grassmann 函数域上高斯型泛函的路径积分有那么简洁的表达式，人们有时也将泛函行列式反过来表达成路径积分，譬如：

$$\det \left| \frac{\delta G}{\delta \theta} \right| = \int D[\eta, \bar{\eta}] \exp \left( \bar{\eta} \circ \frac{\delta G}{\delta \theta} \circ \eta \right), \quad (115)$$

于是，规范固定下的路径积分 (89) 被写作：

$$\begin{aligned} Z_G[\alpha] &\propto \int D[f] D[\eta, \bar{\eta}] \exp \left( \bar{\eta} \circ \frac{\delta G}{\delta \theta} \circ \eta \right) S[f; \alpha] \\ &\quad \times \int D[\gamma] v[\gamma] \delta[G[f^*[f; \theta]; \gamma]], \end{aligned} \quad (116)$$

其中出于辅助目的被引入的 Grassmann 场  $\eta$  被称为“鬼场”。

用与证明方程 (50) 类似的方法，读者可以自证

$$\begin{aligned} Z[\chi, \bar{\chi}] &\equiv \int D[\eta, \bar{\eta}] \exp(\bar{\eta} \circ A \circ \eta + \bar{\chi} \circ \eta + \bar{\eta} \circ \chi) \\ &= \exp(\text{Tr} \ln[A]) \exp(-\bar{\chi} \circ A^{-1} \circ \chi). \end{aligned} \quad (117)$$

与前一节类似，方程 (117) 亦可被用来计算高斯型路径积分的高阶矩，譬如二阶矩

$$\begin{aligned} \langle \eta(x) \bar{\eta}(y) \rangle &\equiv \int D[\eta, \bar{\eta}] \eta(x) \bar{\eta}(y) \exp(\bar{\eta} \circ A \circ \eta) \\ &= \frac{\overrightarrow{\delta}}{\delta \bar{\chi}} Z[\chi, \bar{\chi}] \frac{\overleftarrow{\delta}}{\delta \chi} \\ &= -A^{-1}(x, y) Z[0, 0] \end{aligned} \quad (118)$$

读者可以用类似的方法计算更高阶的矩，并且一如前一节微扰法所提到的一般，将一个接近高斯型泛函的路径积分表达成这些矩的线性叠加。

最后看一下 Grassmann 数域上路径积分的变量代换:  $(\eta, \bar{\eta}) \rightarrow (\eta', \bar{\eta}')$  下, 路径积分

$$Z \equiv \int D[\eta, \bar{\eta}] e^{iS[\eta, \bar{\eta}]} \rightarrow \int D[\eta', \bar{\eta}'] e^{iS'[\eta', \bar{\eta}']}, \quad (119)$$

其中

$$S'[\eta', \bar{\eta}'] = S[\eta[\eta', \bar{\eta}'], \bar{\eta}[\eta', \bar{\eta}']] + i \text{Tr} \ln \left[ \frac{\delta[\eta, \bar{\eta}]}{\delta[\eta', \bar{\eta}']} \right] \quad (120)$$

上式最后一项正是手征反常效应的来源。

### 3.6 习题

- 已知

$$G(x, y) \equiv \int dz A(x - z) B(z - y), \quad (121)$$

证明:  $G(x, y) = G(x - y)$

- 已知

$$\frac{d^n}{dx^n} G(x, y) = \delta(x - y) \quad (122)$$

证明:  $G(x, y) = G(x - y)$

- 证明方程 (38)

- 证明当  $A(\tau) = A(x - y)$  为周期性函数, 即  $A(\tau + \beta) = A(\tau)$  时,

$$\text{Det}[A] = \exp \left( \sum_n \ln \widetilde{A}_n \right), \quad (123)$$

其中  $\ln$  表示取普通汉书的自然对数, 而

$$\begin{aligned} \widetilde{A}_n &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} A(\tau) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \tau^2 \sum_{m,l} \widetilde{A}_m \widetilde{A}_l e^{-i(\omega_m + \omega_l)\tau} \\ A(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_n \widetilde{A}_n e^{-i\omega_n \tau}, \quad \widetilde{A}_n = \int_0^\beta d\tau A(\tau) e^{i\omega_n \tau} \end{aligned}$$

$$\int_0^\beta d\tau A(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \widetilde{A}_n \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_n \tau} = \widetilde{A}_0$$

$$\int_0^\beta d\tau A(\omega) = \sum_n \widetilde{A}_n$$

且  $\omega_n = 2\pi n/\beta$ 。

- 证明方程 (50)
- 仿照方程(57), 计算  $\langle f(x)f(y)f(z)f(w) \rangle_{\text{Gauss}}$  以及  $\langle f(x)^4 f(y)^4 \rangle_{\text{Gauss}}$ 。
- 证明方程 (112)
- 假设地表附近空气折射率随高度  $y$  的变化满足  $n(y) = e^{y/\lambda}$ , 求满足费玛原则的光线。



# 4

---

## 一维振子的热力学

---



# 5

---

## 玻色与费米场的热力学

---





# 6

---

## 规范场的热力学

---



# 7

---

玻色化与平均场近似

---



# 8

---

## 尺度与重整化群

---



## 五花八门的关联函数

在之前的章节中，我们的关注点一直局限于虚时（或松原）格林函数，并利用它来计算系统的配分函数与热力学性质。在后面的章节中，我们会将视线转向略微偏离热平衡的情形，利用线性响应理论来研究系统的输运或震荡性质。此时，我们将会邂逅一种新的关联函数：延时关联函数。因此，我们不妨花一个章节与读者一起领略形形色色的格林函数以及它们之间的变换关系。

### 9.1 久保-马丁-施温格 (KMS) 关系

定义格林函数  $D^>$ 、 $D^<$  以及谱函数  $A$  为

$$D^>(x-y) \equiv \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[ e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x) \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \right] \quad (126)$$

$$D^<(x-y) \equiv \pm \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[ e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x) \right] \quad (127)$$

$$A(x-y) \equiv D^>(x-y) - D^<(x-y) \quad (128)$$

其中  $\mathcal{Z} \equiv \text{Tr} e^{-\beta H}$  为配分函数。方程 (127) 中的  $\pm$  在算符  $\hat{\phi}$  为物理可观测量或玻色子场算符时取  $+$ ，在它为费米子场算

符时取  $-$ 。以上三个格林函数并不独立。可以证明, 倘若将  $D^<$  所定义的时间延虚轴平移  $i\beta$ ,  $D^<$  便能转化为  $\pm D^>$ :

$$\begin{aligned}
 D^>(x-y) &\equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x) \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \right] \\
 &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{i(i\beta)H} \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x) e^{-i(i\beta)H} e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \right] \\
 &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x^0 + i\beta, \mathbf{x}) e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \right] \\
 &= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta H} \hat{\phi}_{\mathbf{b}}(y) \hat{\phi}_{\mathbf{a}}(x^0 + i\beta, \mathbf{x}) \right] \\
 &= \pm D^<(x^0 - y^0 + i\beta, \mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (129)
 \end{aligned}$$

正是由于  $D^>$  与  $D^<$  在时间平移上的关系, 导致在傅里叶变换后, 两者相差一个  $\pm e^{\beta\omega}$  因子:

$$\begin{aligned}
 \widetilde{D}^>(\omega, \mathbf{k}) &= \int d^4x D^>(x) e^{i\omega x^0 - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad \text{blue: } \partial_{x^0} e^{-i p^0 x^0} \rightarrow -i p^0 \\
 &= \pm \int d^4x D^<(x^0 + i\beta, \mathbf{x}) e^{i\omega(x^0 + i\beta - i\beta) - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \\
 &= \pm \widetilde{D}^<(\omega, \mathbf{k}) e^{\beta\omega} \quad (130)
 \end{aligned}$$

于是:

$$\begin{aligned}
 \widetilde{A}(\omega, \mathbf{k}) &= \widetilde{D}^>(\omega, \mathbf{k}) - \widetilde{D}^<(\omega, \mathbf{k}) \\
 &= (\pm e^{\beta\omega} - 1) \widetilde{D}^<(\omega, \mathbf{k}) \quad (131)
 \end{aligned}$$

值得一提的是, 倘若  $\hat{\phi}$  为粒子场算符, 那么谱函数  $\widetilde{A}(\omega, \mathbf{k})$  的物理意义为动量为  $\mathbf{k}$  的粒子在能量  $\omega$  的分布几率,  $\widetilde{A}(m, \mathbf{o})$  的物理意义为粒子的质量分布。对于稳定的自由粒子而言,



其频谱空间的谱函数应当为  $\delta$  函数。我们最终可以将  $\widetilde{D}^>$ 、 $\widetilde{D}^<$  表达成谱函数：

$$\widetilde{D}^>(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\pm e^{\beta\omega}}{\pm e^{\beta\omega} - 1} \widetilde{A}(\omega, \mathbf{k}) \quad (132)$$

$$\widetilde{D}^<(\omega, \mathbf{k}) = \frac{1}{\pm e^{\beta\omega} - 1} \widetilde{A}(\omega, \mathbf{k}) \quad (133)$$

这便是 Kubo-Martin-Schwinger(KMS) 关系。

## 9.2 松原格林函数及其与其他格林函数的关系

松原格林函数定义为

$$\Delta(\tau, \mathbf{x}) \equiv \langle \hat{\phi}(-i\tau, \mathbf{x}) \hat{\phi}(0) \rangle = D^>(-i\tau, \mathbf{x}) \quad (134)$$

其中虚时  $\tau \in [0, \beta]$ 。正因为  $\tau$  在有限范围内取值，导致傅里叶变换后， $\widetilde{\Delta}$  的频率只能取分离值  $\omega_n$ ，其中当  $\hat{\phi}$  为物理可观测量或玻色子场算符时， $\omega_n = 2n\pi iT$  且  $e^{i\omega_n\beta} = 1$ ，而当  $\hat{\phi}$  为费米子场算符时， $\omega_n = (2n+1)\pi iT$  且  $e^{i\omega_n\beta} = -1$ 。于是在傅里叶变换后：

$$\begin{aligned} \widetilde{\Delta}(i\omega_n, \mathbf{k}) &= \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} e^{i\omega_n\tau} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \Delta(\tau, \mathbf{x}) \\ &= \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} e^{i\omega_n\tau} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} D^>(-i\tau, \mathbf{x}) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \widetilde{D}^>(\bar{\omega}, \mathbf{k}) e^{-i\bar{\omega}(-i\tau)} \\ &= \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \widetilde{D}^>(\bar{\omega}, \mathbf{k}) \frac{\pm e^{-\beta\bar{\omega}} - 1}{i\omega_n - \bar{\omega}} \\ &= - \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \frac{\widetilde{A}(\bar{\omega}, \mathbf{k})}{i\omega_n - \bar{\omega}} \end{aligned} \quad (135)$$

$$\mathcal{T}_m \widetilde{\Delta}(\omega + i0^+, \vec{k}) \rightarrow \mathcal{T}_m \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \frac{\widetilde{A}(\bar{\omega}, \vec{k})}{\omega - \bar{\omega} + i0^+}$$

$$= \mathcal{T}_m \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \widetilde{A}(\bar{\omega}, \vec{k}) \rightarrow \pi \delta(\omega - \bar{\omega}) i = \frac{1}{2} \widetilde{A}(\omega, \vec{k})$$

最后来看一下上一节的老朋友——延时格林函数：

$$D_R(x) \equiv \theta(t) A(x) \quad (136)$$

傅里叶变换后，借助方程 (??) 给出的  $\tilde{\theta}$ ，有：

$$\begin{aligned} \widetilde{D_R}(\omega, \mathbf{k}) &= \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \tilde{\theta}(\omega - \bar{\omega}) \widetilde{A}(\bar{\omega}, \mathbf{k}) \\ &= \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \frac{i\widetilde{A}(\bar{\omega}, \mathbf{k})}{\omega - \bar{\omega} + i0^+} \\ &= -i\widetilde{\Delta}(\omega + i0^+, \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (137)$$

其中最后一个等号右侧为频谱空间下的松原格林函数的解析延拓。将恒等式 (??) 运用于方程 (137) 的第二个等号处后有

$$A(\omega, \mathbf{k}) = 2\Re D_R(\omega, \mathbf{k}) = 2\Re[-i\widetilde{\Delta}(\omega + i0^+, \mathbf{k})] \quad (138)$$

这样，我们便将延时格林函数  $\widetilde{D_R}$  与谱函数  $\widetilde{A}$  都表达成松原格林函数  $\widetilde{\Delta}$  的函数。在此之外，还有超前格林函数 (Advanced Green's Function)，费曼 (编时) 格林函数等，因与本章节无关，暂且略去不谈。有兴趣的读者可以查阅 Michel Le Bellec 的《Thermal Field Theory》。

## 线性响应理论

线性响应理论也被称为格林-久保方程，其内容为：扰动一个**原本处于平衡态**的系统，系统随之作出的响应正比于扰动的大小，而其比例系数取决于系统**平衡态下**的性质。欧姆定律便是线性响应理论的一个例子。平衡态下的孤立导体中并没有电流。外加电压可视为对系统的扰动，而系统所作出的响应，即电流，正比于该扰动，即电压，而其比例系数，即电阻，由导体的平衡态性质所决定。在中学物理中，电阻（或电导率）总是一个给定的数，但利用格林-久保方程，我们可以从系统的哈密顿量出发来推导系统的电导率，并且自然地掌握它对温度、化学势的依赖。线性响应理论的推导需要用到密度矩阵。下面作一些介绍。

### 10.1 态、密度矩阵、力学量期望值的系综平均的时间演化

量子态的时间演化由薛定谔方程来描述，其解为

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (139)$$

其中幺正算符

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, t_0) &\equiv T e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} H_S(\bar{t})} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_S(t_1) \cdots H_S(t_n) \end{aligned} \quad (140)$$

表示将量子态从  $t_0$  时刻演化到  $t$  时刻的时间演化算符，而编时算符  $T$  的意义为将定义于晚时刻的算符排序到左端，即

$$TH_S(t_1)H_S(t_2) = \begin{cases} H_S(t_1)H_S(t_2) & t_1 > t_2 \\ H_S(t_2)H_S(t_1) & t_2 > t_1 \end{cases} \quad (141)$$

$H_S$  表示薛定谔绘景下的系统哈密顿量**算符**。读者可能会在初等量子力学课程中听闻“薛定谔绘景下力学算符，包括哈密顿量算符，都不显含时间，依赖于时间的是态矢”，这与方程 (140) 中  $H_S$  对时间的依赖矛盾。这是由于读者在初等量子力学课程中所遇到的问题，譬如粒子与**静止**势阱的散射，里，力学量期望值演化的唯一原因来源于态的演化。然而在更一般的情形下，力学量期望值演化的原因是复杂的，譬如势阱本身也可能随时间变化，这种变化既可以是受外界控制的，也可以来自于系统本身构型的变化。在这种情形下，即便在薛定谔绘景下，哈密顿量算符也会有时间依赖。

考虑到  $|\psi(t)\rangle$  满足薛定谔方程，时间演化算符  $\mathcal{U}(t, t_0)$  亦因此满足

$$i\partial_t \mathcal{U}(t, t_0) = H_S(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (142)$$

而  $\mathcal{U}$  的么正性则要求

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) = \mathcal{U}^{-1}(t, t_0) = \mathcal{U}(t_0, t) \quad (143)$$

在一般的分析中，哈密顿量  $H_S$  通常可以被分为两部分

$$H_S(t) = H_{0S} + H'_S(t) \quad (144)$$

其中  $H_{0S}$  是相对容易处理的通常不显含时间的部分，视情况可以是“无相互作用时的系统哈密顿量”或“没有外界扰动时的系统哈密顿量”，前者常见于微扰量子场论，而本章节所指涉的  $H_{0S}$  取的是后一种意味。在此分解下，时间演化算符可被写为

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) \quad (145)$$

其中

$$\mathcal{U}_0(t, t_0) \equiv e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} H_{0S}} \quad (146)$$

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) \equiv T e^{-i \int_{t_0}^t d\bar{t} H'_I(\bar{t})} \quad (147)$$

而式 (147) 中  $H'$  的下标  $I$  表示算符写在相互作用绘景，它与薛定谔绘景的关系由

$$O_I(t) \equiv \mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0) O_S(t) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (148)$$

给出。不难看出，相互作用绘景便是在没有扰动的情形下的海森堡绘景。方程 (145) 可以通过在其两端对时间取偏导来验证：

$$\begin{aligned} i\partial_t \mathcal{U}(t, t_0) &= i\partial_t \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) + \mathcal{U}_0(t, t_0) i\partial_t \mathcal{U}_I(t, t_0) \\ &= H_{0S}(t) \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) + \mathcal{U}_0(t, t_0) H'_I(t) \mathcal{U}_I(t, t_0) \\ &= H_{0S}(t) \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) \\ &\quad + \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0) H'_S(t) \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) \\ &= [H_{0S}(t) + H'_S(t)] \mathcal{U}_0(t, t_0) \mathcal{U}_I(t, t_0) \\ &= H_S(t) \mathcal{U}(t, t_0) \end{aligned} \quad (149)$$

与方程 (142) 吻合。

密度矩阵由于是左矢  $\times$  右矢的形式，它的演化方程是

$$\hat{\rho}(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \quad (150)$$

注意，考虑到时间演化算符的么正性，方程 (10) 所定义的冯诺伊曼熵在时间演化下保持不变，因此冯诺伊曼熵并不随时间增加。

最后, 一个物理观测量  $O$  的期望值的系综平均为

$$\begin{aligned}
 \overline{O(t)} &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t)O_S(t)] \\
 &= \text{Tr}[\mathcal{U}(t, t_0)\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)O_S(t)] \\
 &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)O_S(t)\mathcal{U}(t, t_0)] \\
 &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0)\mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0)O_S(t)\mathcal{U}_0(t, t_0)\mathcal{U}_I(t, t_0)] \\
 &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0)O_I(t)\mathcal{U}_I(t, t_0)] \quad (151)
 \end{aligned}$$

其中第二个等号用到了恒等式  $\text{Tr}[AB] = \text{Tr}[BA]$ , 而最后一个等号用到了相互作用绘景与薛定谔绘景的转换式 (148)。

## 10.2 线性响应理论——格林-久保方程

在本章节接下来的内容里, 我们的讨论将限于微扰远远小于系统自身能量, 即  $H' \ll H_0$ , 的情况。此时  $\mathcal{U}_I(t, t_0)$  可近似为

$$\mathcal{U}_I(t, t_0) \approx I - i \int_{t_0}^t d\bar{t} H'_I(\bar{t}) \quad (152)$$

将式 (152) 代入方程 (151), 忽略  $H'$  的平方或更高阶项后, 我们得到

$$\overline{O(t)} \approx \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)O_I(t)] - i \int_{t_0}^t d\bar{t} \text{Tr}\{\hat{\rho}(t_0)[O_I(t), H'_I(\bar{t})]\} \quad (153)$$

或者说

$$\overline{\delta O(t)} \approx -i \int_{t_0}^t d\bar{t} \text{Tr}\{\hat{\rho}(t_0)[O_I(t), H'_I(\bar{t})]\} \quad (154)$$

其中

$$\begin{aligned}
 \overline{\delta O(t)} &\equiv \overline{O(t)} - \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)O_I(t)] \\
 &= \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}_I^\dagger(t, t_0)O_S(t)\mathcal{U}_I(t, t_0)] \\
 &\quad - \text{Tr}[\hat{\rho}(t_0)\mathcal{U}_0^\dagger(t, t_0)O_S(t)\mathcal{U}_0(t, t_0)] \quad (155)
 \end{aligned}$$

为在  $t$  时刻，力学量  $O$  的期望值的系综平均对其在未受扰动情况下的系综平均值的偏离，这正是力学量  $O$  对外界扰动的响应。

我们更进一步地将初始时刻  $t_0$  取到  $-\infty$ ，并且假定在无穷远处，系综处于平衡态，即

$$\hat{\rho}(-\infty) = \hat{\rho}_0 \equiv \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tre}^{-\beta H_0}} \quad (156)$$

再引入缩写

$$\langle \cdots \rangle_0 \equiv \text{Tr}[\hat{\rho}_0 \cdots] \quad (157)$$

来表示平衡态下的系综平均值，方程 (154) 便可被简化为

$$\overline{\delta O(t)} \approx -i \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} \theta(t - \bar{t}) \langle [O_I(t), H'_I(\bar{t})] \rangle_0 \quad (158)$$

方程 (158) 左侧为力学量  $O$  对扰动的响应，而右侧则正比于  $H'$ ，即扰动。**响应正比于扰动**，这正是线性响应理论所陈述的命题。

### 10.3 一个例子：欧姆定律

作为一个例子，我们将利用线性响应理论来再现欧姆定律，并利用方程 (158) 来推导系统的电导率。

以下推导将在时间规范 (temporal gauge)，即  $A^0 = 0$  下进行。在此规范下，外场对系统的扰动为

$$H' = - \int d^3 \mathbf{x} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \quad (159)$$

而电场强度  $\mathbf{E}$  则被表达为

$$\mathbf{E} = \partial_t \mathbf{A} \quad (160)$$

在傅里叶变换后则为

$$\tilde{\mathbf{E}} = -i\omega\tilde{\mathbf{A}} \quad (161)$$

将方程 (159) 代入方程 (158) 后便可得到关于电流  $\mathbf{j}$  对抗动的响应:

$$\overline{\delta j_i(x)} \approx -i \int_{-\infty}^{\infty} d^4\bar{x} \theta(t - \bar{t}) \langle [j_{Ii}(x), j_{Ij}(\bar{x})] \rangle_0 A_j(\bar{x}) \quad (162)$$

其中  $x = (t, \mathbf{x})$  为四维坐标。这里磁矢势  $\mathbf{A}$  被写在平衡态系综平均  $\langle \dots \rangle_0$  之外, 这是由于  $\mathbf{A}$  为**外禀的经典场**, 是类似于温度一般的对每个系统而言都可选取一致的模型参数, 故不参与系综平均。

考虑到倘无外场, 电流的**系综平均**为零, 因此  $\overline{\delta \mathbf{j}(x)} = \overline{\mathbf{j}(x)}$ 。注意, 这里强调系综平均, 是由于即便没有外场, 单个孤立的系统仍然可能由于涨落而在局部产生非零的电流。我们后面会看到, 正是无外场下这些系统自发的非零局部电流涨落的关联函数, 给出了电导率的值。将方程 (162) 左侧的  $\overline{\delta \mathbf{j}(x)}$  替换成  $\overline{\mathbf{j}(x)}$  后, 我们有

$$\overline{j_i(x)} \approx -i \int_{-\infty}^{\infty} d^4\bar{x} \chi_{ij}(x - \bar{x}) A_j(\bar{x}) \quad (163)$$

其中

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(x - \bar{x}) &\equiv \theta(t - \bar{t}) \langle [j_{Ii}(x), j_{Ij}(\bar{x})] \rangle_0 \\ &= \theta(t - \bar{t}) \langle [j_{Ii}(x - \bar{x}), j_{Ij}(0)] \rangle_0 \end{aligned} \quad (164)$$

被称为延时格林函数 (Retarded Green's Function)。方程 (164) 中最后一个等号成立的原因是平衡态下的系综平均值具有时间-空间平移对称性, 即系综平均值不取决于初始时刻或坐标的选取, 故被平均的算符所定义的时空坐标可以被平移  $\bar{x}$ 。



注意，方程 (163) 右侧为卷积，故在对其两侧做傅里叶变换后，右侧便成了乘积：

$$\begin{aligned}\overline{\tilde{j}_i(\omega, \mathbf{k})} &\approx -i\widetilde{\chi}_{ij}(\omega, \mathbf{k})\widetilde{A}_j(\omega, \mathbf{k}) \\ &= \frac{\widetilde{\chi}_{ij}(\omega, \mathbf{k})}{\omega}\widetilde{E}_j(\omega, \mathbf{k})\end{aligned}\quad (165)$$

方程 (165) 便是扩展版的欧姆定理，从中很容易读出电导率，它是：

$$\widetilde{\sigma}_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\widetilde{\chi}_{ij}(\omega, \mathbf{k})}{\omega} \quad (166)$$

注意， $\widetilde{\chi}_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ ，以及  $\widetilde{\sigma}_{ij}(\omega, \mathbf{k})$ ，的值完全由平衡态下的系统平均所决定，而与外界扰动无关，这与中学所学的“电导率是材料的内禀属性，与外部干扰无关”是一致的。

方程 (166) 将电导率与平衡态下的延时格林函数联系起来了。这类将输运系数与平衡态下的延时两点格林函数关联起来的方程被称为格林久保方程。我们可以通过它们，从系统的底层哈密顿量出发，计算多体系统的输运系数，并由此推得诸如安德逊局域化等有意思的结论。我们将会在习题中看到，从方程 (166) 出发，结合二维布里渊区的拓扑结构，得到二维半导体材料的霍尔电导率必为整数的结论。然而在更一般的情形下，计算延时格林函数  $\chi$  需要将其转换为更易处理的虚时格林函数（或者说松原格林函数），然后利用有限温度场论的方法完成对后者的估值，这会是下一节的内容。但是在本节的最后部分，我们将展示一种在高温极限下，将  $\chi$  转化为经典观测量，并利用数值模拟来估算的方法。

## 10.4 高温（经典）极限

方程 (158) 与 (164) 中的对易式揭示了线性响应理论内禀的量子性。但在本章节的最末部分，我们将会看到在高温极限

下，这些对易式会退化成在经典情形下也能估算的普通关联函数。技巧的关键在于在高温下估算对易式  $\langle [O_I(t), H'_I(\bar{t})] \rangle_0$ ：

$$\begin{aligned}
 & \langle [O_I(t), H'_I(\bar{t})] \rangle_0 \\
 &= \text{Tr}\{\hat{\rho}_0 [O_I(t), H'_I(\bar{t})]\} \\
 &= \text{Tr}\{\hat{\rho}_0 O_I(t) H'_I(\bar{t}) - \hat{\rho}_0 H'_I(\bar{t}) O_I(t)\} \\
 &= \text{Tr}\{\hat{\rho}_0 O_I(t) H'_I(\bar{t}) - O_I(t) \hat{\rho}_0 H'_I(\bar{t})\} \\
 &= \frac{1}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}} \text{Tr}\{e^{-\beta H_0} O_I(t) H'_I(\bar{t}) - O_I(t) e^{-\beta H_0} H'_I(\bar{t})\} \\
 &= \text{Tr}\left\{ \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}} [O_I(t) H'_I(\bar{t}) - e^{\beta H_0} O_I(t) e^{-\beta H_0} H'_I(\bar{t})] \right\} \\
 &= \langle [O_I(t) - O_I(t - i\beta)] H'_I(\bar{t}) \rangle_0 \\
 &\approx i\beta \langle \partial_t O_I(t) H'_I(\bar{t}) \rangle_0
 \end{aligned} \tag{167}$$

其中第三个等号处运用了恒等式  $\text{Tr}[AB] = \text{Tr}[BA]$ ，第四个等号处代入了平衡态密度矩阵的具体表达式 (156)，第六个等号处用到了  $e^{\beta H_0} O_I(t) e^{-\beta H_0} = e^{i(-i\beta)H_0} O_I(t) e^{-i(-i\beta)H_0} = O_I(t - i\beta)$ ，而最后一个约等号处要求  $\beta$  很小，具体来说，要求  $i\beta \overline{\partial_t} \ll 1$ 。实际上，倘若  $O$  与  $H_0$  共享本征态，在扰动微小时， $O$  随时是缓变的，因此该要求在很大的温度区间内都成立。在此近似下，线性响应方程 (158) 退化为：

$$\overline{\delta O(t)} \approx \beta \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} \theta(t - \bar{t}) \langle \partial_t O_I(t) H'_I(\bar{t}) \rangle_0 \tag{168}$$

由此得到的欧姆定律表达式退化为

$$\begin{aligned}
 \overline{j_i(\bar{x})} &\approx \beta \int_{-\infty}^{\infty} d^4 \bar{x} \theta(t - \bar{t}) \partial_{\bar{t}} S_{ij}(x - \bar{x}) A_j(\bar{x}) \\
 &= -\beta \int_{-\infty}^{\infty} d^4 \bar{x} \theta(t - \bar{t}) \partial_{\bar{t}} S_{ij}(x - \bar{x}) A_j(\bar{x}) \\
 &= \beta \int_{-\infty}^{\infty} d^4 \bar{x} \theta(t - \bar{t}) S_{ij}(x - \bar{x}) \partial_{\bar{t}} A_j(\bar{x}) \\
 &\quad - \beta \int_{-\infty}^{\infty} d^4 \bar{x} \delta(t - \bar{t}) S_{ij}(x - \bar{x}) A_j(\bar{x}) \\
 &= \beta \int_{-\infty}^{\infty} d^4 \bar{x} \theta(t - \bar{t}) S_{ij}(x - \bar{x}) E_j(\bar{x}) \\
 &\quad - \beta \int_{-\infty}^{\infty} d^3 \bar{x} S_{ij}(0, \mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) A_j(t, \bar{\mathbf{x}}) \quad (169)
 \end{aligned}$$

其中  $\mathbf{A}(-\infty, \mathbf{x}) = 0$ , 且

$$S_{ij}(x - \bar{x}) \equiv \langle j_{Ii}(x - \bar{x}) j_{Ij}(0) \rangle_0 \quad (170)$$

在傅里叶变换后, 结合方程 (??), 并利用恒等式

$$S_{ij}(0, \mathbf{k}) = \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} \widetilde{S}_{ij}(\bar{\omega}, \mathbf{k}) \quad (171)$$

可得电导率为:

$$\begin{aligned}
 \widetilde{\sigma}_{ij}(\omega, \mathbf{k}) &= \beta \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} i \widetilde{S}_{ij}(\bar{\omega}, \mathbf{k}) \left( \frac{1}{\omega - \bar{\omega} + i0^+} - \frac{1}{\bar{\omega}} \right) \\
 &= \beta \int \frac{d\bar{\omega}}{2\pi} i \widetilde{S}_{ij}(\bar{\omega}, \mathbf{k}) \frac{\bar{\omega} - i0^+}{\omega(\omega - \bar{\omega} + i0^+)} \\
 &\rightarrow \beta \widetilde{S}_{ij}(\omega + i0^+, \mathbf{k}) \quad (172)
 \end{aligned}$$

其中最后一步要求  $\tilde{S}$  在上半复平面解析, 且满足  $|\tilde{S}(z)| \leq C e^{-A|z|}$ 。

与方程 (166) 不同, 方程 (172) 更容易在经典意义下计算。这是由于由方程 (170) 右侧给出的  $\widetilde{S}_{ij}(x)$ , 即不同时空坐标处电流密度的乘积在平衡态下的系综平均, 是原则上可以测

量得到，实际上可以通过数值模拟统计得到的观测量。因此，有一种常用的计算输运系数的方法是，在相同的热力学参数（诸如温度、化学势等等）下制备许多相似的由粒子构成的系统，经由分子动力学或运输模型模拟其演化。在经历了一系列碰撞后这些系统都达到了热平衡。之后统计出不同时空点的物理量的关联函数，代入高温下的格林-久保方程，完成对输运系数的估算。譬如在 J.Phys.G 48 (2021) 015005 这篇文章中，作者便使用了类似的方法计算了强子气体的粘滞系数。

### 10.5 量子力学修正下的等离子体振荡频率

现在我们用线性响应理论来重新分析等离子体震荡。

在库伦规范下，由局域电中性的破缺所带来的系统能量的抬升为

$$H' = e \int d^3\mathbf{x} (\delta n_+ - \delta n_-) \phi \quad (173)$$

而电势  $\phi$  则由泊松公式给出：

$$\nabla^2 \phi = -e(\overline{\delta n_+} - \overline{\delta n_-}) \quad (174)$$

在傅里叶变化后，

$$\tilde{\phi} = \frac{e}{k^2} (\overline{\delta n_+} - \overline{\delta n_-}) \quad (175)$$

利用线性响应方程 (158)，并将电势  $\phi$  处理成经典场后有：

$$\overline{\delta n_{\pm}}(x) \approx -ie \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \theta(t-\bar{t}) \langle [\delta n_{\pm I}(x), \delta n_{+I}(\bar{x}) - \delta n_{-I}(\bar{x})] \rangle_0 \phi(\bar{x}) \quad (176)$$

在阳离子与电子的密度涨落关联较弱的情况下，可以取

$$\langle [\delta n_{-I}(x), \delta n_{+I}(\bar{x})] \rangle_0 = \langle [\delta n_{+I}(x), \delta n_{-I}(\bar{x})] \rangle_0 = 0 \quad (177)$$

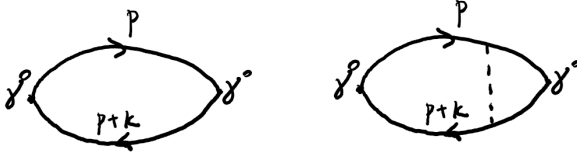


Figure 4: 方程 (183) 中的光子自能所对应的费曼图。图两端有  $\gamma^0$  是由于粒子数算符  $\hat{n} = \bar{\psi}\gamma^0\psi$ 。而实线表示电子（或阳离子）传播子  $\langle\psi(x)\bar{\psi}(y)\rangle$ 。其中左图所表示的自能中省略了粒子间碰撞的贡献，而右图则表示考虑了最低阶碰撞效应的自能。

方程 (176) 因此化简为

$$\overline{\delta n_{\pm}}(x) \approx \mp ie \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x} \theta(t-\bar{t}) \langle [\delta n_{\pm I}(x), \delta n_{\pm I}(\bar{x})] \rangle_0 \phi(\bar{x}) \quad (178)$$

傅里叶变换后，将  $\tilde{\phi}$  通过泊松方程 (175) 转化为  $\delta n_{\pm}$ ，有

$$\begin{pmatrix} 1 + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_+ & -i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_+ \\ -i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_- & 1 + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{\delta n_+} \\ \overline{\delta n_-} \end{pmatrix} = 0 \quad (179)$$

其中延时格林函数  $\tilde{\chi}_{\pm}$  为

$$\tilde{\chi}_{\pm}(\omega, \mathbf{k}) \equiv \int d^4x \theta(t) \langle [\delta n_{\pm I}(x), \delta n_{\pm I}(0)] \rangle_0 e^{i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (180)$$

与第??章中的处理方法类似，等离子体震荡的特征频率由

$$\begin{aligned} & \det \begin{pmatrix} 1 + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_+ & -i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_+ \\ -i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_- & 1 + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_- \end{pmatrix} \\ &= 1 + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_+ + i\frac{e^2}{k^2}\tilde{\chi}_- = 0 \end{aligned} \quad (181)$$

给出，其中的延时格林函数  $\tilde{\chi}_+$  可由方程 (137) 转换为松原格林函数。于是特征频率满足方程：

$$1 + \frac{e^2}{k^2} \tilde{\Pi}_+(\omega + i0^+, \mathbf{k}) + \frac{e^2}{k^2} \tilde{\Pi}_-(\omega + i0^+, \mathbf{k}) = 0 \quad (182)$$

其中松原格林函数

$$\tilde{\Pi}_\pm(i\omega_n, \mathbf{k}) \equiv \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \langle [\delta n_{\pm I}(-i\tau, \mathbf{x}), \delta n_{\pm I}(0)] \rangle_0 e^{i\omega_n \tau - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (183)$$

因其对光子传播子的修正效应亦被称为**光子自能**。 $\tilde{\Pi}$  可在有限温度场论的框架下求值，其所对应的费曼图见图4。忽略粒子间的碰撞，经过一系列计算后求得：

$$i\tilde{\chi}(\omega, \mathbf{k}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left( \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + E_{\mathbf{p}}^2}{E_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{p}}} + 1 \right) \frac{f_0(E_{\mathbf{p}}) - f_0(E_{\mathbf{p}+\mathbf{k}})}{E_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} - E_{\mathbf{p}} - \omega - i0^+} \quad (184)$$

其中动能  $E_{\mathbf{p}} \equiv \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$ 。在长波近似，更确切地说是在  $\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{k} \ll E_p$  或  $k \ll m$  下， $E_{\mathbf{k}+\mathbf{p}} \approx E_{\mathbf{p}} + \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{k}$ ， $f_0(E_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}) \approx f_0(E_{\mathbf{p}}) + \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{k} f'_0(E_{\mathbf{p}})$ 。于是上式近似等于

$$i\tilde{\chi}(\omega, \mathbf{k}) \approx 2 \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{v}_p \cdot \mathbf{k} f'_0(E_{\mathbf{p}})}{\omega - \mathbf{v}_p \cdot \mathbf{k} + i0^+} \quad (185)$$

与通过求解线性输运方程所得到的反应函数 (??) 相比，方程 (185) 多了一个因子 2，这正是两个自旋态所带来的简并因子，可以通过重新定义化学势而消去。我们由此证明了，在长波极限下，线性响应理论与输运模型能给出相同的等离子体震荡频率。当  $k$  与  $m$  可比，或者说等离子体震荡的波长与粒子的德布罗意波长可比时，则不得不考虑量子效应，此时只有线性响应理论给出的特征频率才是可靠的。