

杂七杂八的凝聚态理论

滕一鸣 ^{a,b}

^a 北京大学物理学院

^b *Université Paris-Saclay*

Contents

1	周期势场中的电子能级	2
1.1	Bloch 定理	2
1.1.1	Born-von Karman 边界条件	2
1.1.2	对 Bloch 定理的第一种证明	3
1.1.3	对 Bloch 定理的第二种证明	4
1.2	电子的能量	6
1.3	Fermi 面	8
1.4	能级密度	8
2	二次量子化	10
2.1	多体 Hilbert 空间的构造	10
2.2	连续 Fock 表示	11
2.3	离散 Fock 表示	17
2.4	近独立粒子系的统计	19
3	多体系统	21
3.1	晶体中的电子	22
3.1.1	Bloch 电子	22
3.1.2	Jellium 模型	24
3.1.3	Hubbard 模型	30
3.2	晶格振动	33
3.2.1	谐振子近似	33
3.2.2	声子气	37
3.3	电子-声子相互作用	39
3.4	电子间的有效相互作用	40
3.5	自旋波	42
4	Green 函数	47
4.1	线性响应理论	47
4.2	几种典型的响应函数	50
4.2.1	磁感率	50
4.2.2	电导率	51
4.2.3	退极化函数	52
4.3	谱密度	53
4.4	双时 Green 函数	55
4.5	Green 函数的谱表示	56
4.6	谱定理	58
4.7	Green 函数的对称性	59
4.8	Green 函数的解析性: Kramers-Kronig 关系	60
4.9	Green 函数的简单应用	61

4.9.1	无相互作用 Bloch 电子	61
4.9.2	自由自旋波	63
4.10	准粒子	64
5	相互作用粒子系	70
5.1	无限窄带电子的 Hubbard 模型	70
5.2	Hartree-Fock 近似	71
5.3	Hubbard 解	74
5.4	插值法	75
5.5	矩法	76
5.6	Hubbard 模型和 Heisenberg 模型的等价性	76
5.7	电子的集体激发	76
5.7.1	电荷屏蔽 (Thomas-Fermi 近似)	77
5.7.2	RPA 近似, 电荷密度波和等离激元	78
5.7.3	自旋密度波和磁子	82
5.8	无序合金中的元激发	83
5.8.1	有效介质法	86
5.8.2	TMA 近似	87
5.8.3	CPA 近似	88
5.8.4	图线法	89
5.9	自旋系统	94
5.9.1	Tyablikow 近似	94
5.9.2	重整自旋波	96
5.10	电子-磁子相互作用	97
5.10.1	$s - f$ 模型	97
5.10.2	无穷窄带近似	98
5.10.3	合金类比	99
5.10.4	磁极化子	99
6	零温微扰论	100
6.1	不含时微扰论	100
6.2	含时微扰论	103
6.3	因果 Green 函数	106
6.4	Wick 定理	108
6.5	Feynman 图	110
6.6	连通集团定理	113
6.7	连通图主定理	115
6.8	能量表象中单粒子 Green 函数的 Feynman 规则	116
6.9	Dyson 方程	117
6.10	电子气的基态能量	118
6.11	关联能	122
6.12	图部分和	122
6.13	极化传播子	123

7 有限温微扰论	125
7.1 Matsubara 函数	125
7.2 巨正则配分函数	127
7.3 单粒子 Matsubara 函数	128
7.4 Wick 定理	129
7.5 巨正则配分函数的 Feynman 规则	129
7.6 单粒子 Matsubara 函数的 Feynman 规则	131
8 补遗: 一些有趣的东西	132
8.1 Hubbard-Stratonovich 变换	132
8.2 场算符, 一次与二次量子化的等价性	133
8.3 Fock 空间中的相干态	134
8.4 投影解式法和有效 Hamilton 量	136
9 泛函积分	138
9.1 巨正则配分函数	138
9.2 理想量子气	139
9.2.1 半经典方法	139
9.2.2 Matsubara 方法	140
9.2.3 Green 函数法	142
9.3 生成泛函	143
10 相互作用与 Feynman 图	144
10.1 准粒子	144
10.2 Lehmann 谱表示	144
10.3 谱密度	146
10.4 集体激发	146
10.5 微扰论	147
11 Hubbard-Stratonovich 变换与 Hartree-Fock 近似	148
11.1 Hartree 理论	148
11.2 Fock 理论	150
11.3 Jellium 模型	151
12 Landau 相变理论	154
12.1 d 维 Ising 模型的平均场近似	154
12.2 泛函积分方法	155
13 响应函数	157
13.1 微观线性响应理论	157
14 对称性破缺与集体现象	158
14.1 泛函积分方法中的平均场理论	158
14.2 相互作用电子气	158

14.3	Bose-Einstein 凝聚和超流	160
14.3.1	Bose-Einstein 凝聚	161
14.3.2	超流	163
14.4	超导	164
14.4.1	BCS 理论	164
14.4.2	现代场论方法	167
14.5	无序电子气的场论	172
14.5.1	复本场论	174
14.5.2	杂质散射	175
14.5.3	扩散	176
14.5.4	平均场理论和自发对称破缺	177
15	重整化群	179
15.1	一维 Ising 模型	179
15.1.1	标度理论	179
15.1.2	Kadanoff 分块自旋重整化群	180
15.2	耗散量子隧穿	181
15.3	重整化群的一般理论	184
15.3.1	Gell-Mann-Low 方程	184
15.3.2	标度理论	186
15.4	铁磁相变	187
15.4.1	Gauss 模型	188
15.4.2	非 Gauss 模型	188
15.5	非线性 σ -模型	191
15.5.1	Lie 群上的积分	192
15.5.2	单圈计算	194
15.6	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 相变	194
15.6.1	涡旋和拓扑相变	196
15.6.2	重整化群分析	197
15.7	反向重整化群	200
16	拓扑相	201
16.1	历史故事	201
16.2	物理 Hilbert 空间的拓扑	201
16.3	Berry 相位	201
16.3.1	直观推导	201
16.3.2	纤维丛语言下的 Berry 相	203
16.3.3	通量量子化与陈数	206
16.3.4	二能级系统	207
16.4	拓扑观点下的绝缘体	209
16.4.1	绝缘体的拓扑等价性	209
16.4.2	对称性与拓扑相的分类	209
16.4.3	具有周期平移不变性的绝缘体	211

16.4.4	整数量子 Hall 效应	215
16.5	Dirac 材料与 Dirac 费米子	219
16.5.1	石墨烯	219
16.5.2	陈拓扑绝缘体	224
16.5.3	Weyl 与 Dirac 半金属	228
17	多体物理中的拓扑	232
17.1	玩具模型: 环上的粒子	232
17.2	同伦	233
17.3	θ -项	234
17.3.1	θ -项的几何构造	234
17.3.2	$\pi_2(\mathbb{S}^2)$ 玩具模型	235
17.3.3	泛函积分	236
17.3.4	自旋链	236
17.3.5	整数量子 Hall 效应	238
17.4	Wess-Zumino 项	247
17.4.1	自旋路径积分	247
17.4.2	自旋的量子化	249
17.4.3	Wess-Zumino 项的几何	252
17.4.4	与费米子耦合的磁矩	253
17.5	Chern-Simons 项	254
17.5.1	二维拓扑物相	255
17.5.2	非阿贝尔统计与基态简并性	255
17.5.3	Chern-Simons 理论	256
17.5.4	阿贝尔 Chern-Simons 理论的一般性质	256
17.5.5	分数量子 Hall 效应 (FQHE)	258
18	自旋轨道耦合	261
18.1	原子中的自旋轨道耦合	261
18.1.1	Dirac 方程	261
18.2	固体物理中的自旋轨道耦合	263
18.2.1	半导体能带结构中的 SOC	263
18.2.2	Bulk 反演对称性破缺与 Dresselhaus Hamilton 量	263
18.3	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法与有效质量张量	264
18.3.1	空穴和价带有效质量	266
18.3.2	存在自旋轨道耦合时的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法	267
18.3.3	$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法下的有效 Hamilton 量	269
19	粒子-空穴对称性	272
20	聚乙炔, SSH 模型与分数激发	273
20.1	对称性	273
20.2	跃迁振幅与能带结构	274
20.3	相变	275

21 拓扑序与范畴论导论	276
21.1 拓扑序的基本概念	276
21.1.1 Gapped 量子相	276
21.1.2 \mathbb{R}^n -可观测量	276
21.1.3 反常自由与反常量子相	277
21.1.4 拓扑缺陷和拓扑骨架	277
21.2 二维拓扑序	277
21.2.1 Toric code 模型	277
21.2.2 类粒子拓扑缺陷的范畴	279

1 周期势场中的电子能级

因为完美晶体中的离子按周期性排列, 因此其产生的电子所在的势场 $U(\mathbf{r})$ 满足

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}, \quad (1.1)$$

其中 \mathcal{B} 为 Bravais 格矢组成的集合. 研究固体中的电子本身是一个多电子问题, 但是我们总能通过后面将要提到的特殊方式构造 $U(\mathbf{r})$ 把电子间的相互作用效应囊括其中, 此时 $U(\mathbf{r})$ 被称作有效单电子势 (effective one-electron potential), 我们对固体中电子能量的研究也就转化成了对如下单电子 Schrödinger 方程的研究:

$$H|\psi\rangle = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right) |\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.2)$$

其中 $U(\mathbf{r})$ 满足沿 Bravais 格子的平移对称性. 该有效单电子 Schrödinger 方程刻画电子叫做 Bloch 电子.

1.1 Bloch 定理

Bloch 定理刻画了周期性势场中 Schrödinger 方程的解满足的重要性质: 如果 Hamilton 算符

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

中的势场具有沿 Bravais 格子的周期性

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}, \quad (1.4)$$

那么其本征态波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 将由一个矢量 \mathbf{k} 所刻画, 并且 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 满足

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

其中

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}. \quad (1.6)$$

换句话说, 其本征态波函数满足

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}. \quad (1.7)$$

注意, Bloch 波函数里的 \mathbf{k} 并非电子的物理动量给出的波矢 \mathbf{p}/\hbar , 因为晶体中不存在连续的平移对称性, 故晶体中的电子并不存在守恒的物理动量. 这里的 \mathbf{k} 应该被视为由离散的平移对称性生成的标记态的量子数, $\hbar\mathbf{k}$ 给出的所谓"晶体动量 (crystal momentum)"并没有实在的物理意义.

1.1.1 Born-von Karman 边界条件

尽管一般固体体积有限并且 Bloch 定理仅适用于无限大的平移对称性, 但由于晶格的平移对称性仅在边界处破缺并且我们感兴趣的固体内部 (bulk) 通常远离边界, 因而我们会自然地假设边界处的边界条件对内部电子态的影响微乎其微. 这赋予了我们选择边界条件的自由度, 而 Born-von Karman 边界条件 (周期性边界条件) 则堪称最方便理论处理的边界条件.

记生成 Bravais 格子的三个基矢为 $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3\}$, 并且固体在三个方向上分别有 $\{N_1, N_2, N_3\}$ 个格点, 于是固体包含的格点总数便为

$$N = N_1 N_2 N_3. \quad (1.8)$$

Born-von Karman 边界条件便要求电子的波函数满足

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.9)$$

Born-von Karman 边界条件对 Bloch 波矢 \mathbf{k} 提出了非平凡的要求:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.10)$$

于是

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.11)$$

进而

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = \frac{2\pi n_i}{N_i}, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.12)$$

考虑到倒格矢基矢的定义

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad (1.13)$$

我们发现 Bloch 波矢可以用倒格矢基矢写作

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{n_i}{N_i} \mathbf{b}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}. \quad (1.14)$$

进而 Bloch 波矢允许的取值在倒空间里亦形成了一组格点, 平均每个格点占据的体积为

$$\Delta k = \frac{\mathbf{b}_1}{N_1} \cdot \left(\frac{\mathbf{b}_2}{N_2} \times \frac{\mathbf{b}_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3). \quad (1.15)$$

这表明倒空间中的一个原胞包含了 N 个 Bloch 波矢格点. 考虑到

$$\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{v}, \quad (1.16)$$

其中 $v = V/N$ 为实空间中一个格点占据的体积, 于是

$$\Delta k = \frac{(2\pi)^3}{V}. \quad (1.17)$$

1.1.2 对 Bloch 定理的第一种证明

由于系统具有平移对称性, 因此 Hamilton 算符 H 的一个本征态 $|\psi\rangle$ 必然是简并的; 为了 label 简并的本征态, 我们可以考虑由 $\forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}$ 给出的平移算符 $T_{\mathbf{R}}$: H 的平移对称性意味着

$$[H, T_{\mathbf{R}}] = 0, \quad \forall \mathbf{R} \in \mathcal{B}, \quad (1.18)$$

进而我们可以寻找二者的共同本征态 $|\psi, \alpha\rangle$, 其满足

$$H|\psi, \alpha\rangle = E_\psi |\psi, \alpha\rangle, \quad T_{\mathbf{R}}|\psi, \alpha\rangle = \alpha(\mathbf{R})|\psi, \alpha\rangle. \quad (1.19)$$

由于 $T_{\mathbf{R}}$ 满足

$$T_{\mathbf{R}}T_{\mathbf{R}'} = T_{\mathbf{R}+\mathbf{R}'}, \quad \forall \mathbf{R}, \mathbf{R}' \in \mathcal{B}, \quad (1.20)$$

从而

$$\alpha(\mathbf{R})\alpha(\mathbf{R}') = \alpha(\mathbf{R} + \mathbf{R}'). \quad (1.21)$$

根据对称表示定理, $T_{\mathbf{R}}$ 必然是一个么正算符, 因此

$$\langle \psi, \alpha | T_{\mathbf{R}}^\dagger T_{\mathbf{R}} | \psi, \alpha \rangle = \langle \psi, \alpha | \psi, \alpha \rangle = 1, \quad (1.22)$$

进而

$$\alpha^\dagger(\mathbf{R})\alpha(\mathbf{R}) = 1, \quad (1.23)$$

这表明 $\alpha(\mathbf{R})$ 必定是一个形如 $e^{i\theta(\mathbf{R})}$ 的复相位, 于是 (1.21) 给出

$$\theta(\mathbf{R}) + \theta(\mathbf{R}') = \theta(\mathbf{R} + \mathbf{R}'), \quad \theta(\mathbf{R}) \in \mathbb{R}. \quad (1.24)$$

这是一个 Cauchy 函数方程, 其解必然形如

$$\theta(\mathbf{R}) = -\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}, \quad \forall \mathbf{k}. \quad (1.25)$$

因此我们可以按 \mathbf{k} 标记 Hamilton 算符的本征态 $|\psi, \mathbf{k}\rangle$, 并且其对应的本征态波函数满足

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \langle \mathbf{r} | T_{-\mathbf{R}} | \psi, \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \langle \mathbf{r} | \psi, \mathbf{k} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.26)$$

1.1.3 对 Bloch 定理的第二种证明

在 Born-von Karman 边界条件下, 我们总可以将电子波函数按符合该边界条件的 Bloch 波矢集合 $\mathcal{L} \equiv \{\mathbf{q}\}$ 展开:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} \tilde{c}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (1.27)$$

同时由于 $U(\mathbf{r})$ 具有沿晶格的平移对称性, 故我们可以将其按倒格矢 $\mathcal{R} \equiv \{\mathbf{K}\}$ 展开:

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}, \quad (1.28)$$

其中

$$\tilde{U}(\mathbf{K}) = \frac{1}{v} \int_{\text{原胞}} d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}, \quad (1.29)$$

并且我们总可以通过规定势能零点使得 $U(\mathbf{r})$ 在空间上的均值等于零, 即

$$\tilde{U}(0) = \frac{1}{v} \int_{\text{原胞}} d\mathbf{r} U(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.30)$$

同时, Bravais 格子在 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ 的反演对称性保证了

$$\tilde{U}^\dagger(\mathbf{K}) = \tilde{U}(-\mathbf{K}). \quad (1.31)$$

Bloch 电子的 Schrödinger 方程中的动能项便可以写成

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m} \tilde{c}(\mathbf{q}), \quad (1.32)$$

而势能项为

$$U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{q}} e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \tilde{U}(\mathbf{K}) \tilde{c}(\mathbf{q}). \quad (1.33)$$

由于满足 Born-von Karman 边界条件的波矢 $\forall \mathbf{q} \in \mathcal{L}$ 在经过一个倒格矢 $\forall \mathbf{K} \in \mathcal{R}$ 的平移后仍满足该边界条件, 故

$$U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{U}(\mathbf{K}) \tilde{c}(\mathbf{q} - \mathbf{K}). \quad (1.34)$$

于是原 Schrödinger 方程便能被写作

$$\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \left[\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m} - E \right) \tilde{c}(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}(\mathbf{K}) \tilde{c}(\mathbf{q} - \mathbf{K}) \right] = 0. \quad (1.35)$$

这意味着

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m} - E \right) \tilde{c}(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}(\mathbf{K}) \tilde{c}(\mathbf{q} - \mathbf{K}) = 0, \quad \forall \mathbf{q} \in \mathcal{L}. \quad (1.36)$$

$\forall \mathbf{q} \in \mathcal{L}$, 我们总可以找到 $\mathbf{K}' \in \mathcal{R}$ 使得 $\mathbf{k} \equiv \mathbf{q} + \mathbf{K}'$ 处于第一 Brillouin 区 \mathcal{B}_1 , 进而我们有

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{K}')^2 - E \right) \tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}') + \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}(\mathbf{K}) \tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}' - \mathbf{K}) = 0. \quad (1.37)$$

而这等价于

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{K}')^2 - E \right) \tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}') + \sum_{\mathbf{K}} \tilde{U}(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}) = 0. \quad (1.38)$$

\mathcal{B}_1 内 \mathbf{k} 只有有限个 (N 个) 取值, 进而对于给定的 \mathbf{k} , 我们从上式出发可以生成一组以 $\{\tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_i) | \mathbf{K}_i \in \mathcal{R}\}$ 为未知数的 (无限维) 线性方程组. 因此, 不同的 \mathbf{k} 对应的 Fourier 系数间是完全脱耦的, 我们便可以将 Hamilton 算符的本征波函数分解为一系列由 \mathbf{k} label 的本征波函数的线性组合:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B}_1} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.39)$$

其中

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K} \in \mathcal{R}} \tilde{c}(\mathbf{k} - \mathbf{K}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{K})\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.40)$$

显然这样的 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 满足 Bloch 定理.

1.2 电子的能量

虽然 Bloch 波矢的取值范围遍及整个倒空间, 但我们不难意识到凡是依赖于 Bloch 波矢的物理量都会拥有相对倒格矢的周期性. 因此为了研究这样的物理量, 我们只需要研究该物理量对倒空间的一个原胞内的 Bloch 波矢的依赖性, 并且这个原胞常常会被取作第一 Brillouin 区 \mathcal{B}_1 .

取定 $\mathbf{k} \in \mathcal{B}_1$, 我们考虑 Bloch 波函数

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.41)$$

我们将其代入 Schrödinger 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.42)$$

便得到

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right)^2 + U(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.43)$$

由于我们施加了周期性边界条件, 因此我们可以在一个原胞的范围内处理这一厄米算符的本征值问题, 并且我们会期待对于每一个给定的 \mathbf{k} , 我们都会得到一组无限个离散的本征值 $\{E_n(\mathbf{k})\}$ 和对应的本征函数 $\{u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ 及 $\{\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$, 其中各个 $E_n(\mathbf{k})$ 是 \mathbf{k} 的以倒格矢为周期的连续函数. 如此得到的一组本征值集合便是该固体的能带结构, $E_n(\mathbf{k})$ 便是一条能带, 其周期性和连续性保证了它一定有上下界.

Remark

这里有一个 subtle 的悖论: Bloch 态 $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle$ 是 Hamilton 算符 H 与 Bravais 格子上的平移算符 $T_{\mathbf{R}}$ 的共同本征态, 因此如果我们认为 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 只是被 Bloch 波矢 \mathbf{k} 标记的 Hamilton 算符的 E_n 对应的简并的本征空间中的矢量, 那么上面的 $E_n(\mathbf{k})$ 便不应该拥有 \mathbf{k} 依赖性. 这一观点的谬误在于 E_n 本征子空间里的简并本征矢并非由不同的 \mathbf{k} 对应的 $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 给出, 而是由不同的 $\mathbf{R} \in \mathcal{B}$ 产生的 $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ 给出. 更进一步地讲, 给定 Bloch 波矢 \mathbf{k} 对应的第 n 个能级的 Bloch 波函数的能量 $E_n(\mathbf{k})$ 其实并不等于原 Hamilton 算符的第 n 个本征值: Bloch 波矢的作用相当于筛选出了 Hamilton 量在沿 Bravais 格子的平移下满足由它刻画特征的态, 进而本征值问题 (1.43) 便被约束在了这些态组成的子空间上, 该问题的谱只是 Hamilton 算符谱的一个子集, $E_n(\mathbf{k})$ 中的 n 只是该本征值在这个本征值问题的谱中的编号而非在 Hamilton 算符的谱中的编号. 从这个意义上讲, 对 $E_n(\mathbf{k})$ 的连续性假设其实是在假设 \mathbf{k} 发生微小变化时本征值问题的谱也只发生微小的变化, 并且我们的记号 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 略 misleading.

如果一个电子处于非简并的能带 $E_n(\mathbf{k})$ 中 (即它的态为 $|n, \mathbf{k}\rangle$), 那么它拥有非零的平均速度

$$\mathbf{v}_n = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}). \quad (1.44)$$

这表明尽管晶体中的本征态电子在不断地和外界发生相互作用, 但是平均而言它却在匀速运动.

为了证明这一表达式，我们可以考虑 Taylor 展开

$$E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = E_n(\mathbf{k}) + \frac{\partial E_n}{\partial k_i} q_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j + \mathcal{O}(q^3), \quad (1.45)$$

其中我们使用了 Einstein 求和约定. 根据不含时微扰论，如果我们将 Hamilton 算符分为 $H = H_0 + V$ 并考虑 H_0 的非简并的本征态

$$H_0 |\psi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n\rangle, \quad (1.46)$$

那么 H 的本征值便为

$$E_n = E_0^{(0)} + \langle \psi_n | V | \psi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_n | V | \psi_m \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \mathcal{O}(V^3). \quad (1.47)$$

考虑到 $E_n(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ 是 Hamilton 算符

$$H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = H_{\mathbf{k}} + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{q} \cdot \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} q^2 \quad (1.48)$$

的本征值，因此我们有

$$\frac{\partial E_n}{\partial k_i} q_i = \mathbf{q} \cdot \int d\mathbf{r} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.49)$$

进而

$$\frac{\partial E_n}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{m} \int d\mathbf{r} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{i} \nabla + \mathbf{k} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \langle \psi_n | \mathbf{p} | \psi_n \rangle = \hbar \mathbf{v}_n. \quad (1.50)$$

如果考虑到二阶修正，那么我们有

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} q_i q_j &= \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \frac{\hbar^4}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{1}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})} |\langle u_{n,\mathbf{k}} | \mathbf{q} \cdot (-i\nabla + \mathbf{k}) | u_{m,\mathbf{k}} \rangle|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \sum_{m \neq n} \frac{1}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})} \left| \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \frac{\hbar^2}{mi} \mathbf{q} \cdot \nabla | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (1.51)$$

于是

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} &= \frac{\hbar^2}{m} \delta_{ij} \\ &+ \frac{\hbar^4}{m^2} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | -i\partial_i | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{m,\mathbf{k}} | -i\partial_j | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle + \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | -i\partial_j | \psi_{m,\mathbf{k}} \rangle \langle \psi_{m,\mathbf{k}} | -i\partial_i | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (1.52)$$

这给出了电子的有效质量张量 (effective mass tensor).

能带 $E_n(\mathbf{k})$ 存在简并的情况

如果能带 $E_n(\mathbf{k})$ 存在简并，那么此时我们需要按简并微扰论的做法在该本征空间上对角化相互作用矩阵并把 \mathbf{v}_n 定义为速度算符在该矩阵本征矢上的期望，并且我们不难意识到这里的简并性不会对结论产生影响。

1.3 Fermi 面

如果固体中存在 N 个电子, 那么这些电子将会在 Pauli 不相容原理的约束下按能量从低到高填充诸能量为 $E_n(\mathbf{k})$ 的能级 $|n, \mathbf{k}\rangle$. 此时为了保证每个能级只被统计一次, 我们需要将 Bloch 波矢的取值范围约束在倒空间的一个原胞内. 当我们逐次填入所有电子后, 固体中的电子能量会有一个上限, 该上限即 Fermi 能量 E_F , 并且此时能带的占据情况可以分为如下两种类型:

1. 一部分能带被完全填满, 另一部分能带全空; 此时最低未被占据态与最高被占据态间的能量差便为该固体的能隙 (band gap), 习惯上会认为绝缘体为能隙远大于 $k_B T$ 的固体, 而能隙大小在 $k_B T$ 左右的则是本征半导体 (intrinsic semiconductor). 由于一条能带 $E_n(\mathbf{k})$ 包含的能级数是倒空间一个原胞中的 Bloch 波矢数, 而这等于晶体实空间中的原胞数; 并且每一个能级只能容纳两个电子, 因此只有在一个原胞贡献偶数个 Bloch 电子时存在带隙的构形才可能出现.
2. 一些能带只被部分填满, 此时 E_F 会处在一条或多条能带的能量范围内. 不妨记 E_F 在能带 $E_{n_1}(\mathbf{k}), \dots, E_{n_m}(\mathbf{k})$ 的范围内, 那么 $E_{n_1}(\mathbf{k}) = E_F, \dots, E_{n_m}(\mathbf{k}) = E_F$ 便会给出 m 个倒空间中的分隔了给定能带中被占据态和未被占据态的曲面, 此即 Fermi 面. 特别的, 由其中一条能带确定的曲面 $E_{n_i}(\mathbf{k}) = E_F$ 叫做该固体 Fermi 的一个分支 (branch). 存在 Fermi 面的固体会表现出一些金属性质.

1.4 能级密度

我们在按能级填入 Bloch 电子后便可以考虑可观测量的计算, 而这样的可观测量通常有这样的形式:

$$Q = 2 \sum_{n, \mathbf{k}} Q_n(\mathbf{k}), \quad (1.53)$$

其中的 2 来自 Pauli 不相容原理要求每个能级只能填入两个电子, 并且我们假设这个可观测量与自旋无关. 在大粒子数极限下这样一个求和可以被换成在一个原胞上的积分, 进而我们有

$$Q = 2 \int_{\text{原胞}} \frac{d\mathbf{k}}{\Delta k} \sum_n Q_n(\mathbf{k}) = 2V \sum_n \int_{\text{原胞}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} Q_n(\mathbf{k}). \quad (1.54)$$

为方便起见, 我们可以定义 Q 的密度 q 为

$$q = \frac{Q}{V} = 2 \sum_n \int_{\text{原胞}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} Q_n(\mathbf{k}). \quad (1.55)$$

$Q_n(\mathbf{k})$ 常常仅通过 $E_n(\mathbf{k})$ 获得对 n 和 \mathbf{k} 的依赖性, 即 $Q_n(\mathbf{k}) = Q(E_n(\mathbf{k}))$, 因此我们可以考虑将 q 表示为

$$q = \int dE g(E) Q(E), \quad (1.56)$$

其中

$$g(E) = 2 \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta(E - E_n(\mathbf{k})) \equiv \sum_n g_n(E), \quad (1.57)$$

$$g_n(E) = \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \delta(E - E_n(\mathbf{k})). \quad (1.58)$$

我们可以考虑一个原胞内能带 $E_n(\mathbf{k})$ 中的由 $E_n(\mathbf{k}) = E$ 给出的等能面 $S_n(E)$, 那么我们可以将原积分测度 $d\mathbf{k}$ 换成由 $S_n(E)$ 上的坐标 $\{s_1, s_2\}$ 和其法向坐标 k_n 组成的积分测度 $ds dk_n$, 并且我们总可以通过调节 s_1, s_2 使得这一测度变换的 Jacobi 行列式为 1. 进而

$$\begin{aligned} g_n(E) &= \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} \int dk_n \delta(E - E_n(\mathbf{k})) \\ &= \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} \frac{1}{|\partial E_n(\mathbf{k})/\partial k_n|} \\ &= \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})|}. \end{aligned} \quad (1.59)$$

这一表达式的物理意义如下: 根据定义, $g_n(E)dE$ 给出了 $2/V$ 乘以第 n 个能带中能量位于 E 到 $E + dE$ 之间的态的数目, 于是

$$g_n(E)dE = \frac{2}{V} \int_{S_n(E) \sim S_n(E+dE)} \frac{d\mathbf{k}}{\Delta k} = \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} dk_n, \quad (1.60)$$

进而

$$g_n(E) = \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} \frac{1}{dE/dk_n} = \int_{S_n(E)} \frac{ds}{4\pi^3} \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})|}. \quad (1.61)$$

值得注意的是, 能带的周期性和连续性使得在一个周期内必然存在 Bloch 波矢 \mathbf{k} 使得 $|\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})|$ 等于零, 进而此时似乎能级密度 $g_n(E)$ 积分表达式里的被积函数会存在奇点. 在三维情况下这不会让 $g_n(E)$ 发散而会使 dg_n/dE 发散, 这一奇异性叫做 van Hove 奇性. 如果这一奇性出现在了 Fermi 面上, 那么它将对固体的低温行为产生显著影响.

2 二次量子化

严格地求解多体 Schrödinger 方程显然是不现实的, 多体物理的一大目标便是发展能够帮助我们以一种物理上合理的方式近似求解多体问题的理论框架. 二次量子化便可以极大地简化我们对多体问题的理论描述, 其本质是对 Schrödinger 方程的重新表述.

传统上, 研究一个 N -粒子问题的出发点是从单粒子的波函数出发按照粒子的统计性质构造出无相互作用的 N -粒子对称/反对称波函数, 二次量子化则认为这样的操作并不是必须的. 二次量子化会引入对易关系遵循粒子统计性质的产生湮灭算符并通过它们对真空态的作用产生 N -粒子态, 而粒子间的相互作用项亦可以由产生湮灭算符写出.

2.1 多体 Hilbert 空间的构造

如果系统中的 N 个粒子都是非全同的, 那么第 i -个粒子的波函数由其对应的单粒子 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_1^{(i)}$ 里的态矢 $|\varphi_\alpha^{(i)}\rangle$ 所刻画, 并且其参与组成了该空间的一组正交归一完备基 $\{|\varphi_\alpha^{(i)}\rangle\}$; 而整个 N -粒子系统的 Hilbert 空间便是各个粒子的单粒子 Hilbert 空间的直积:

$$\mathcal{H}_N = \bigotimes_{i=1}^N \mathcal{H}_1^{(i)}. \quad (2.1)$$

无论这些粒子间是否存在相互作用, 整个系统的态矢必定属于 \mathcal{H}_N . 显然, 一般情况下 \mathcal{H}_N 的一组完备基由各单粒子态矢的张量积给出:

$$|\varphi_N\rangle = |\varphi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \equiv |\varphi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle, \quad (2.2)$$

进而一个一般的 N -粒子态 $|\psi_N\rangle$ 可以在这组完备基上被展开:

$$|\psi_N\rangle = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} C(\alpha_1, \dots, \alpha_N) |\varphi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle. \quad (2.3)$$

而这个态的演化仍遵循 Schrödinger 方程

$$i\partial_t |\psi_N\rangle = H_N |\psi_N\rangle. \quad (2.4)$$

但是在量子力学中相互作用的同种粒子是全同不可分辨的, 而这会让全同粒子系的态矢 $|\psi_N\rangle$ 在交换一对全同粒子的操作下要么不变号, 要么反号; 这便带来了 Bose 统计和 Fermi 统计. 为了构造出满足这两种统计关系的态矢, 我们可以利用前面构造的非全同粒子的 Hilbert 空间. 我们可以形式上定义对称化算符

$$S_\varepsilon = \sum_{\mathcal{P} \in \mathcal{S}_N} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P}, \quad (2.5)$$

其中 \mathcal{P} 是将粒子 $(1, 2, \dots, N)$ 置换为 (i_1, i_2, \dots, i_N) 的算符, 而 ε 对玻色子取 $+$ 对费米子取 $-$, p 是 \mathcal{P} 的置换操作带来的两两交换数. 进而全同多粒子态的 Hilbert 空间便可以由各个

$$|\psi_N^{(\varepsilon)}\rangle = S_\varepsilon |\psi_N\rangle \quad (2.6)$$

张成. 我们记玻色子对应的对称空间为 $\mathcal{H}_N^{(+)}$, 而费米子对应的反对称空间为 $\mathcal{H}_N^{(-)}$. 特别的, 自旋-统计定理指出玻色子都是整数自旋粒子, 而费米子都是半整数自旋粒子.

2.2 连续 Fock 表示

我们自然可以利用前面构造出的多体 Hilbert 空间直接处理多体问题, 但是这将会相当麻烦. 为了让日子好过一点, 我们需要进行二次量子化来引入产生湮灭算符.

第一步是考虑用单粒子态 $|\varphi_\alpha\rangle$ 构造出 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$, 而此时我们必须区分 $|\varphi_\alpha\rangle$ 为连续单粒子态 (如位置或动量本征态) 和离散单粒子态 (如氢原子中电子束缚态) 的情况. 我们先来考虑前者.

我们称 $|\varphi_\alpha\rangle$ 为连续单粒子态, 如果其是某个算符 φ 的本征矢

$$\varphi |\varphi_\alpha\rangle = \varphi_\alpha |\varphi_\alpha\rangle, \quad (2.7)$$

并且 φ_α 取连续值. 此时态矢间的正交归一条件由 δ -函数给出:

$$\langle \varphi_\alpha | \varphi_\beta \rangle = \delta(\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \equiv \delta(\alpha - \beta). \quad (2.8)$$

其张成 \mathcal{H}_1 的完备性关系则为

$$\int d\varphi_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| = \mathbb{1}. \quad (2.9)$$

此时无相互作用的未对称化的 N -粒子态矢仍为

$$|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle = |\varphi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\varphi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle. \quad (2.10)$$

我们总可以找到一些预设的原则来安排各个态矢的顺序, 这给出了标准排序的态矢. 全同粒子系的态矢便可以由排列算符 \mathcal{P} 生成:

$$|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P} \in \mathcal{S}_N} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P} |\varphi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \cdots |\varphi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \equiv |\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle. \quad (2.11)$$

如此构造的 N 粒子态满足

$$\mathcal{P} |\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle = \varepsilon^{\mathcal{P}} |\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle, \quad (2.12)$$

进而我们可以计算不同 N 粒子态间的内积:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\beta_1}^{(\varepsilon)} \cdots \varphi_{\beta_N}^{(\varepsilon)} | \varphi_{\alpha_1}^{(\varepsilon)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(\varepsilon)} \rangle &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \langle \varphi_{\beta_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\beta_N}^{(N)} | \mathcal{P}^\dagger | \varphi_{\alpha_1}^{(\varepsilon)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(\varepsilon)} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{2\mathcal{P}} \langle \varphi_{\beta_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\beta_N}^{(N)} | \varphi_{\alpha_1}^{(\varepsilon)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(\varepsilon)} \rangle = \langle \varphi_{\beta_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\beta_N}^{(N)} | \varphi_{\alpha_1}^{(\varepsilon)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(\varepsilon)} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{\mathcal{P}_\alpha} \mathcal{P}_\alpha \langle \varphi_{\beta_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\beta_N}^{(N)} | \varphi_{\alpha_1}^{(1)} \cdots \varphi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{\mathcal{P}_\alpha} \mathcal{P}_\alpha [\delta(\beta_1 - \alpha_1) \cdots \delta(\beta_N - \alpha_N)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

这便是正交归一条件向全同多粒子态的推广. 可以验证, 此时完备性关系为

$$\int d\beta_1 \cdots d\beta_N |\varphi_{\beta_1} \cdots \varphi_{\beta_N}\rangle \langle \varphi_{\beta_1} \cdots \varphi_{\beta_N}| |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle = |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle. \quad (2.14)$$

我们进而假设如此构造的 $\{\varphi_N^{(\varepsilon)}\}$ 组成了 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ 的一组完备基, 任意一个全同多粒子态 $|\psi_N\rangle$ 都能按这样一组无相互作用的全同多粒子态展开.

我们现在引入一个代表没有任何粒子的归一化真空态 $|0\rangle$ 并定义理论的 Fock 空间为

$$\mathcal{F}^{(\varepsilon)} = \{|0\rangle\} \oplus \bigoplus_{N=1}^{\infty} \mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}. \quad (2.15)$$

我们进一步可以在 Fock 空间上定义产生单粒子态 $|\varphi_\alpha\rangle$ 的产生算符 a_α^\dagger 使得

$$a_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle = \sqrt{1} |\varphi_{\alpha_1}\rangle^{(\varepsilon)}, \quad (2.16)$$

$$a_{\alpha_2}^\dagger |\varphi_{\alpha_1}\rangle^{(\varepsilon)} = \sqrt{2} |\varphi_{\alpha_2} \varphi_{\alpha_1}\rangle^{(\varepsilon)}, \quad (2.17)$$

...

$$a_{\alpha_{N+1}}^\dagger |\varphi_{\alpha_N} \cdots \varphi_{\alpha_1}\rangle^{(\varepsilon)} = \sqrt{N+1} |\varphi_{\alpha_{N+1}} \cdots \varphi_{\alpha_1}\rangle^{(\varepsilon)}, \quad (2.18)$$

...

进而 a_α^\dagger 是联系 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ 和 $\mathcal{H}_{N+1}^{(\varepsilon)}$ 的映射. 如果我们认为真空态和产生算符更加基本, 那么一个 N 粒子态便可以用二者表示为

$$|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = \frac{1}{N!} a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle. \quad (2.19)$$

显然, 产生算符的先后顺序是很重要的:

$$a_{\alpha_1}^\dagger a_{\alpha_2}^\dagger = \varepsilon a_{\alpha_2}^\dagger a_{\alpha_1}^\dagger. \quad (2.20)$$

因而对于玻色子, 其是交换对易的:

$$[a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger] = 0. \quad (2.21)$$

对于费米子, 其是反交换对易的:

$$\{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = 0. \quad (2.22)$$

我们定义湮灭算符 a_α 为产生算符的厄米共轭, 进而其应该把 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ 中的态矢映射到 $\mathcal{H}_{N-1}^{(\varepsilon)}$ 中. 我们不难发现

$$\langle \varphi_{\alpha_N} \cdots \varphi_{\alpha_1} |^{(\varepsilon)} a_{\alpha_{N+1}} = \sqrt{N+1} \langle \varphi_{\alpha_{N+1}} \cdots \varphi_{\alpha_1} |^{(\varepsilon)}, \quad (2.23)$$

以及

$$\langle \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N} | = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | a_{\alpha_N} \cdots a_{\alpha_1}. \quad (2.24)$$

进而

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | a_\gamma | \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle \\ &= \sqrt{N} \langle \varphi_\gamma \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | \varphi_{\alpha_1} \varphi_{\alpha_2} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle \\ &= \frac{\sqrt{N}}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{p_\alpha} \mathcal{P}_\alpha [\delta(\gamma - \alpha_1) \delta(\beta_2 - \alpha_2) \cdots \delta(\beta_N - \alpha_N)]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

这可以被进一步写成

$$\begin{aligned}
& \langle \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | a_\gamma | \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{(N-1)!} \left[\delta(\gamma - \alpha_1) \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{\mathcal{P}_\alpha} \mathcal{P}_\alpha [\delta(\beta_2 - \alpha_2) \cdots \delta(\beta_N - \alpha_N)] \right. \\
&+ \varepsilon \delta(\gamma - \alpha_2) \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{\mathcal{P}_\alpha} \mathcal{P}_\alpha [\delta(\beta_2 - \alpha_1) \delta(\beta_3 - \alpha_3) \cdots \delta(\beta_N - \alpha_N)] \\
&+ \cdots + \varepsilon^{N-1} \delta(\gamma - \alpha_N) \sum_{\mathcal{P}_\alpha} \varepsilon^{\mathcal{P}_\alpha} \mathcal{P}_\alpha [\delta(\beta_2 - \alpha_1) \cdots \delta(\beta_N - \alpha_{N-1})] \left. \right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} [\delta(\gamma - \alpha_1) \langle \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | \varphi_{\alpha_2} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle + \varepsilon \delta(\gamma - \alpha_2) \langle \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | \varphi_{\alpha_1} \varphi_{\alpha_3} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle \\
&+ \cdots + \varepsilon^{N-1} \delta(\gamma - \alpha_N) \langle \varphi_{\beta_2} \cdots \varphi_{\beta_N} | \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_{N-1}} \rangle]. \tag{2.26}
\end{aligned}$$

进而我们可以推断

$$\begin{aligned}
a_\gamma | \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} [\delta(\gamma - \alpha_1) | \varphi_{\alpha_2} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle + \varepsilon \delta(\gamma - \alpha_2) | \varphi_{\alpha_1} \varphi_{\alpha_3} \cdots \varphi_{\alpha_N} \rangle \\
&+ \cdots + \varepsilon^{N-1} \delta(\gamma - \alpha_N) | \varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_{N-1}} \rangle]. \tag{2.27}
\end{aligned}$$

这表明如果 $|\varphi_\gamma\rangle$ 与组成 N -粒子态 $|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)}$ 的单粒子态 $|\varphi_{\alpha_1}\rangle$ 到 $|\varphi_{\alpha_N}\rangle$ 其中之一相符, 那么 a_γ 的作用将会产生一个不存在 $|\varphi_\gamma\rangle$ 态的 $(N-1)$ -粒子态; 如果 $|\varphi_\gamma\rangle$ 不在组成 N -粒子态的单粒子态中, 那么 a_γ 的作用将会让原粒子态消失. 特别的, 对于真空态我们有

$$a_\gamma |0\rangle = 0. \tag{2.28}$$

利用我们得到的 a_γ 对任意多粒子态的作用, 我们不难直接计算得到产生湮灭算符之间的对易关系:

$$a_\beta a_\gamma^\dagger - \varepsilon a_\gamma^\dagger a_\beta = \delta(\beta - \gamma), \tag{2.29}$$

亦即对玻色子而言

$$[a_\beta, a_\gamma^\dagger] = \delta(\beta - \gamma), \tag{2.30}$$

而费米子则有

$$\{a_\beta, a_\gamma^\dagger\} = \delta(\beta - \gamma). \tag{2.31}$$

因此, 我们可以通过产生湮灭算符对真空态的作用来产生任意无相互作用的全同多粒子态, 并且我们可以根据对易关系来改变算符的排序.

可观测量也可以被产生湮灭算符表示. 我们选择的无相互作用多粒子态的完备性表明任意算符 A 都可以被写成

$$\begin{aligned}
A &= \int d\alpha_1 d\beta_1 \cdots d\alpha_N d\beta_N | \varphi_{\alpha_1} \cdots \rangle \langle \varphi_{\alpha_1} \cdots | A | \varphi_{\beta_1} \cdots \rangle \langle \varphi_{\beta_1} \cdots | \\
&= \frac{1}{N!} \int d\alpha_1 d\beta_1 \cdots d\alpha_N d\beta_N a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle \langle \varphi_{\alpha_1} \cdots | A | \varphi_{\beta_1} \cdots \rangle \langle 0 | a_{\beta_N} \cdots a_{\beta_1}. \tag{2.32}
\end{aligned}$$

我们可以先假设算符 A 仅包含单粒子部分和两粒子相互作用部分

$$A = \sum_{i=1}^N A_1^{(i)} + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} A_2^{(i,j)}, \tag{2.33}$$

那么我们不难得到单粒子部分的矩阵元为

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\alpha_1} \cdots | A | \varphi_{\beta_1} \cdots \rangle^{(\varepsilon)} &= \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}_\beta} \varepsilon^{\mathcal{P}_\beta} \mathcal{P}_\beta [\langle \varphi_{\alpha_1}^{(1)} | A_1^{(1)} | \varphi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \langle \varphi_{\alpha_2}^{(2)} | \varphi_{\beta_2}^{(2)} \rangle \cdots \langle \varphi_{\alpha_N}^{(N)} | \varphi_{\beta_N}^{(N)} \rangle + \cdots \\ &+ \langle \varphi_{\alpha_1}^{(1)} | \varphi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \cdots \langle \varphi_{\alpha_N}^{(N)} | A_1^{(N)} | \varphi_{\beta_N}^{(N)} \rangle]. \end{aligned} \quad (2.34)$$

将这一表达式代入 (2.32) 并整理表达式, 我们会发现

$$\sum_{i=1}^N A_1^{(i)} = \int d\alpha d\beta \langle \varphi_\alpha | A_1 | \varphi_\beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta. \quad (2.35)$$

类似的, 对两粒子相互作用算符的分析会给出

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} A_2^{(i,j)} = \frac{1}{2} \int d\alpha d\beta d\gamma d\delta \langle \varphi_\alpha^{(1)} | \langle \varphi_\beta^{(2)} | A_2 | \varphi_\gamma^{(1)} \rangle | \varphi_\delta^{(2)} \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta. \quad (2.36)$$

我们这里得到的结果是直观自然的并且可以直接被推广到 n -粒子相互作用算符:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{n!} \sum_{i_1 \cdots i_n}^{i_k \neq i_\ell} A_n^{(i_1, \cdots, i_n)} \\ &= \frac{1}{n!} \int d\alpha_1 \cdots d\alpha_n d\beta_1 \cdots d\beta_n \langle \varphi_{\alpha_1}^{(1)} | \cdots \langle \varphi_{\alpha_n}^{(n)} | A_n | \varphi_{\beta_1}^{(1)} \rangle \cdots | \varphi_{\beta_n}^{(n)} \rangle a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_n}^\dagger a_{\beta_1} \cdots a_{\beta_n}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

这也就是说, 为了用产生湮灭算符改写 Fock 空间上的任意算符, 我们只需要计算这个算符在各个单粒子直积态上的矩阵元. 当我们计算这个算符在由产生湮灭算符作用在真空态上得到的全同多粒子态间的矩阵元 $\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle$ 时, 算符组合 $a_{\alpha_1}^\dagger \cdots a_{\alpha_n}^\dagger a_{\beta_1} \cdots a_{\beta_n}$ 会数出矩阵元 $\langle \varphi_{\alpha_1} | \cdots \langle \varphi_{\alpha_n} | A_n | \varphi_{\beta_1} \rangle \cdots | \varphi_{\beta_n} \rangle$ 在 $\langle \psi_\alpha | A | \psi_\beta \rangle$ 的表达式中的系数.

现在我们便发现原先繁琐的对多全同粒子态的构造过程可以被换成产生湮灭算符对真空态 $|0\rangle$ 的作用, 而粒子的统计性质体现在了产生湮灭算符的对易关系中. 同时, 我们可以用产生湮灭算符来表示系统的可观测量, 而在此过程中我们只需要直截了当地计算个别矩阵元. 我们也可以反其道而行之, 认为真空态和产生湮灭算符是一个组成量子多体系统的 Fock 空间的基本元素, 那么我们便可以直接用产生湮灭算符来构造系统的哈密顿量并研究其中的物理.

我们可以利用产生湮灭算符构造出两个重要的算符:

- 占有数密度算符:

$$n_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha, \quad (2.38)$$

这一算符给出了多粒子态 $|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle$ 中本征值为 α 的态的占有数密度:

$$n_\alpha |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle = \left(\sum_{i=1}^N \delta(\alpha - \alpha_i) \right) |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle. \quad (2.39)$$

- 粒子数算符:

$$\hat{N} = \int d\alpha n_\alpha = \int d\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha. \quad (2.40)$$

我们有

$$\hat{N} |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle = N |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle. \quad (2.41)$$

我们在构造连续 Fock 空间时仅一般性地假设了 $|\varphi_\alpha\rangle$ 是某个算符 $\hat{\psi}$ 的本征值为 φ_α 的连续本征态, 而一个具体的例子便是位置算符 $\hat{\mathbf{r}}$. 此时位置算符对应的产生湮灭算符便是场算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$. 此时我们有

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')]_{-\varepsilon} = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\varepsilon} = 0, \quad (2.42)$$

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{-\varepsilon} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.43)$$

并且

$$|\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \cdots \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_N) |0\rangle. \quad (2.44)$$

为了建立场算符与一般的产生湮灭算符的关系, 我们可以考虑一个一般的算符的连续本征态 $|\varphi_\alpha\rangle$, 那么我们有

$$|\varphi_\alpha\rangle = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \varphi_\alpha\rangle = \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle. \quad (2.45)$$

由于 $|\varphi_\alpha\rangle = a_\alpha^\dagger |0\rangle$ 而 $|\mathbf{r}\rangle = \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) |0\rangle$, 我们便有

$$|\varphi_\alpha\rangle = \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) |0\rangle, \quad (2.46)$$

进而

$$a_\alpha^\dagger = \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \quad a_\alpha = \int d\mathbf{r} \varphi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}). \quad (2.47)$$

注意这里 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 是算符, 而 φ_α 是态 $|\varphi_\alpha\rangle$ 对应的标量波函数. 我们也可以反过来考虑这个问题: 如果我们已知了一组好的连续本征态 $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$ 并确定了与之对应的产生湮灭算符 $a_\alpha, a_\alpha^\dagger$, 那么我们可以利用

$$|\mathbf{r}\rangle = \int d\alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha | \mathbf{r}\rangle \quad (2.48)$$

而反过来把场算符写成

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \int d\alpha \varphi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}) a_\alpha^\dagger, \quad \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \int d\alpha \varphi_\alpha(\mathbf{r}) a_\alpha. \quad (2.49)$$

可以看到, 这正是我们在高能物理中的做法: 高能物理中会把 $|\varphi_\alpha\rangle$ 取成时空平移群的本征态 (即动量本征态), 故此时 $\varphi_p(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$, 将其代入表达式后恰好可以得到我们熟悉的场算符的定义. 在更一般的情况下系统的对称群并非平移群, 那么我们便可以将 $|\varphi_\alpha\rangle$ 取成相应对称群的本征态并构造出与系统对称性相适应的场算符表达式.

我们来考虑一个具体例子: 通过 $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ 两两相互作用的无自旋全同粒子系拥有哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} V(|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|). \quad (2.50)$$

我们的系统拥有空间平移对称性, 因此一个好的选择是取 $|\varphi_\alpha\rangle \equiv |\mathbf{p}\rangle$ 为动量本征态, 进而对应的产生湮灭算符记为 $a_{\mathbf{p}}^\dagger, a_{\mathbf{p}}$. 于是动能项可以被产生湮灭算符表示为

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_i^2 \Rightarrow \frac{1}{2m} \int d\mathbf{p} d\mathbf{q} \langle \mathbf{p} | \hat{p}_i^2 | \mathbf{q} \rangle a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{p} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}, \quad (2.51)$$

而相互作用项则为

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} V(|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|) \Rightarrow \frac{1}{2} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \left\langle \mathbf{p}_1^{(1)} \mathbf{p}_2^{(2)} \left| V(|\hat{\mathbf{r}}^{(1)} - \hat{\mathbf{r}}^{(2)}|) \right| \mathbf{q}_1^{(1)} \mathbf{q}_2^{(2)} \right\rangle a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2}. \quad (2.52)$$

注意到

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{p}_1^{(1)} \mathbf{p}_2^{(2)} \left| V(|\hat{\mathbf{r}}^{(1)} - \hat{\mathbf{r}}^{(2)}|) \right| \mathbf{q}_1^{(1)} \mathbf{q}_2^{(2)} \right\rangle &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \langle \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 | \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \rangle \langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2 \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) e^{i\mathbf{r}_1(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) + i\mathbf{r}_2(\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2)} \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{R} V(|\mathbf{R}|) e^{i\mathbf{R}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) + i\mathbf{r}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \int d\mathbf{R} V(|\mathbf{R}|) e^{i\mathbf{R}(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1)} \\ &= \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) V(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1). \end{aligned} \quad (2.53)$$

于是

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{i \neq j} V(|\hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j|) &\Rightarrow \frac{1}{2} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 \delta(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) V(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) a_{\mathbf{p}_1}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2} \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{p}_2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 V(\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}_2) a_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2} \\ &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{p}_2 d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 V(\mathbf{p}_2) a_{\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_2}^\dagger a_{\mathbf{p}_2 + \mathbf{q}_2}^\dagger a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_2}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

原哈密顿量便能被产生湮灭算符写作

$$\hat{H} = \int d\mathbf{k} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{k} d\mathbf{p} d\mathbf{q} V(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}}. \quad (2.55)$$

根据我们对场算符的定义, 此时

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}^\dagger, \quad \hat{\psi}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} a_{\mathbf{p}}, \quad (2.56)$$

那么这一哈密顿量还能被写成

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\mathbf{r} - \frac{1}{2m} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla_r \hat{\psi}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.57)$$

2.3 离散 Fock 表示

现在我们假设 $|\varphi_\alpha\rangle$ 是某个算符 $\hat{\varphi}$ 的离散本征态, 满足

$$\hat{\varphi}|\varphi_\alpha\rangle = \varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle, \quad (2.58)$$

$$\langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.59)$$

$$\sum_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha| = \mathbb{1}. \quad (2.60)$$

此时我们构造全同多粒子态的方式与前面大致相同, 唯独我们暂时无法确定归一化系数 C_ε :

$$|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = C_\varepsilon \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left| \varphi_{\alpha_1}^{(1)} \right\rangle \cdots \left| \varphi_{\alpha_N}^{(N)} \right\rangle. \quad (2.61)$$

对于 $\varepsilon = -1$ 的费米子, 我们发现上式可以被写作 Slater 行列式:

$$|\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(-)} = C_- \begin{vmatrix} \left| \varphi_{\alpha_1}^{(1)} \right\rangle & \left| \varphi_{\alpha_1}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left| \varphi_{\alpha_1}^{(N)} \right\rangle \\ \left| \varphi_{\alpha_2}^{(1)} \right\rangle & \left| \varphi_{\alpha_2}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left| \varphi_{\alpha_2}^{(N)} \right\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \left| \varphi_{\alpha_N}^{(1)} \right\rangle & \left| \varphi_{\alpha_N}^{(2)} \right\rangle & \cdots & \left| \varphi_{\alpha_N}^{(N)} \right\rangle \end{vmatrix}. \quad (2.62)$$

可以看到, 如果两个态的量子数相同 ($\alpha_i = \alpha_j$), 那么 Slater 行列式中将会有两行相等, 进而其值为零. 这便反映了 Pauli 不相容原理.

为了计算归一化系数 C_ε , 我们可以考虑态 $|\varphi_{\alpha_i}\rangle$ 在全同多粒子态 $|\varphi_{\alpha_1} \cdots\rangle^{(\varepsilon)}$ 中出现的次数 (占有数) n_i , 那么我们有

$$\sum_i n_i = N. \quad (2.63)$$

同时 $\langle\varphi_N^{(\varepsilon)}|\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle = 1$ 要求

$$\begin{aligned} 1 &= C_\varepsilon \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \langle\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}|\mathcal{P}^\dagger|\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle = N! C_\varepsilon \langle\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}|\varphi_N^{(\varepsilon)}\rangle \\ &= N! C_\varepsilon^2 \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \langle\varphi_{\alpha_1}^{(1)}|\cdots\langle\varphi_{\alpha_N}^{(N)}|\mathcal{P}[\left|\varphi_{\alpha_1}^{(1)}\right\rangle\cdots\left|\varphi_{\alpha_N}^{(N)}\right\rangle] \end{aligned} \quad (2.64)$$

对费米子而言非平凡的多粒子态中各态两两互异, 进而只有 $\mathcal{P} = \mathbb{1}$ 对求和有贡献, 并且我们有

$$C_- = \frac{1}{\sqrt{N!}}. \quad (2.65)$$

对于玻色子, 对求和有贡献的是重排了 n_i 个等价单粒子态 $|\varphi_{\alpha_i}\rangle$ 的排列, 进而我们有

$$C_+ = \left(N! \prod_i n_i! \right)^{-1/2}. \quad (2.66)$$

可以发现, 离散的无相互作用全同多粒子态可以通过明确各个态的占有数而得到等价的刻画, 而这给出了占有数表象中的 Fock 态

$$|N; n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle^{(\varepsilon)} = |\varphi_{\alpha_1} \cdots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} = C_\varepsilon \sum_{\mathcal{P}} \varepsilon^{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left[\underbrace{\left|\varphi_{\alpha_1}^{(1)}\right\rangle \left|\varphi_{\alpha_1}^{(2)}\right\rangle \cdots}_{n_1} \cdots \underbrace{\left|\varphi_{\alpha_i}^{(p)}\right\rangle \left|\varphi_{\alpha_i}^{(p+1)}\right\rangle \cdots}_{n_i} \right]. \quad (2.67)$$

在此表象下, 两个态只有在总粒子数和各能级占有数均相同时才一致:

$$\langle N; \dots n_i \dots | \bar{N}; \dots \bar{n}_i \dots \rangle = \delta_{N\bar{N}} \prod_i \delta_{n_i \bar{n}_i}, \quad (2.68)$$

而在 $\mathcal{H}_N^{(\varepsilon)}$ 上的完备性关系则为

$$\sum_{n_1} \dots \sum_{n_i} \dots |N; \dots n_i \dots \rangle \langle N; \dots n_i \dots| = \mathbb{1}_N. \quad (2.69)$$

其中求和满足约束 $\sum_i n_i = N$.

我们此时仍定义产生算符为

$$\begin{aligned} a_r^\dagger |\varphi_{\alpha_1} \dots \varphi_{\alpha_N}\rangle^{(\varepsilon)} &= \sqrt{n_r + 1} \left| \varphi_{\alpha_r} \underbrace{\varphi_{\alpha_1} \dots}_{n_1} \dots \underbrace{\varphi_{\alpha_r} \dots}_{n_r} \dots \right\rangle \equiv a_r^\dagger |N; \dots n_r \dots\rangle^{(\varepsilon)} \\ &= \varepsilon^{N_r} \sqrt{n_r + 1} |N + 1; \dots n_r + 1 \dots\rangle^{(\varepsilon)}, \end{aligned} \quad (2.70)$$

其中

$$N_r = \sum_{i=1}^{r-1} n_i. \quad (2.71)$$

进而玻色子满足

$$a_r^\dagger |N; \dots n_r \dots\rangle = \sqrt{n_r + 1} |N + 1; \dots n_r + 1 \dots\rangle. \quad (2.72)$$

而费米子则满足

$$a_r^\dagger |N; \dots n_r \dots\rangle = (-1)^{N_r} \delta_{n_r, 0} |N + 1; \dots n_r + 1 \dots\rangle. \quad (2.73)$$

多粒子 Fock 态便可以由产生算符对真空态的作用产生:

$$|N; n_1 \dots\rangle^{(\varepsilon)} = \prod_{p=1 \dots}^{\sum n_p = N} \frac{1}{\sqrt{n_p!}} (a_p^\dagger)^{n_p} \varepsilon^{N_p} |0\rangle. \quad (2.74)$$

取共轭即可推知湮灭算符的作用:

$$a_r |N; \dots n_r \dots\rangle^{(\varepsilon)} = \varepsilon^{N_r} \sqrt{n_r} |N - 1; \dots n_r - 1 \dots\rangle, \quad (2.75)$$

于是玻色子满足

$$a_r |N; \dots n_r \dots\rangle = \sqrt{n_r} |N - 1; \dots n_r - 1 \dots\rangle. \quad (2.76)$$

而费米子则满足

$$a_r |N; \dots n_r \dots\rangle = (-1)^{N_r} \delta_{n_r, 1} |N - 1; \dots n_r - 1 \dots\rangle. \quad (2.77)$$

进而我们可以得到离散 Fock 表示中产生湮灭算符的对易关系:

$$[a_r, a_s]_{-\varepsilon} = [a_r^\dagger, a_s^\dagger]_{-\varepsilon} = 0, \quad [a_r, a_s^\dagger]_{-\varepsilon} = \delta_{rs}. \quad (2.78)$$

采取和连续 Fock 表示中相同的直观, 我们仍旧可以用产生湮灭算符表示 n -粒子相互作用算符:

$$\frac{1}{n!} \sum_{i_1 \dots i_n}^{i_k \neq i_\ell} A_n^{(i_1, \dots, i_n)} = \frac{1}{n!} \sum_{\alpha_i, \beta_i} \langle \varphi_{\alpha_1} | \dots \langle \varphi_{\alpha_n} | A_n | \varphi_{\beta_1} \rangle \dots | \varphi_{\beta_n} \rangle a_{\alpha_1}^\dagger \dots a_{\alpha_n}^\dagger a_{\beta_1} \dots a_{\beta_n}. \quad (2.79)$$

此时占有数算符仍为

$$\hat{n}_r = a_r^\dagger a_r, \quad (2.80)$$

而总粒子数算符为

$$\hat{N} = \sum_r \hat{n}_r. \quad (2.81)$$

2.4 近独立粒子系的统计

现在我们可以考虑由 $N \gg 1$ 个无相互作用全同玻色子或费米子组成的系统, 其 Hamilton 量为

$$H = \sum_{i=1}^N H_1^{(i)}. \quad (2.82)$$

我们假设单粒子 Hamilton 算符 $H_1^{(i)}$ 拥有离散且非简并的谱, 即

$$H_1^{(i)} \left| \varphi_r^{(i)} \right\rangle = \varepsilon_r \left| \varphi_r^{(i)} \right\rangle, \quad \left\langle \varphi_r^{(i)} \right| \varphi_s^{(i)} \right\rangle = \delta_{rs}, \quad (2.83)$$

那么我们可以用这些本征态来构造多粒子 Fock 空间的基底 $|N; n_1, n_2, \dots\rangle^{(\varepsilon)}$. 我们考虑粒子数不确定的巨正则系综, 那么系统的状态便可以由如下未归一化的密度矩阵所描述:

$$\rho = \exp \left[-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N}) \right]. \quad (2.84)$$

记产生湮灭算符为 a_r^\dagger, a_r , 那么显然二次量子化后 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \sum_r \varepsilon_r a_r^\dagger a_r. \quad (2.85)$$

注意到

$$\hat{N} = \sum_r a_r^\dagger a_r, \quad (2.86)$$

我们便有

$$\rho = \prod_r \exp \left[-\beta(\varepsilon_r - \mu) a_r^\dagger a_r \right] = \prod_r \exp \left[-\beta(\varepsilon_r - \mu) \hat{n}_r \right]. \quad (2.87)$$

巨正则配分函数便为

$$\begin{aligned} \Xi(V, T, \mu) &= \text{Tr } \rho = \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} \langle N; n_1, \dots | \rho | N; n_1, \dots \rangle \\ &= \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} \prod_r \exp \left[-\beta(\varepsilon_r - \mu) n_r \right] \\ &= \sum_{n_1, n_2, \dots} \prod_r \exp \left[-\beta(\varepsilon_r - \mu) n_r \right] = \prod_r \left(\sum_{n_r} \exp \left[-\beta(\varepsilon_r - \mu) n_r \right] \right). \end{aligned} \quad (2.88)$$

对于玻色子, 我们有

$$\Xi_+(V, T, \mu) = \prod_r \left(\sum_{n_r=0}^{\infty} \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)n_r] \right) = \prod_r \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}}; \quad (2.89)$$

对于费米子, 其巨配分函数便为

$$\Xi_-(V, T, \mu) = \prod_r \left(\sum_{n_r=0}^1 \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)n_r] \right) = \prod_r (1 + e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)}). \quad (2.90)$$

粒子数的期望值为

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr}(\rho \hat{N}) = \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} \sum_r \langle N; n_1, \dots | \rho \hat{n}_r | N; n_1, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} \prod_r \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)n_r] = \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)} \ln \Xi(V, T, \mu). \end{aligned} \quad (2.91)$$

因而玻色子的粒子数期望为

$$\langle N_+ \rangle = \sum_r \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} - 1}, \quad (2.92)$$

而费米子的粒子数期望为

$$\langle N_- \rangle = \sum_r \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}. \quad (2.93)$$

类似的, 能量期望为

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr}(\rho H) = \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} \left(\sum_r n_r \varepsilon_r \right) \prod_r \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)n_r] \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \Xi, \end{aligned} \quad (2.94)$$

故玻色子能量期望为

$$\langle H_+ \rangle = \sum_r \frac{\varepsilon_r}{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} - 1}, \quad (2.95)$$

费米子的为

$$\langle H_- \rangle = \sum_r \frac{\varepsilon_r}{e^{-\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}. \quad (2.96)$$

我们还可以考虑能级- i 的粒子数期望

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \frac{1}{\Xi} \text{Tr}(\rho \hat{n}_i) = \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_{n_1, n_2, \dots}^{n_1 + n_2 + \dots = N} n_i \prod_r \exp[-\beta(\varepsilon_r - \mu)n_r] \\ &= -\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_i)} \ln \Xi, \end{aligned} \quad (2.97)$$

显然

$$\langle n_{i,\pm} \rangle = \frac{1}{e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \mp 1}. \quad (2.98)$$

3 多体系统

现在我们来考虑一些来自固体理论的多体系统. 固体由原子组成, 每个原子都有一个带正电的原子核和周围带负电的电子云. 而固体中的原子内会有一些电子 (一般是闭壳层内的电子) 和原子核紧密结合并定域在其附近, 我们称之为核电子, 这些电子几乎不会对固体性质带来显著影响; 另一些电子 (一般是开壳层内的电子) 只和由核电子和原子核组成的格点离子有微弱的相互作用并对固体的性质起主要影响, 我们称这些电子为价电子. 进而, 一个固体的哈密顿量将包含三个部分:

$$H = H_e + H_i + H_{ei}. \quad (3.1)$$

H_e 为电子子系统的哈密顿量:

$$H_e = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j}^{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \equiv H_{e, \text{kin}} + H_{ee}, \quad (3.2)$$

其中 N_e 是价电子数, 第一项是电子的动能项, 第二项是电子间的 Coulomb 相互作用项.

H_i 是离子子系统的哈密顿量:

$$H_i = \sum_{\alpha=1}^{N_i} \frac{p_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta}^{\alpha \neq \beta} V_i(\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}) \equiv H_{i, \text{kin}} + H_{ii}. \quad (3.3)$$

我们现在暂不能也暂不需要明确离子-离子相互作用的形式, 不过其总是两两相互作用. 离子间的相互作用对离子的平衡位置 $\mathbf{R}_{\alpha}^{(0)}$ 有一定贡献, 进而让离子在平衡时形成了严格的周期性晶格. 真实情况下, 粒子会在平衡位置附近振荡, 并且其振动能量是量子化的, 对应的激发态叫声子. 进而我们可以将 H_{ii} 进一步分解成

$$H_{ii} = H_{ii}^{(0)} + H_p, \quad (3.4)$$

第一项与固体中离子的成键有关, 第二项则刻画了声子的动力学.

两个子系统间的相互作用项为

$$H_{ei} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{\alpha}). \quad (3.5)$$

我们同样可以将这一项分成两部分:

$$H_{ei} = H_{ei}^{(0)} + H_{e-p}, \quad (3.6)$$

其中 $H_{ei}^{(0)}$ 代表了电子与平衡位置原子的相互作用, H_{e-p} 则是电子-声子相互作用项.

显然我们不可能精确解析求解这样一个系统, 而一般的近似解法通常分为三步:

1. 求解刚性离子晶格内的电子运动.
2. 求解得到的电子背景中的离子运动.
3. 考虑电子和声子的耦合, 并利用微扰论计算其影响.

3.1 晶体中的电子

3.1.1 Bloch 电子

我们先来考虑在刚性晶格造成的周期势场中不存在相互作用的电子, 即考虑哈密顿量

$$H_0 = H_{\text{e, kin}} + H_{\text{ei}}^{(0)}. \quad (3.7)$$

晶格势由固定在平衡位置处的原子给出:

$$\hat{V}(\mathbf{r}_i) = \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{\alpha}^{(0)}). \quad (3.8)$$

特别的, 我们有

$$\mathbf{R}_{\alpha}^{(0)} = \mathbf{R}_s^n = \mathbf{R}^n + \mathbf{R}_s, \quad \mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3); \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad (3.9)$$

其中 \mathbf{R}^n 给出了 Bravais 格子

$$\mathbf{R}^n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i. \quad (3.10)$$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是张成 Bravais 格子的三个基矢, \mathbf{R}_s 为初始的原胞中原子 s 的位矢. Bravais 格子的周期性便会导致

$$\hat{V}(\mathbf{r}_i + \mathbf{R}^n) = \hat{V}(\mathbf{r}_i), \quad (3.11)$$

并且 $H_{\text{ei}}^{(0)}$ 项便为

$$H_{\text{ei}}^{(0)} = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}_i). \quad (3.12)$$

由于此时 N_e 个电子间完全脱耦, 我们可以仅考虑单电子哈密顿量

$$h_0 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) \quad (3.13)$$

并求解对应的本征值问题

$$h_0 |\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon(\mathbf{k}) |\psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (3.14)$$

其中 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$ 叫 Bloch 函数, $\varepsilon(\mathbf{k})$ 为 Bloch 能量, \mathbf{k} 为第一 Brillouin 区内的 Bloch 波矢. 根据 Bloch 定理, $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}^n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}^n} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, 我们便可以采用如下拟式

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

其中 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 是 Bravais 格子的周期性函数. Bloch 波函数对 \mathbf{r} 和 \mathbf{k} 指标都是正交归一的:

$$\int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad \sum_{\mathbf{k}}^{\text{1 BZ}} \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.16)$$

其中对 Bloch 波矢的求和在第一 Brillouin 区内. 由于 h_0 不包含自旋相关项, 因此其本征态的自旋态和位形空间里的态是脱耦的; 我们于是可以记一个 Bloch 本征态为 $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$, 并且

$$\psi_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \chi_{\sigma}, \quad \chi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

如果我们考虑不同能带中的电子, 那边 Bloch 函数还依赖于能带指标 n ; 不过我们此处仅考虑单个能带中的电子.

按照二次量子化的精神, 我们现在便可以定义无相互作用的 Bloch 电子的产生湮灭算符 $a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ 和 $a_{\mathbf{k},\sigma}$, 并且我们可以写出 Fock 空间上这一多体系统的哈密顿量

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \langle \mathbf{k}, \sigma | h_0 | \mathbf{k}', \sigma' \rangle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}',\sigma'} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (3.18)$$

鉴于电子是费米子, 其产生湮灭算符便应该满足反对易关系

$$\{a_{\mathbf{k},\sigma}, a_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = \{a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger\} = 0, \quad \{a_{\mathbf{k},\sigma}, a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (3.19)$$

如果我们忽略晶格结构并把离子抹匀为一个均匀的带正电的背景, 那么 Bloch 函数将变成平面波

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.20)$$

而 Bloch 能量将变成电子的动能

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \Rightarrow \frac{\mathbf{k}^2}{2m}. \quad (3.21)$$

我们前面已经提过, 场算符也是一对产生湮灭算符, 因此我们也可以用 $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 来刻画 Fock 空间上的哈密顿量. 二者满足反对易关系

$$\{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (3.22)$$

我们不难得到

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}, \sigma | h_0 | \mathbf{r}', \sigma' \rangle \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \\ &= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla_r^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.23)$$

还有一类常用的构成 Fock 空间完备基的函数为 Wannier 函数

$$\omega_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{\mathbf{k}}^{1\text{ BZ}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \psi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}). \quad (3.24)$$

这样一个函数会强烈集中于格点 \mathbf{R}_i 附近. 利用 (3.16), 我们不难得到其正交归一性

$$\int d\mathbf{r} \omega_\sigma^\dagger(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \omega_{\sigma'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{i,j}. \quad (3.25)$$

记 Wannier 态 $|i, \sigma\rangle$ 使得 $\omega_\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \langle \mathbf{r} | i, \sigma \rangle$, 我们便可以定义出这样的态在 Fock 空间中对应的产生 (湮灭) 算符 $a_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$), 其代表产生 (湮灭) 了一个定域在离子 \mathbf{R}_i 附近的电子. 此时哈密顿量形如

$$H_0 = \sum_{i,j,\sigma} T_{i,j} a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}, \quad (3.26)$$

这直观上刻画了一个自旋 σ 的电子从格点 \mathbf{R}_i 处跳到了格点 \mathbf{R}_j 处, 对应的 $T_{i,j}$ 也因而得名"跳跃积分". 考虑到

$$\begin{aligned}\langle i, \sigma | h_0 | j, \sigma' \rangle &= \delta_{\sigma, \sigma'} \langle i, \sigma | h_0 | j, \sigma \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \rho} \langle i, \sigma | h_0 | \mathbf{k}, \rho \rangle \langle \mathbf{k}, \rho | j, \sigma \rangle \\ &= \delta_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{k}, \rho} \varepsilon(\mathbf{k}) \langle i, \sigma | \mathbf{k}, \rho \rangle \langle \mathbf{k}, \rho | j, \sigma \rangle.\end{aligned}\quad (3.27)$$

由于

$$|i, \sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i} |\mathbf{k}', \sigma\rangle, \quad (3.28)$$

我们便有

$$\begin{aligned}\langle i, \sigma | h_0 | j, \sigma' \rangle &= \delta_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{N_i} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \rho} e^{-i(\mathbf{k}_2\mathbf{R}_j - \mathbf{k}_1\mathbf{R}_i)} \varepsilon(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma, \rho} \\ &= \frac{\delta_{\sigma, \sigma'}}{N_i} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}.\end{aligned}\quad (3.29)$$

于是

$$T_{i,j} = \frac{1}{N_i} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (3.30)$$

同时

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_i} \sum_{i,j} T_{i,j} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.31)$$

我们同时不难得到 Bloch 产生湮灭算符与 Wannier 产生湮灭算符间的关系:

$$a_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{i=1}^{N_i} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{i, \sigma}, \quad (3.32)$$

$$a_{i, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_i}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (3.33)$$

易验证 Wannier 产生湮灭算符符合通常的正则反对易关系.

3.1.2 Jellium 模型

Jellium 可以比较好地描述一大类简单金属, 其基于如下假设:

- 体积 $V = L^3$ 内的 N_e 个电子通过 Coulomb 势相互作用:

$$H_{ee} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i,j}^{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3.34)$$

- 固体中的离子带单位正电荷, 进而

$$N_e = N_i = N. \quad (3.35)$$

- 离子被抹匀为了一个均匀的背景, 因此晶格势是一个常数, 此时 Bloch 波函数便是平面波:

$$\psi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \chi_{\sigma}. \quad (3.36)$$

- Bloch 波函数满足周期性边界条件, 于是

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z), \quad n_{x,y,z} \in \mathbb{Z}. \quad (3.37)$$

二次量子化前系统的哈密顿量为

$$H = H_e + H_+ + H_{e+}, \quad (3.38)$$

其中

$$H_e = H_{e,\text{kin}} + H_{ee} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j}^{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (3.39)$$

H_+ 为背景正离子的哈密顿量. 记正离子密度为 $n(\mathbf{r})$, 那么我们便有

$$H_+ = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad \alpha \rightarrow 0^+. \quad (3.40)$$

对 Jellium 模型而言

$$n(\mathbf{r}) = \frac{N}{V} \quad (3.41)$$

是一个常数, 这会使我们在直接计算 H_+ 的积分时得到发散的结果. $e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ 一项便是积分的正规化因子. 直接计算可以得到

$$\begin{aligned} H_+(\alpha) &= \frac{e^2 N^2}{8\pi\epsilon_0 V^2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{e^2 N^2}{8\pi\epsilon_0 V^2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{R} \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|} \\ &= \frac{e^2 N^2}{2\epsilon_0 V} \int_0^\infty dr r e^{-\alpha r} = \frac{e^2 N^2}{2\epsilon_0 V \alpha^2}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

进而我们可以将这一项对应的 Hamilton 算符写作

$$H_+ = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 V} \frac{4\pi}{\alpha^2} \hat{N}^2, \quad (3.43)$$

这和总粒子数算符有关. 虽然 H_+ 在 $\alpha \rightarrow 0$ 时会发散, 但我们会期待这种发散性会在最终得到的可观测量中被消去.

类似的, 我们也需要在电子-离子相互作用项的积分中引入正规化因子并得到

$$H_{e+} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \frac{n(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|} e^{-\alpha|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{N}{V} \sum_{i=1}^N \int d\mathbf{r} \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V} \frac{4\pi}{\alpha^2} \hat{N}^2. \quad (3.44)$$

Jellium 模型的总 Hamilton 算符便为

$$H = H_{e,\text{kin}} + H_{ee} - \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\pi}{\alpha^2} \frac{\hat{N}^2}{V}. \quad (3.45)$$

我们选择 Bloch 波函数构成 Fock 空间的基底, 那么此时 Jellium 模型经过二次量子化后的哈密顿量便由以下部分组成:

$$H_{e,\text{kin}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (3.46)$$

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_4} v(\mathbf{k}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{k}_4, \sigma_4) a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_3, \sigma_3} a_{\mathbf{k}_4, \sigma_4}, \quad (3.47)$$

$$-\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V} \frac{4\pi}{\alpha^2} \hat{N}^2 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V} \frac{4\pi}{\alpha^2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^\dagger a_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}. \quad (3.48)$$

其中

$$\begin{aligned} v(\mathbf{k}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{k}_4, \sigma_4) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \mathbf{k}_1, \sigma_1, (1); \mathbf{k}_2, \sigma_2, (2) | \frac{1}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|} | \mathbf{k}_3, \sigma_3, (1); \mathbf{k}_4, \sigma_4, (2) \rangle \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V^2} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{i\mathbf{r}_1(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) + i\mathbf{r}_2(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_2)} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V^2} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \int d\mathbf{r} d\mathbf{R} \frac{1}{|\mathbf{r}|} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)} e^{i\mathbf{R}(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V^2} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \int d\mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r}|} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

此时我们仍需要正规化因子来计算这个积分:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r}|} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1)} e^{-\alpha|\mathbf{r}|} &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr r \sin\theta e^{-\alpha r + i\mathbf{r}|\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1| \cos\theta} \\ &= \frac{4\pi}{|\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1|} \int_0^\infty dr \sin(r|\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1|) e^{-\alpha r} \\ &= \frac{4\pi}{\alpha^2 + |\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1|^2}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

于是

$$\begin{aligned} v(\mathbf{k}_1, \sigma_1; \dots; \mathbf{k}_4, \sigma_4) &= \frac{e^2}{\epsilon_0 V^2 (|\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1|^2 + \alpha^2)} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \\ &= \frac{e^2}{\epsilon_0 V (|\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1|^2 + \alpha^2)} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

其中我们利用了

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}}. \quad (3.52)$$

二次量子化后的电子 Coulomb 相互作用 Hamilton 量便为

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} v_{\alpha}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'} a_{\mathbf{q}, \sigma}, \quad (3.53)$$

其中

$$v_\alpha(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V (|\mathbf{q}|^2 + \alpha^2)}. \quad (3.54)$$

Coulomb 相互作用中 $\mathbf{q} = 0$ 一项的贡献为

$$\begin{aligned} & \frac{e^2}{2\varepsilon_0 V \alpha^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'} a_{\mathbf{q}, \sigma} = -\frac{e^2}{2\varepsilon_0 V \alpha^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{p}, \sigma'} \\ & = -\frac{e^2}{2\varepsilon_0 V \alpha^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger (\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} \delta_{\sigma, \sigma'} - a_{\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{p}, \sigma'}^\dagger) a_{\mathbf{p}, \sigma'} \\ & = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 V \alpha^2} [-\hat{N} + (\hat{N})^2]. \end{aligned} \quad (3.55)$$

可以看到, 这一项恰好抵消掉了前面的发散项. 我们最终得到了 Jellium 模型二次量子化后的哈密顿量

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'}^{q \neq 0} v_\alpha(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'} a_{\mathbf{q}, \sigma}. \quad (3.56)$$

此时我们可以放心地把 α 取成零, 因而

$$v_\alpha(\mathbf{q}) = v_0(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V |\mathbf{q}|^2}. \quad (3.57)$$

我们现在考虑电子密度算符

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}_i), \quad (3.58)$$

那么这一算符在 Fock 空间上的形式便为

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \mathbf{k}, \sigma | \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{r}}') | \mathbf{k}', \sigma' \rangle a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma'} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{r}'(\mathbf{k}' - \mathbf{k})} \delta_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma'} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

电子密度算符的 Fourier 分量便满足

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (3.60)$$

进而

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}=0} = \hat{N}, \quad \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger = \hat{\rho}_{-\mathbf{q}}. \quad (3.61)$$

我们可以进一步把 Fock 空间上 Jellium 模型的 Hamilton 算符写成

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_0(\mathbf{q}) (\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}). \quad (3.62)$$

有了哈密顿量后我们便可以考虑着手研究这个模型的物理了. 首先我们来考虑解析地微扰计算这个系统的基态能量, 此时我们将第二项视作微扰, 进而无微扰的 Hamilton 算符便是

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (3.63)$$

这其实是 Sommerfeld 模型的哈密顿量, 在其基态 $|E_0\rangle$ 中 N 个电子依次占据能量由低到高的各个能级. 记 Fermi 能量 ε_F 为能量最高的电子的能量, 于是

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \leq \varepsilon_F = \frac{\mathbf{k}_F^2}{2m}, \quad (3.64)$$

其中 \mathbf{k}_F 为 Fermi 波矢. 在 Sommerfeld 模型中电子占据了 \mathbf{k} -空间中位于半径为 $|\mathbf{k}_F|$ 的球面内的所有态; 鉴于周期性边界条件下每一个 \mathbf{k} -格点占据的空间体积为

$$\Delta k = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (3.65)$$

并且每一个格点可以容纳一对自旋相反的电子, 我们便可以推知 $|\mathbf{k}_F|$ 应该满足

$$N = \frac{2}{\Delta k} \frac{4\pi}{3} |\mathbf{k}_F|^3 = \frac{V}{3\pi^2} |\mathbf{k}_F|^3, \quad (3.66)$$

于是

$$|\mathbf{k}_F| = \left(\frac{3N\pi^2}{V} \right)^{1/3}, \quad (3.67)$$

Fermi 能量便为

$$\varepsilon_F = \frac{1}{2m} \left(\frac{3N\pi^2}{V} \right)^{2/3}. \quad (3.68)$$

基态电子的平均能量为

$$\bar{\varepsilon} = \frac{2}{N} \int_{|\mathbf{k}| \leq |\mathbf{k}_F|} d\mathbf{k} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \frac{1}{\Delta k} = \frac{3}{5} \varepsilon_F, \quad (3.69)$$

故基态能量为

$$E_0 = N\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F. \quad (3.70)$$

记平均电子密度为

$$n_e = \frac{N}{V}, \quad (3.71)$$

平均单个电子占据的体积便为

$$v_e = \frac{1}{n_e}. \quad (3.72)$$

我们可以将电子视作一个半径为 $a_B r_s$ 的球体, 那么我们可以通过规定

$$v_e = \frac{4\pi}{3} (a_B r_s)^3 \quad (3.73)$$

来确定无量纲的密度参数 r_s , 而 $a_B = 0.529$ 为 Bohr 半径. 定义能量单位 ryd 为两个相邻 $2a_B$ 的电子间的相互作用能

$$1 \text{ ryd} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2a_B} = 13.605 \text{ eV}, \quad (3.74)$$

那么我们便有

$$E_0 = N \frac{2.21}{r_s^2} [\text{ryd}]. \quad (3.75)$$

现在我们引入 H_{ee} 项并考虑其对基态能量的领头阶修正:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma, \sigma'}^{q \neq 0} v_0(\mathbf{q}) \langle E_0 | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} | E_0 \rangle. \quad (3.76)$$

对求和结果有非平凡贡献的项中的湮灭算符湮灭的粒子动量必须位于 Fermi 球内, 随之产生算符的作用则填充了湮灭产生的 Fermi 球内的空穴. 此时有两种可能: 一种是 $\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ 而 $\mathbf{p} = \mathbf{p} - \mathbf{q}$, 这会要求 $\mathbf{q} = 0$ 而不会在求和中出现; 第二种便是唯一一种非平凡的情况:

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{p}, \quad \mathbf{p} - \mathbf{q} = \mathbf{k}, \quad \sigma = \sigma'. \quad (3.77)$$

因此

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma}^{q \neq 0} v_0(\mathbf{q}) \langle E_0 | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma} | E_0 \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma}^{q \neq 0} v_0(\mathbf{q}) \langle E_0 | a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} | E_0 \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma}^{q \neq 0} v_0(\mathbf{q}) \langle E_0 | \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} | E_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.78)$$

由于电子均匀填充了 Fermi 面内的所有态, 我们便有

$$\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} | E_0 \rangle = \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k}|), \quad (3.79)$$

其中 $\vartheta(x)$ 是单位阶跃函数; 进而

$$E^{(1)} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^{q \neq 0} v_0(\mathbf{q}) \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k}|). \quad (3.80)$$

在热力学极限下我们可以将求和换成积分:

$$\sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \frac{1}{\Delta k} \int d\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k},$$

进而

$$\begin{aligned}
E^{(1)} &= -\frac{Ve^2}{\varepsilon_0(2\pi)^6} \int d\mathbf{k} d\mathbf{q} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k}|) \\
&= -\frac{Ve^2}{\varepsilon_0(2\pi)^6} \int d\mathbf{k} d\mathbf{q} \frac{1}{|\mathbf{q} - \mathbf{k}|^2} \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{q}|) \vartheta(|\mathbf{k}_F| - |\mathbf{k}|) \\
&= -\frac{e^2V}{\varepsilon_0(2\pi)^5} \int d\mathbf{k} \vartheta(k_F - k) \int_0^\infty dq q^2 \vartheta(k_F - q) \int_0^\pi d\theta \sin \theta \frac{1}{q^2 + k^2 - 2kq \cos \theta} \\
&= -\frac{e^2V}{\varepsilon_0(2\pi)^5} \int d\mathbf{k} \vartheta(k_F - k) \int_0^{k_F} dq \frac{q}{k} \ln \frac{|k + q|}{|k - q|} \\
&= -\frac{2e^2V}{\varepsilon_0(2\pi)^4} \int_0^{k_F} dk k^2 \left[k_F + \frac{k_F^2 - k^2}{k} \operatorname{arctanh} \frac{k}{k_F} \right] = -\frac{e^2 k_F^4 V}{\varepsilon_0(2\pi)^4}. \tag{3.81}
\end{aligned}$$

进一步计算给出

$$E^{(1)} = -N \frac{0.916}{r_s} [\text{ryd}]. \tag{3.82}$$

Jellium 模型的基态能量便为

$$E_{\min}[\text{ryd}] = N \left(\frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} \right) + \varepsilon_{\text{correction}}. \tag{3.83}$$

第一项来自电子的动能, 第二项则可以被视为交换能的贡献, 因为 Pauli 不相容原理会让费米子间在统计上出现等效的斥力. 我们现在得到的基态能量在 $r_0 = 4.83$ 处取极小值 -0.095 ryd, 这便给出了让基态能量取极小值的最优电子密度并可以在一定程度上解释金属键导致的离子间隔.

3.1.3 Hubbard 模型

Jellium 模型将固体中的晶格结构抹匀为了一个均匀带正电的背景, 此时 Bloch 波函数是平面波并且电子始终有恒定的占有概率. 这一假设使得 Jellium 模型只能比较好地描述宽能带中的电子, 如碱金属中的导带电子. 而窄能带中的电子倾向于集中在各个格点离子附近, 显然此时从平面波出发来刻画这些电子并不是一个好的选择, 因而我们便滑向了另一个极端: 紧束缚近似.

如果固体中的晶格势 $\hat{V}(\mathbf{r})$ 如此之强以至于各个电子都定域在其所属于的原子附近, 那么描述了 N_i 个无相互作用原子中的电子的哈密顿量

$$H_{\text{at}} = \sum_{i=1}^{N_i} h_{\text{at}}^{(i)} \tag{3.84}$$

应该能在一定程度上比较好地刻画固体的物理性质. 并且对一个定域在某个离子附近的电子而言其感受到的哈密顿量应该类似单个原子的哈密顿量 $h_{\text{at}}^{(i)}$, 进而我们可以考虑从满足单原子 Schrödinger 方程的

$$h_{\text{at}}^{(i)} \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \varepsilon_n \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \tag{3.85}$$

单原子波函数 $\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 出发来构造我们的理论. 指标 n 代表了一系列标记了不同能级的量子数. 我们感兴趣的为定域在不同点 $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j$ 附近的电子波函数交叠不大的情况, 这使

得电子在不同格点位置间隧穿的概率较低, 为 H_{at} 引入了比较微弱的原子间相互作用的项并造成较窄的能级劈裂, 这也就形成了较窄的能带.

Hamilton 量 (3.84) 仅考虑了各个无相互作用电子和其所属于的离子的相互作用 $h_{\text{at}}^{(i)}$, 但实际上每个原子还会受到其他离子的影响, 我们于是为 $h_{\text{at}}^{(i)}$ 引入一个刻画了其它离子影响的修正项 $V_l^{(i)}(\mathbf{r})$ 并将固体中无相互作用电子的哈密顿量取作

$$H_0 = \sum_{i=1}^{N_e} h_0^{(i)}, \quad h_0^{(i)} = h_{\text{at}}^{(i)} + V_l^{(i)}(\hat{\mathbf{r}}_i). \quad (3.86)$$

紧束缚近似要求 $h_0^{(i)}$ 的本征波函数集中在离子- i 附近并在距其稍远处快速衰减, 这便让我们期待修正势函数 $V_l^{(i)}(\mathbf{r})$ 在离子- i 附近很小 (≈ 0) 而在稍远的地方相对较大以压低波函数. 我们不难意识到这个修正势函数其实就是

$$V_l^{(i)}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1; j \neq i}^N V_{\text{el}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j). \quad (3.87)$$

为了构造该系统的 Fock 空间, 一个好的出发点便是 h_0 的本征态

$$h_0 \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.88)$$

注意到 $h_{\text{at}}^{(i)}$ 中的势能项加上 $V_l^{(i)}(\mathbf{r})$ 使得该 Schrödinger 方程中的势能项仍是 Bloch 定理所要求的周期势, 因而其本征态仍可以被 Bloch 波矢标记. 显然我们没法直接求解出各个态 $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 的具体形式, 但是我们可以已有的信息来猜测形式与之接近的波函数. 一个好用的拟式便是

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (3.89)$$

这其实就是把 (3.24) 中的 Wannier 函数换成了单原子波函数并做了 Fourier 反变换. 可以看出来这个函数仍遵循 Bloch 定理并在单个格点附近有着不错的近似精度. 利用这个拟式, 我们可以考虑按如下方式计算 Bloch 能量 $\varphi_n(\mathbf{k})$: 我们总有

$$\langle \varphi_n | h_0 | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \langle \varphi_n | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (3.90)$$

进而

$$\langle \varphi_n | V_l(\hat{\mathbf{r}}) | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_n] \langle \varphi_n | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (3.91)$$

此即

$$\int d\mathbf{r} \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}) V_l(\mathbf{r}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_0] \int d\mathbf{r} \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.92)$$

现在考虑代入拟式 (3.89) 并定义

$$v_n \equiv \int d\mathbf{r} V_l(\mathbf{r}) |\varphi_n(\mathbf{r})|^2, \quad (3.93)$$

$$\gamma_n^{(j)} \equiv \int d\mathbf{r} V_l(\mathbf{r}) \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (3.94)$$

$$\alpha_n^{(j)} \equiv \int d\mathbf{r} \varphi_n^\dagger(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (3.95)$$

$$T_0^{(n)} \equiv \varepsilon_n + v_n. \quad (3.96)$$

那么我们有

$$v_n + \sum_{j=1, \mathbf{R}_j \neq 0}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \gamma_n^{(j)} = [\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_0] \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \alpha_n^{(j)}, \quad (3.97)$$

这等价于

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_n = v_n + \sum_{j, \mathbf{R}_j \neq 0} [\gamma_n^{(j)} - (\varepsilon_n(\mathbf{k}) - \varepsilon_n) \alpha_n^{(j)}] e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}. \quad (3.98)$$

我们于是可以解得

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = \varepsilon_n + \frac{v_n + \sum_{j \neq 0} \gamma_n^{(j)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}}{1 + \sum_{j \neq 0} \alpha_n^{(j)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}}. \quad (3.99)$$

根据假设, 刻画了不同原子波函数相互作用的交叠积分 $\gamma_n^{(j)}$ 和 $\alpha_n^{(j)}$ 都很小. 我们可以进一步近似忽略波函数的单纯交叠而取各个 $\alpha = 0$ 并仅考虑与我们选定的原子最邻近的原子的波函数通过势能项带来的耦合效应, 于是

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) = T_0^{(n)} + \gamma_n^{(l)} \sum_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}}, \quad (3.100)$$

其中 Δ 代表对最邻近的原子求和. 对于简单立方晶格, 我们有

$$\mathbf{R}_{\Delta} = a(\pm 1, 0, 0); a(0, \pm 1, 0); a(0, 0, \pm 1), \quad (3.101)$$

此时

$$\varepsilon_n^{\text{s.c.}}(\mathbf{k}) = T_0^{(n)} + 2\gamma_n^{(l)} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]. \quad (3.102)$$

一般我们会通过实验来确定常数 $T_0^{(n)}$ 和 $\gamma_n^{(l)}$. 可以看到, 该能带的宽度

$$W_n^{\text{s.c.}} = 12\gamma_n^{(l)}, \quad (3.103)$$

这可以让我们通过实验数据确定 $\gamma_n^{(l)}$. 我们这里的紧束缚近似只适用于 s -电子形成的能带, 而在使用该方法处理其他壳层电子时则必须考虑各种简并的情况.

我们此时仍可利用 Wannier 波函数来生成 Fock 空间的基底并进行二次量子化, 此时 H_0 便会形如

$$H_0 = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma}, \quad (3.104)$$

其中

$$T_{ij} = \frac{1}{N_i} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.105)$$

如果我们把单电子本征波函数取作拟式 (3.89), 那么此时 Wannier 函数便是单原子的波函数 $\varphi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, 进而二次量子化后电子间相互作用哈密顿量便为

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} v(ij; k\ell) a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{k,\sigma} a_{\ell,\sigma}, \quad (3.106)$$

其中

$$v(ij; k\ell) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\varphi^{\dagger}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \varphi^{\dagger}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_k) \varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_{\ell})}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (3.107)$$

我们为简便起见仅考虑单一能带中的电子而忽略了能带指标 n . 可以想象, 由于不同原子间波函数交叠很小, 因而主导电子相互作用的应该是单个原子内电子的自相互作用

$$U \equiv v(ii; ii). \quad (3.108)$$

于是 Hubbard 认为我们可以仅考虑这一项的贡献而将哈密顿量取作

$$H = \sum_{ij, \sigma} T_{ij} a_{i, \sigma}^\dagger a_{j, \sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma}. \quad (3.109)$$

第二项取 $\hat{n}_{i, \sigma} \hat{n}_{i, -\sigma}$ 是因为 Pauli 不相容原理要求同一原子内处于同一能级的电子自旋必须相反. Hubbard 模型是最简单的同时考虑了电子动能, Coulomb 相互作用, Pauli 不相容原理和晶格结构的模型. 这一模型通常可以描述:

- 窄能带固体 (如过渡金属) 中的电子特性,
- 铁钴镍的磁性,
- 金属-绝缘体相变 (即 Mott 相变),
- 统计力学中的基本原理,
- 高温超导.

尽管 Hubbard 模型形式上很简单, 但是人们仍未得到其精确解, 我们仍需要近似手段来研究它.

3.2 晶格振动

我们前面固定住了晶格上的离子而仅考虑了电子的动力学, 现在我们则要考虑离子子系统的动力学并关注哈密顿量

$$H_i = \sum_{\alpha=1}^{N_i} \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta}^{\alpha \neq \beta} V_i(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta) \equiv H_{i, \text{kin}} + H_{ii}. \quad (3.110)$$

由于离子间的相互作用很强, 所以如果能量被转移到了一个离子上 (如通过粒子碰撞), 那么被转移的能量将被迅速地传输到整个晶格上并让起初的局域激发变成了各个离子均参与的集体激发. 集体激发产生的晶格振荡也可以被量子化, 对应的激发态便是声子.

3.2.1 谐振子近似

晶格上的离子受到离子键形成的势场的约束, 而各离子的平衡位置便是这个势场的各个极小值. 如果离子的振幅不大, 那么我们便可以考虑对极小值附近的势场做二阶近似, 这便给出了谐振子近似.

考虑一个其基 (basis) 包含 p 个离子的 Bravais 格子

$$\mathbf{R}_s^m = \mathbf{R}^m + \mathbf{R}_s, \quad s = 1, \dots, p, \quad \mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3), \quad m_i \in \mathbb{Z}, \quad (3.111)$$

$$\mathbf{R}^m = \sum_{i=1}^3 m_i \mathbf{a}_i. \quad (3.112)$$

\mathbf{R}_s 为离子 (s, \mathbf{m}) 在原胞中对应的晶格矢量. 记 $\mathbf{x}_s^{\mathbf{m}}(t)$ 为离子 (s, \mathbf{m}) 的瞬时位置, $\mathbf{u}_s^{\mathbf{m}}(t)$ 是此时其相对平衡位置的位移, 故

$$\mathbf{x}_s^{\mathbf{m}}(t) = \mathbf{u}_s^{\mathbf{m}}(t) + \mathbf{R}_s^{\mathbf{m}}. \quad (3.113)$$

晶格动能项便为

$$H_{\text{i, kin}} = \frac{1}{2} \sum_{s, \mathbf{m}} M_s \left(\frac{d\mathbf{u}_s^{\mathbf{m}}}{dt} \right)^2. \quad (3.114)$$

势能项则是

$$H_{\text{ii}} = V(\{\mathbf{R}_s^{\mathbf{m}} + \mathbf{u}_s^{\mathbf{m}}\}) = V(\{\mathbf{R}_s^{\mathbf{m}_s}\}) + \frac{1}{2} \sum_{r, s, \mathbf{m}_r, \mathbf{m}_s} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{R}_{r, \mu}^{\mathbf{m}_r} \partial \mathbf{R}_{s, \nu}^{\mathbf{m}_s}} u_{r, \mu}^{\mathbf{m}_r} u_{s, \nu}^{\mathbf{m}_s} + \dots \quad (3.115)$$

其中我们展开到了相对平衡位置位移的二阶并考虑到 V 在平衡位置的一阶偏导等于零, 同时对希腊字母代表的矢量指标采用了 Einstein 求和约定. 零阶项 $V(\{\mathbf{R}_s^{\mathbf{m}_s}\}) \equiv V_0$ 给出了晶格的结合能. 一般而言, 相对位移不会超过晶格间距的 5%, 因而在领头阶近似下忽略二次以上的非谐振项是合理的. 我们就此得到了晶格劲度系数张量

$$\varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \nu, \mathbf{n}_s} \equiv \frac{\partial V}{\partial \mathbf{R}_{r, \mu}^{\mathbf{m}_r} \partial \mathbf{R}_{s, \nu}^{\mathbf{m}_s}}, \quad (3.116)$$

其描述了在其它原子处于平衡位置的情况下 (r, \mathbf{m}_r) -离子在 μ 方向上的单位位移造成的 (s, \mathbf{m}_s) -离子在 ν 方向上的受力. (s, \mathbf{m}_s) -离子的运动方程显然为

$$M_s \ddot{u}_{s, \mu}^{\mathbf{m}_s} = - \frac{\partial V}{\partial u_{s, \mu}^{\mathbf{m}_s}} = - \sum_{r, \mathbf{m}_r} \varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \mu, \mathbf{m}_s} u_{r, \mu}^{\mathbf{m}_r}. \quad (3.117)$$

显然劲度系数张量具有对称性

$$\varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \nu, \mathbf{n}_s} = \varphi_{s, \nu, \mathbf{n}_s}^{r, \mu, \mathbf{m}_r}. \quad (3.118)$$

如果我们同时把各个离子平移了 $\Delta \mathbf{x}$, 那么各个离子应该均布受力, 因此

$$\sum_{r, \mathbf{m}_r} \varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \nu, \mathbf{n}_s} \Delta x^\mu = 0. \quad (3.119)$$

鉴于 $\Delta \mathbf{x}$ 可以取任意值, 这便表明

$$\sum_{r, \mu, \mathbf{m}_r} \varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \nu, \mathbf{n}_s} = 0. \quad (3.120)$$

Bravais 格子的平移对称性还表明

$$\varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r - \mathbf{m}'}^{s, \nu, \mathbf{n}_s - \mathbf{m}'} = \varphi_{r, \mu, \mathbf{m}_r}^{s, \nu, \mathbf{n}_s}. \quad (3.121)$$

为了求解 (3.117), 我们考虑如下试探解:

$$u_{s, \mu}^{\mathbf{m}_s} = \frac{1}{\sqrt{M_s}} \hat{u}_{s, \mu}^{\mathbf{m}_s} e^{-i\omega t}, \quad (3.122)$$

而这便导向了一个本征值问题:

$$\omega^2 \hat{u}_{s,\mu}^{\mathbf{m}_s} = \sum_{r, \mathbf{n}_r} D_{s,\mu, \mathbf{m}_s}^{r, \nu, \mathbf{n}_r} \hat{u}_{r, \nu}^{\mathbf{n}_r}, \quad D_{s,\mu, \mathbf{m}_s}^{r, \nu, \mathbf{n}_r} = \frac{1}{\sqrt{M_s M_r}} \varphi_{s,\mu, \mathbf{m}_s}^{r, \nu, \mathbf{n}_r}. \quad (3.123)$$

记 Bravais 格子数为 N , 那么矩阵 $D_{s,\mu, \mathbf{m}_s}^{r, \nu, \mathbf{n}_r}$ 的维数便是 $3pN$, 进而对应 $3pN$ 个本征值 $\omega_{s,i}^{\mathbf{m}_s}$. 当然, 这些本征值可能是实的也可能是复的, 但是复的 ω 模式代表了快速衰减的振荡, 因而是非物理的解. 晶格的平移对称性导致这 $3pN$ 个本征值中任意一个至少是 N 重简并的, 为了消除这种简并性, 我们可以考虑取行波试探解并定义

$$u_{s,\mu}^{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{M_s}} c_{s,\mu}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}} - \omega t)}, \quad (3.124)$$

$$K_{\mu, \nu}^{s, t}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{m}} \frac{\varphi_{0, s, \mu}^{\mathbf{m}, t, \nu}}{\sqrt{M_s M_t}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}}, \quad (3.125)$$

那么原问题可以被约化为 $3p$ 维的本征值问题:

$$\omega^2(\mathbf{q}) c_{s,\mu}(\mathbf{q}) = \sum_t K_{\mu, \nu}^{s, t} c_{t, \nu}. \quad (3.126)$$

这会给出消除了平移对称性带来的简并后的 $3p$ 个本征频率 $\omega_r(\mathbf{q})$.

由于我们通常会为系统施加周期性边界条件, 而这会导致 \mathbf{q} 拥有和 Bloch 波矢一样的离散的取值范围. 同时考虑到对任意倒格矢 \mathbf{G} 都有

$$\omega_r(\mathbf{q} + \mathbf{G}) = \omega_r(\mathbf{q}), \quad (3.127)$$

从而我们只需要考虑第一 Brillouin 区内的 \mathbf{q} . 系统的时间反演对称性还导致

$$\omega_r(-\mathbf{q}) = \omega_r(\mathbf{q}). \quad (3.128)$$

记本征值问题 (3.126) 给出的对应 ω_r 本征矢为

$$c_{s,\mu}^r = \varepsilon_{s,\mu}^r(\mathbf{q}), \quad (3.129)$$

那么我们有正交性条件

$$\sum_{s, \mu} \varepsilon_{s,\mu}^{r*}(\mathbf{q}) \varepsilon_{s,\mu}^{r'}(\mathbf{q}) = \delta_{r, r'}. \quad (3.130)$$

运动方程的通解便形如

$$u_{s,\mu}^{\mathbf{m}}(t) = \frac{1}{\sqrt{N M_s}} \sum_{r=1}^{3p} \sum_{\mathbf{q}}^{\text{1.BZ}} Q_r(\mathbf{q}, t) \varepsilon_{s,\mu}^r(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}}. \quad (3.131)$$

其中 $Q_r(\mathbf{q}, t)$ 便是声子的简正模式, 我们可以将其表示为

$$Q_r(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s, \mu, \mathbf{m}} \sqrt{M_s} u_{s,\mu}^{\mathbf{m}}(t) \varepsilon_{s,\mu}^{r*}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}}, \quad (3.132)$$

其满足

$$\ddot{Q}_r(\mathbf{q}, t) + \omega_r^2(\mathbf{q}) Q_r(\mathbf{q}, t) = 0. \quad (3.133)$$

我们现在来考虑一个简单的例子: 由质量 m_1 和 m_2 的两种原子交替组成的一维弹簧振子链, 连接各原子的弹簧的劲度系数均为 f . 记原子 m_1 和 m_2 的间隔为 r_0 而两个 m_1 的间隔为 a , 那么我们可以将这个系统视作一个带有双原子基的一维 Bravais 格子. 格子的原初矢量为 $\mathbf{a} = a\hat{e}_x$, 倒格矢则为

$$\mathbf{k}_n = \frac{2\pi n}{a}, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (3.134)$$

第一 Brillouin 区对应着 $x \in [-\pi/a, \pi/a]$. 对于该系统, 我们发现

$$H_{ii} = \sum_m \frac{1}{2} f [(u_2^m - u_1^m)^2 + (u_1^{m+1} - u_2^m)^2], \quad (3.135)$$

进而纵向的振动满足

$$m_1 \ddot{u}_1^m = -2f u_1^m + f(u_2^m + u_2^{m-1}), \quad (3.136)$$

$$m_2 \ddot{u}_2^m = -2f u_2^m + f(u_1^m + u_1^{m+1}). \quad (3.137)$$

我们考虑试探解

$$u_\alpha^m = \frac{c_\alpha}{\sqrt{m_\alpha}} e^{i(qR^m - \omega t)} = \frac{c_\alpha}{\sqrt{m_\alpha}} e^{i(maq - \omega t)}, \quad (3.138)$$

进而

$$\begin{aligned} \sqrt{m_1} \omega^2 c_1 &= 2 \frac{f}{\sqrt{m_1}} c_1 - \frac{f}{\sqrt{m_2}} (1 + e^{-iaq}) c_2, \\ \sqrt{m_2} \omega^2 c_2 &= 2 \frac{f}{\sqrt{m_2}} c_2 - \frac{f}{\sqrt{m_1}} (1 + e^{iaq}) c_1. \end{aligned} \quad (3.139)$$

此即

$$\omega^2 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2f/m_1 & -f(1 + e^{-iaq})/\sqrt{m_1 m_2} \\ -f(1 + e^{iaq})/\sqrt{m_1 m_2} & 2f/m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (3.140)$$

我们不难解得

$$\omega_\pm^2 = \frac{f}{m_1 m_2} \left(m_1 + m_2 \pm \sqrt{m_1^2 + m_2^2 + 2m_1 m_2 \cos(aq)} \right). \quad (3.141)$$

我们称不同的本征频率 $\omega_r(\mathbf{q})$ 为不同的色散分支 (dispersion branch), 此处双原子链的情况便解出了两条色散分支. 特别的, 我们称满足 $\omega(q=0) = 0$ 为声学分支 (acoustic branch), 其刻画了固体中传导声波的振动; 而 $\omega(q=0) \neq 0$ 的为光学分支 (optical branch), 其可以刻画电磁场在固体中的传播. 对于双原子链的情况, 我们发现 $\omega_-(q)$ 对应声学分支, 这在 $q=0$ 时会给出

$$\frac{c_1}{c_2} = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}, \quad (3.142)$$

表明磁模式下各个原子同相振荡; 同时其在长波极限 $q \ll \pi/a$ 时给出

$$\omega_2 \approx a \sqrt{\frac{f}{2(m_1 + m_2)}} q, \quad (3.143)$$

而这刚好符合连续体中声速波的色散关系

$$\omega = v_s q. \quad (3.144)$$

$\omega_+(q)$ 便对应了光学分支, 这给出

$$\omega_+(q=0) = \sqrt{2f \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)} \quad (3.145)$$

且此时

$$\frac{c_1}{c_2} = -\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}. \quad (3.146)$$

这表明在长波极限下两个原子反相振荡. 如果两个离子带相反的电荷, 那么这便恰好刻画了震荡的电偶极矩并且能和电磁场相互作用.

3.2.2 声子气

根据前面所做的展开, 我们不难写出晶格的拉氏量:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{s, \mathbf{m}} M_s (\dot{u}_s^{\mathbf{m}})^2 - \frac{1}{2} \sum_{s, t, \mathbf{m}, \mathbf{n}} \varphi_{\mathbf{m}, s, \mu}^{\mathbf{n}, t, \nu} u_{s, \mu}^{\mathbf{m}} u_{t, \nu}^{\mathbf{n}}. \quad (3.147)$$

这一拉氏量可以被晶格振动的简正模式等价地表示为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{r, \mathbf{q}} [\dot{Q}_r^*(\mathbf{q}, t) \dot{Q}_r(\mathbf{q}, t) - \omega_r^2(\mathbf{q}) Q_r^*(\mathbf{q}, t) Q_r(\mathbf{q}, t)]. \quad (3.148)$$

显然, 简正模式对应的共轭动量为

$$\Pi_r(\mathbf{q}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}_r} = \dot{Q}_r^*(\mathbf{q}, t), \quad (3.149)$$

因而用简正模式表示的经典 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2} \sum_{r, \mathbf{q}} [\Pi_r^*(\mathbf{q}, t) \Pi_r(\mathbf{q}, t) + \omega_r^2(\mathbf{q}) Q_r^*(\mathbf{q}, t) Q_r(\mathbf{q}, t)]. \quad (3.150)$$

这里 \mathbf{q} 的取值均在第一 Brillouin 区内. 可以看到, 通过选择简正模式作为晶格振动的基本自由度, 系统的 Hamilton 量可以被表示为 $3pN$ 个互不耦合的谐振子¹.

我们接下来便可以进行正则量子化: 我们考虑将各个简正模式的正则动量和正则坐标提升为满足玻色子正则对易关系的算符², 即

$$[Q_r(\mathbf{q}), Q_{r'}(\mathbf{q}')] = [\Pi_r(\mathbf{q}), \Pi_{r'}(\mathbf{q}')] = 0, \quad [Q_r(\mathbf{q}), \Pi_{r'}(\mathbf{q}')] = i\delta_{r, r'} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}. \quad (3.151)$$

可以验证这等价地给出了

$$[u_{s, \mu}^{\mathbf{m}}, u_{t, \nu}^{\mathbf{n}}] = [M_s \dot{u}_{s, \mu}^{\mathbf{m}}, M_t \dot{u}_{t, \nu}^{\mathbf{n}}] = 0, \quad [u_{s, \mu}^{\mathbf{m}}, M_t \dot{u}_{t, \nu}^{\mathbf{n}}] = i\delta_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \delta_{s, t} \delta_{\mu \nu}. \quad (3.152)$$

¹在第一 Brillouin 区内 \mathbf{q} 有 N 种取值.

²如果使用费米子满足的正则反对易关系开展量子化, 那么系统将会表现出无能量下限这一病态行为.

仿照谐振子中产生湮灭算符的定义, 我们取

$$Q_r(\mathbf{q}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_r(\mathbf{q})}}[b_{\mathbf{q},r}(t) + b_{-\mathbf{q},r}^\dagger(t)], \quad \Pi_r(\mathbf{q}, t) = i\sqrt{\frac{\omega_r(\mathbf{q})}{2}}[b_{\mathbf{q},r}^\dagger(t) - b_{-\mathbf{q},r}(t)], \quad (3.153)$$

那么我们有

$$[b_{\mathbf{q},r}, b_{\mathbf{q}',r'}] = 0, \quad [b_{\mathbf{q},r}, b_{\mathbf{q}',r'}^\dagger] = \delta_{r,r'}\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad (3.154)$$

原 Hamilton 量则可以被写成

$$H = \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}) \left(b_{\mathbf{q},r}^\dagger(t) b_{\mathbf{q},r}(t) + \frac{1}{2} \right), \quad (3.155)$$

这正是 $3pN$ 个无耦合谐振子的 Hamilton 量.

声子产生湮灭算符随时间的依赖性容易确定: 记 $Q_r(\mathbf{q}) \equiv Q_r(\mathbf{q}, t=0)$, $\Pi_r(\mathbf{q}) \equiv \Pi_r(\mathbf{q}, t=0)$, 那么我们有

$$Q_r(\mathbf{q}, t) = Q_r(\mathbf{q})e^{-i\omega_r(\mathbf{q})t}, \quad \Pi_r(\mathbf{q}, t) = \Pi_r(\mathbf{q})e^{i\omega_r(\mathbf{q})t}. \quad (3.156)$$

进而

$$b_{\mathbf{q},r}(t) = b_{\mathbf{q},r}e^{-i\omega_r(\mathbf{q})t} \quad (3.157)$$

并且

$$H = \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}) \left(b_{\mathbf{q},r}^\dagger(t) b_{\mathbf{q},r}(t) + \frac{1}{2} \right) = \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}) \left(b_{\mathbf{q},r}^\dagger b_{\mathbf{q},r} + \frac{1}{2} \right). \quad (3.158)$$

可以验证, $b_{\mathbf{q},r}(t)$ 对时间的依赖性恰好满足 Heisenberg 方程

$$b_{\mathbf{q},r}(t) = e^{iHt} b_{\mathbf{q},r} e^{-iHt}. \quad (3.159)$$

可以看到, 正则量子化后晶格的振动能以 $\hbar\omega_r(\mathbf{q})$ 被量子化, 并且声子作为晶格振动的激发态是玻色子——任意数目的声子可以占据任意振动态. 晶格振动的谐振子近似便使得量子化后的晶格振动表现为无相互作用声子气, 而在谐振子近似中忽略的晶格势的高阶展开项便可以在后续研究中被处理为声子间的耦合.

我们现在便可以计算谐振子近似下的晶格内能:

$$U(T) = \langle H \rangle = \frac{1}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \text{Tr}(H e^{-\beta H}) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z, \quad Z = \text{Tr} e^{-\beta H}. \quad (3.160)$$

考虑到

$$\begin{aligned} Z &= \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}) \right) \prod_{r,\mathbf{q}} \sum_{n_{r,\mathbf{q}}=0}^{\infty} e^{-\beta\omega_r(\mathbf{q})n_{r,\mathbf{q}}} \\ &= \exp \left(-\frac{\beta}{2} \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}) \right) \prod_{r,\mathbf{q}} \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega_r(\mathbf{q})}}. \end{aligned} \quad (3.161)$$

我们于是有

$$U(T) = \sum_{r,\mathbf{q}} \frac{\omega_r(\mathbf{q})}{e^{\beta\omega_r(\mathbf{q})} - 1} + \frac{1}{2} \sum_{r,\mathbf{q}} \omega_r(\mathbf{q}). \quad (3.162)$$

在高温极限下, 我们有

$$U(T \gg 1) \approx \sum_{r, \mathbf{q}} k_B T \left(1 + \frac{\omega_r(\mathbf{q})}{2k_B T} + \dots \right) \approx 3pNk_B T, \quad (3.163)$$

这恰好是经典统计物理给出的 Dulong-Petit 定律. 而对于低温情况, 这便会给出固体热容的 Debye T^3 -律.

3.3 电子-声子相互作用

现在我们来考虑电子和晶格间的耦合项 H_{ei} . 记单个电子和单个离子间的相互作用势为 $V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{x}_\alpha)$, 那么

$$H_{\text{ei}} = \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{x}_\alpha) \equiv H_{\text{ei}}^{(0)} + H_{e-p}. \quad (3.164)$$

其中 $H_{\text{ei}}^{(0)}$ 为电子与处于平衡位置的刚性晶格的相互作用项, 我们已经在处理电子的动力学时考虑了它的影响; H_{e-p} 则是我们现在要重点关注的电子-声子相互作用项, 而这必然会带来 (\mathbf{q}, r) -声子的产生或者湮灭.

我们先考虑将 V_{ei} 展开到声子的领头阶:

$$\begin{aligned} V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{x}_s^m) &= V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m - \mathbf{u}_s^m) \\ &= V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) - \mathbf{u}_s^m \cdot \nabla V_{\text{ei}} + \mathcal{O}(u^2). \end{aligned} \quad (3.165)$$

这里第一项给出了 $H_{\text{ei}}^{(0)}$, 第二项则给出了领头阶 H_{e-p} . 我们假设各个离子带单位电荷, 故 $N_e = N_i = N$, 而领头阶 H_{e-p} 便能用简正模式表示为

$$H_{e-p} = - \sum_{j=1}^N \sum_{s, \mathbf{m}} \sum_{r=1}^{3p} \sum_{\mathbf{q}}^{\text{1. BZ}} \frac{1}{\sqrt{NM_s}} Q_r(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_s^m} \boldsymbol{\varepsilon}_s^{(r)}(\mathbf{q}) \cdot \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m). \quad (3.166)$$

为了显式地引入电子产生湮灭算符, 我们考虑 V_{ei} 的 Fourier 展开

$$V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) = \sum_{\mathbf{p}} V_{\text{ei}}^{(s)}(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m)}, \quad (3.167)$$

进而

$$\nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) = i \sum_{\mathbf{p}} V_{\text{ei}}^{(s)}(\mathbf{p}) \mathbf{p} e^{i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m)}. \quad (3.168)$$

注意到二次量子化后的单电子算符为

$$\sum_{j=1}^N \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \langle \mathbf{k}, \sigma | \nabla V_{\text{ei}} | \mathbf{k}', \sigma' \rangle a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma'}, \quad (3.169)$$

因而我们只需要计算

$$\langle \mathbf{k}, \sigma | e^{i\mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{r}}} | \mathbf{k}', \sigma' \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (3.170)$$

记 Bloch 波函数为 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, 我们便有

$$\langle \mathbf{k}, \sigma | e^{i\mathbf{p}\cdot\hat{\mathbf{r}}} | \mathbf{k}', \sigma' \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (3.171)$$

所以

$$\sum_{j=1}^N \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) = i \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V_{\text{ei}}^{(s)}(\mathbf{p}) \mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_s^m} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (3.172)$$

$u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ 拥有沿 Bravais 格子的周期性, 因此上述积分仅在 $\mathbf{p} - \mathbf{k} + \mathbf{k}'$ 属于倒格矢时非零. 又因为 \mathbf{p} 被限制在第一 Brillouin 区内, 故让积分非平凡的情况只可能为 $\mathbf{p} - \mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$, 从而

$$\sum_{j=1}^N \nabla V_{\text{ei}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_s^m) = i \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V_{\text{ei}}^{(s)}(\mathbf{p}) \mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}_s^m} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma} \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}'+\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}). \quad (3.173)$$

将其代入 H_{e-p} 中并加以整理即得到

$$H_{e-p} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{K}} \sum_{s, r} T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{K}}^{(s, r)} (b_{\mathbf{q}, r} + b_{-\mathbf{q}, r}^\dagger) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{K}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (3.174)$$

其中 \mathbf{K} 为满足使 $\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{K}$ 属于第一 Brillouin 区的倒格矢, $T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{K}}^{(s, r)}$ 为电子-声子耦合的矩阵元

$$T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{K}}^{(s, r)} = -i \sqrt{\frac{\hbar N}{2M_s \omega_r(\mathbf{q})}} V_{\text{ei}}^{(s)}(\mathbf{q} + \mathbf{K}) [\boldsymbol{\varepsilon}_s^{(r)}(\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{K})] \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (3.175)$$

可以看到, $(-\mathbf{q}, r)$ -声子的产生或者 (\mathbf{q}, r) -声子的湮灭会让电子的波数由 \mathbf{k} 变成 $\mathbf{k} + \mathbf{q} + \mathbf{K}$. 进而我们可以定义 (\mathbf{q}, r) -声子的准(晶体)动量为 $\mathbf{q} + \mathbf{K}$.

我们将区分两类电子-声子相互作用: 散射前后 $\mathbf{K} = 0$ 为普通过程 (normal process), 而 $\mathbf{K} \neq 0$ 的则为翻转过程 (umklapp process).

3.4 电子间的有效相互作用

我们现在来考虑被如下假设简化的电子-声子相互作用:

- 晶体中的离子组成 $p = 1$ 的简单 Bravais 格子, 进而我们不需要考虑对 s 的求和.
- 我们仅考虑 $\mathbf{K} = 0$ 的普通过程.
- 声子要么横向偏振, 要么纵向偏振, 因而只有一个纵向声学偏振模式对相互作用项有贡献.

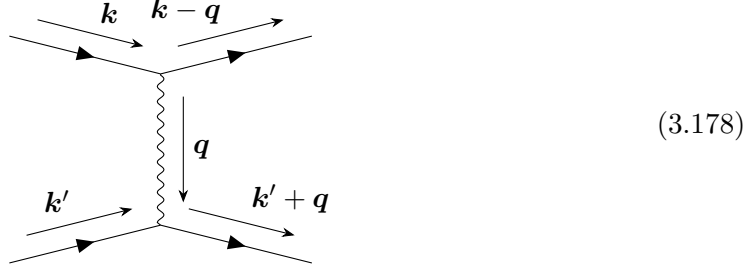
此时电子-声子相互作用矩阵元可以被简化为

$$T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = -i \sqrt{\frac{\hbar N}{2M \omega(\mathbf{q})}} V_{\text{ei}}(\mathbf{q}) [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}] \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (3.176)$$

而相互作用项则可以被写成

$$H_{e-p} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} T_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (3.177)$$

可以看到, 声子-电子相互作用恰似 QED 中的光子-电子相互作用, 其给出了一个两电子一声子的三粒子相互作用顶点. 我们可以基于该相互作用顶点来构造声子媒介的电子-电子相互作用:



我们仅考虑了 t -通道而未考虑 s, u -通道, 因为我们在考虑两个各自定域可区分的电子间的相互作用. 我们可以将这个过程诠释为一个 (\mathbf{k}, σ) -电子扰动了其周围的晶格并释放了一个 \mathbf{q} -声子, 而后初始为 (\mathbf{k}', σ') 的电子接收到了这个声子并做出了相应的反应. 这一过程便给出了一个和 Coulomb 相互作用无关的有效相互作用, 这既可能表现为吸引力, 也可能是排斥力. 如果其表现为吸引力, 那么两个电子便可能形成一个基态能量更低的束缚态, 此即 Cooper 对, 这是经典超导理论的基本元素.

让我们用简化的电子-声子相互作用项来研究这个过程, 并且我们为了简便起见而把电子的 Bloch 波函数取作平面波

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.179)$$

继而

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}, \quad (3.180)$$

并且

$$T_{\mathbf{q}} = -i \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega(\mathbf{q})}} V_{\text{ei}}(\mathbf{q}) [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}]. \quad (3.181)$$

根据实空间里的 V_{ei} 和简正模式都是实函数, 我们不难意识到

$$T_{\mathbf{q}}^* = T_{-\mathbf{q}}, \quad (3.182)$$

需要考虑的有效电子-电子相互作用便由如下 Hamilton 量给出:

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} T_{\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (3.183)$$

我们当然可以通过计算上述树图的散射振幅来反推电子间的有效相互作用, 不过我们也可以通过考虑对该 Hamilton 算符做么正变换来计算出与这个 Hamilton 量拥有等价的谱的有效 Hamilton 量 [12, 2]. 但这里存在的问题是么正变换后的 Hamilton 量描述的并不是正则变换前的系统, 我们似乎不能直接认为等效 Hamilton 量里的项能够反映系统内的物理过程, 因而原书 [15] 中将变换后 Hamilton 量里两电子相互作用项视为描述了原系统电子间

的有效相互作用项的方式是让人难以理解的. 而且我认为原书中通过取一个特殊的么正变换计算出消去了单声子与双电子耦合的项的等价 Hamilton 量并称该 Hamilton 量中新出现的双电子耦合项反映了声子媒介的电子间的有效相互作用是存在问题的, 毕竟这样的么正变换不一定是唯一的, 我们不能确定按此方式确定的有效相互作用项的唯一性, 更无从论及该项能描述实验观测到的效应. 一个直观上严格的处理方式应该是设法 integrate out 出声子而得到一个仅和电子有关的有效理论, 而这要求我们以路径积分的形式组织这个问题.

8.4 节提供了一个构造有效 Hamilton 量的行之有效的方法, 我们现在使用它来积出声子自由度而得到一个电子的有效理论. 此时 \mathcal{P} 是到电子子空间的投影而 \mathcal{Q} 是到声子子空间的投影,

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} + \mathcal{P} H \mathcal{Q} \frac{1}{E - \mathcal{Q} H \mathcal{Q}} \mathcal{Q} H \mathcal{P}, \quad (3.184)$$

其中 E 是构造有效理论时选取的一个参数. 进而有效相互作用便为

$$\mathcal{P} H \mathcal{Q} \frac{1}{E - \mathcal{Q} H \mathcal{Q}} \mathcal{Q} H \mathcal{P} = E \mathcal{P} H \mathcal{Q} [1 + \mathcal{Q} H \mathcal{Q} / E + (\mathcal{Q} H \mathcal{Q} / E)^2 + \cdots] \mathcal{Q} H \mathcal{P}. \quad (3.185)$$

进而电子-电子有效相互作用的领头阶项为

$$E \mathcal{P} H \mathcal{Q} \mathcal{Q} H \mathcal{P} = E \mathcal{P} H \mathcal{Q} H \mathcal{P}. \quad (3.186)$$

对于一般的多体问题这个算符乘积该如何计算?

3.5 自旋波

磁化现象是多体物理的一大研究方向. 根据磁感率

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T, \quad (3.187)$$

我们可以将磁性现象分为三类: 抗磁性, 顺磁性, 集体磁性.

抗磁体对应着纯粹的磁感应现象. Lenz 定律表明我们施加外场 H 会在介质中与外场方向相反的磁偶极子, 进而这样的介质通常会拥有负磁感率:

$$\chi^{\text{dia}} < 0, \quad \chi^{\text{dia}}(T, H) \approx \text{Const.} \quad (3.188)$$

所有物质都会表现出抗磁性, 而顺磁性和集体磁性产生的效应有时会掩盖相对较弱的抗磁性.

顺磁体中本身就存在永久磁偶极矩, 而外场 H 则会克服热涨落的效应而让这些磁偶极矩指向与之相同的方向. 因而其磁感率表现为

$$\chi^{\text{para}} > 0, \quad \chi^{\text{para}}(T, H) = \chi^{\text{para}}(T). \quad (3.189)$$

顺磁体中的磁偶极矩有可能来自组成它的原子中半满电子壳层 (如稀土金属的 $4f$ 电子) 带来的净电子磁偶极矩. 如果这些半满壳层中的电子被更外层的满壳层所包裹, 那么它们并不会参与到固体中电流的输运而会定域在其所属于的母离子附近. 这类磁偶极矩在没有外场时拥有随机的指向, 因而此时整个固体并不存在净磁矩; 各个磁偶极矩在施加外场后则会指向外场的方向, 而此时介质的磁感率在不是很低的温度下将遵循 Curie 定律

$$\chi^{\text{para}} \approx \frac{C}{T}. \quad (3.190)$$

这类顺磁体叫 Langevin 顺磁体. 还有一类顺磁体叫 Pauli 顺磁体. 此时提供磁偶极矩的电子是近自由的载流子, 并且外场诱导出磁性的方式为改变 Fermi 附近电子的自旋指向, 其磁感率在一阶水平上不依赖于温度.

集体磁性源于固体中永久磁偶极矩间的交换相互作用, 这只有通过量子力学才能得到比较好的解释. 这些磁偶极矩既可能是定域在原子附近的电子磁矩 (如 Gd, EuO 和 Rb_2MnCl_4), 也可能是载流电子的磁矩 (如 Fe, Co, Ni). 这类磁体拥有一个临界温度 T^* , 在该温度之下介质会在不存在外场情况下产生自发磁化, 而在临界温度以上介质表现得就像个正常的顺磁体. $T < T^*$ 时介质的磁感率是和外场与温度有关的复杂函数, 并且其还会依赖于介质受外场作用的历史, 这一般会给出磁滞回线. 集体磁性又可以被分为三类:

- 铁磁性: 我们称铁磁体的临界温度为 Curie 温度 T_C . 零温下铁磁体中所有磁矩都指向相同的方向, 并且随着温度的升高, 介质中磁矩指向的无序性逐渐上升, 但在 $0 < T < T_C$ 时系统整体仍然朝某个特定的方向存在自发磁化. 介质在 T_C 以上表现为顺磁性, 并且高温下其磁感率遵循 Curie-Weiss 定律:

$$\chi(T) = \frac{C}{T - T_C}, \quad T \gg T_C. \quad (3.191)$$

- 亚铁磁性: 亚铁磁体的晶格由两组表现出不同的自发磁化特定的铁磁体子晶格组成, 其在 Curie 温度下的自发磁化强度便是两组子晶格的自发磁化强度之和.
- 反铁磁性: 反铁磁体是亚铁磁体的一个特例, 我们称其对应的临界温度为 Néel 温度 T_N . 反铁磁体中的两组铁磁性子晶格在 T_N 一下存在强度相同但是方向相反的自发磁化, 故此时总自发磁化强度为零; 而在 T_N 以上, 系统是正常的顺磁体, 其磁感率为负数并表现为

$$\chi(T) = \frac{T}{T - \Theta}, \quad T \gg T_N. \quad (3.192)$$

这里的 Θ 为顺磁 Curie 温度.

我们将重点关注集体磁性. 由于绝缘体和金属的集体磁性分别来自于定域和离域的电子, 因而我们必须用不同性质的模型来分别研究二者的集体磁性.

大部分绝缘体的集体磁性可以被 Heisenberg 模型描述: 如果我们利用 $L - S$ 耦合来考虑定域的电子磁矩, 那么我们有

$$\mathbf{m}_i = \mu_B(\mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i) \equiv \mu_B g_J \mathbf{J}_i, \quad (3.193)$$

其中 \mathbf{L}_i 和 \mathbf{S}_i 分别为电子的轨道和自旋角动量, 而 g_J 为 Landé g -因子. 又因为

$$\mathbf{S}_i = (g_J - 1)\mathbf{J}_i, \quad (3.194)$$

故我们完全可以将不同定域磁矩间的相互作用取作不同自旋间的相互作用, 进而模型的 Hamilton 量便被取作

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (3.195)$$

其中耦合尝试 J_{ij} 叫交换积分. 我们可以将 Heisenberg 模型的 Hamilton 量视作一个有效 Hamilton 量, 介质中电子间 Coulomb 相互作用的影响被模型中自旋间的相互作用所有效地模拟.

在为磁矩源于游离电子的磁性金属建模时我们需要考虑两类情况:

- 能带磁性: 在铁钴镍这类金属中 $T < T_C$ 时自旋间的交换相互作用会让两种自旋指向的电子拥有两个不同的能量, 进而形成了两条子能带. 在平衡态下, 两条子能带中能量低于 Fermi 能的能级均会被电子填满. 如果此时两条能带中的电子数目不同, 那么系统便会自发磁化出一个净磁矩. 实验表明这类磁性常常存在于窄带金属中, 因而其可以被 Hubbard 模型所模拟.
- "定域" 磁性: 这类磁体的典型代表是拥有半满 $4f$ 壳层的金属钆, 其磁性源于定域的 $4f$ 电子的磁矩产生的自发磁化, 因而可以被 Heisenberg 模型描述. 钆中的载流子是近自由的导带电子, 因而我们可以用 Jellium 模型或者 Hubbard 模型来描述它们. 而定域的 $4f$ 磁矩和离域的导带电子间的相互作用则会为 $4f$ 磁矩间带来额外的有效相互作用并增强其集体磁化, 同时使得导带电子受到的散射增多而增大了介质的电阻率. 一种描述这类介质的模型便为 s-f(s-d) 模型:

$$H = H_{\text{Jellium/Hubbard}} + H_{\text{Heisenberg}} - g \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{S}_i. \quad (3.196)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}_i$ 是位于 \mathbf{R}_i 处的导带电子的自旋算符, 而 g 为耦合常数.

我们可以在晶格振荡和铁磁体的激发态间做出类比: 晶格离子在其平衡位置附近的振荡可以被对角化为振幅量子化的简正模式, 对应的激发态被称为声子; 类似的, 我们称铁磁体中自旋矢量的振荡为自旋波, 而其量子化后的激发态叫磁子 (magnon).

让我们在 Heisenberg 模型内考虑这个问题: 我们取

$$J_{ij} = J_{ji}, \quad J_{ii} = 0, \quad J_0 \equiv \sum_i J_{ij} = \sum_j J_{ij}, \quad (3.197)$$

并且记

$$S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y, \quad (3.198)$$

那么 Heisenberg 模型可以被改写为

$$H_0 = - \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z) - g_J \mu_B B_0 \sum_i S_i^z, \quad (3.199)$$

其中我们引入了局域磁矩和沿 z 方向的外场 $B_0 = \mu_0 H$ 的相互作用项. 现在考虑将实空间中的自旋算符变换到第一 Brillouin 区内的 \mathbf{k} 空间中:

$$S^\mu(\mathbf{k}) \equiv \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^\mu, \quad (3.200)$$

那么我们可以得到 \mathbf{k} 空间中自旋算符间的对易关系:

$$[S^+(\mathbf{k}_1), S^-(\mathbf{k}_2)] = 2S^z(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (3.201)$$

$$[S^z(\mathbf{k}_1), S^\pm(\mathbf{k}_2)] = \pm S^\pm(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (3.202)$$

$$[S^+(\mathbf{k})]^\dagger = S^-(\mathbf{k}). \quad (3.203)$$

类似的, 我们可以将交换积分写作

$$J(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i,j} J_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (3.204)$$

继而原 Hamilton 量可以被写作

$$H = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in 1 \text{ B.Z.}} J(\mathbf{k}) [S^+(\mathbf{k}) S^-(\mathbf{k}) + S^z(\mathbf{k}) S^z(-\mathbf{k})] - g_J \mu_B B_0 S^z(0). \quad (3.205)$$

Heisenberg 铁磁体的基态 $|S\rangle$ 对应着所有自旋均指向同一方向的情况, 我们不妨取这一方向为 z 方向, 于是

$$S_i^z |S\rangle = S |S\rangle \Rightarrow S^z(\mathbf{k}) |S\rangle = NS |S\rangle \delta_{\mathbf{k},0}, \quad (3.206)$$

$$S_i^+ |S\rangle = 0 \Rightarrow S^+(\mathbf{k}) |S\rangle = 0. \quad (3.207)$$

继而我们可以计算出基态能量为

$$E_0 = -NJ_0 S^2 - Ng_J \mu_B B_0 S. \quad (3.208)$$

由于

$$\begin{aligned} [H, S^-(\mathbf{k})] &= g_J \mu_B B_0 S^-(\mathbf{k}) \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} J(\mathbf{p}) [2S^-(\mathbf{p}) S^z(\mathbf{k} + \mathbf{p}) - S^-(\mathbf{k} - \mathbf{p}) S^z(\mathbf{p}) - S^-(\mathbf{k} + \mathbf{p}) S^z(-\mathbf{p})], \end{aligned} \quad (3.209)$$

我们便发现

$$[H, S^-(\mathbf{k})] |S\rangle = \omega(\mathbf{k}) S^-(\mathbf{k}) |S\rangle, \quad (3.210)$$

$$\omega(\mathbf{k}) \equiv g_J \mu_B B_0 + 2S[J_0 - J(\mathbf{k})]. \quad (3.211)$$

因此 $S^-(\mathbf{k}) |S\rangle$ 也是 H 的本征态, 其对应的能量为

$$E(\mathbf{k}) = E_0 + \omega(\mathbf{k}). \quad (3.212)$$

$S^-(\mathbf{k}) |S\rangle$ 并不是归一化的, 其对应的归一化单磁子态为

$$|\mathbf{k}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2SN}} S^-(\mathbf{k}) |S\rangle. \quad (3.213)$$

$\omega(\mathbf{k})$ 便是这一磁子对应的激发能. 可以看到, 外磁场与磁子的耦合带来的能量偏移为 $g_J \mu_B B_0$, 因而磁子是自旋-1 的准粒子, 进而它是玻色子. 局域自旋算符 S_i^z 在单磁子态 $|\mathbf{k}\rangle$ 上的期望值为

$$\langle \mathbf{k} | S_i^z | \mathbf{k} \rangle = S - \frac{1}{N}, \quad (3.214)$$

这表明单磁子态一个单位的自旋变化被均匀分配到了所有格点上, $|\mathbf{k}\rangle$ 对应了所有自旋的集体激发, 即自旋波. 这可以被一个半经典的图像所刻画: 各个局域自旋 \mathbf{S}_i 都在沿 z 轴进动, 并且进动的角度恰好使得长度为 S 的自旋矢量在 z 方向上的投影长 $(S - 1/N)$, 同时相邻格点间自旋进动存在相位差 ka (a 为两个矢量的距离), 这便刻画出了一个波动.

Heisenberg 模型在一般情况不是精确可解的, 而在近似求解时一个很有用的技术便是将自旋算符变成二次量子化后的产生湮灭算符 (Holstein-Primakoff 变换):

$$S_i^+ = \sqrt{2S} \varphi(n_i) a_i, \quad (3.215)$$

$$S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \varphi(n_i), \quad (3.216)$$

$$S_i^z = S - n_i. \quad (3.217)$$

其中

$$n_i = a_i^\dagger a_i, \quad \varphi(n_i) = \sqrt{1 - \frac{n_i}{2S}}. \quad (3.218)$$

按照这一定义, 原来的自旋算符的对易关系给出了玻色子产生湮灭算符的对易关系

$$[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (3.219)$$

而其对应的 Fourier 变换

$$a_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} a_i, \quad a_{\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} a_i^\dagger \quad (3.220)$$

则给出了磁子的产生湮灭算符. 原无外场 Heisenberg 模型的 Hamilton 量则可以被改写为

$$H = E_0 + 2SJ_0 \sum_i n_i - 2S \sum_{i,j} J_{ij} \varphi(n_i) a_i a_j^\dagger \varphi(n_j) - \sum_{i,j} J_{ij} n_i n_j. \quad (3.221)$$

Holstein-Primakoff 变换的一大劣势是其引入了粒子数算符的平方根, 因而我们实际处理 Hamilton 量时需要把根号展开, 而这会引入无穷多个包含粒子数算符的项. 我们必须基于一些物理上的考虑来截断这个幂级数, 而最简单的情况便是低温下仅有些许几个磁子被激发, 因而我们可以取领头阶项, 而这给出了**自旋波近似**:

$$H^{\text{SW}} = E_0 + 2S \sum_{i,j} (J_0 \delta_{ij} - J_{ij}) a_i^\dagger a_j. \quad (3.222)$$

而这可以在 \mathbf{k} 空间内被对角化:

$$H^{\text{SW}} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}. \quad (3.223)$$

此时低温下的铁磁体被处理成了无相互作用磁子气. 由于磁子是遵循 Bose-Einstein 统计的玻色子, 我们有

$$\langle n_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega(\mathbf{k})} - 1}, \quad (3.224)$$

进而我们可以计算出低温下铁磁体的自发磁化强度为

$$M(T, H) = g_J \mu_B \frac{N}{V} \left(S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}} \rangle \right). \quad (3.225)$$

这与实验符合得相当好.

4 Green 函数

我们在多体物理中关心的可观测量要么是可观测量的期望值, 要么是可观测量间的关联函数. 如果我们利用一般的统计物理方法来计算这些量, 那么我们必须事先获得系统的配分函数, 但是这又要求我们解出系统 Hamilton 算符的本征值. 这对一般的多体问题而言是很困难的. 而 Green 函数方法则允许我们在未获得配分函数的情况下近似地计算出这些可观测量.

4.1 线性响应理论

我们从幼儿园就知道, Green 函数刻画了系统中一个初始点源的演化. 如果我们将这个点源视作对系统施加的外界扰动, 那么直观上 Green 函数便应该和系统对外界扰动的反应有关, 这类反应便叫做**响应函数**. 诸如电导率、磁感率以及退极化函数等都属于响应函数, 线性响应理论便将这些响应函数和**推迟 Green 函数**联系在了一起.

我们一般性地考虑一个 Hamilton 量为 H_0 的系统, 对系统的扰动可以被处理为额外的一个含时的扰动项 V_t , 即我们需要考虑的 Hamilton 算符为

$$H \equiv H_0 + V_t. \quad (4.1)$$

我们进一步假设扰动 V_t 来自外标量场 F_t (如方向确定的磁场, 但我们将此将之处理为一个一般的复数), 而与之对偶并凑出能量量纲的可观测量为 \hat{B} (如沿磁场方向的磁矩), 进而

$$V_t = \hat{B}F_t. \quad (4.2)$$

记 \hat{A} 为一个没有显式的时间依赖性的可观测量, 我们实际观测的便是其热力学期望值 $\langle \hat{A} \rangle$, 而我们现在感兴趣的问题便是 $\langle \hat{A} \rangle$ 对微扰 V_t 的反应.

我们考虑巨正则系综, 没有外场时系统的密度矩阵为

$$\rho_0 = \frac{1}{\text{Tr exp}(-\beta \mathcal{H}_0)} e^{-\beta \mathcal{H}_0}, \quad \mathcal{H}_0 = H_0 - \mu \hat{N}. \quad (4.3)$$

而 \hat{A} 的热力学期望值便为

$$\langle \hat{A} \rangle_0 = \text{Tr}(\hat{A} \rho_0). \quad (4.4)$$

我们现在引入仅作用一小段时间的外场 F_t , 那么此时系统的个密度矩阵将具有时间依赖性 ρ_t . 在 Schrödinger 绘景中 ρ_t 的运动方程为

$$i \frac{d\rho_t}{dt} = i \sum_m p_m \left(\frac{d|\psi_m\rangle}{dt} \langle \psi_m| + |\psi_m\rangle \frac{d\langle \psi_m|}{dt} \right) = [H, \rho_t] = [\mathcal{H}_0, \rho_t] + [V_t, \rho_t]. \quad (4.5)$$

同时方程的边界条件为

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t = \rho_0. \quad (4.6)$$

现在我们换到 Dirac (相互作用) 绘景中, 则密度矩阵变成

$$\rho_t^D = e^{i\mathcal{H}_0 t} \rho_t e^{-i\mathcal{H}_0 t}, \quad (4.7)$$

其运动方程则化为

$$i \frac{d\rho_t^D}{dt} = i[\rho_t^D, V_t^D]. \quad (4.8)$$

根据边界条件 $\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t^D = \rho_0$, 我们便有

$$\rho_t^D = \rho_0 - i \int_{-\infty}^t dt' [V_{t'}^D, \rho_{t'}^D]. \quad (4.9)$$

这可以被逐阶求解. 如果我们假设外场扰动很小, 那么我们可以仅计算到 V 的线型阶并得到系统对微扰的线性响应:

$$\rho_t \approx \rho_0 - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\mathcal{H}_0 t} [V_{t'}^D, \rho_0] e^{i\mathcal{H}_0 t}. \quad (4.10)$$

我们可以进一步得到可观测量期望值对扰动的线性响应:

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \langle \hat{A} \rangle_0 - i \int_{-\infty}^t dt' F_{t'} \text{Tr}\{\rho_0 [\hat{A}_t^D, \hat{B}_{t'}^D]\}. \quad (4.11)$$

因而

$$\Delta A_t \equiv \langle \hat{A} \rangle_t - \langle \hat{A} \rangle_0 = -i \int_{-\infty}^t dt' F_{t'} \langle [\hat{A}_t^D, \hat{B}_{t'}^D] \rangle_0. \quad (4.12)$$

可以看到, 系统对微扰的线性响应和一组对易子在受扰动前的系统中的期望有关. 我们定义**双时推迟 Green 函数**为

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle = -i\Theta(t - t') \langle [A(t), B(t')] \rangle_0, \quad (4.13)$$

进而

$$\Delta A_t = \int dt' F_{t'} G_{AB}^{\text{ret}}(t, t'). \quad (4.14)$$

这里的算符是未受扰动系统中的 Heisenberg 绘景算符. 我们考虑 F_t 的 Fourier 变换

$$F_t = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} F(E), \quad (4.15)$$

并考虑到 Green 函数仅依赖时间差 $t - t'$ ³, 我们于是得到了 Kubo 公式

$$\begin{aligned} \Delta A_t &= \frac{1}{2\pi} \int d\tau \int dE e^{-i(E+i0^+)\tau} F(E) G_{AB}^{\text{ret}}(t, \tau) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dE F(E) G_{AB}^{\text{ret}}(E + i0^+) e^{-i(E+i0^+)t}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

其中我们定义

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, \tau) \equiv \frac{1}{2\pi} \int dE G_{AB}^{\text{ret}}(E) e^{-iE(t-\tau)}, \quad (4.17)$$

进而

$$\int d\tau e^{-i(E+i0^+)\tau} G_{AB}^{\text{ret}}(t, \tau) = e^{-i(E+i0^+)t} G_{AB}^{\text{ret}}(E + i0^+). \quad (4.18)$$

$+i0^+$ 的引入确保了无论 $F(E)$ 取什么形式, $F(t)$ 在 $t \rightarrow -\infty$ 时总等于零, 即场 F_t 应该被绝热地引入系统. 同时根据 Kubo 公式也不难发现, 系统的线性响应性表现在频率空间内.

³Explicitly 地见 (4.27).

Remark

线性响应理论的结果和系统的 Hamilton 量的具体形式无关, 我们放弃巨正则系综的假设也可以得到相同的结果. 同时前面推导中刻意强调的相互作用绘景的使用完全是多余的, 我们也可以很直截了当地保持在 Schrödinger 绘景中开展计算:

我们的出发点仍是本身不含时的可观测量 \hat{A} ; 记未受扰动的系统 Hamilton 量仍为 H_0 , 受到的扰动仍记作 $V(t) = \hat{B}F(t)$, 平衡态未受扰动的系统的密度矩阵为

$$\rho_0 = \frac{1}{\text{Tr}[e^{-\beta H_0}]} e^{-\beta H_0}, \quad [\rho_0, H_0] = 0. \quad (4.19)$$

我们假设在 $t = -\infty$ 时引入扰动, 那么系统的密度矩阵 $\rho(t)$ 的演化将满足

$$\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)] = -i[H_0, \rho(t)] - i[V(t), \rho(t)], \quad \rho(-\infty) = \rho_0, \quad (4.20)$$

可观测量 \hat{A} 的期望同时表现出时间依赖性

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \text{Tr}[\hat{A}\rho(t)]. \quad (4.21)$$

问题的关键只是如何求解 $\rho(t)$, 而这可以用微扰论的套路直接得到解决: 我们引入帮助我们追踪微扰论阶数的 spurious 的耦合常数 $\alpha = 1$, $V(t) \Rightarrow \alpha V(t)$, 于是截断到领头阶便有

$$\dot{\rho}^{(0)}(t) = -i[H_0, \rho^{(0)}(t)], \quad (4.22)$$

$$\dot{\rho}^{(1)}(t) = -i[H_0, \rho^{(1)}(t)] - i[V(t), \rho^{(0)}(t)]. \quad (4.23)$$

显然根据边界条件, 我们必须有 $\rho^{(0)}(t) = \rho_0$, 进而一阶修正项应该满足

$$\dot{\rho}^{(1)}(t) = -i[H_0, \rho^{(1)}(t)] - i[V(t), \rho_0]. \quad (4.24)$$

为了求解这个方程, 我们考虑变量代换

$$\rho^{(1)}(t) \equiv e^{-iH_0 t} \sigma^{(1)}(t) e^{iH_0 t}, \quad (4.25)$$

可以看到, 我们这里技术性地引入的 $\sigma^{(1)}(t)$ 其实就是 Dirac 绘景里的 $\rho^{(1)}(t)$, 原推导切换到 Dirac 绘景里完全是出于技术性的考虑而不包含任何物理因素 (事实上反而会徒增困扰). 如此代换后我们可以直接解得

$$\sigma^{(1)}(t) = -i \int_{-\infty}^t d\tau e^{iH_0 \tau} [V(\tau), \rho_0] e^{-iH_0 \tau}, \quad (4.26)$$

此即

$$\rho^{(1)}(t) = -i \int_{-\infty}^t d\tau e^{-iH_0(t-\tau)} [V(\tau), \rho_0] e^{iH_0(t-\tau)}. \quad (4.27)$$

我们进而可以轻松得到

$$\Delta A(t) = -i \int_{-\infty}^t d\tau \text{Tr}\{\rho_0 [\hat{A}^H(t), \hat{B}^H(\tau)]\} F(\tau). \quad (4.28)$$

4.2 几种典型的响应函数

4.2.1 磁感率

我们考虑一个空间上均匀的含时磁场

$$\mathbf{B}(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} \tilde{\mathbf{B}}(E) \quad (4.29)$$

对一个含有永久磁矩的介质带来的扰动，与这样一个磁场耦合的算符便是系统的总磁矩

$$\mathbf{m} = \sum_i \mathbf{m}_i = gJ\mu_B \sum_i \mathbf{S}_i, \quad (4.30)$$

而这为 Hamilton 量带来的微扰项则为

$$V(t) = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}(t) = -\frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} m^\mu \tilde{B}^\mu(E). \quad (4.31)$$

我们定义系统的磁化强度为总磁矩的热力学期望的密度：

$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \langle \mathbf{m} \rangle = \frac{gJ\mu_B}{V} \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle, \quad (4.32)$$

那么我们根据线性响应定理便有

$$M^\mu(t) - M^\mu(0) = -\frac{1}{V} \int d\tau B^\nu(\tau) \langle \langle m^\mu(t); m^\nu(\tau) \rangle \rangle, \quad (4.33)$$

进而我们可以定义**磁感率张量**

$$\chi_{ij}^{\mu\nu}(t, t') \equiv -\frac{\mu_0 g_J^2 \mu_B^2}{V} \langle \langle S_i^\mu(t); S_j^\nu(t') \rangle \rangle, \quad (4.34)$$

那么外场带来的磁化强度的响应便为

$$\Delta M^\mu(t) = \frac{1}{\mu_0} \sum_{i,j} \int d\tau \chi_{ij}^{\mu\nu}(t, \tau) B^\nu(\tau). \quad (4.35)$$

我们现在便可以定义两类磁感率：

- 纵向磁感率：

$$\chi_{ij}^{zz}(E) = -\frac{\mu_0 g_J^2 \mu_B^2}{V} \langle \langle S_i^z; S_j^z \rangle \rangle(E), \quad (4.36)$$

这一物理量可以帮助我们判断磁有序结构的形成条件。我们只需要考虑对空间指标做 Fourier 变换

$$\chi_{\mathbf{q}}^{zz}(E) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i,j} \chi_{ij}^{zz}(E) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (4.37)$$

由于 Green 函通常存在奇点，因而在适当条件下一个无穷小的扰动会诱导系统产生有限大的磁化强度，这便产生了自发磁化。由于此时磁感率应该是均匀的，故我们只需要考察使得

$$\lim_{(\mathbf{q}, E) \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{q}}^{zz}(E) = \pm\infty \quad (4.38)$$

的条件便可以确定系统发生这种铁磁-顺磁相变的条件。

- 横向磁感率:

$$\chi_{ij}^{+-}(E) \equiv -\frac{\mu_0 g_J^2 \mu_B^2}{V} \left\langle \left\langle S_i^+; S_j^- \right\rangle \right\rangle (E). \quad (4.39)$$

这个函数对 E 也不是解析的, 可以证明其极点对应着自旋波的本征能量:

$$\lim_{E \rightarrow \hbar\omega(\mathbf{q})} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(E) = \pm\infty \quad (4.40)$$

4.2.2 电导率

如果我们将微扰取作空间上均匀的电场

$$\mathbf{F}(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} \tilde{\mathbf{F}}(E), \quad (4.41)$$

那么它将和电偶极矩算符

$$\mathbf{P} = \int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) \equiv \sum_{i=1}^N q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (4.42)$$

耦合在一起. 显然, 电偶极算符也可以被写成

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N q_i \hat{\mathbf{r}}_i. \quad (4.43)$$

电场带来的微扰项便为

$$V(t) = -\mathbf{P} \cdot \mathbf{F}(t) = -\frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} P^\mu \tilde{F}^\mu(E). \quad (4.44)$$

此时我们感兴趣的为电流密度对外场的响应, 而电流密度算符为

$$\mathbf{j} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N q_i \dot{\mathbf{r}}_i = \frac{1}{V} \dot{\mathbf{P}}. \quad (4.45)$$

无外场时我们显然会期待 $\langle \mathbf{j} \rangle_0 = 0$, 进而施加外场后我们应该有

$$\langle j^\mu \rangle(t) = - \int d\tau F^\nu(\tau) \langle \langle j^\mu(t), P^\nu(\tau) \rangle \rangle, \quad (4.46)$$

我们遂可以定义**电导率张量**为

$$\sigma^{\mu\nu}(E) \equiv - \langle \langle j^\mu; P^\nu \rangle \rangle (E), \quad (4.47)$$

那么受扰动后系统内的电流密度便为

$$\langle j^\mu \rangle(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} \sigma^{\mu\nu}(E) F^\nu(E). \quad (4.48)$$

我们目前得到的电导率张量的形式还不够好看, 不过考虑到电流密度和电偶极矩的关系并做一次分部积分后我们可以将之改写为

$$\sigma^{\mu\nu}(E) = -\frac{\langle [j^\mu, P^\nu] \rangle}{E + i0^+} + iV \frac{\langle \langle j^\mu; j^\nu \rangle \rangle (E)}{E + i0^+}. \quad (4.49)$$

如果我们假设系统内只有一种载流子, $q_i = q, m_i = m$, 那么我们便能轻易得到

$$\sigma^{\mu\nu}(E) = i \frac{q^2 (N/V)}{m(E + i0^+)} \delta_{\mu\nu} + iV \frac{\langle \langle j^\mu; j^\nu \rangle \rangle (E)}{E + i0^+}. \quad (4.50)$$

第一项恰好给出了经典的 Drude 理论预言的无相互作用电子系的电导率.

4.2.3 退极化函数

如果我们人为向系统引入一个电荷密度 $\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$, 那么它将改变系统内准自由的载流子的密度分布并在引入的电荷密度周围产生屏蔽效应, 这一屏蔽效应便由退极化函数 $\varepsilon(\mathbf{q}, E)$ 所刻画.

我们在经典的推导中取人为引入的电荷密度为

$$\rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi V} \int dE \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} e^{-i(E+i0^+)t}, \quad (4.51)$$

同时记系统中的载流子密度为

$$-e\rho(\mathbf{r}) = -\frac{e}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rho(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \quad (4.52)$$

那么二者间的相互作用能便为

$$V(t) = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.53)$$

考虑到

$$\int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}')}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \frac{4\pi V}{q^2}, \quad (4.54)$$

我们便可以记

$$\tilde{v}(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \frac{-e}{\epsilon_0 q^2} \quad (4.55)$$

并得到

$$V(t) = \frac{1}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{v}(\mathbf{q}) \rho_{-\mathbf{q}} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E). \quad (4.56)$$

取 Jellium 模型并假设引入的电荷仅会影响近自由的载流子而不会影响固定的离子, 那么在 ρ_{ext} 影响下系统的净电荷密度应该是它和其诱导的电荷密度 ρ_{ind} 之和:

$$\rho_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = \rho_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \rho_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t). \quad (4.57)$$

根据 Maxwell 方程

$$i\mathbf{q} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{q}, E) = \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E), \quad (4.58)$$

$$i\mathbf{q} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho_{\text{tot}}(\mathbf{q}, E), \quad (4.59)$$

以及电位移矢量的定义

$$\mathbf{D}(\mathbf{q}, E) = \epsilon_0 \varepsilon(\mathbf{q}, E) \mathbf{F}(\mathbf{q}, E), \quad (4.60)$$

我们便有

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, E) = \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, E)} - 1 \right) \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E). \quad (4.61)$$

因此, 确定退极化函数的关键便是确定外源诱导的电荷密度 ρ_{ind} .

在量子理论中, 我们需要考虑的则是密度算符

$$\rho_{\mathbf{q}} \equiv \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (4.62)$$

与之有关的微扰项为

$$V(t) = \sum_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} \tilde{F}(\mathbf{q}, t), \quad (4.63)$$

其中

$$\tilde{F}(\mathbf{q}, t) = \frac{\tilde{v}(\mathbf{q})}{2\pi} \int dE e^{-i(E+i0^+)t} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E). \quad (4.64)$$

根据线性响应定理, 我们便有

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, t) = \Delta\rho(\mathbf{q}, t) = -e \int d\tau \tilde{F}(\mathbf{q}, \tau) \left\langle \left\langle \rho(\mathbf{q}, t); \rho^{\dagger}(\mathbf{q}, \tau) \right\rangle \right\rangle. \quad (4.65)$$

这在频域便是

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, E) = -e\tilde{v}(\mathbf{q})\rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E) \left\langle \left\langle \rho(\mathbf{q}), \rho^{\dagger}(\mathbf{q}) \right\rangle \right\rangle(E), \quad (4.66)$$

退极化函数便可以 Green 函数表示为

$$\varepsilon(\mathbf{q}, E) = \frac{1}{1 - e\tilde{v}(\mathbf{q}) \left\langle \left\langle \rho(\mathbf{q}), \rho^{\dagger}(\mathbf{q}) \right\rangle \right\rangle(E)}. \quad (4.67)$$

可以看到, Green 函数的奇点会使 $\varepsilon(\mathbf{q}, E) \rightarrow 0$, 而 Green 函数的奇性意味着此时任意小的电荷扰动都会为系统带来有限的电荷涨落, 这些极点便对应着电荷系统集体激发态的本征频率, 对应的准粒子叫**等离激元**.

4.3 谱密度

Green 函数和系统的元激发态密切相关, 并且这些态能被合适的光谱学技术直接观测. 因而, 与 Green 函数紧密相连的谱密度也是能被直接测量的可观测量. 光谱学通常可以测量四类过程:

- 光电效应 (PES): 一个能量为 $\hbar\omega$ 的光子激发了半满能带中的一个电子并使之离开固体变成自由电子, 因而对光电子能量的分析可以让我们确定半满能带中被占据的态的能量. 这使得一个能带内的电子数减一, 进而该过程可以被跃迁算符 $Z_{-1} = a_{\alpha}$ 描述.
- 逆向光电效应 (IPE): 一个电子入射到了固体中并在通过发射一个 $\hbar\omega$ 光子释放能量后停留在了半满能带中未被占据的一个态, 我们此时根据发射出的光子的能量分布便能确定半满能带中未被占据的态的能量. 这让能带多出来了一个电子, 跃迁算符便为 $Z_{+1} = a_{\alpha}^{\dagger}$.
- Auger 电子谱 (AES): 如果固体中的一个原子的电子云在深壳层处出现了一个未被占据的态, 那么半满能带里的一个电子便可能跃迁到这个态上, 其释放的能量将被传递给同能带里的另一个电子并使得这个电子离开固体. 因而分析发射的电子能量能为我们提供和能带中被占据的态有关的信息. 这让能带电子数减二, 跃迁算符为 $Z_{-2} = a_{\alpha}a_{\beta}$.

- 表观势谱 (APS): 这是 Auger 电子发射的逆过程, 此时一个电子被能带里未被占据的态所捕获, 其释放的能量被传输给了一个核电子并把它激发到了能带中的另一个未被占据的态上. 这让能带内电子数加二, 故跃迁算符可以被取作 $Z_{+2} = a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger}$.

我们现在的任务便是计算出这些过程的强度. 首先, 这些过程均会使能带中的粒子数发生变化, 因而我们需要考虑巨正则系综 Hamilton 量

$$\mathcal{H} = H - \mu \hat{N}. \quad (4.68)$$

一个物理的考虑是定态下系统的粒子数没有变化, 因而我们假设原 Hamilton 量和粒子数算符 \hat{N} 对易, 二者拥有共同本征态 $\{|E_n, N\rangle\}$. 进而这也是巨正则 Hamilton 量的本征态:

$$\mathcal{H} |E_n, N\rangle = (E_n - \mu N) |E_n, N\rangle \equiv \mathcal{E}_n |E_n\rangle. \quad (4.69)$$

系统的巨正则配分函数便为

$$\Xi = \text{Tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right), \quad (4.70)$$

平衡态下本征态 $|E_n\rangle$ 出现的概率便为 $e^{-\beta \mathcal{E}_n} / \Xi$. 在领头阶微扰论水平上, 跃迁算符 Z_r 诱导的 $|E_n\rangle$ 和 $|E_m\rangle$ 间跃迁的概率便为 $|\langle E_m | Z_r | E_n \rangle|^2$, 进而描述测量到的释放能量介于 $E \sim E + dE$ 间元过程数目的强度便为

$$I_r(E) = \frac{1}{\Xi} \sum_{m,n} e^{-\beta \mathcal{E}_n} |\langle E_m | Z_r | E_n \rangle|^2 \delta[E - (\mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n)]. \quad (4.71)$$

通过简单的变量代换, 我们不难推导出互补谱的对称关系:

$$I_r(E) = e^{\beta E} I_{-r}(-E). \quad (4.72)$$

我们定义谱密度为

$$S_r^{(\pm)}(E) = I_{-r}(E) \mp I_r(-E) = (e^{\beta E} \mp 1) I_r(-E). \quad (4.73)$$

把谱强度变换到时域则会给出

$$\frac{1}{2\pi} \int dE e^{-iE(t-t')} I_{-r}(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\Xi} \sum_n e^{-\beta \mathcal{E}_n} \langle E_n | Z_r(t) Z_r^{\dagger}(t') | E_n \rangle = \frac{1}{2\pi} \left\langle Z_r(t) Z_r^{\dagger}(t') \right\rangle, \quad (4.74)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int dE e^{-iE(t-t')} I_{-r}(E) = \frac{1}{2\pi} \left\langle Z_r^{\dagger}(t') Z_r(t) \right\rangle. \quad (4.75)$$

因此谱密度在时域上表现为

$$S_r^{(\varepsilon)}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \left\langle [Z_r(t), Z_r^{\dagger}(t')]_{-\varepsilon} \right\rangle. \quad (4.76)$$

按照类似的推导, 我们可以将 Z_r, Z_r^{\dagger} 换成任意的诱导跃迁的算符 \hat{A}, \hat{B} , 并得到一般意义上的谱密度

$$S_{AB}^{(\varepsilon)}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \left\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{-\varepsilon} \right\rangle. \quad (4.77)$$

注意 $\hat{A}(t), \hat{B}(t)$ 是按照巨正则 Hamilton 量演化的 Heisenberg 绘景算符.

4.4 双时 Green 函数

我们目前已经定义了推迟 Green 函数

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\text{ret}} = -i\Theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\varepsilon} \rangle \quad (4.78)$$

并展示了其在线性响应理论中的重要地位. 为了后续方便起见, 我们还可以定义超前 Green 函数

$$G_{AB}^{\text{adv}}(t, t') \equiv \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\text{adv}} = i\Theta(t' - t) \langle [A(t), B(t')]_{-\varepsilon} \rangle, \quad (4.79)$$

以及因果 Green 函数

$$G_{AB}^{\text{causal}}(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\text{causal}} = -i \langle T_{\varepsilon} \{A(t), B(t')\} \rangle. \quad (4.80)$$

其中我们定义了**编时排序算符**

$$T_{\varepsilon} \{A(t), B(t')\} = \Theta(t - t') A(t) B(t') + \varepsilon \Theta(t' - t) B(t') A(t). \quad (4.81)$$

值得一提的是, 诸 Green 函数定义中 ε 的正负依具体问题而定而和所涉及的算符是费米子算符还是玻色子算符没有太大关系.

我们定义的诸 Green 函数以及前面的谱密度仅依赖于 $t - t'$, 而这是因为组成这些表达式的关联函数 $\langle A(t)B(t') \rangle$ 也有这种对称性:

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \text{Tr} \left[e^{-\beta H} e^{iHt} A e^{-iH(t-t')} B e^{-iHt'} \right] = \text{Tr} \left[e^{-\beta H} A(t - t') B(0) \right]. \quad (4.82)$$

既然 Green 函数显含时间, 那么一个自然的考虑便是推导其随时间演化的运动方程. 根据

$$\frac{d}{dt} \Theta(t - t') = \delta(t - t'), \quad (4.83)$$

我们不难发现三种 Green 函数均满足同一形式的运动方程

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{AB}^{\alpha}(t, t') &= \delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [A, H]_{-}(t); B(t') \rangle \rangle^{\alpha} \\ &= \delta(t - t') \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [A, H]_{-}(t); B(t') \rangle \rangle^{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

注意到第一项中的 δ -函数使得关联函数不具有时间依赖性. 可以看到, 在运动方程的右边出现了一个新的 Green 函数 $\langle \langle [A, H]_{-}(t); B(t') \rangle \rangle^{\alpha}$, 我们称这是从原 Green 函数衍生出来的**高阶 Green 函数**. 显然这些高阶 Green 函数也遵循相同形式的运动方程, 进而我们还会得到诸如 $\langle \langle [[A, H], H](t); B(t') \rangle \rangle^{\alpha}$ 的更高阶 Green 函数. 进而我们会得到一组互相耦合的运动方程链, 而在实际计算中我们必须根据具体的问题在某一时刻将其截断. 当然我们也可以从频域上考察 Green 函数的运动方程, 这显然为

$$E G_{AB}^{\alpha}(E) = \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [A, H]_{-}; B \rangle \rangle^{\alpha}(E). \quad (4.85)$$

此时原运动方程链变成了一组无限耦合的代数方程, 而不同 Green 函数在时域上的边界条件变成了对该代数方程组在复 E -平面上解析性的不同要求.

4.5 Green 函数的谱表示

我们考虑系统 Hamilton 量的一组本征态 $\{|E_n\rangle\}$, 那么我们可以借助这组本征态进行关联函数 $\langle A(t)B(t') \rangle$ 的计算:

$$\begin{aligned}
Z \langle A(t)B(t') \rangle &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H} A(t)B(t') \right] = \sum_n \langle E_n | e^{-\beta H} A(t)B(t') | E_n \rangle \\
&= \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | A(t) | E_m \rangle \langle E_m | B(t') | E_n \rangle \\
&= \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t - t')} \langle E_n | A | E_m \rangle \langle E_m | B | E_n \rangle \\
&= \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{-\beta(E_m - E_n)} e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle. \quad (4.86)
\end{aligned}$$

类似的, 我们有

$$Z \langle B(t')A(t) \rangle = \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{-i(E_n - E_m)(t - t')} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle. \quad (4.87)$$

进而在频域上二者满足

$$Z \langle AB \rangle(E) = 2\pi \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{-\beta(E_m - E_n)} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \delta[E - (E_n - E_m)], \quad (4.88)$$

$$Z \langle B(t')A(t) \rangle = 2\pi \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \delta[E - (E_n - E_m)], \quad (4.89)$$

谱密度 (4.77) 在频域上便可以写作

$$S_{AB}^{(\varepsilon)}(E) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} - \varepsilon) \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \delta[E - (E_n - E_m)], \quad (4.90)$$

这便是**谱密度的谱表示**. 可以看到, 如果我们假设各个矩阵元均拥有良好的解析性, 那么谱密度的极点将全部来自 δ -函数, 并且对应的值是系统所有可能的激发能.

现在我们便可以考虑用谱密度表示三种 Green 函数, 为此我们需要利用单位阶跃函数的积分表达式

$$\Theta(t - t') = \frac{i}{2\pi} \int dx \frac{e^{-ix(t-t')}}{x + i0^+}, \quad (4.91)$$

即

$$\Theta(E) = \frac{i}{E + i0^+}. \quad (4.92)$$

那么推迟 Green 函数便可以写作

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \int dE \frac{e^{-iE(t-t')}}{E + i0^+} S_{AB}^{(\varepsilon)}(t, t') = \int dE dE' \frac{e^{-iE(t-t')}}{E + i0^+} S_{AB}^{(\varepsilon)}(E') e^{-iE'(t-t')}. \quad (4.93)$$

变到频域空间中便有

$$\begin{aligned}
G_{AB}^{\text{ret}}(E) &= \frac{1}{2\pi} \int dt(t-t') G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') e^{iE(t-t')} \\
&= \int dt(t-t') dx dE' \frac{S_{AB}^{(\varepsilon)}(E')}{x + i0^+} e^{i[E - (x+E')](t-t')} \\
&= \int dx dE' \frac{S_{AB}^{(\varepsilon)}(E')}{x + i0^+} \delta[E - (x + E')] \\
&= \int dE' \frac{S_{AB}^{(\varepsilon)}(E')}{E - E' + i0^+}.
\end{aligned} \tag{4.94}$$

类似的, 我们可以立即得到

$$G_{AB}^{\text{adv}}(E) = \int dE' \frac{S_{AB}^{(\varepsilon)}(E')}{E - E' - i0^+}. \tag{4.95}$$

显然, 推迟 Green 函数在上半复平面解析而超前 Green 函数则在下半复平面解析. 如果代入谱密度的谱表示, 那么我们立即有

$$G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - \varepsilon}{E - (E_n - E_m) \pm i0^+}. \tag{4.96}$$

由此我们可以直观看到, 推迟/超前 Green 函数在复平面上都是拥有简单极点的亚纯函数, 并且极点的位置对应着系统的激发能.

对于因果 Green 函数, 我们有

$$\begin{aligned}
G_{AB}^c(t, t') &= -i\Theta(t - t') \langle A(t) B(t') \rangle - i\varepsilon\Theta(t' - t) \langle B(t') A(t) \rangle \\
&= \frac{1}{2\pi} \int dx e^{-ix(t-t')} \left(\frac{\langle A(t) B(t') \rangle}{x + i0^+} + \varepsilon \frac{\langle B(t') A(t) \rangle}{x - i0^+} \right).
\end{aligned} \tag{4.97}$$

进而我们可以得到

$$G_{AB}^c(E) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \left[\frac{e^{\beta(E_n - E_m)}}{E - (E_n - E_m) + i0^+} - \frac{\varepsilon}{E - (E_n - E_m) - i0^+} \right]. \tag{4.98}$$

因果 Green 函数在上下半平面均不解析.

在微扰处理相互作用理论时, 我们用迭代解运动方程的方法可以直接微扰地计算出超前/推迟 Green 函数; 但是用 Feynman 图则只能直接计算出因果 Green 函数.

我们可以将推迟/超前 Green 函数视作超前/推迟 Green 函数在上/下半复平面上的解析延拓并定义一个在上下半复平面上均解析的函数

$$G_{AB}(E) = \int dE' \frac{S_{AB}(E')}{E - E'}. \tag{4.99}$$

考虑到

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \tag{4.100}$$

我们便有

$$S_{AB}(E) = \frac{i}{2\pi} [G_{AB}(E + i0^+) - G_{AB}(E - i0^+)]. \tag{4.101}$$

4.6 谱定理

我们考虑关联函数 $\langle B(t')A(t) \rangle$, 那么显然它可以被反对易谱密度表示为

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int dE \frac{S_{AB}^{(-)}(E)}{e^{\beta E} + 1} e^{-iE(t-t')}. \quad (4.102)$$

这一关系便是**谱定理**. 根据这一公式, 我们可以用恰当的谱密度得到与之对应的关联函数和期望值. 注意我们这里用的是反对易谱密度, 而根据对易谱密度得到的

$$\int dE \frac{S_{AB}^{(+)}(E)}{e^{\beta E} - 1} \quad (4.103)$$

并不能给出完整的关联函数. 这是因为此时 $1/(e^{\beta E} - 1)$ 在 $E = 0$ 处的奇性使得积分结果缺少了零频项的贡献, 我们需要人为补上一个常数 D . (这其实很像 Bose-Einstein 凝聚的情况.) 进而一般情况的谱定理可以被记作

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int dE \frac{S_{AB}^{(\varepsilon)}(E)}{e^{\beta E} - \varepsilon} e^{-iE(t-t')} + \frac{1}{2}(1 + \varepsilon)D. \quad (4.104)$$

为了更直观地认识到对易谱密度无法完全确定关联函数, 我们可以考虑定义算符

$$\tilde{A} \equiv A - \langle A \rangle, \quad \tilde{B} \equiv B - \langle B \rangle, \quad (4.105)$$

那么

$$\langle \tilde{B}(t')\tilde{A}(t) \rangle = \langle B(t')A(t) \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle, \quad (4.106)$$

但是我们会发现此时对易谱密度不变:

$$S_{AB}^{(+)} = S_{\tilde{A}\tilde{B}}^{(+)}. \quad (4.107)$$

因此, 同一个对易谱密度可能对应于多个关联函数.

不难看出常数项 D 应该和谱密度的零能部分有关: 我们遂可以考虑

$$\begin{aligned} S_{AB}^{(\varepsilon)}(E) &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m}^{E_n \neq E_m} e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} - \varepsilon) \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \delta[E - (E_n - E_m)] \\ &\quad + \frac{1}{Z} (1 - \varepsilon) \delta(E) \sum_{n,m}^{E_n = E_m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \\ &\equiv \hat{S}_{AB}^{(\varepsilon)}(E) + (1 - \varepsilon) \delta(E) D. \end{aligned} \quad (4.108)$$

可以看到, $\varepsilon = +$ 的对易谱密度不包含 D , 但是其中的矩阵元乘积对确定关联函数是必不可少的.

根据在能量本征态上写出的一般谱表示, 我们不难发现关联函数可以被写成

$$\langle B(t')A(t) \rangle = D + \int dE \frac{\hat{S}_{AB}^{(\varepsilon)}(E)}{e^{\beta E} - \varepsilon} e^{-iE(t-t')}, \quad (4.109)$$

$$\langle A(t)B(t') \rangle = D + \int dE \frac{\hat{S}_{AB}^{(\varepsilon)}(E)e^{\beta E}}{e^{\beta E} - \varepsilon} e^{-iE(t-t')}. \quad (4.110)$$

而根据 Green 函数的谱表示

$$G_{AB}^{(\varepsilon)}(E) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle E_n | B | E_m \rangle \langle E_m | A | E_n \rangle \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - \varepsilon}{E - (E_n - E_m) \pm i0^+}, \quad (4.111)$$

我们便发现

$$\lim_{E \rightarrow 0} E G_{AB}^{(\varepsilon)}(E) = (1 - \varepsilon)D. \quad (4.112)$$

因此, 反对易 Green 函数在 $E = 0$ 处存在一阶极点, 其留数给出了 $2D$; 而对易 Green 函数在 $E = 0$ 处不存在极点.

4.7 Green 函数的对称性

考虑到

$$\begin{aligned} \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle^{\text{ret}} &= -i\Theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\varepsilon} \rangle \\ &= \varepsilon i\Theta(t - t') \langle [B(t'), A(t)'] \rangle = \varepsilon G_{BA}^{\text{adv}}(t', t), \end{aligned} \quad (4.113)$$

所以

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \varepsilon G_{BA}^{\text{adv}}(t', t). \quad (4.114)$$

这在频域上也就是

$$G_{AB}^{\text{ret}}(E) = \varepsilon G_{BA}^{\text{adv}}(-E). \quad (4.115)$$

同时根据定义, 我们有

$$(G_{AB}^{\text{ret/adv}}(t, t'))^* = \varepsilon G_{A^\dagger B^\dagger}^{\text{ret/adv}}(t, t'), \quad (4.116)$$

这表明如果 A, B 均为厄米算符, 那么其构造出的对易 Green 函数都是实数而反对易 Green 函数都是虚数.

我们还可以使用 Green 函数的运动方程对其高能行为加以约束: 根据

$$E G_{AB}^\alpha(E) = \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle^\alpha(E), \quad (4.117)$$

我们有

$$\int dE [E G_{AB}^\alpha(E) - \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle] = \int dE \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle^\alpha(E). \quad (4.118)$$

对推迟 Green 函数而言, 这便给出

$$\begin{aligned} \int dE [E G_{AB}^{\text{ret}}(E) - \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle] &= \int dE \langle \langle [A, H]; B \rangle \rangle^{\text{ret}}(E) \\ &= (-i) \int dE \int_0^\infty dt \langle [[A, H]_-(t), B(0)]_{-\varepsilon} \rangle e^{iEt} \\ &= \pi \langle [\dot{A}(0), B(0)]_{-\varepsilon} \rangle. \end{aligned} \quad (4.119)$$

类似的

$$\int dE [E G_{AB}^{\text{adv}}(E) - \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle] = -\pi \langle [\dot{A}(0), B(0)]_{-\varepsilon} \rangle, \quad (4.120)$$

$$\int dE [E G_{AB}^c(E) - \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle] = \pi (\langle \dot{A}(0) B(0) \rangle + \varepsilon \langle B(0) \dot{A}(0) \rangle). \quad (4.121)$$

因此等号左边在实轴上是绝对可积的, 进而三种 Green 函数都必然会表现出相同的渐进行为:

$$\lim_{E \rightarrow \infty} G_{AB}^\alpha(E) \sim \frac{1}{E} \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle. \quad (4.122)$$

这也意味着 Green 的高能行为可以被一个比较容易计算的算符期望所约束.

注意到谱密度满足

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} \right)^n [2\pi S_{AB}^{(\varepsilon)}(t, t')] = \int dE S_{AB}^{(\varepsilon)}(E) E^n e^{-iE(t-t')}, \quad (4.123)$$

我们可以就 $t = t'$ 的情况定义**谱矩** (spectral moments)

$$M_{AB}^{(n)} = \int dE E^n S_{AB}^{(\varepsilon)}(E). \quad (4.124)$$

这和解析 Green 函数的高能展开直接相关:

$$G_{AB}(E) = \int dE' \frac{S_{AB}(E')}{E - E'} = \frac{1}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \int dE' S_{AB}(E') \left(\frac{E'}{E} \right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_{AB}^{(n)}}{E^{n+1}}. \quad (4.125)$$

根据我们刚刚得到的 Green 函数的高能渐进行为, 我们便能确定领头阶谱矩为

$$M_{AB}^{(0)} = \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle. \quad (4.126)$$

而在一般情况下, 我们可以在谱密度未知的情况下直接计算出谱矩:

$$M_{AB}^{(n)} = \left\langle \underbrace{[[[A, H]_{-} \cdots, H]_{-}, B]_{-\varepsilon}}_{n \text{ 个对易子}} \right\rangle \quad (4.127)$$

并进而计算出 Green 函数的高能展开.

4.8 Green 函数的解析性: Kramers-Kronig 关系

我们考虑上半平面中的解析函数 $f(z)$ 以及上半平面中的大圆围道 C , 那么

$$\oint_C dz \frac{f(z)}{z - z_0 + i0^+} = 0. \quad (4.128)$$

根据 Dirac 公式, 我们进而有

$$\mathcal{P} \int dz \frac{f(z)}{z - z_0} - i\pi f(z_0) = 0. \quad (4.129)$$

因此

$$f(z_0) = \frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int dz \frac{f(z)}{z_0 - z}. \quad (4.130)$$

类似的, 对于下半平面中的解析函数 $g(z)$, 我们可以得到

$$g(z_0) = -\frac{i}{\pi} \mathcal{P} \int dz \frac{g(z)}{z_0 - z}. \quad (4.131)$$

显然我们可以将 $f(z)$ 和 $g(z)$ 分别换成超前和推迟 Green 函数, 那么我们便发现这些 Green 函数的实部和虚部之间是互相联系的:

$$\operatorname{Re} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E_0) = \mp \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int dE \frac{\operatorname{Im} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E)}{E_0 - E}, \quad (4.132)$$

$$\operatorname{Im} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E_0) = \pm \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int dE \frac{\operatorname{Re} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E)}{E_0 - E}. \quad (4.133)$$

这便是 **Kramers-Kronig 关系**. 如果我们的谱密度是实数, 那么

$$\operatorname{Im} G_{AB}^{\text{ret}}(E) = -\operatorname{Im} G_{AB}^{\text{adv}}(E) = -\pi S_{AB}(E), \quad (4.134)$$

进而

$$\operatorname{Re} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E_0) = \mathcal{P} \int dE \frac{S_{AB}(E)}{E_0 - E}. \quad (4.135)$$

根据谱密度和因果 Green 函数的谱表示, 我们还可以得到

$$\operatorname{Re} G_{AB}^c(E) = \operatorname{Re} G_{AB}^{\text{ret/adv}}(E), \quad \operatorname{Im} G_{AB}^c(E) = -\pi S_{AB}(E) \frac{e^{\beta E} + \varepsilon}{e^{\beta E} - \varepsilon}. \quad (4.136)$$

因而我们根据 Kramers-Kronig 关系可以把不同 Green 函数联系在一起.

4.9 Green 函数的简单应用

Green 函数方法的威力在处理相互作用系统时才能得到充分彰显, 但现在我们先来通过两个精确可解的例子来展示 Green 函数技术的使用方法.

4.9.1 无相互作用 Bloch 电子

我们先来考虑彼此不存在相互作用而只和晶格相互作用的 Bloch 电子. 晶格-电子相互作用的影响表现为单电子的能量 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 并非简单的 $\mathbf{k}^2/(2m)$, 而不存在电子间的相互作用使得多体 Hamilton 量的形式极为简单:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (4.137)$$

我们考虑巨正则系综, 于是

$$\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu \hat{N}, \quad \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (4.138)$$

这个系统的所有性质都能被如下**单电子 Green 函数**导出:

$$G_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha(E) = \left\langle \left\langle a_{\mathbf{k}, \sigma}; a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^\alpha(E). \quad (4.139)$$

由于电子是费米子, 我们会在这些 Green 函数定义中取 $\varepsilon = -$. 为了计算 Green 函数, 我们只需要考虑它在频域上的运动方程

$$E G_{\mathbf{k}, \sigma}^\alpha(E) = \left\langle \left\{ a_{\mathbf{k}, \sigma}, a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right\} \right\rangle + \left\langle \left\langle [a_{\mathbf{k}, \sigma}, \mathcal{H}_0]; a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^\alpha(E). \quad (4.140)$$

等号右边第一项显然是 1, 第二项中的对易子为

$$\begin{aligned}
[a_{\mathbf{k},\sigma}, \mathcal{H}_0] &= \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} [\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu] [a_{\mathbf{k},\sigma}, a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\sigma'}] \\
&= \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} [\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu] (a_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\sigma'} - a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\sigma'} a_{\mathbf{k},\sigma}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}',\sigma'} [\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu] (a_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}',\sigma'} + a_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k}',\sigma'}) \\
&= [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] a_{\mathbf{k},\sigma}.
\end{aligned} \tag{4.141}$$

于是

$$EG_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E) = 1 + [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E), \tag{4.142}$$

并且我们可以得到推迟/超前 Green 函数为

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ret,adv}}(E) = \frac{1}{E - [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \pm i0^+}. \tag{4.143}$$

可以看到, Green 函数的奇点恰好对应系统中电子的各个激发能, 并且我们可以直接读出系统的单电子谱密度为

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \delta[E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)]. \tag{4.144}$$

我们做个 Fourier 变换即可得到时域中的 Green 函数:

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ret}}(t - t') = -i\Theta(t - t') e^{-i(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)(t - t')}, \tag{4.145}$$

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{adv}}(t - t') = i\Theta(t' - t) e^{-i(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)(t - t')}. \tag{4.146}$$

可以看到它们均表现出振荡行为, 这其实是 Green 函数在时域的普遍特征; 相互作用的引入会使其振幅出现衰减, 而这可以被诠释为准粒子的寿命.

我们使用运动方程只能确定因果 Green 函数应该形如

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^c(E) = \frac{C_1}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) + i0^+} + \frac{C_2}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) - i0^+}. \tag{4.147}$$

为了确定两个常数的值, 我们必须变换到时域

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^c(E) = [-i\Theta(t - t')C_1 + i\Theta(t' - t)C_2] e^{-i(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)(t - t')} \tag{4.148}$$

并考虑边界条件

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^c(t > t') = -i(1 - \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle), \quad G_{\mathbf{k},\sigma}^c(t < t') = i\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle, \tag{4.149}$$

于是

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^c(E) = \frac{1 - \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) + i0^+} + \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) - i0^+}. \tag{4.150}$$

为了确定 $\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$, 我们可以将谱密度代入谱定理

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int dE \frac{S_{AB}^{(-)}(E)}{e^{\beta E} + 1} e^{-iE(t - t')} \tag{4.151}$$

并得到

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k})-\mu)} + 1} \equiv f_{-}(\varepsilon(\mathbf{k})). \quad (4.152)$$

这正是 Fermi 分布函数.

事实上我们可以根据谱定理得到对态密度的一般定义:

$$N_e = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \int dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \sum_{\mathbf{k},\sigma} S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \int dE f_{-}(E) \sum_{\mathbf{k},\sigma} S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu). \quad (4.153)$$

定义态密度为

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu), \quad (4.154)$$

其中 N 为格点数, 于是

$$N_e = N \sum_{\sigma} \int dE f_{-}(E) \rho_{\sigma}(E). \quad (4.155)$$

我们这里的定义对相互作用粒子系依旧成立.

类似的, 我们也可以根据谱密度计算系统的内能:

$$U = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int dE (E + \varepsilon(\mathbf{k})) f_{-}(E) S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu). \quad (4.156)$$

考虑热力学关系

$$U(T, V) = -T^2 \left[\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{T} F(T, V) \right) \right]_T, \quad (4.157)$$

以及边界条件 $F(0, V) = U(0, V)$ 和热力学第三定律

$$\lim_{T \rightarrow 0} \frac{F(T) - F(0)}{T} = -S(T = 0, V) = 0, \quad (4.158)$$

我们便可以由内能确定自由能

$$F(T, V) = U(0, V) - T \int_0^T dT' \frac{U(T', V) - U(0, V)}{T'^2}. \quad (4.159)$$

有了自由能, 我们便可以进一步导出系统的其它热力学性质.

原则上对于一般的相互作用系统, 我们都可以从 Green 函数出发计算谱密度, 进而利用谱定理确定各态的占有数并得到系统的热力学势, 最终计算出宏观的物理可观测量.

4.9.2 自由自旋波

我们以自由自旋波为例考虑无相互作用玻色子, 其 Hamilton 量为

$$H_0 = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \omega(\mathbf{q}) a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}. \quad (4.160)$$

与自由 Bloch 电子相似, 我们来考虑单磁子 Green 函数

$$G_{\mathbf{q}}^{\alpha}(t, t') = \left\langle \left\langle a_{\mathbf{q}}(t); a_{\mathbf{q}}^{\dagger}(t') \right\rangle \right\rangle^{\alpha}. \quad (4.161)$$

考虑到磁子是玻色子, 我们在 Green 函数定义中均取对易子.

我们仍考虑巨正则系综

$$\mathcal{H} = H_0 - \mu \hat{N}. \quad (4.162)$$

由于平衡态下系统自由能极小, 故

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \mu = 0, \quad (4.163)$$

因而 $\mathcal{H} = H_0$. 与自由电子情况类似, 单磁子 Green 函数的运动方程满足

$$EG_{\mathbf{q}}^{\alpha}(E) = 1 + \omega(\mathbf{q})G_{\mathbf{q}}^{\alpha}(E), \quad (4.164)$$

并且我们直接可得推迟/超前 Green 函数

$$G_{\mathbf{q}}^{\text{ret/adv}}(E) = \frac{1}{E - \omega(\mathbf{q}) \pm i0^+}. \quad (4.165)$$

亦不难得到由对易子给出的单磁子谱密度

$$S_{\mathbf{q}}(E) = \delta(E - \omega(\mathbf{q})). \quad (4.166)$$

由于这是个对易谱密度, 所以我们只能根据谱定理确定磁子占有数密度为

$$m_{\mathbf{q}} = \langle a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\omega(\mathbf{q})} - 1} + D_{\mathbf{q}}. \quad (4.167)$$

为了确定常数项 $D_{\mathbf{q}}$, 我们不得不同时考虑反对易 Green 函数并得到

$$G_{\mathbf{q}}^{\epsilon=-}(E) = \frac{1 + 2m_{\mathbf{q}}}{E - \omega(\mathbf{q})}. \quad (4.168)$$

一般 $\omega(\mathbf{q}) \neq 0$, 所以

$$\lim_{E \rightarrow 0} EG_{\mathbf{q}}^{\epsilon=-}(E) = 0 \quad \Rightarrow \quad D_{\mathbf{q}} = 0, \quad (4.169)$$

进而磁子占有数密度为

$$m_{\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\beta\omega(\mathbf{q})} - 1}. \quad (4.170)$$

这正是初等量子统计给出的近独立玻色子系统满足的 Bose-Einstein 分布函数. 该系统热力学函数的推导与前述一致.

4.10 准粒子

即使是相互作用系统, 我们也可以从单电子 Green 函数或单电子谱密度出发完全确定平衡态下系统的热力学性质. 对相互作用 Green 函数性质的分析则可以导向准粒子的概念.

我们前面推导过单个能带中彼此间存在 Coulomb 相互作用的电子气的多体 Hamilton 量:

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma, \sigma'} v_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} a_{\mathbf{p}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (4.171)$$

其中

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (4.172)$$

并且 Coulomb 矩阵元为

$$v_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}_2) \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}_2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4.173)$$

我们还在紧束缚近似下推到过 Wannier 表象中的 Hamilton 量

$$H = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} v(i,j;k,l) a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma'}^\dagger a_{l,\sigma'} a_{k,\sigma}, \quad (4.174)$$

其中跳跃积分为

$$T_{ij} = \int d\mathbf{r} \omega^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \omega(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (4.175)$$

$\omega(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 为中心在 \mathbf{R}_i 处的 Wannier 函数. 同时

$$v(i,j;k,l) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \omega^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) \omega^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \omega(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_l) \omega(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_k). \quad (4.176)$$

为了说明系统的热力学性质可以由单电子 Green 函数 $\langle \langle a_{\mathbf{k},\sigma}; a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle^\alpha(E)$ 给出, 我们首先得通过某种方式把这东西算出来. 这是后续内容的核心, 但目前我们只需要考察其大致形式. 显然, 如果要通过运动方程计算 Green 函数, 那么我们绕不开计算 $a_{\mathbf{k},\sigma}$ 和巨正则 Hamilton 量 (因为我们现实中并不能确定粒子数) 的对易子:

$$[a_{\mathbf{k},\sigma}, \mathcal{H} \equiv H - \mu \hat{N}] = (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) a_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma'} v_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{q}) a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p},\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}. \quad (4.177)$$

进而在使用运动方程法计算 Green 函数时我们需要处理高阶 Green 函数

$$\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k};\mathbf{q}}^{\alpha;\sigma',\sigma}(E) \equiv \langle \langle a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p},\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}; a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle^\alpha(E), \quad (4.178)$$

据此运动方程可以被写作

$$[E - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu] G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E) = 1 + \sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma'} v_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k};\mathbf{q}}^{\alpha,\sigma',\sigma}(E). \quad (4.179)$$

由于此时存在非平凡的高阶 Green 函数, 我们没法直接求解运动方程. 如果我们假设⁴

$$\sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma'} v_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k};\mathbf{q}}^{\alpha,\sigma',\sigma}(E) := \Sigma_\sigma^\alpha(\mathbf{k}, E) G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E) \quad (4.180)$$

并称 $\Sigma_\sigma^\alpha(\mathbf{k}, E) \in \mathbb{C}$ 为**自能**, 那么我们可以确定相互作用 Green 函数应该形如

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E) = \frac{1}{E - [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + \Sigma_\sigma^\alpha(\mathbf{k}, E)]}. \quad (4.181)$$

⁴这个假设其实暗含了对 Green 函数空间的某种完备性要求?

如果我们的假设成立, 那么相互作用的存在仅表现为移动了单电子 Green 函数的极点, 我们称此时极点对应的能量为**准粒子**的激发, 而自能的虚部给出了准粒子的寿命, 因为这个虚部使得 Green 函数在时域上存在衰减. 记无相互作用电子的 Green 函数为 $G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E)$, 那么我们不难根据运动方程发现相互作用 Green 函数满足 **Dyson 方程**

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(E) = G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E) + G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E) \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, E) G_{\mathbf{k},\sigma}(E). \quad (4.182)$$

按此方程迭代下去, 我们发现相互作用 Green 函数可以被写成

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(E) = G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E) \sum_{n=0}^{\infty} [\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, E) G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E)]^n. \quad (4.183)$$

可以看到, 这正是我们在量子场论中计算完自能圈图后计算 dressed propagator 时需要做的重求和.

我们先悬置对这一假设是否合理的质疑⁵而来考察据此得到的 Green 函数将拥有什么样的性质. 自能一般是个复数, 我们考虑将其分解为

$$\Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, E) = R_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, E) + iI_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, E). \quad (4.184)$$

根据我们前面推导的 Green 函数的对称性关系, $(G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{adv}}(E))^* = G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ret}}(E)$, 故

$$(\Sigma_{\sigma}^{\text{adv}}(\mathbf{k}, E))^* = \Sigma_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, E). \quad (4.185)$$

进而我们可以不是一般性地仅考虑推迟 Green 函数的情况. 至于因果 Green 函数, 我们会在后面使用场论方法计算时再管它.

单电子谱密度的谱表示给出

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} |\langle E_n | a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} | E_m \rangle|^2 e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} + 1) \delta[E - (E_n - E_m)], \quad (4.186)$$

因此这始终是非负实数, 我们根据 Green 函数的谱表示便有

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ret}}(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{I_{\sigma}(\mathbf{k}, E)}{[E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + R_{\sigma}(\mathbf{k}, E))]^2 + I_{\sigma}^2(\mathbf{k}, E)} \geq 0. \quad (4.187)$$

这便意味着推迟 Green 函数中自能的虚部一定非正. 同时我们发现谱密度在由

$$E_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + R_{\sigma}(\mathbf{k}, E_{i,\sigma}(\mathbf{k})) \quad (4.188)$$

确定的**共振能** $E_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ 处取极大值. 如果在一段能量范围内自能的虚部 $I_{\sigma}(\mathbf{k}, E) = 0$, 那么通过对无穷小虚部的仔细分析可以发现在此能量范围内谱密度的共振峰表现为一系列位于各个共振能的 δ -函数, 这表现得就像一系列无衰变的自由粒子. 如果共振能处自能的虚部不为零但是远小于共振能, 那么我们会发现在共振能附近谱密度表现为以共振能为中心的 Lorentz 线型:

$$S_{\mathbf{k},\sigma}^{(i)}(E) \approx -\frac{1}{\pi} \frac{\alpha_{i,\sigma}^2(\mathbf{k}) I_{\sigma}(\mathbf{k}, E_{i,\sigma}(\mathbf{k}))}{(E - E_{i,\sigma}(\mathbf{k}))^2 + (\alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k}) I_{\sigma}(\mathbf{k}, E_{i,\sigma}(\mathbf{k})))^2}, \quad (4.189)$$

⁵后面我们将会看到这一形式在解析计算中常常是成立的.

其中

$$\alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = \left| 1 - \frac{\partial}{\partial E} R_\sigma(\mathbf{k}, E) \right|_{E=E_{i,\sigma}}^{-1}. \quad (4.190)$$

当然, 这仅在自能虚部远小于共振能的情况下成立; 现实中不乏违背这一假设而不呈现出 Lorentz 线型的系统. Anyway, 我们可以大致将相互作用系统的谱密度线型视为 Lorentz 线型和 δ -函数的组合.

如果我们考察共振能附近的谱密度在时域上的行为, 那么我们会发现自能虚部的存在确乎会使得时域谱密度表现为阻尼振荡, 振荡频率正是共振能 $E_{i,\sigma}$, 衰减系数则和自能的虚部有关. 因而我们可以期待一般的相互作用系统的时域谱密度 $S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t')$ 表现为阻尼和无阻尼振荡的叠加, 振荡频率为各个共振能量 $E_{i,\sigma}$.

我们现在可以正式引入准粒子了: 它们对应着相互作用系统的谱密度中主要的共振峰. 我们可以来考虑一个零温下的特例: 我们在 t 时刻向系统基态 $|E_0\rangle$ 中引入了一个 (\mathbf{k}, σ) 电子的操作便对应于

$$|\varphi_0(t)\rangle = a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t) |E_0\rangle, \quad |\mathbf{k}| > k_F. \quad (4.191)$$

零温下这个系统始终保持基态, 那么我们根据谱密度的定义便可以得到

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \langle \varphi_0(t) | \varphi_0(t') \rangle, \quad t > t'. \quad (4.192)$$

不难发现此时谱密度正是 t' 时产生的单个电子在 t 时刻仍存在的概率, 因而此时 $S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t')$ 刻画的正是系统中一个额外的电子随时间的演化 (即传播). 如果我们假设 $|\mathbf{k}| < k_F$, 那么 $S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t')$ 可以被相应地诠释为系统中一个空穴的传播.

如果 $\langle \varphi_0(t) | \varphi_0(t') \rangle$ 在 $t-t' \rightarrow \infty$ 时非零, 那么单粒子态 $|\varphi_0(t)\rangle$ 便是一个**稳态**; 反之便是一个**有限寿命态**. 通过一点点简单的量子力学计算不难发现无相互作用电子系中这样一个单粒子态是稳态; 存在相互作用时我们则需要插入一组能量本征态并得到

$$2\pi S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t') = \sum_n |\langle E_n | a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | E_0 \rangle|^2 e^{-i(E_n - E_0)(t-t')}. \quad (4.193)$$

此时 $a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t) |E_0\rangle$ 并不一定是能量本征态, 因而我们可以考虑展开

$$|\varphi_0\rangle = a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |E_0\rangle = \sum_m c_m |E_m\rangle. \quad (4.194)$$

此时将有许多展开系数不为零, 而这会使得谱密度表现为诸多不同频率的振荡的叠加, 而这些振荡在 $t-t' \rightarrow \infty$ 时会干涉相消, 进而使此时的单粒子态表现为有限寿命态. 不过有时我们可以做到对角化这样的相互作用谱密度并得到形如

$$2\pi S_{\mathbf{k},\sigma}(t-t') = \sum_i \alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k}) e^{-i\eta_{i,\sigma}^{\text{QP}}(\mathbf{k})(t-t')} \quad (4.195)$$

的表达式. 这在形式上和自由系统谱密度一致, 不过此时新的单粒子能量 $\eta_{i,\sigma}^{\text{QP}}(\mathbf{k})$ 一般会是复数, 其虚部便带来了谱密度的衰减. 我们随可以将这些能量对应于一些假想离子, 即**准粒子**. 我们可以将整个过程想象为引入系统的一个额外的 (\mathbf{k}, σ) 电子衰变成了一系列准粒子, 这些准粒子的能量和寿命分别由 $\eta_{i,\sigma}^{\text{QP}}(\mathbf{k})$ 的实部和虚部决定, 并且每个准粒子都有一个**谱权重** $\alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k})$, 这应该满足

$$\sum_i \alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = 1. \quad (4.196)$$

通过比较由 Green 得到的结果, 我们可确定这个谱权重正是 (4.190), 与粒子自能的实部有关. 我们习惯上会将准粒子的寿命取作

$$\tau_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{|\alpha_{i,\sigma}(\mathbf{k})I_{i,\sigma}(\mathbf{k})|}. \quad (4.197)$$

按此定义, 谱密度中的 δ -函数峰对应的准粒子拥有无限长的寿命.

我们还可以通过将准粒子能量 $E_{i,\sigma}(\mathbf{k})$ 展开为

$$E_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = T_{0;i,\sigma} + \frac{k^2}{2m_{i,\sigma}^*} + \mathcal{O}(k^4) \quad (4.198)$$

来定义准粒子的**有效质量** $m_{i,\sigma}^*(\mathbf{k})$. 借助准粒子能量的定义式 (4.188), 我们不难发现有效质量和自能的实部有关:

$$\frac{m_{i,\sigma}^*(\mathbf{k})}{m} = \frac{1 - \left(\frac{\partial R_\sigma(\mathbf{k}, E_{i,\sigma})}{\partial E_{i,\sigma}} \right)_{\varepsilon(\mathbf{k})}}{1 + \left(\frac{\partial R_\sigma(\mathbf{k}, E_{i,\sigma})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right)_{E_{i,\sigma}}}. \quad (4.199)$$

我们知道, 根据单电子谱密度可以得到**平均占有数**

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \left\langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle = \int dE f_-(E) S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu). \quad (4.200)$$

对于自由系统, 我们也定义了态密度 $\rho_\sigma(E)$ 为

$$N_e = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \int dE f_-(E) S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu) \equiv N \sum_{\sigma} \int dE f_-(E) \rho_\sigma(E). \quad (4.201)$$

类似的, 我们也可以定义**准粒子态密度**为

$$\rho_\sigma(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k},\sigma}(E - \mu). \quad (4.202)$$

根据谱密度的一般谱表示, 我们不难发现态密度是依赖于温度的. 它还会受到总粒子数的剧烈影响并且和系统的各个激发能有关, 因而它和实验有着十分密切的联系.

虽然我们这里考虑的单粒子 Green 函数无法给出前面利用线性响应定理推导出的响应函数 (因为它们包含的 Green 函数依赖大于一个产生/湮灭算符), 但是单粒子 Green 函数可以完全确定相互作用电子系统的平衡态热力学. 确定系统的热力学性质只需要确定一个系统的热力学势, 我们不妨将这个热力学势取作内能:

$$\begin{aligned} U = \langle H \rangle &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \left\langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) \left\langle a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p},\sigma'} a_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \left\langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p},\mathbf{k},\mathbf{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \left\langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p},\sigma'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.203)$$

利用谱定理, 我们可以用 Green 函数的虚部改写内能表达式:

$$U = \int dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \left[\sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k},\sigma}^{\text{ret}}(E) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\mathbf{q}) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} \Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{k};\mathbf{q}}^{\text{ret},\sigma',\sigma}(E) \right) \right]. \quad (4.204)$$

根据运动方程, 上式中的高阶 Green 函数可以被单电子 Green 函数表示出来, 于是

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \int dE \frac{1}{e^{\beta E} + 1} [E + \mu + \varepsilon(\mathbf{k})] \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}, \sigma}^{\text{ret}}(E) \right). \quad (4.205)$$

这也就是

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \int dE f_-(E) [E + \varepsilon(\mathbf{k})] S_{\mathbf{k}, \sigma}(E - \mu). \quad (4.206)$$

因而, 相互作用电子系的热力学函数也可以被单电子谱密度所完全决定.

5 相互作用粒子系

现在我们将使用 Green 函数方法来研究比较现实的存在相互作用的多体系统. 一方面, 我们将充分挖掘 Green 函数所蕴含的物理信息; 另一方面, 我们将展示实际计算 Green 函数使用的方法.

5.1 无限窄带电子的 Hubbard 模型

我们先以 Hubbard 模型为例展示处理相互作用的一些方法. 巨正则系综中 Hubbard 模型的 Hamilton 量为

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}. \quad (5.1)$$

根据之前的讨论, 为了研究系统的热力学性质, 我们只需要计算单电子 Green 函数

$$G_{i,j,\sigma}^\alpha(E) = \left\langle \left\langle a_{i,\sigma}; a_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^\alpha(E). \quad (5.2)$$

由于电子是费米子, 这里的 Green 函数应该用反对易子定义. 为了计算它, 现在我们只能考虑运动方程并且需要计算如下对易子:

$$[a_{i,\sigma}, \mathcal{H}] = \sum_m (T_{im} - \mu\delta_{im}) a_{m,\sigma} + U n_{i,-\sigma} a_{i,\sigma}. \quad (5.3)$$

这个对易子的第二项意味着在运动方程里会出现高阶 Green 函数

$$\Gamma_{ilm;j,\sigma}^\alpha = \left\langle \left\langle a_{i,-\sigma}^\dagger a_{l,-\sigma} a_{m,\sigma}; a_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle^\alpha(E). \quad (5.4)$$

进而单电子 Green 函数满足的运动方程为

$$(E + \mu) G_{ij,\sigma}^\alpha(E) = \delta_{ij} + \sum_m T_{im} G_{mj,\sigma}^\alpha(E) + U \Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha(E). \quad (5.5)$$

高阶 Green 函数的存在让我们还是没法直接求解这个运动方程, 但是我们可以计算高阶 Green 函数 $\Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha(E)$ 的运动方程并得到

$$(E + \mu - U) \Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha(E) = \delta_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle + \sum_m T_{im} [\Gamma_{iim;j,\sigma}^\alpha(E) + \Gamma_{imi;j,\sigma}^\alpha(E) + \Gamma_{mii;j,\sigma}^\alpha(E)]. \quad (5.6)$$

我们现在来考虑一个简化情况: 固体的能带无限窄, 因而 Hubbard 模型中的每个电子都被束缚在原子实附近并且

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = T_0, \quad T_{ij} = T_0 \delta_{ij}. \quad (5.7)$$

于是高阶 Green 函数链被截断了:

$$(E + \mu - U - T_0) \Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha(E) = \delta_{ij} \langle n_{i,-\sigma} \rangle. \quad (5.8)$$

由于晶格拥有平移对称性, $\langle n_{i,-\sigma} \rangle$ 应该和格点位置无关, 我们遂可以省略格点指标并记之为 $\langle n_{-\sigma} \rangle$, 进而原 Green 函数的运动方程便为

$$(E + \mu - T_0) G_{ii,\sigma}^\alpha(E) = 1 + \frac{U \langle n_{-\sigma} \rangle}{E - (T_0 - \mu + U)}. \quad (5.9)$$

我们于是可以得到推迟 Green 函数

$$G_{ii,\sigma}^{\text{ret}}(E) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{E - (T_0 - \mu) + i0^+} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{E - (T_0 + U - \mu) + i0^+}. \quad (5.10)$$

Green 函数的两个极点分别对应系统的两个激发能:

$$E_{1,\sigma} = E_{1,-\sigma} = T_0 - \mu, \quad E_{2,\sigma} = E_{2,-\sigma} = U + T_0 - \mu. \quad (5.11)$$

两个激发能分别对应于一个电子到达未被占据的格点以及到达本来有一个电子的格点的情况, 正是后者会带来 Coulomb 相互作用. 我们可以立即得到单电子谱密度为

$$S_{ii,\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii,\sigma}^{\text{ret}}(E) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(E - E_{1,\sigma}) + \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(E - E_{2,\sigma}). \quad (5.12)$$

为了确定未知的平均占有数, 我们考虑

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \int dE f_{-}(E) S_{ii,\sigma}(E) = (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) f_{-}(T_0) + \langle n_{-\sigma} \rangle f_{-}(T_0 + \mu). \quad (5.13)$$

我们可以直接解得

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{f_{-}(T_0)}{1 + f_{-}(T_0) - f_{-}(U + T_0)}. \quad (5.14)$$

可以看到, 此时谱密度完全是自旋无关的.

5.2 Hartree-Fock 近似

Hartree-Fock 近似是一种很粗略的近似方法, 但是能让我们第一时间对模型获得一些物理直观. 对 Hubbard 模型进行 Hartree-Fock 近似后得到的结果叫 **Stoner 模型**, 这个模型经常出现在对能带电子磁性行为的讨论中.

我们的出发点是如下算符恒等式;

$$AB = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (5.15)$$

我们可以将等号右边的第一项视为与算符在其热力学期望附近的涨落有关, 而 **Hartree-Fock 近似** (又名**分子场近似**) 便认为这些涨落很小可被忽略, 于是原来是非线性的乘积会被替换为一个线性的表达式:

$$AB \rightarrow A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (5.16)$$

利用这一近似, 我们便可以如下处理计算 Hubbard 模型单电子 Green 函数时遇到的算符乘积

$$a_{i,\sigma} \langle n_{i,-\sigma} \rangle \rightarrow a_{i,\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle + \langle a_{i,\sigma} \rangle n_{-\sigma} - \langle a_{i,\sigma} \rangle \langle n_{-\sigma} \rangle = a_{i,\sigma} \langle n_{-\sigma} \rangle. \quad (5.17)$$

进而在 Hartree-Fock 近似下

$$\Gamma_{iii;j,\sigma}^{\alpha}(E) \rightarrow \langle n_{-\sigma} \rangle G_{ij,\sigma}^{\alpha}(E). \quad (5.18)$$

原 Green 函数的运动方程便满足

$$(E + \mu - U \langle n_{-\sigma} \rangle) G_{ij,\sigma}^{\alpha}(E) = \delta_{ij} + \sum_m T_{im} G_{mj,\sigma}^{\alpha}(E). \quad (5.19)$$

为了求解这一方程组, 我们考虑对位置指标进行 Fourier 变换:

$$f_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (5.20)$$

此处我们考虑了晶格的平移对称性使得运动方程中 T_{ij} 与 G_{ij} 本质上仅依赖于 $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. 进而波矢空间中运动方程满足

$$(E + \mu - U \langle n_{-\sigma} \rangle) G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E) = 1 + \varepsilon(\mathbf{k}) G_{\mathbf{k},\sigma}^\alpha(E), \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{i,j} T_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (5.21)$$

进而

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{E - [\varepsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_{-\sigma} \rangle - \mu]} \equiv G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E - U \langle n_{-\sigma} \rangle). \quad (5.22)$$

可以看到, Hartree-Fock 近似后的 Hubbard 单电子 Green 函数其实只是经过依赖自旋的能量重整化的自由 Green 函数. 记**磁化强度**为

$$m = \frac{1}{2}(\langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle), \quad (5.23)$$

并记**粒子密度**为

$$n = \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle, \quad (5.24)$$

那么此时准粒子能量便为

$$E_\sigma(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}Un - z_\sigma mU, \quad (5.25)$$

其中 z_σ 为 σ 的符号. 现在为了彻底求解该模型, 我们只需要确定占有数密度 $\langle n_\sigma \rangle$ 的表达式. 我们只需要根据推迟 Green 函数确定单粒子谱密度为

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \delta[E - \varepsilon(\mathbf{k}) - U \langle n_{-\sigma} \rangle + \mu]. \quad (5.26)$$

进而谱定理, 我们有

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \int dE f_-(E) S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_{-\sigma} \rangle - \mu)] + 1}. \quad (5.27)$$

注意到

$$\langle n_\sigma \rangle = \langle n_{i,\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \quad (5.28)$$

并且 $\langle n_{i,\sigma} \rangle$ 和 i 无关, 因而我们可以直接取 $\mathbf{R}_i = 0$ 并得到

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_{-\sigma} \rangle - \mu)] + 1}. \quad (5.29)$$

为了从这个没法直接求解的隐函数方程里获得点物理信息, 我们考虑用它来改写磁化强度:

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_\downarrow \rangle - \mu)] + 1} - \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U \langle n_\uparrow \rangle - \mu)] + 1} \right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U(n/2 - m) - \mu)] + 1} - \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U(n/2 + m) - \mu)] + 1} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sinh(\beta U m) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m), \end{aligned} \quad (5.30)$$

其中

$$g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m) = \left\{ \cosh(\beta U m) + \cosh \left[\beta \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} U n - \mu \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (5.31)$$

类似的, 我们可以将粒子密度改写为

$$n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ e^{-\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} U n - \mu)} + \cosh(\beta U m) \right\} g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m). \quad (5.32)$$

此时不难发现无磁化解 $m = 0$ 总是存在的. 为了寻找非平凡解, 我们先考虑高温极限: 此时显然

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m) = \frac{1}{2}, \quad (5.33)$$

进而

$$m = \frac{1}{4} \sinh(\beta U m) \approx \frac{1}{4} \beta U m. \quad (5.34)$$

在此极限下方程只有 $m = 0$ 一个解, 这和我们的直观相符. 如果该系统存在 $m \neq 0$ 的解, 那么我们一定可以找到一个铁磁相变的临界温度 T_C , 此时 m 取非常小的非零值并且我们可以做如下近似:

$$\sinh(\beta U m) \approx \beta U m, \quad g_{\mathbf{k}}(\beta, U, m) = \left\{ 1 + \cosh \left[\beta \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} U n - \mu \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (5.35)$$

因而这个临界温度应该近似满足

$$\frac{1}{2} \beta_C U \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + \cosh \left[\beta_C \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} U n - \mu \right) \right]} = 1. \quad (5.36)$$

存在这个临界温度的另一个基本条件是解 $T_C \geq 0$, 进而临界情况是 $\beta_C \rightarrow \infty$ 时上式有解. 因为

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\beta}{1 + \cosh(\beta x)} = 2\delta(x), \quad (5.37)$$

我们便得到临界情况

$$U \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} U n - \mu) = 1. \quad (5.38)$$

在 $T \approx 0$ 时, μ 可以被换成系统的 Fermi 能 E_F , 而这约定于自由系统的 Fermi 能 ε_F 加上 Coulomb 相互作用能 $\frac{1}{2} U n$. 于是我们得到了 Hubbard 模型存在铁磁相变的 **Stoner 判据**:

$$U \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon(\mathbf{k})) \geq 1. \quad (5.39)$$

尽管我们在推导它时做了许多假设, 但是它在定性预测上是很有用的.

如果系统出现了自发磁化, 那么准粒子的能量谱会出现一个依赖温度的**交换劈裂**

$$\Delta E_{\text{ex}} = 2mU. \quad (5.40)$$

这在我们的例子中是与 \mathbf{k} 无关的. 准粒子能量 $E_{\sigma}(\mathbf{k})$ 代表了我们在系统中引入一个额外的 (\mathbf{k}, σ) 电子所需的能量. 因而, 如果我们将系统中的一个电子由 (\mathbf{k}, σ) 态激发到了 $(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma')$ 态, 那么其需要的能量为

$$\Delta E_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}; \mathbf{q}) = E_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\sigma}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + mU(z_{\sigma} - z_{\sigma'}). \quad (5.41)$$

进而, 如果不存在自旋翻转, 那么所需的激发能恰等于 $U = 0$ 的自由系统的激发能.

5.3 Hubbard 解

显然我们也可以直接对 Hubbard Hamilton 量应用 Hartree-Fock 近似并得到 Stoner 模型的 Hamilton 量

$$\mathcal{H}_S = \sum_{i,j,\sigma} [T_{ij} + (U \langle n_{-\sigma} \rangle - \mu) \delta_{ij}] a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} \equiv \sum_{\mathbf{k},\sigma} [E_\sigma(\mathbf{k}) - \mu] a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (5.42)$$

显然这给出了和对高阶 Green 函数应用 Hartree-Fock 近似一样的结果.

我们也可以在用运动方程法计算 Hubbard 模型单电子 Green 函数时在 $\Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha(E)$ 的运动方程中再进行截断, 此时我们处理的不再是单粒子 Green 函数而是多粒子 Green 函数. 现在我们可以引入**粒子关联**这个概念并把单粒子模型中无法观测的效应都打包塞到里面, 即它代表了一般的**多体效应**.

我们现在考虑当初由 Hubbard 自己引入的解耦运动方程的方法: 我们可以对高阶 Green 函数里的算符应用 Hartree-Fock 近似并得到

$$\begin{aligned} \Gamma_{im;j,\sigma}^\alpha &= \left\langle \left\langle a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i,-\sigma} a_{m,\sigma}; a_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle \\ &= \left\langle \left\langle \langle n_{-\sigma} \rangle a_{m,\sigma} + n_{-\sigma} \langle a_{m,\sigma} \rangle; a_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle \right\rangle \\ &= \langle n_{-\sigma} \rangle G_{mj,\sigma}^\alpha(E) \quad (i \neq m). \end{aligned} \quad (5.43)$$

注意由于粒子数和自旋守恒, 我们应该有 $\langle a_{m,\sigma} \rangle = 0$. 类似的, 我们可以得到

$$\Gamma_{imi;j,\sigma}^\alpha \rightarrow \left\langle a_{i,-\sigma}^\dagger a_{m,-\sigma} \right\rangle G_{ij,\sigma}^\alpha, \quad (5.44)$$

$$\Gamma_{mii;j,\sigma}^\alpha \rightarrow \left\langle a_{m,-\sigma}^\dagger a_{i,-\sigma} \right\rangle G_{ij,\sigma}^\alpha. \quad (5.45)$$

其中均有 $m \neq i$. 将这些近似代入 $\Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha$ 的运动方程中并利用晶格的平移对称性进行约化即可得到

$$(E + \mu - T_0 - U) \Gamma_{iii;j,\sigma}^\alpha = \delta_{ij} \langle n_{-\sigma} \rangle + \langle n_{-\sigma} \rangle \sum_{m \neq i} T_{im} G_{mj,\sigma}^\alpha(E). \quad (5.46)$$

将对应的高阶 Green 函数解代入单电子 Green 函数的运动方程中便会给出

$$(E + \mu - T_0) G_{ij,\sigma}^\alpha(E) = \left(\delta_{ij} + \sum_{m \neq i} T_{im} G_{mj,\sigma}^\alpha(E) \right) \left(1 + \frac{U \langle n_{-\sigma} \rangle}{E + \mu - T_0 - U} \right). \quad (5.47)$$

我们可以利用对格点指标的 Fourier 变换求解这个方程并得到

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{E - [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + \Sigma_\sigma(E)]}, \quad (5.48)$$

其中

$$\Sigma_\sigma(E) = U \langle n_{-\sigma} \rangle \frac{E + \mu - T_0}{E + \mu - T_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}. \quad (5.49)$$

可以看到, 此时 Green 函数恰好具有我们在讨论准粒子时所假设的那种形式. 并且 $U \rightarrow 0$ 时 Green 函数恰好给出自由电子的情况, 而 $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow T_0$ 恰好给出窄带极限下的情况. 除了

让 $U = 0$, $\langle n_{-\sigma} \rangle = 0$ 也可以让自能项为零, 因为此时 σ -电子并不存在与它相互作用同类电子

在此处的 Hubbard 解中自能项是实的并且与 \mathbf{k} 无关, 进而准粒子谱密度是 δ -函数:

$$S_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \delta[E - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu - \Sigma_{\sigma}(E)] = \sum_{j=1}^2 \alpha_{j,\sigma}(\mathbf{k}) \delta(E + \mu - E_{j,\sigma}(\mathbf{k})), \quad (5.50)$$

其中

$$E_{j,\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{U + \varepsilon(\mathbf{k}) + T_0}{2} + (-1)^j \sqrt{\frac{1}{4}(T_0 + U - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + U \langle n_{-\sigma} \rangle (\varepsilon(\mathbf{k}) - T_0)}, \quad (5.51)$$

$$\alpha_{j,\sigma}(\mathbf{k}) = (-1)^j \frac{E_{j,\sigma}(\mathbf{k}) - T_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{E_{2,\sigma}(\mathbf{k}) - E_{1,\sigma}(\mathbf{k})}. \quad (5.52)$$

可以看到, 对给定任意 \mathbf{k} 均存在两个准粒子能级, 二者对应两类有着无限长寿命的准粒子. 上下能级间距约为 U , 这可以被诠释为上能级中的电子倾向于跃迁到被一个自旋相反的上能级电子占据的格点上, 而下能级中的电子倾向于跃迁到未被占据的格点上.

5.4 插值法

我们先考虑自由系统的 Hamilton 量

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{i,j,\sigma} (T_{ij} - \mu \delta_{ij}) a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}, \quad (5.53)$$

这在无穷窄带的原子极限下有着更简单的形式

$$\mathcal{H}_{00} = \sum_{i,\sigma} (T_0 - \mu) a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}. \quad (5.54)$$

我们称这个 Hamilton 量给出的单粒子 Green 函数为**形心函数**

$$G_{00,\sigma}(E) = \frac{1}{E - T_0 + \mu}. \quad (5.55)$$

我们知道, \mathcal{H}_0 对应的单粒子 Green 函数为

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k}) + \mu}, \quad (5.56)$$

那么我们显然有

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E) = \frac{1}{G_{00,\sigma}^{-1}(E) + T_0 - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (5.57)$$

我们遂据此**假设**任意相互作用系统的单粒子 Green 函数都可以被原子极限下给出的形心函数 $G_{0,\sigma}(E)$ 按

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{G_{0,\sigma}^{-1}(E) + T_0 - \varepsilon(\mathbf{k})} \quad (5.58)$$

近似, 进而准粒子态密度可以被近似为

$$\rho_{\sigma}(E) = \rho_0(G_{0,\sigma}^{-1}(E - \mu) + T_0). \quad (5.59)$$

不难验证这一插值法在 Hubbard 模型上会给出 Hubbard 解, 并且根据其构造不难发现其在无相互作用极限和原子极限下都能给出精确解. 这一 Hubbard 解的问题在于即便能带宽度 W 远小于 Coulomb 相互作用强度 U , 能带仍会出现劈裂, 这表明此时 Hubbard 解的有效性是存疑的.

5.5 矩法

我们也可以绕开用运动方程计算单粒子 Green 函数而考虑单粒子谱密度

$$S_{ij,\sigma}(E) = \frac{1}{2\pi} \int dt(t-t') e^{-iE(t-t')} \left\langle \{a_{i,\sigma}(t), a_{j,\sigma}^\dagger(t')\} \right\rangle. \quad (5.60)$$

我们可以根据已知的精确可解的极限情况并猜测出包含一系列未知参数 (假设为 m 个) 的谱密度的 ansatz, 然后我们可以通过

$$M_{\mathbf{k},\sigma}^{(n)} = \int dE E^n S_{\mathbf{k},\sigma}(E) \quad (5.61)$$

计算出 ansatz 给出的各阶谱矩. 由于完整模型的各个谱矩总能通过

$$M_{AB}^{(n)} = \left\langle \underbrace{[[[A, H]_-, \dots, H]_-, B]_{-\epsilon}}_{n \text{ 个对易子}} \right\rangle \quad (5.62)$$

精确算出, 我们便可以寻找使得 ansatz 给出的前 m 阶谱矩尽量接近其精确值的自由参数并认为此时的 ansatz 能够近似代表完整模型的谱密度.

这一方法类似于有效场论中的 matching, 并且在足够合适的 ansatz 下可以比较好地刻画 Hubbard 模型中的自发磁化.

5.6 Hubbard 模型和 Heisenberg 模型的等价性

我们可以使用初等的微扰论证明 $U/W \gg 1$ 并且每个格点原子仅贡献一个电子时 Hubbard 模型和 Heisenberg 模型是等价的. 我们选择将电子在不同格点间的跃迁视为微扰, 进而我们可以使用二阶微扰论构造出这一部分微扰项在自由 Hamilton 量的本征空间上的二阶有效 Hamilton 量. 通过定义自旋算符为

$$S_i^z = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} z_{\sigma} n_{i,\sigma}, \quad S_i^{\sigma} = a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,-\sigma}, \quad (5.63)$$

这一有效 Hamilton 量可以被写成

$$H_{\text{eff}} = P_0 \sum_{i \neq j} \frac{T_{ij}^2}{U} \left(2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{2} \right) P_0. \quad (5.64)$$

这恰好是 Heisenberg 模型中相互作用项的形式, 并且我们发现 Heisenberg 模型中的交换积分为

$$J_{ij} = -2 \frac{T_{ij}^2}{U}, \quad (5.65)$$

可以看到这一系数确实和电子在不同格点间跃迁的"交换效应"有关.

5.7 电子的集体激发

前面仅考虑了单电子 Green 函数所刻画单粒子效应, 现在我们将转而考虑需要被其它类型的 Green 函数描述的集体激发效应 (如电荷密度波和自旋密度波).

5.7.1 电荷屏蔽 (Thomas-Fermi 近似)

我们先来考虑在均匀的带正电的离子海中的电子系如何能出现集体激发效应. 首先考虑无电子间相互作用的 Sommerfield 模型, 那么我们很容易便能计算出和空间位置无关的均匀地粒子密度

$$n_0 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} = \frac{(2m\varepsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2} \equiv n_0(\varepsilon_F). \quad (5.66)$$

现在我们引入一个固定在原点的电荷 $-e$, 那么受这个电荷扰动的系统将存在势场 $\varphi(\mathbf{r})$ 并使得此时电子密度分布变成依赖于位置的 $n(\mathbf{r})$. 为了计算这个分布, 我们可以考虑单电子 Schrödinger 方程

$$-\frac{1}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) - e\varphi(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (5.67)$$

电子密度便为

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (5.68)$$

在 **Thomas-Fermi 近似** 中, 我们认为引入固定电荷后单电子的能量可以被直接取作

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - e\varphi(\mathbf{r}), \quad (5.69)$$

其中 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 为引入电荷前的能量. 这个表达式乍看起来很有问题, 因为它要求我们同时确定电子的位置和动量. 我们只能把这里的电子想象成位置不确定度为 $\mathcal{O}(1/k_F)$ 的波包并假设 $\varphi(\mathbf{r})$ 在这一空间尺度上变化不大.

未引入固定电荷前的电子密度为

$$n_0(\varepsilon_F) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F)} + 1}, \quad (5.70)$$

而根据 Thomas-Fermi 近似, 引入电荷后的电荷密度分布便为

$$n(\mathbf{r}) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) - e\varphi(\mathbf{r}) - \varepsilon_F)} + 1} = n_0(e\varphi(\mathbf{r}) + \varepsilon_F) = \frac{[2m(e\varphi(\mathbf{r}) + \varepsilon_F)]^{3/2}}{3\pi^2}. \quad (5.71)$$

假设 $e\varphi(\mathbf{r})$ 相较 ε_F 而言很弱, 那么我们可以将 $n(\mathbf{r})$ 展开为

$$n(\mathbf{r}) \approx n_0 \left(1 + \frac{3}{2} \frac{e\varphi(\mathbf{r})}{\varepsilon_F} \right). \quad (5.72)$$

这表明在 $\mathbf{r} = 0$ 处存在低电子密度区, 背景的正离子将更多地显现出来. 显露出的背景正离子让系统之外的观察者认为引入的电荷的 Coulomb 势被屏蔽了 (即 $\varphi(\mathbf{r})$ 形式上弱于 Coulomb 势), 并且只有距离这个电荷某个特征长度 (我们称之为**屏蔽长度**) 以内的电子会受到它的显著影响. 屏蔽长度的计算依赖于对 $\varphi(\mathbf{r})$ 的求解, 我们需要考虑 Poisson 方程

$$\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{e}{\varepsilon}\delta(\mathbf{r}) + \frac{e}{\varepsilon_0}[n_0 - n(\mathbf{r})], \quad (5.73)$$

此即

$$\left(\nabla^2 - \frac{3}{2} \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_F} \right) \varphi(\mathbf{r}) = \frac{e}{\varepsilon_0} \delta(\mathbf{r}). \quad (5.74)$$

这打眼一看就能用 Fourier 变换求解, 我们便得到

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \frac{-e}{\varepsilon_0(q^2 + q_{\text{TF}}^2)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-q_{\text{TF}} r}, \quad q_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{3n_0 e^2}{2\varepsilon_0 \varepsilon_F}}. \quad (5.75)$$

可以看到, 我们得到了个 Yukawa 势, 并且电荷屏蔽长度为

$$\lambda_{\text{TF}} \equiv q_{\text{TF}}^{-1} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_F}{3n_0 e^2}}. \quad (5.76)$$

金属中这种屏蔽效应十分明显. 退极化函数可以反映介质中屏蔽效应的强弱: 我们将退极化函数定义为

$$\frac{\rho_{\text{induced}}(\mathbf{q}, E)}{\rho_{\text{external}}(\mathbf{q}, E)} = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, E)} - 1, \quad (5.77)$$

对于我们的情况,

$$\rho_{\text{induced}}(\mathbf{q}, E) = \int dt e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} e[n_0 - n(\mathbf{r})] = \frac{eq_{\text{TF}}^2}{V(q^2 + q_{\text{TF}}^2)} \delta(E), \quad (5.78)$$

$$\rho_{\text{external}}(\mathbf{q}, E) = -\frac{e}{V} \delta(t). \quad (5.79)$$

进而我们得到了 Thomas-Fermi 近似中退极化函数的表达式

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 + \frac{q_{\text{TF}}^2}{q^2}. \quad (5.80)$$

Thomas-Fermi 模型的关键问题在于它是静态的, 而真正的电荷屏蔽应该是一个弛豫到平衡态的动力学过程. 当我们把电荷引入系统后, 周围的电子会先被排斥远离直到电荷附近显露出了足够多的正电荷, 随后在正电荷的吸引作用下电子又会向中心运动, 此后它们又会远离中心. 我们期待系统的电荷密度在时域上会出现如此循环往复地振荡, 因而它应该对应着某个固有频率, 而与之对应的集体激发便叫做等离激元, 我们现在便要在理论上研究它.

5.7.2 RPA 近似, 电荷密度波和等离激元

我们已经根据线性响应定理推导过平衡态系统在含时扰动下的退极化函数

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{q}, E) = 1 + v_0(\mathbf{q}) \left\langle \left\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle^{\text{ret}}(E), \quad v_0(\mathbf{q}) = \frac{1}{V} \frac{e^2}{\varepsilon_0 q^2}. \quad (5.81)$$

其中动量空间内的电荷密度算符为

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (5.82)$$

我们期待根据多体理论得到的退极化函数在静态极限 $E, q \rightarrow 0$ 下给出与 Thomas-Fermi 近似一致的结果.

可以看到, 现在我们的核心问题便是计算推迟 Green 函数

$$\chi(\mathbf{q}, E) = \left\langle \left\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle^{\text{ret}}(E) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left\langle \left\langle a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle^{\text{ret}}(E) \equiv \sum_{\mathbf{k}, \sigma} f_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{q}, E). \quad (5.83)$$

我们称之为 **generalized susceptibility**. 先考虑就无相互作用系统计算这个函数, 那么系统 Hamilton 量为

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} (\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu) a_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma}, \quad (5.84)$$

我们要考虑的便是对易子

$$\begin{aligned} [a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \mathcal{H}_0] &= \sum_{\mathbf{p}, \sigma'} (\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu) [a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, a_{\mathbf{p}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'}] \\ &= \sum_{\mathbf{p}, \sigma'} (\varepsilon(\mathbf{p}) - \mu) (\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'} - \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} \delta_{\sigma, \sigma'} a_{\mathbf{p}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) \\ &= [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})] a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \end{aligned} \quad (5.85)$$

以及

$$[a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \hat{\rho}_{\mathbf{q}}] = \sum_{\mathbf{p}, \sigma'} [a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p}, \sigma'}] = \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} - \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (5.86)$$

因此

$$f_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{q}, E) = \frac{\langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle^{(0)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \rangle^{(0)}}{E - [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]}. \quad (5.87)$$

于是自由系统中的 generalized susceptibility 便为

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q}, E) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle^{(0)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \rangle^{(0)}}{E - [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]}. \quad (5.88)$$

如果引入电子间相互作用, 那么我们将无法精确算出 generalized susceptibility. 现在考虑 Jellium 模型

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} v_0(\mathbf{q}) (\hat{\rho}_{\mathbf{q}} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}} - \hat{N}). \quad (5.89)$$

我们现在还是只需要计算出 $f_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{q}, E)$, 不过相互作用项的引入使得其运动方程变成了

$$[E - (\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))] f_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{q}, E) = \langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} v_0(\mathbf{q}_1) \left\langle \left\langle [a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} \hat{\rho}_{-\mathbf{q}_1}]; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle. \quad (5.90)$$

其中我们考虑到了

$$[a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \hat{N}] = 0. \quad (5.91)$$

考虑到 $v_0(\mathbf{q}) = v_0(-\mathbf{q})$, 我们可以将运动方程改写为

$$\begin{aligned} [E - (\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))] f_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{q}, E) &= \\ &\langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}_1 \neq 0} v_0(\mathbf{q}_1) \\ &\times \left(\left\langle \left\langle \{ \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}, a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}_1, \sigma} \}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle - \left\langle \left\langle \{ \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1}, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_1, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (5.92)$$

现如今等号右边的高阶 Green 函数仅包含反对易子. 我们接下来考虑使用**随机相位近似 (RPA)**: 首先, 我们在高阶 Green 函数中使用 Hartree-Fock 近似并保持动量守恒, 于是

$$\hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}_1,\sigma} \rightarrow \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}_1} \hat{\rho}_{\mathbf{q}_1} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle. \quad (5.93)$$

随后, 占有数被替换为自由系统的占有数 $\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)}$. 现在 $f_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{q}, E)$ 的运动方程便可以化为

$$[E - (\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}))] f_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{q}, E) = \left(1 + v_0(\mathbf{q}) \left\langle \left\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle\right) (\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \rangle^{(0)}). \quad (5.94)$$

进而

$$f_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{q}, E) = \left(1 + v_0(\mathbf{q}) \left\langle \left\langle \hat{\rho}_{\mathbf{q}}; \hat{\rho}_{\mathbf{q}}^\dagger \right\rangle \right\rangle\right) f_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(\mathbf{q}, E). \quad (5.95)$$

对 \mathbf{k}, σ 求和后便有

$$\chi_{\text{RPA}} = (1 + v_0(\mathbf{q}) \chi_{\text{RPA}}) \chi_0(\mathbf{q}, E) \Rightarrow \chi_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, E) = \frac{\chi_0(\mathbf{q}, E)}{1 - v_0(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, E)}. \quad (5.96)$$

于是, 随机相位近似下退极化函数为

$$\varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, E) = 1 - v_0(\mathbf{q}) \chi_0(\mathbf{q}, E) = 1 - v_0(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \rangle^{(0)}}{E - [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]}. \quad (5.97)$$

这个表达式叫 **Lindhard 函数**. 既然退极化函数通过

$$\rho_{\text{ind}}(\mathbf{q}, E) = \left(\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{q}, E)} - 1 \right) \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}, E) \quad (5.98)$$

描述了引入的电荷源诱导的系统中的电荷密度涨落, 那么退极化函数的零点便代表了电荷密度涨落的固有频率, 此时我们要求

$$f_{\mathbf{q}}(E) \equiv v_0(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \rangle^{(0)}}{E - [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]} = 1. \quad (5.99)$$

我们可以如此论证解 $E(\mathbf{q})$ 的存在性: 考虑求和涉及的两个 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ 使得 $\varepsilon(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_1)$ 是最大的小于 $\varepsilon(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_2)$ 的波矢, 那么 $E \rightarrow (\varepsilon(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_1) + 0^+)$ 时 $f_{\mathbf{q}}(E) \rightarrow +\infty$, 而 $E \rightarrow (\varepsilon(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}_2) - 0^+)$ 时 $f_{\mathbf{q}}(E) \rightarrow -\infty$, 进而这一区间中必然至少存在一点使得 $f_{\mathbf{q}}(E) = 1$. 由于 \mathbf{k} 有诸多取值, 我们可以断定这种解一定有很多个. 但是在热力学极限下 $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})$ 会形成一个连续谱, 此时这种解对应的能量取值便刚好等于单粒子激发能 $E_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})$ 了, 因而这是一类比较平凡的解. 不过我们可以找到一类非平凡解: 记 φ_m 为 $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})$ 的上限, 那么 $E \rightarrow \varphi_m + 0^+$ 时 $f_{\mathbf{q}}(E) \rightarrow +\infty$, 同时 $E \rightarrow \infty$ 时 $f_{\mathbf{q}}(E) \rightarrow 0$, 因此在我们必然能在区间 $[\varphi_m(\mathbf{q}), +\infty)$ 上找到一类解 $E_p(\mathbf{q})$, 这代表了系统中的**集体激发**, 即**等离子激元**. 我们记

$$E_p(\mathbf{q}) \equiv \hbar \omega_p(\mathbf{q}). \quad (5.100)$$

这种集体激发会涉及数目相当大的电子, 因而其能量通常较大 (5 到 25 电子伏) 并且通常无法被热激发, 但我们可以用高能粒子轰击金属来激发它.

现在让我们尝试就 $|\mathbf{q}| \ll 1$ 来确定色散关系 $\omega_p(\mathbf{q})$. 我们假设

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2m^*}, \quad (5.101)$$

其中 m^* 是电子的有效质量. 进而我们有

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} = \langle n_{-\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} \quad (5.102)$$

并且我们能借此将 $f_{\mathbf{q}}(E) = 1$ 写作

$$2v_0(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]}{E_p^2 - [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})]^2}. \quad (5.103)$$

此即

$$\omega_p^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_0 m^* V q^2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} (q^2 + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{q})}{1 - \frac{1}{\omega_p^2} \left(\frac{q^2}{2m^*} + \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m^*} \right)^2}. \quad (5.104)$$

在 $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ 的极限下, 我们可以忽略分母中括号里的项. 考虑到

$$\sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} = N_e = n_0 V, \quad (5.105)$$

$$\sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} (-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (5.106)$$

我们便得到了短波极限下的等离子体振荡频率

$$\omega_p^2(\mathbf{q} = 0) = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m^*}. \quad (5.107)$$

对于非零的小 $|\mathbf{q}|$, 我们可以将等号右边的分母展开到二阶并得到

$$\omega_p^2(\mathbf{q}) = \omega_p^2(0) + \frac{3e^2}{\varepsilon_0 V m^{*3} \omega_p^2(\mathbf{q})} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{q})^2. \quad (5.108)$$

我们可以将等号右边的 $\omega_p(\mathbf{q})$ 换成 $\omega_p(0)$ 并在低温下把对 \mathbf{k} 的求和换成在 Fermi 面内的积分, 同时对 \mathbf{k}, \mathbf{q} 的夹角在 $[0, \pi]$ 上积分, 进而我们得到了色散关系

$$\omega_p^2(\mathbf{q}) = \omega_0^2(0) + \frac{3}{5} \frac{k_F^2}{m^{*2}} q^2 + \mathcal{O}(q^4), \quad (5.109)$$

此即

$$\omega_p(\mathbf{q}) = \omega_p(0) + \frac{3}{10} \frac{k_F^2}{m^{*2} \omega_p(0)} q^2 + \mathcal{O}(q^4). \quad (5.110)$$

为了比较 RPA 近似下的结果和半经典 Thomas-Fermi 模型的差别, 我们来考察一下 $E = 0$ 时的 RPA 退极化函数

$$\varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}, 0) = 1 + 2v_0(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)}}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (5.111)$$

我们在低温时还是可以将对 \mathbf{k} 的求和换成 Fermi 面内的积分:

$$\sum_{\mathbf{k},\sigma} \frac{\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)}}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_V d\mathbf{k} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})} \equiv I(\mathbf{q}). \quad (5.112)$$

可以计算得到

$$I(\mathbf{q}) = \frac{Vm^*k_F}{2\pi^2} g\left(\frac{q}{2k_F}\right), \quad (5.113)$$

其中

$$g(u) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2u} (1 - u^2) \ln \frac{|1+u|}{|1-u|} \right). \quad (5.114)$$

于是 RPA 近似中静态极限下的退极化函数为

$$\varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q}) = 1 + \frac{q_{\text{TF}}^2}{q^2} g\left(\frac{q}{2k_F}\right). \quad (5.115)$$

这里的 $g\left(\frac{q}{2k_F}\right)$ 叫做 **Lindhard 修正**, 它在 $q = 0$ 时为 1 并且在 $q = 2k_F$ 时非解析. 这一非解析性会带来有趣的结果: 引入外电荷后介质内的静电场满足的 Poisson 方程为

$$q^2 \varphi(\mathbf{q}) = \frac{1}{\varepsilon_0} (\rho_{\text{ind}} + \rho_{\text{ext}}) = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{RPA}}(\mathbf{q})} \rho_{\text{ext}}(\mathbf{q}). \quad (5.116)$$

我们求解这一 Poisson 方程后会发现 $\varphi(\mathbf{r})$ 在长程下表现为

$$\varphi(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^3} \cos(2k_F r), \quad (5.117)$$

因而此时被屏蔽的势并不会随距离增大指数衰减而会表现出长程振荡, 这叫做 **Friedel 振荡**.

5.7.3 自旋密度波和磁子

相互作用能带电子中还存在着一种和它们的自旋有关的集体激发. 我们曾根据线性响应定理推导过**横向磁化率**

$$\chi_{ij}^{+-}(E) = -\gamma \left\langle \left\langle a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}; a_{j,\downarrow}^\dagger a_{j,\uparrow} \right\rangle \right\rangle(E), \quad \gamma = \frac{\mu_0 g^2 \mu_B^2}{V}. \quad (5.118)$$

自旋波的激发能 (磁子) 便对应着 Fourier 变换

$$\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(E) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \chi_{ij}^{+-}(E) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = -\frac{\gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \tilde{\chi}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{q}) \quad (5.119)$$

后函数的极点, 其中

$$\tilde{\chi}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \left\langle \left\langle a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}; a_{\mathbf{p}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \uparrow} \right\rangle \right\rangle. \quad (5.120)$$

不妨考虑在 Stoner 模型中计算 $\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(E)$, Hamilton 量为

$$\mathcal{H}_S = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [E_\sigma(\mathbf{k}) - \mu] a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (5.121)$$

为了计算 $\tilde{\chi}_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}(\mathbf{q})$, 我们只需要考虑对易子

$$[a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}, \mathcal{H}_S] = [E_\downarrow(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_\uparrow(\mathbf{k})] a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}, \quad (5.122)$$

以及

$$\left\langle [a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}, a_{\mathbf{p},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\uparrow}] \right\rangle = (\langle n_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} \rangle) \delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (5.123)$$

记

$$\Delta E_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}; \mathbf{q}) = E_{\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\uparrow}(\mathbf{k}), \quad (5.124)$$

那么我们有

$$\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(E) = \frac{\gamma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle}{E - \Delta E_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}; \mathbf{q})}. \quad (5.125)$$

可以看到, Stoner 模型中的横向磁化率的极点都对应着翻转电子自旋的激发态, 此时并不存在集体激发.

我们不得不在 Hubbard 模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}} a_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} a_{\mathbf{p},\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\downarrow} \quad (5.126)$$

中再次考虑这个问题. 此时把 Stoner 模型当成自由模型并使用 RPA 近似处理计算 $\tilde{\chi}_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ 时遇到的高阶 Green 函数便可以得到

$$[E - \Delta E_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}; \mathbf{q})] \tilde{\chi}_{\mathbf{k},\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \left(\delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \tilde{\chi}_{\mathbf{k}',\mathbf{p}}(\mathbf{q}) \right) (\langle n_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle^{(S)} - \langle n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} \rangle^{(S)}), \quad (5.127)$$

进而

$$\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(E) = \frac{\chi_{\mathbf{q}}^{+-, (S)}(E)}{1 - \gamma^{-1} U \chi_{\mathbf{q}}^{+-, (S)}(E)}. \quad (5.128)$$

这个结果在形式上和 generalized susceptibility 十分相似, 我们对其包含的集体激发态的分析也和前述大同小异. 定性上, 我们在 $|\mathbf{q}| \rightarrow 0$ 时会找到形如

$$\omega_m(\mathbf{q}) \approx Dq^2 \quad (5.129)$$

的色散关系, 系统的激发谱便是一片单粒子 Stoner 连续谱加上这样一条色散关系曲线. 人们首先在铁的非弹性中子散射中观察到了自旋波. 更加仔细的分析表明这种集体激发的自旋波产生的磁化在低温下表现出 T^2 依赖性, 而不是定域自旋系统的自旋波表现出的 Bloch $T^{3/2}$ -律.

5.8 无序合金中的元激发

我们目前为止考虑的都是周期晶格结构中的电子性质, 此时晶格的对称性对物理施加了很强的约束. 特别的, 晶格的周期性能让我们把研究固体中的电子拆分为使用 Bloch 定理研究等效单粒子问题的能带以及使用多体理论研究能带电子间的相互作用两部分. 但是 Bloch 定理并不适用于无序系统, 这便使我们对无序系统的研究面临极大困难.

我们来考虑一个简单的刻画了无序系统的 Hamilton 量:

$$H = \sum_{i \neq j} \sum_{m,n} T_{ij}^{mn} a_{i,m}^\dagger a_{j,n} + \sum_{i,m} \varepsilon_m a_{i,m}^\dagger a_{i,m} + \sum_{i,j} \sum_{m,n} V_{ij}^{mn} a_{i,m}^\dagger a_{j,n}. \quad (5.130)$$

其中第一项中的 T_{ij}^{mn} 是描述了粒子从 \mathbf{R}_j 处的 $|n\rangle$ 态跃迁到 \mathbf{R}_i 处的 $|m\rangle$ 态的转移积分, ε_m 是理想周期性晶格中原子的 $|m\rangle$ 态的能量, 而第三项刻画了非周期性的影响: 我们认为

微扰矩阵 V_{ij}^{mn} 刻画了杂质的存在造成的原子激发能和转移积分相对理想情况的偏差带来的对 Hamilton 量的影响:

$$V_{ij}^{mn} = (\eta_m - \varepsilon_m) \delta_{ij} \delta_{mn} + (\tilde{T}_{ij}^{mn} - T_{ij}^{mn}). \quad (5.131)$$

造成系统无序性的众多因素可以大致被分为两类: **替换无序**和**结构无序**. 在第一类无序性中系统的晶格仍具有理想晶体的几何结构, 但对于一个正在传播的元激发而言其感受到的物理环境却表现各向异性, 如合金和混合晶体. 而结构无序则指系统的晶格结构相对空间周期性的偏离, 如非晶态固体, 玻璃, 液体金属等.

我们将仅考虑较为简单的无序类型中最简单的一类情况, 即**对角替换无序**. 我们假设系统几何上仍拥有周期性的晶格结构, 但是格点上的原子性质存在不影响跃迁积分的统计上的涨落, 进而此时微扰矩阵为

$$V_{ij}^{mn} = (\eta_m - \varepsilon_m) \delta_{ij} \delta_{mn}. \quad (5.132)$$

这类情况能够比较好地刻画能带结构相似的金属组成的合金, 如铜镍合金以及金银合金.

我们还是考虑单能带模型并略去能带指标 m, n , 此时 Hamilton 量可以被表示为

$$H = \sum_{\sigma} H_{\sigma}, \quad H_{\sigma} = \sum_{i,j} T_{ij} a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma} + \sum_i \eta_{(i),\sigma} a_{i,\sigma}^{\dagger} a_{i,\sigma} \equiv H_{0,\sigma} + V_{0,\sigma}. \quad (5.133)$$

此时我们不考虑电子-电子相互作用. 其中

$$\eta_{(i),\sigma} = \eta_{i,\sigma} - T_{ii}, \quad (5.134)$$

$\eta_{i,\sigma}$ 便是在对角替换无序系统中 i 位置处的原子能级. 由于我们假设合金的几种组分原子相互独立地随机分布于格点上, 因而我们先验地只能把 $\eta_{i,\sigma}$ 处理为未知的随机变量.

不难想象, 我们还是会关心单粒子 Green 函数

$$G_{ij,\sigma}(E) = \left\langle \left\langle a_{i,\sigma}; a_{j,\sigma}^{\dagger} \right\rangle \right\rangle (E). \quad (5.135)$$

此时其运动方程为

$$E G_{ij,\sigma}(E) = \delta_{ij} + \sum_m (T_{im} + \eta_{(i),\sigma} \delta_{im}) G_{mj,\sigma}(E). \quad (5.136)$$

现在系统中平移对称性的破缺让我们没法直接用 Fourier 变换来求解出 Green 函数. 我们将 i, j 当成矩阵的指标而定义 Green 函数矩阵 $\hat{G}_{\sigma}(E) = (G_{ij,\sigma}(E))$, 那么我们可以将 Green 函数的运动方程组改写为一个矩阵方程

$$E \hat{G}_{\sigma}(E) = \mathbb{1} + (\hat{H}_{0,\sigma} + \hat{V}_{0,\sigma}) \hat{G}_{\sigma}(E). \quad (5.137)$$

其中我们也定义了矩阵

$$\hat{H}_{0,\sigma} = (T_{ij}), \quad \hat{V}_{0,\sigma} = \eta_{(i),\sigma} \delta_{im}, \quad \hat{H}_{\sigma} = \hat{H}_{0,\sigma} + \hat{V}_{0,\sigma}. \quad (5.138)$$

显然这个矩阵方程的解形式上为

$$\hat{G}_{\sigma}(E) = [E - \hat{H}_{\sigma}]^{-1}. \quad (5.139)$$

随机的微扰项的存在让我们还是没法直接计算这个表达式, 我们只得先考虑显然比较容易算的不存在微扰的自由 Green 函数

$$\hat{G}_{0,\sigma}(E) \equiv [E - \hat{H}_{0,\sigma}]^{-1}. \quad (5.140)$$

于是

$$\hat{G}_\sigma(E) = [\hat{G}_{0,\sigma}^{-1}(E) - \hat{V}_{0,\sigma}]^{-1} = [1 - \hat{G}_{0,\sigma}(E)\hat{V}_{0,\sigma}]^{-1}\hat{G}_{0,\sigma}(E). \quad (5.141)$$

对这个表达式稍加变形便可以给出 **Dyson 方程**

$$\hat{G}_\sigma(E) = \hat{G}_{0,\sigma}(E) + \hat{G}_{0,\sigma}(E)\hat{V}_{0,\sigma}\hat{G}_\sigma(E). \quad (5.142)$$

这在 Wannier 表示中也就是

$$G_{ij,\sigma}(E) = G_{ij,\sigma}^{(0)}(E) + \sum_m G_{im,\sigma}^{(0)}(E)\eta_{(m),\sigma}G_{mj,\sigma}(E). \quad (5.143)$$

我们可以在一般情况下定义**散射矩阵** $\hat{T}_{0,\sigma}$ 为

$$\hat{G}_\sigma(E) = \hat{G}_{0,\sigma}(E) + \hat{G}_{0,\sigma}(E)\hat{T}_{0,\sigma}\hat{G}_{0,\sigma}(E). \quad (5.144)$$

显然, 我们所期待计算的 Green 函数和 Hamilton 量一样依赖于各个原子在格点上的实际分布构型, 但我们在理论研究中并不需要考虑某个特殊的构型, 毕竟实验很难一模一样地将它复刻出来. 这里有实际观测价值的应该是物理量在各种可能的原子分布构型上的期望值 (我们还是用 $\langle \cdots \rangle$ 来表示), 我们不难意识到这是一个系综平均. 我们记一个格点可能被 α 种原子占据, 其中第 i 种原子的浓度为 c_i , 其对应的激发能为 $\eta_\sigma^{(i)}$, 那么一个依赖于随机变量 $\eta_\sigma^{(i)}$ 的函数 $F_\sigma(\eta_\sigma^{(i)})$ 的期望便是

$$\langle F_\sigma \rangle = \sum_{i=1}^{\alpha} c_i F_\sigma(\eta_\sigma^{(i)}). \quad (5.145)$$

类似的, 我们期待能找到一个有效 Hamilton 量 $H_{\text{eff},\sigma}(E)$ 使得 Green 函数的期望值满足

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \left\langle \frac{1}{E - H_\sigma} \right\rangle = \frac{1}{E - H_{\text{eff},\sigma}(E)}, \quad (5.146)$$

这个有效 Hamilton 量一般会依赖于能量并且是复的. 自由 Green 函数不受取构型平均的影响

$$\langle \hat{G}_{0,\sigma}(E) \rangle = \hat{G}_{0,\sigma}(E), \quad (5.147)$$

并且我们可以期待将有效 Hamilton 量分解为自由部分和依赖能量的部分:

$$H_{\text{eff},\sigma}(E) = H_{0,\sigma} + \langle \hat{V}_{0,\sigma} \rangle \equiv H_{0,\sigma} + \Sigma_{0,\sigma}(E). \quad (5.148)$$

显然, 求解这个问题等价于确定 $\Sigma_{0,\sigma}(E)$.

我们现在便可以考虑构型平均后的 Dyson 方程和 T -矩阵定义式:

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \hat{G}_{0,\sigma}(E) + \hat{G}_{0,\sigma}(E)\Sigma_{0,\sigma}(E)\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle, \quad (5.149)$$

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \hat{G}_{0,\sigma}(E) + \hat{G}_{0,\sigma}(E)\langle \hat{T}_{0,\sigma} \rangle \hat{G}_{0,\sigma}(E). \quad (5.150)$$

5.8.1 有效介质法

我们并不一定非得把模型 Hamilton 量分解为 $H_{0,\sigma}$ 和 $V_{0,\sigma}$. 事实上, 我们可以在每个格点上引入一个假想的实数或复数势 $v_{K,\sigma}$ 而构造出未受到无序因素扰动的有效介质的 Hamilton 量

$$K_\sigma \equiv \sum_{i,j} T_{ij} a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} + \sum_i v_{K,\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}. \quad (5.151)$$

我们期待这个 Hamilton 量仍是精确可解的, 进而这个有效介质中的 Green 函数

$$\hat{R}_\sigma(E) = [E - K_\sigma]^{-1} \quad (5.152)$$

已知并且可以在动量空间中被对角化:

$$R_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{E - \tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k})}, \quad \tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) + v_{K,\sigma}. \quad (5.153)$$

我们可以在模型 Hamilton 量里分离出这样一个有效介质部分并得到

$$H_\sigma = K_\sigma + V_{K,\sigma}, \quad (5.154)$$

$$V_{K,\sigma} = \sum_i (\eta_{(i),\sigma} - v_{K,\sigma}) a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} \equiv \sum_i \tilde{\eta}_{(i),\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}. \quad (5.155)$$

$\tilde{\eta}_{(i),\sigma}$ 便刻画了无序的局域势相对有效势的偏离. 我们现在只需要把上一节中的 $\hat{G}_{0,\sigma}(E)$ 换成 $\hat{R}_\sigma(E)$ 并把 $\Sigma_{0,\sigma}(E)$ 换成由 $V_{K,\sigma}$ 给出的 $\Sigma_{K,\sigma}$ 即可得到

$$\hat{G}_\sigma(E) = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) V_{K,\sigma} \hat{G}_\sigma(E), \quad (5.156)$$

$$\hat{G}_\sigma(E) = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) \hat{T}_{K,\sigma} \hat{R}_\sigma(E), \quad (5.157)$$

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) \Sigma_{K,\sigma}(E) \langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle, \quad (5.158)$$

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) \langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle \hat{R}_\sigma(E). \quad (5.159)$$

根据前两个方程, 我们不难得到

$$\hat{T}_{K,\sigma} = V_{K,\sigma} (1 - \hat{R}_\sigma V_{K,\sigma})^{-1}, \quad (5.160)$$

进而取构型平均后会给出

$$\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle = \Sigma_{K,\sigma} (1 - \hat{R}_\sigma \Sigma_{K,\sigma})^{-1}, \quad (5.161)$$

这可以反解出

$$\Sigma_{K,\sigma} = \langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle (1 + \langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle \hat{R}_\sigma)^{-1}. \quad (5.162)$$

如果我们能够以足够合适的方式构造有效介质以使得 $\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle = 0$, 那么我们便有 $\Sigma_{K,\sigma}(E) = 0$, 并且无序介质中的 Green 函数的构型期望恰好等于 $\hat{R}_\sigma(E)$.

有效介质法只是表明无序系统在构型平均下的物理或许可以被一个精心构造的有序有效系统所刻画, 但这是 hardly practical 的. 其具体应用还依赖于后面的内容.

5.8.2 TMA 近似

我们先来考虑仅单个 i -格点被杂质占据的情况, 即此时

$$V_{K,\sigma} = V_{K,\sigma}^{(i)} = \tilde{\eta}_{(i),\sigma} a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}, \quad (5.163)$$

记它对应的 Green 函数为 $\hat{G}_{i,\sigma}(E)$, 显然其满足

$$\hat{G}_{i,\sigma}(E) = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) V_{K,\sigma}^{(i)} \hat{G}_{i,\sigma}(E). \quad (5.164)$$

我们定义原子散射矩阵 $\hat{t}_{K,\sigma}^{(i)}$ 为

$$\hat{G}_{i,\sigma}(E) = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma(E). \quad (5.165)$$

显然

$$\hat{t}_{K,\sigma}^{(i)}(E) = V_{K,\sigma}^{(i)} (1 - \hat{R}_\sigma V_{K,\sigma}^{(i)})^{-1}. \quad (5.166)$$

现在考虑完整模型 Hamilton 量的 Dyson 方程并代入

$$V_{K,\sigma} = \sum_i V_{K,\sigma}^{(i)} \quad (5.167)$$

而得到

$$\hat{G}_\sigma = \hat{R}_\sigma + \hat{R}_\sigma \sum_i V_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma + \sum_{i,j} \hat{R}_\sigma V_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma \hat{V}_{K,\sigma}^{(j)} \hat{R}_\sigma + \cdots. \quad (5.168)$$

我们可以将这里的 $V_{K,\sigma}^{(i)}$ 换成 $\hat{t}_{K,\sigma}^{(i)}$ 并和 $\hat{T}_{K,\sigma}$ 的定义式比较而得到

$$\hat{T}_{K,\sigma} = \sum_i \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} + \sum_{i \neq j} \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(j)} + \sum_{i \neq j, j \neq k} \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(j)} \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(k)} + \cdots. \quad (5.169)$$

如今我们尚未引入任何近似. 不过我们知道, 对原问题的近似求解等价于近似确定 $\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle$ 的形式, 而这本质上是计算

$$\langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(j)} \hat{R}_\sigma \cdots \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(n)} \rangle. \quad (5.170)$$

T-矩阵近似 (TMA) 假设我们总可以将这个系综平均进行因子化:

$$\langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(j)} \hat{R}_\sigma \cdots \hat{R}_\sigma \hat{t}_{K,\sigma}^{(n)} \rangle \rightarrow \langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \rangle \hat{R}_\sigma \langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(j)} \rangle \hat{R}_\sigma \cdots \hat{R}_\sigma \langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(n)} \rangle. \quad (5.171)$$

不难意识到系综平均后的原子散射矩阵应该拥有如下形式:

$$\langle \hat{t}_{K,\sigma}^{(i)} \rangle = \langle t_{K,\sigma} \rangle \mathbb{1}_i, \quad (5.172)$$

其中 $\mathbb{1}_i$ 是 (i, i) -元素为 1, 其余均为零的矩阵. 根据 (5.166), 我们有

$$\langle t_{K,\sigma} \rangle = \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \frac{\hat{\eta}_\sigma^{(m)} - v_{K,\sigma}}{1 - R_{ii,\sigma}(E)(\hat{\eta}_\sigma^{(m)} - v_{K,\sigma})}. \quad (5.173)$$

于是 TMA 近似下 $\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle$ 满足

$$\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle^{\text{TMA}} = \langle t_{K,\sigma} \rangle \mathbb{1} [1 - \hat{R}_\sigma \langle t_{K,\sigma} \rangle]^{-1}, \quad \hat{R}_{mn,\sigma} = R_{mn,\sigma}(E)(1 - \delta_{mn}). \quad (5.174)$$

将这个结果代入 (5.162) 中, 我们便发现此时自能项为

$$(\Sigma_{K,\sigma})_{ij} = \langle t_{K,\sigma} \rangle \delta_{ij} [1 + R_{ii,\sigma} \langle t_{K,\sigma} \rangle]^{-1}. \quad (5.175)$$

由于有效介质仍保留平移对称性, 我们有

$$R_{ii,\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k},\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k}) - v_{K,\sigma}}. \quad (5.176)$$

进而在 TMA 近似下自能项实际上是不依赖波矢的. 显然 TMA 近似并不是一个自洽的方法, 其给出的结果依赖于我们选择有效介质的方式; 但我们可以期待这一操作在我们选择和真实的物理系统比较接近的有效介质时能给出比较好的结果.

5.8.3 CPA 近似

TMA 近似的结果强烈依赖于我们对有效介质的选取方式, 此时我们可以使用**相干势近似 (CPA)** 来近似确定一个最佳的有效介质选取方式. 我们在有效介质法一节曾指出使得 $\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle = 0$ 的有效介质能够等效刻画系综平均下的无序系统, 而根据 TMA 近似后的 $\langle \hat{T}_{K,\sigma} \rangle$ 表达式, 我们发现此时要求

$$\langle t_{K,\sigma} \rangle = 0 \quad (5.177)$$

便能解出一个 $v_{K,\sigma}$. 注意到有效介质的平移对称性使得 T_{ii} 不随指标变化, 我们记 $T_{ii} = T_0$. 同时注意到 $\hat{\eta}_\sigma^{(m)} = \eta_\sigma^{(m)} - T_0$, 进而我们在 CPA 近似下需要求解的方程为

$$\sum_{m=1}^{\alpha} c_m \frac{\eta_\sigma^{(m)} - T_0 - v_{K,\sigma}}{1 - R_{ii,\sigma}(E)(\eta_\sigma^{(m)} - T_0 - v_{K,\sigma})} = 0. \quad (5.178)$$

这个方程一般是高度非线性的, 所以我们常常只能数值求解它. 据此确定下 $v_{K,\sigma}$ 后我们便可以将它代入 TMA 近似得到的自能项表达式中并得到对角的 $\Sigma_\sigma^{\text{CPA}}(E)$.⁶ 此时

$$\langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle = \hat{R}_\sigma(E) + \hat{R}_\sigma(E) \Sigma_\sigma^{\text{CPA}}(E) \langle \hat{G}_\sigma(E) \rangle \quad (5.179)$$

中 \hat{R}_σ 和 $\Sigma_\sigma^{\text{CPA}}$ 相对 Wannier 指标都是对角的, 因此我们可以变换到动量空间里并得到⁷

$$\langle G_{\mathbf{k},\sigma}(E) \rangle = \frac{R_{\mathbf{k},\sigma}(E)}{1 - R_{\mathbf{k},\sigma}(E) \Sigma_\sigma^{\text{CPA}}(E)} = \frac{1}{E - \tilde{\varepsilon}_\sigma(\mathbf{k}) - \Sigma_\sigma^{\text{CPA}}(E)}. \quad (5.180)$$

现在有了单粒子 Green 函数, 系统的热力学性质便能随之确定了.

⁶注意, 我们在有效介质法中论证的结果为 $\langle t_{K,\sigma} \rangle = 0$ 时自能项一定等于零; 但我们在这里是通过使 TMA 近似下的 $\langle t_{K,\sigma} \rangle^{\text{TMA}}$ 等于零来自洽地确定有效介质中势函数的取值, 进而实际的 $\langle t_{K,\sigma} \rangle$ 并不是零, 此时仍存在非平凡的自能项.

⁷注意 $\Sigma_\sigma^{\text{CPA}}$ 在 Wannier 表象中的各个对角元都是一样的.

可以看到, 我们目前为止介绍的一套处理方法有着相对直观的物理图像: 我们的目标是选择足够合适的有效介质来在构型平均的意义上等价地刻画无序系统, 这要求我们在以有效介质为基点计算无序系统的 Green 函数时遇到的 $\langle T \rangle$ 等于零. 为了寻找满足这个条件的有效介质, 我们考虑容易计算构型平均的单原子散射矩阵 t 并应用 TMA 近似把一系列复杂的构型平均因子化为仅依赖 $\langle t \rangle$ 的表达式并得到依赖于 $v_{K,\sigma}$ 的 $\langle T \rangle$ 表达式. 应用 CPA 近似, 令 $\langle T \rangle(v_{K,\sigma}) = 0$ 便能解近似满足我们期待的 $v_{K,\sigma}$, 将这个参数代入 TMA 近似下的自能项后便能让我们近似确定整个无序系统在构型平均下的可观测量.

5.8.4 图线法

我们也可以 brute force 地微扰计算系统的 Green 函数, 按照这个方式得到的结果也可以映证前面近似方法的有效性.

我们回头考虑无序系统中的 Green 函数满足的 Dyson 方程

$$G_{ij,\sigma} = G_{ij,\sigma}^{(0)} + \sum_m G_{im,\sigma}^{(0)} \eta_{(m),\sigma} G_{mj,\sigma}. \quad (5.181)$$

注意 $\eta_{(m),\sigma}^{(n)}$ 中下标的 m 为位置指标, 上标 (Dyson 方程中未写出) 才是原子种类指标. 显然我们可以不断迭代这个方程来计算近似解:

$$G_{ij,\sigma} = G_{ij,\sigma}^{(0)} + \sum_m G_{im,\sigma}^{(0)} \eta_{(m),\sigma} G_{mj,\sigma}^{(0)} + \sum_{m,n} G_{im,\sigma}^{(0)} \eta_{(m),\sigma} G_{mn,\sigma}^{(0)} \eta_{(n),\sigma} G_{nj,\sigma}^{(0)} + \cdots \quad (5.182)$$

这在构型平均下便会给出

$$\langle G_{ij,\sigma} \rangle = G_{ij,\sigma}^{(0)} + \sum_m G_{im,\sigma}^{(0)} G_{mj,\sigma}^{(0)} \langle \eta_{(m),\sigma} \rangle + \sum_{m,n} G_{im,\sigma}^{(0)} G_{mn,\sigma}^{(0)} G_{nj,\sigma}^{(0)} \langle \eta_{(m),\sigma} \eta_{(n),\sigma} \rangle + \cdots \quad (5.183)$$

由于我们假设各个格点上的原子分布在统计上互相独立, 因而 $\eta_{(m),\sigma}$ 相关的构型期望满足

$$\langle \eta_{(m),\sigma} \eta_{(n),\sigma} \rangle = \delta_{mn} \langle \eta_{(m),\sigma}^2 \rangle + (1 - \delta_{mn}) \langle \eta_{(m),\sigma} \rangle^2. \quad (5.184)$$

此时我们可以引入如下图线规则:

$$\begin{aligned} i \text{---} j &\Rightarrow \langle G_{ij,\sigma} \rangle \\ i \text{---} j &\Rightarrow G_{ij,\sigma}^{(0)} \\ \begin{array}{c} i \bullet \\ | \\ \triangle \\ \vdots \end{array} &\Rightarrow \langle \eta_{(i),\sigma} \rangle = \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \hat{\eta}_{(i),\sigma}^{(m)} \\ \begin{array}{c} i \bullet \\ | \\ \triangle \\ \vdots \end{array} &\Rightarrow \langle \eta_{(i),\sigma}^n \rangle = \sum_{m=1}^{\alpha} c_m (\hat{\eta}_{(i),\sigma}^{(m)})^n \\ &\text{ } n \text{ 条相互作用线} \end{aligned}$$

于是我们可以将 $\langle G_{ij,\sigma} \rangle$ 的迭代解中的各项用图线表示出来. 例如,

$$\sum_{m,n} G_{im,\sigma}^{(0)} G_{mn,\sigma}^{(0)} G_{nn,\sigma}^{(0)} G_{nj,\sigma}^{(0)} \langle \eta_{(m),\sigma} \rangle \langle \eta_{(n),\sigma}^2 \rangle = \begin{array}{c} m \bullet \quad n \bullet \\ | \quad \quad | \\ i \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} j \end{array}. \quad (5.185)$$

我们定义一个图中**相互作用线**的数目为图的**阶数**. 我们在计算时必须将所以相互作用线的指标求和.

注意

$$\begin{array}{c} m \\ \bullet \\ \vdots \\ i \rightarrow \rightarrow \rightarrow j \end{array} + \begin{array}{c} n \\ \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \rightarrow j \end{array} = \begin{array}{c} m \\ \bullet \\ \vdots \\ i \rightarrow \rightarrow n \end{array} \times \begin{array}{c} n \\ \bullet \\ \vdots \\ n \rightarrow \rightarrow j \end{array}, \quad (5.186)$$

我们不难进而意识到所有粒子传播子的单粒子可约图都能被写成一组单粒子不可约图的乘积. 如果我们记构型平均后的 Dyson 方程为

$$\langle G_{ij,\sigma} \rangle = G_{ij,\sigma}^{(0)} + \sum_{m,n} G_{im,\sigma}^{(0)} \Sigma_{mn} \langle G_{nj,\sigma} \rangle, \quad (5.187)$$

那么当 Σ_{mn} 取作所有截去两条外线的单粒子不可约图的和时我们恰好能根据这个 Dyson 方程迭代算出 Green 函数. Σ_σ 的前三阶包含

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \rightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow \end{array} + \dots \quad (5.188)$$

根据这些图线表示, 我们可以对研究无序系统时常用的近似方法进行分类.

虚晶体近似 (Virtual Crystal Approximation, VCA) 这是最简单的近似, 此时我们取

$$(\Sigma_\sigma^{\text{VCA}})_{ij} = \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vdots \end{array} \equiv \delta_{ij} \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \hat{\eta}_\sigma^{(m)} = \delta_{ij} \langle \hat{\eta}_\sigma \rangle. \quad (5.189)$$

于是

$$\langle G_{ij,\sigma} \rangle^{\text{VCA}} = G_{ij,\sigma}^{(0)} + \langle \hat{\eta}_\sigma \rangle \sum_m G_{im,\sigma}^{(0)} \langle G_{mj,\sigma} \rangle^{\text{VCA}}. \quad (5.190)$$

通过 Fourier 变换即可解出

$$\langle G_{\mathbf{k},\sigma}(E) \rangle^{\text{VCA}} = \frac{1}{E - \langle \hat{\eta}_\sigma \rangle - \varepsilon(\mathbf{k})} = G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E - \langle \hat{\eta}_\sigma \rangle). \quad (5.191)$$

这相当于做了分子场近似, 所有准粒子能量都被平移了一个常数. VCA 近似仅在组成合金的原子能级结构相差不大时才比较准确.

单点近似 (Single-Site Approximation, SSA) 这一近似仅考虑 Σ_σ 的展开式中只包含单个相互作用顶点的项的贡献, 这些项是 c_m 的线性项. 在这一近似下, 我们会忽略不同格点处的散射间的关联. 此时我们有

$$\begin{aligned}
 (\Sigma_\sigma^{\text{SSA}})_{ij} &= \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \rightarrow \rightarrow \rightarrow \end{array} + \dots \\
 &= \delta_{ij} \left(\sum_m c_m \hat{\eta}_\sigma^{(m)} + \sum_m c_m (\hat{\eta}_\sigma^{(m)})^2 G_{ii,\sigma}^{(0)} + \sum_m c_m (\hat{\eta}_\sigma^{(m)})^3 (G_{ii,\sigma}^{(0)})^3 + \dots \right) \\
 &= \delta_{ij} \sum_m c_m \frac{c_m \hat{\eta}_\sigma^{(m)}}{1 - \hat{\eta}_\sigma^{(m)} G_{ii,\sigma}^{(0)}}. \quad (5.192)
 \end{aligned}$$

可以看到, 由于我们忽略了不同格点处的散射间的相互作用, 此时单个格点上的自能项形式和单原子散射矩阵一致并且在 Fourier 变换后不依赖波矢. 不难发现此时系统的 Green 函数可以表示为

$$\langle G_{\mathbf{k},\sigma}(E) \rangle^{\text{SSA}} = \frac{1}{E - \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}(E) - \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k})} = G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E - \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}(E)). \quad (5.193)$$

修饰传播子法 (The Modified Propagator Method, MPM) MPM 法将 SSA 中的自由 Green 函数换成了完整的 Green 函数, 于是

$$(\Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}})_{ij} = \delta_{ij} \sum_m c_m \frac{c_m \hat{\eta}_{\sigma}^{(m)}}{1 - \hat{\eta}_{\sigma}^{(m)} G_{ii,\sigma}(E)}. \quad (5.194)$$

此时 $(\Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}})_{ij}$ 仍是对角的, 从而根据 Dyson 方程不难确定

$$\langle G_{\mathbf{k},\sigma}(E) \rangle^{\text{MPM}} = G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E - \Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}}(E)). \quad (5.195)$$

于是我们得到了自能项应该满足的自洽性条件:

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}} = \sum_m c_m \frac{c_m \hat{\eta}_{\sigma}^{(m)}}{1 - \hat{\eta}_{\sigma}^{(m)} G_{\mathbf{k},\sigma}^{(0)}(E - \Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}}(E))}. \quad (5.196)$$

求解这个方程即可得到 $\Sigma_{\sigma}^{\text{MPM}}$. 不难看出将自由传播子换成完整传播子让我们能考虑诸多 SSA 近似中没能涉及的图. 在前四阶中 MPM 会包含除了描述集团效应的 crossed diagram 之外的所有图, 特别的, 这一方法可以考虑进 nested diagram.

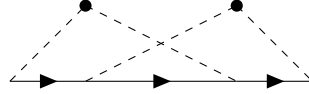


Figure 1. 四阶图中的 crossed diagram.

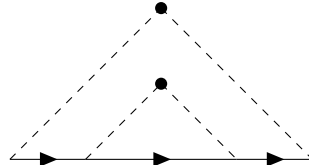


Figure 2. 四阶图中的一个 nested diagram.

平均 T -矩阵近似 (Average T -Matrix Approximation, ATA) ATA 近似来自我们观察到的目前使用的图线规则的一个缺陷: 如果我们将自能的领头阶项代入 Dyson 方程计算 Green 函数, 那么它会给出

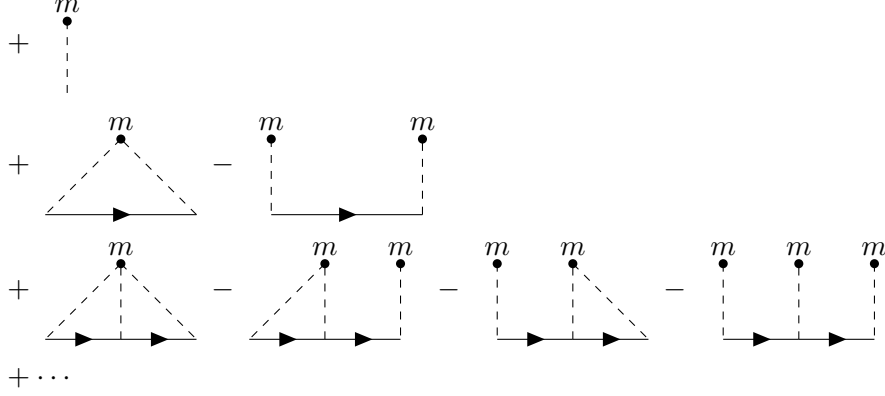
$$\begin{array}{c} m \quad n \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ i \longrightarrow \quad \longrightarrow \quad \longrightarrow j \end{array} = \langle \hat{\eta}_{\sigma} \rangle^2 \sum_{m,n} G_{im,\sigma}^{(0)} G_{mn,\sigma}^{(0)} G_{nj,\sigma}^{(0)} \quad (5.197)$$

这样的修正项. 我们在这里的求和中并没有要求 $m \neq n$, 而根据 Dyson 方程的迭代解不难看出这些项应该被剔除. 为了消除这些项, 我们应该为制定如下图线规则:

裂点规则

对于自能项每一个包含高阶顶点的图, 我们都应减去分裂图中高阶顶点得到的 non-crossed and non-nested diagram.

按照这一规则, 我们可以将在 ATA 近似中将考虑的图修正为



之所以说仅考虑减去 non-crossed diagram 是因为我们现在考虑的是消去 SSA 近似给出的 Green 函数中非物理的图, 因而我们通过裂点构造的图的拓扑应该存在于 SSA 近似下的 Green 函数展开式中, 而这里并不包含 crossed diagram.

原书对 ATA 近似中图线求和的推导疑似有误.

我们考虑按照裸露的传播子数目对 ATA 近似的自能项进行求和. 显然, 没有裸露传播子的图会给出

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}} = \langle t_{0,\sigma} \rangle, \quad (5.198)$$

而裸露一个传播子会给出修正项

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}} G_{mm,\sigma}^{(0)} \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}. \quad (5.199)$$

类似的, 裸露 n 个传播子会给出

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}} [G_{mm,\sigma}^{(0)} \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}]^{n-1}. \quad (5.200)$$

将这些项求和便给出

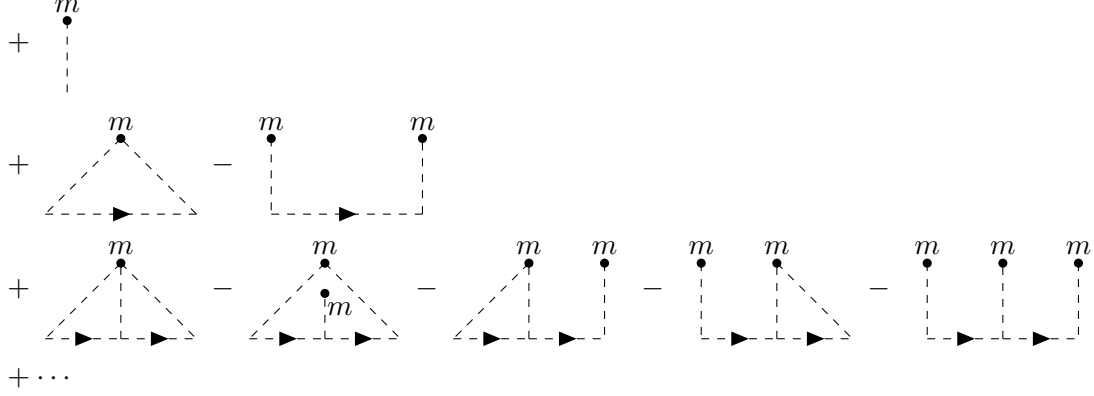
$$\Sigma_{\sigma}^{\text{ATA}} = \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}} [1 - G_{mm,\sigma}^{(0)} \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}} - (G_{mm,\sigma}^{(0)} \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}})^2 - \dots] = \frac{\Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}}{1 + G_{mm,\sigma}^{(0)} \Sigma_{\sigma}^{\text{SSA}}}. \quad (5.201)$$

此即

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{ATA}} = \frac{\langle t_{0,\sigma} \rangle}{1 + G_{mm,\sigma}^{(0)} \langle t_{0,\sigma} \rangle}. \quad (5.202)$$

我们可以立即发现这其实就是在取未受微扰的晶体为有效介质的基础上应用 TMA 近似得到的结果.

相干势近似 (Coherent Potential Approximation, CPA) 显然我们可以结合 ATA 近似和 MPM 近似而将自由传播子换成完整传播子来构造自洽方程并加以求解以得到精度更高的结果, 不过此时我们需要减去的修正项形式会更加复杂. 我们在 MPM 一节曾指出修饰传播子法会引入 nested diagram, 此时相互作用顶点指标相同的 nested diagram 也会为我们的计算带来非物理的修正项, 因而我们必须将它们减去. 现在我们需要考虑的自能图便为



我们仍然考虑按照裸露的传播子数目求和. 我们将未裂点的图求和即可得到

$$\begin{aligned}
 (\Sigma_{\sigma}^{(1)})_{ij} &= \sum_m \langle \eta_{(m),\sigma} \rangle \delta_{im} \delta_{mj} + \sum_m \langle \eta_{(m),\sigma}^2 \rangle \langle G_{mm,\sigma} \rangle \delta_{im} \delta_{mj} + \sum_m \langle \eta_{(m),\sigma}^3 \rangle \langle G_{mm,\sigma} \rangle^2 \delta_{im} \delta_{mj} + \dots \\
 &= \delta_{ij} \left(\langle \eta_{(i),\sigma} \rangle + \langle \eta_{(i),\sigma}^2 \rangle \langle G_{ii,\sigma} \rangle + \langle \eta_{(i),\sigma}^3 \rangle \langle G_{ii,\sigma} \rangle^2 + \dots \right) \\
 &= \delta_{ij} \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \frac{\hat{\eta}_{\sigma}^{(m)}}{1 - \hat{\eta}_{\sigma}^{(m)} \langle G_{ii,\sigma} \rangle}.
 \end{aligned} \tag{5.203}$$

记裂点后没有裸露传播子的 nested diagrams 的求和给出 $\mathcal{N}[\langle G \rangle]$, 那么显然裸露 n 个传播子的图的求和会给出

$$\mathcal{N}[\langle G \rangle] (\langle G_{ii,\sigma} \rangle \mathcal{N}[\langle G \rangle])^{n-1}, \tag{5.204}$$

进而所有修正的图的求和为

$$\mathcal{C}[\langle G \rangle] = \frac{\mathcal{N}[\langle G \rangle]}{1 - \langle G_{ii,\sigma} \rangle \mathcal{N}[\langle G \rangle]}. \tag{5.205}$$

问题的关键便是计算出 $\mathcal{N}[\langle G \rangle]$, 注意到这等价于

$$\begin{aligned}
 \mathcal{N} &= \langle \eta^2 \rangle \langle G \rangle^2 (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C}) + 2 \langle \eta^3 \rangle \langle G \rangle^3 (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C}) + \langle \eta^3 \rangle \langle G \rangle^4 (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})^2 \\
 &\quad + \dots + \langle \eta^n \rangle \langle G \rangle^{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} C_{n-1}^i \langle G \rangle^i (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})^i + \dots \\
 &= \sum_{n=2}^{\infty} \langle \eta^n \rangle \langle G \rangle^{n-1} [1 + \langle G \rangle (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})]^{n-1} = \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \hat{\eta}^{(m)} \sum_{n=1}^{\infty} \{ \hat{\eta}^{(m)} \langle G \rangle [1 + \langle G \rangle (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})] \}^n \\
 &= \sum_{m=1}^{\alpha} c_m \frac{(\hat{\eta}^{(m)})^2 \langle G \rangle [1 + \langle G \rangle (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})]}{1 - \hat{\eta}^{(m)} \langle G \rangle [1 + \langle G \rangle (\Sigma^{(1)} + \mathcal{C})]}.
 \end{aligned} \tag{5.206}$$

于是我们得到了一个能让我们确定 \mathcal{N} 和 \mathcal{C} 的自洽性方程, 求解后即可得到自能项.

.. 但是好像导不出 CPA 近似的自洽方程的形式. Anyway, 我们可以看到作为一种 single-site 近似, 此时计算出的自能项仍是不依赖于格点位置的.

CPA 近似不仅仅适用于研究合金, 这其实已经成为了多体理论中的一类标准操作并且衍生出了名为**合金类比**的方法. 考虑某个多体模型, 如 Hubbard 模型. 这在原子极限 (无穷窄带极限) 下可解, 此时 N 个能带态在能级 T_0 上 N 重简并, 进而我们可以将 Green 函数记作

$$G_{0,\sigma}(E) = \sum_{m=1}^p \frac{\alpha_{m,\sigma}}{E - \eta_{\sigma}^{(m)}}, \quad (5.207)$$

其中 $\eta_{\sigma}^{(m)}$ 是电子间相互作用使得简并的 T_0 劈裂出的 p 个准粒子能级, 而谱权重 $\alpha_{m,\sigma}$ 通过 $N\alpha_{m,\sigma}$ 给出了各个准粒子能级的简并度. 可以看到, 这里的情况就相当于一个假想的由浓度为 $\{\alpha_{1,\sigma}, \alpha_{2,\sigma}, \dots, \alpha_{p,\sigma}\}$, 原子能级分别为 $\{\eta_{\sigma}^{(1)}, \dots, \eta_{\sigma}^{(p)}\}$ 的组分构成的 p 元合金. 将这些参数代入 CPA 近似得到的自洽方程中, 求解即可得到此时材料中电子的自能. 这个方法在多体理论中极其有用.

5.9 自旋系统

Heisenberg 模型可以用来描述磁性绝缘体. 尽管其 Hamilton 量结构十分简单, 但是与之相关的多体问题至今仍未有精确解, 我们仍然需要仰仗一系列近似方法.

5.9.1 Tyablikow 近似

我们考虑均匀常磁场 $\mathbf{B}_0 = \mu_0 \mathbf{H}$ 中的 Heisenberg 模型

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^+ S_j^- + S_i^z S_j^z) - gJ\mu_B B_0 \sum_i S_i^z. \quad (5.208)$$

假设这一系统在某个临界温度 T_C 以下为铁磁体, 我们感兴趣的便是其自发磁化强度

$$M(T, B_0) = \frac{gJ\mu_B}{V} \sum_i \langle S_i^z \rangle_{T, B_0} = \frac{gJ\mu_B N}{V} \langle S^z \rangle_{T, B_0}. \quad (5.209)$$

我们假设定域的都是自旋- $\frac{1}{2}$ 的粒子, 那么我们有

$$S_i^z = \frac{1}{2} [S_i^+, S_i^-], \quad (5.210)$$

进而我们可以通过考虑推迟 Green 函数

$$G_{ij}(t, t') = \left\langle \left\langle S_i^+(t); S_j^-(t') \right\rangle \right\rangle \quad (5.211)$$

来计算所需的 $\langle S_i^z \rangle$. 其运动方程为

$$(E - gJ\mu_B B_0) G_{ij}(E) = 2\delta_{ij} \langle S_i^z \rangle + 2 \sum_m J_{im} (\left\langle \left\langle S_i^+ S_m^z; S_j^- \right\rangle \right\rangle - \left\langle \left\langle S_m^+ S_i^z; S_j^- \right\rangle \right\rangle). \quad (5.212)$$

不出所料, 我们遇到了高阶 Green 函数的阻碍. 一种简单的近似方式是用 Hartree-Fock 近似使得

$$\left\langle \left\langle S_i^+ S_m^z; S_j^- \right\rangle \right\rangle \rightarrow \langle S^z \rangle G_{ij}(E), \quad \left\langle \left\langle S_m^+ S_i^z; S_j^- \right\rangle \right\rangle \rightarrow \langle S_z \rangle G_{mj}(E), \quad (5.213)$$

进而在动量空间中求解得到

$$G_{\mathbf{q}}(E) = \frac{2 \langle S_z \rangle}{E - \varepsilon(\mathbf{q}) + i0^+}, \quad (5.214)$$

其中

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = g_J \mu_B B_0 + 2 \langle S_z \rangle [J_0 - J(\mathbf{q})]. \quad (5.215)$$

系统中准粒子的谱密度便为

$$S_{\mathbf{q}}(E) = 2 \langle S_z \rangle \delta[E - \varepsilon(\mathbf{q})], \quad (5.216)$$

并且此时修正常数 $D = 0$. 我们遂可以根据谱定理计算出

$$\langle S_j^- S_i^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \int dE \frac{S_{\mathbf{q}}(E)}{e^{\beta E} - 1} = \frac{2 \langle S_z \rangle}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}}{e^{\beta \varepsilon(\mathbf{q})} - 1}. \quad (5.217)$$

进而

$$\langle S_z \rangle = S - \langle S_i^- S_i^+ \rangle = \frac{S}{1 + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} (e^{\beta \varepsilon(\mathbf{q})} - 1)^{-1}}. \quad (5.218)$$

将 $\varepsilon(\mathbf{q})$ 的表达式代入即可得到 $\langle S_z \rangle$ 的自洽方程, 数值求解即可得到 $\langle S_z \rangle$ 以及系统的磁化强度. 这一近似在热涨落较小的低温情况下比较准确. 我们根据这个表达式可以近似确定 Curie 温度: 此时 $B_0 = 0$ 并且 $\varepsilon(\mathbf{q})$ 很小, 因而我们可以近似取

$$\langle S_z \rangle = S \left(\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\beta \varepsilon(\mathbf{q})} \right)^{-1}, \quad (5.219)$$

求解这个方程即可得到

$$k_B T_C = \left(\frac{1}{NS} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{J_0 - J(\mathbf{q})} \right)^{-1}. \quad (5.220)$$

定域粒子的自旋大于 $\frac{1}{2}$ 的情况要更加复杂, 此时

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle = S(S+1) - \langle S_i^z \rangle - \langle (S_i^z)^2 \rangle. \quad (5.221)$$

我们没法使用前面计算的 Green 函数来确定 $\langle (S_i^z)^2 \rangle$, 因而此时需要考虑

$$G_{ij,\sigma}^{(n)}(E) = \langle \langle S_i^+; (S_j^z)^n S_i^- \rangle \rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots, 2S-1. \quad (5.222)$$

对这个 Green 函数的运动方程应用 Hartree-Fock 近似即可得到

$$G_{\mathbf{q}}^{(n)}(E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{q})} \langle [S_i^+, (S_i^z)^n S_i^-] \rangle. \quad (5.223)$$

准粒子能量 $\varepsilon(\mathbf{q})$ 与前面的结果一致. 我们进而可以利用谱定理构造 $\langle (S_i^z)^n \rangle$, $n = 1, \dots, 2S+1$ 满足的庞大的自洽性方程组来确定这些期望值.

5.9.2 重整自旋波

我们曾使用归一化的单磁子态

$$|\mathbf{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2SN}} S^-(\mathbf{q}) |S\rangle \quad (5.224)$$

讨论了自旋波, 这是 Heisenberg Hamilton 量的精确本征态:

$$E(\mathbf{q}) = E_0 + \hbar\omega(\mathbf{q}). \quad (5.225)$$

线性自旋波近似便将铁磁体刻画为无相互作用磁子气, 这一近似依赖于截断到线性阶的 Holstein-Primakoff 变换. 这在足够低温下自然是有效的, 但温度升高时磁子间的相互作用将无法被忽略, 我们必须另寻它径.

我们考虑 **Dyson-Maleév 变换**:

$$\begin{aligned} S_i^- &= \sqrt{2S} \alpha_i^\dagger, \\ S_i^+ &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n_i}{2S}\right) \alpha_i, \\ S_i^z &= S - n_i. \end{aligned} \quad (5.226)$$

其中 $\alpha_i^\dagger, \alpha_i$ 都是玻色子产生湮灭算符, 其中 $n_i = \alpha_i^\dagger \alpha_i$ 为磁子占有数算符. 这一变换不会产生 Holstein-Primakoff 变换中的无穷级数而会把 Hamilton 量变成

$$H = E_0 + H_2 + H_4, \quad (5.227)$$

$$H_2 = 2S \sum_{i,j} J_{ij} \delta_{ij} - J_{ij} + \delta_{ij} g_J \mu_B B_0 \alpha_i^\dagger \alpha_j, \quad (5.228)$$

$$H_4 = - \sum_{i,j} J_{ij} n_i n_j + \sum_{ij} J_{ij} \alpha_i^\dagger n_j \alpha_j. \quad (5.229)$$

这一操作的劣势在于此时 H 不再是厄米的, 我们先姑且忽略这点带来的问题而考虑 Hamilton 量在波数表象下的表达式:

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega(\mathbf{q}) \alpha_{\mathbf{q}}^\dagger \alpha_{\mathbf{q}} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_4} [J(\mathbf{q}_4) - J(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_3)] \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4} \alpha_{\mathbf{q}_1}^\dagger \alpha_{\mathbf{q}_2}^\dagger \alpha_{\mathbf{q}_3} \alpha_{\mathbf{q}_4}. \quad (5.230)$$

其中 $\hbar\omega(\mathbf{q})$ 为裸自旋波能量.

我们考虑**单磁子谱密度**

$$B_{\mathbf{q}}(E) = \frac{1}{2\pi} \int d(t-t') e^{iE(t-t')} \langle [\alpha_{\mathbf{q}}(t), \alpha_{\mathbf{q}}^\dagger(t')] \rangle, \quad (5.231)$$

那么它可以被一系列谱矩

$$M_{\mathbf{q}}^{(n)} = \langle [[\cdots [\alpha_{\mathbf{q}}, H], H], \alpha_{\mathbf{q}}^\dagger] \rangle \quad (5.232)$$

所逼近. 前两阶谱矩为

$$M_{\mathbf{q}}^{(0)} = 1, \quad (5.233)$$

$$M_{\mathbf{q}}^{(1)} = \hbar\omega(\mathbf{q}) + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}'} [J(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q}') - J(0) - J(\mathbf{q} - \mathbf{q}')] \langle \alpha_{\mathbf{q}'}^\dagger \alpha_{\mathbf{q}'} \rangle. \quad (5.234)$$

由于我们前面根据其它近似方法得到的单磁子谱密度都是单极点函数, 因而我们可以假设如下拟式:

$$B_{\mathbf{q}}(E) = b_{\mathbf{q}} \delta[E - \hbar\Omega(\mathbf{q})], \quad (5.235)$$

于是根据前两阶谱矩我们可以确定

$$b_{\mathbf{q}} = 1, \quad (5.236)$$

$$\hbar\Omega(\mathbf{q}) = \hbar\omega(\mathbf{q}) + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \frac{J(\mathbf{q}) + J(\mathbf{q}') - J(0) - J(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{e^{\beta\hbar\Omega(\mathbf{q}')} - 1}. \quad (5.237)$$

按照这个方法计算的重整自旋波能量完全等同于 Dyson 自旋波理论中的值.

5.10 电子-磁子相互作用

磁子的行为很像声子, 它也可以和电子发生相互作用. 如果系统中同时包含离域和定域电子 (如稀土化合物), 那么电子-磁子相互作用将对系统的物理性质产生不可忽视的影响.

5.10.1 $s-f$ 模型

一些材料 (如稀土化合物) 中的原子含有半满的 $4f$ 壳层, 这种 $4f$ 系统可能表现为绝缘体, 半导体或金属. 化合物中的稀土离子通常表现为 $+3$ 价, 在绝缘体中这三个电子全部参与形成化学键, 而在金属中它们会便为近自由的载流子.

$4f$ 系统一大特征是其中的 $4f$ 电子被全满的 $5s, 5p$ 壳层所屏蔽而严格局域化, 因而即使是在复杂的材料中相邻两个离子的 $4f$ 电子的波函数也只有极小的重叠并且这些 $4f$ 电子的性质在固体中也能被 Hund 规则所很好地描述. 进而如果这个壳层中电子没有成对排布, 那么原子将拥有一个近似定域在原子处的永久磁矩; 它们在特定的系统中可能产生交换相互作用并或许能在某个特定温度下自发产生铁磁序. 典型的这种**磁性 $4f$ 系统**有钇族钕化合物以及钆, 前者是绝缘体或半导体, 而后者则是金属.

既然包含永久磁矩的 $4f$ 系统可能表现为金属, 那么其中的载流子和磁矩间的相互作用便可能产生非平凡的后果. 这有可能导致系统导带的结构受磁化状态影响进而产生强烈的温度依赖性; 这也有可能让系统的磁化状态对导带中的载流子密度高度敏感, 进而我们可以通常掺杂来调控系统的磁化性质.

此类系统由 $s-f$ 模型所描述, 其 Hamilton 量为

$$H = H_s + H_{ss} + H_f + H_{sf}, \quad (5.238)$$

其中 H_s 部分刻画了周期晶格势中导带电子的动力学:

$$H_s = \sum_{i,j,\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) a_{i,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (5.239)$$

H_{ss} 为导带电子 Coulomb 相互作用项. 假设导带电子是 s -电子并且高度定域, 那我们可以取这一项为 Hubbard 型:

$$H_{ss} = \frac{1}{2} U \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i,-\sigma}. \quad (5.240)$$

刻画定域 $4f$ 磁矩的项 H_f 可以被直接取为 Heisenberg 模型

$$H_f = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (5.241)$$

我们将电子-自旋相互作用项取作局域的耦合:

$$H_{sf} = -g \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{S}_i. \quad (5.242)$$

不过我们这里应该使用二次量子化后的产生湮灭算符来改写自旋算符: 记 $z_\uparrow = +1, z_\downarrow = -1$, 那么

$$\sigma_i^\dagger = a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}, \quad (5.243)$$

$$\sigma_i = a_{i,\downarrow}^\dagger a_{i,\uparrow}, \quad (5.244)$$

$$\sigma_i^z = \frac{1}{2} \sum_\sigma z_\sigma n_{i,\sigma}, \quad (5.245)$$

于是

$$H_{sf} = -\frac{g}{2} \sum_{i,\sigma} (z_\sigma S_i^z n_{i,\sigma} + S_i^\sigma a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}), \quad (5.246)$$

其中

$$S_i^{\uparrow\downarrow} \equiv S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y. \quad (5.247)$$

可以看到, H_{sf} 中的第二项刻画了载流电子和定域磁矩间自旋的交换; 正是这一项对导带的结构有着显著的影响.

5.10.2 无穷窄带近似

我们考虑最简单的情况: 固体晶格常数如此之大以至于不同离子间相互作用近似可以忽略, 此时能带坍缩成了单个能级 T_0 , 并且我们只需要考虑单个格点处的 Hamilton 量⁸

$$\hat{H} = (T_0 - \mu) \sum_\sigma n_\sigma + \frac{1}{2} U \sum_\sigma n_\sigma n_{-\sigma} - \frac{g}{2} \sum_\sigma (z_\sigma S^z n_\sigma + S^\sigma a_{-\sigma}^\dagger a_\sigma). \quad (5.248)$$

我们还是需要计算单电子 Green 函数, 这可以通过一系列复杂的操作 (参见 [16]) 精确地算出. 考察单电子 Green 函数的极点可以发现原先单一能级 T_0 劈裂出了四个准粒子能级:

$$E_1 = T_0 - \frac{g}{2} S, \quad (5.249)$$

$$E_2 = T_0 + \frac{g}{2} (S + 1), \quad (5.250)$$

$$E_3 = T_0 + U - \frac{g}{2} (S + 1), \quad (5.251)$$

$$E_4 = T_0 + U + \frac{g}{2} S. \quad (5.252)$$

这些能级和自旋, 温度以及能带占有数无关. 但是各个能级的谱权重却会依赖于这些参数. 这些谱权重描述了各个准粒子能级的简并度, 我们便能以此为基础使用合金类比近似研究能带宽度有限时系统的物理性质.

⁸此时完整 Hamilton 量就是 $N\hat{H}$.

5.10.3 合金类比

现在我们可以将系统类比为一个四元合金, 每一组分都是单能级原子, 其能量为

$$\eta_{(m),\sigma} = E_m, \quad m = 1, 2, 3, 4. \quad (5.253)$$

同时各个组分的浓度由无穷窄带近似下准粒子的谱权重给出:

$$c_{m,\sigma} = \alpha_{m,\sigma}(T, n). \quad (5.254)$$

应用 CPA 近似即可计算出有限带宽下准粒子态密度, 此时其表现明显的能量和粒子数依赖性.

5.10.4 磁极化子

$s-f$ 模型的一个重要特例是空导带 ($n = 0$) 中存在单个试探电子的情况, 这可以描述氧化铈和硫化铈这样的铁磁绝缘体, 并且这个模型在铁磁饱和 (即 $T = 0$) 时精确可解.

$T = 0$ 且 $n = 0$ 的假设让计算单粒子 Green 函数时求热力学期望的操作变成了计算在系统的基态 $|0\rangle$ (这同时是电子真空和磁子真空) 上的期望. 记此时磁矩均指向 \uparrow , 那么计算可得

$$G_{\mathbf{k},\uparrow}(E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k}) + gS/2 + i0^+}, \quad (5.255)$$

这表明此时自旋正的准粒子有无穷长的寿命并且其能量相对自由的情况只被平移了一个常数. 这符合零温下正自旋的电子没法和平行的磁矩交换自旋的物理直观. 而负自旋单粒子 Green 函数形式则比较复杂:

$$G_{\mathbf{k},\downarrow}(E) = \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k},\downarrow}(E) + i0^+}, \quad (5.256)$$

$$\Sigma_{\mathbf{k},\downarrow}(E) = \frac{gS}{2} \left(1 + \frac{gB_{\mathbf{k}}(E)}{1 - \frac{1}{2}gB_{\mathbf{k}}(E)} \right), \quad (5.257)$$

$$B_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{E + gS/2 - \varepsilon(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \omega(\mathbf{q})}. \quad (5.258)$$

此时自能项会出现非零的虚部, 这意味着自旋负的准粒子有着有限的寿命, 而这代表了自旋负的电子和磁矩相互作用, 释放了一个磁子并变成了自旋正的电子, 但这一切的前提是存在能够接受这个新的自旋正的电子的态.

如果 $G_{\mathbf{k},\downarrow}(E)$ 的极点处自旋正准粒子的态密度等于零, 那么此时系统中会出现新的准粒子类型: 此时 \downarrow 电子要么和定域磁矩发生散射使得其能量位于 ρ_{\uparrow} 非零的范围内, 进而和磁矩交换自旋并变成 \uparrow 电子; 要么和一个 \uparrow 的 $4f$ 磁矩形成一个寿命无限长的束缚态, 我们称之为**磁极化子**. 因而此时 \downarrow 准粒子谱密度既包含一系列宽度有限大的峰, 也含有无限窄的 δ -函数.

6 零温微扰论

我们现在开始考虑发展一套系统的微扰计算多体 Green 函数的图形规则. 我们首先考虑零温的情况, 此时热力学期望 $\langle \cdots \rangle$ 可以被替换成在相互作用系统基态 $|E_0\rangle$ 上求期望 $\langle E_0 | \cdots | E_0 \rangle$.

6.1 不含时微扰论

我们把系统的 Hamilton 量分解为

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}, \quad (6.1)$$

其中 \mathcal{H}_0 是精确可解的, 而 $\lambda \mathcal{V}$ 是无法直接解出的微扰项. 记 \mathcal{H}_0 的本征态为 $|\eta_m\rangle$, 并且

$$\mathcal{H}_0 |\eta_m\rangle = \eta_m |\eta_m\rangle. \quad (6.2)$$

计算零温 Green 函数要求我们出求解 \mathcal{H} 的基态 $|E_0\rangle$, 记

$$\mathcal{H} |E_0\rangle = E_0 |E_0\rangle. \quad (6.3)$$

于是

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}) |E_0\rangle = E_0 |E_0\rangle, \quad (6.4)$$

进而

$$\lambda \langle \eta_m | \mathcal{V} | E_0 \rangle = (E_0 - \eta_m) \langle \eta_m | E_0 \rangle. \quad (6.5)$$

如果取 $|\eta_m\rangle$ 为 \mathcal{H}_0 的基态 $|\eta_0\rangle$, 那么我们便得到了相互作用项导致的能级移动

$$\Delta E_0 = E_0 - \eta_0 = \frac{\langle \eta_0 | \lambda \mathcal{V} | E_0 \rangle}{\langle \eta_0 | E_0 \rangle}. \quad (6.6)$$

假设 \mathcal{H}_0 基态非简并, 定义 P_0 为向 $|\eta_0\rangle$ 张成的一维子空间的投影算符

$$P_0 \equiv |\eta_0\rangle \langle \eta_0|, \quad (6.7)$$

记 Q_0 为向基态本征空间的正交补空间的投影:

$$Q_0 \equiv \mathbb{1} - P_0 = \sum_{n=1}^{\infty} |\eta_n\rangle \langle \eta_n|. \quad (6.8)$$

于是

$$|E_0\rangle = (P_0 + Q_0) |E_0\rangle = |\eta_0\rangle \langle \eta_0 | E_0 \rangle + Q_0 |E_0\rangle. \quad (6.9)$$

同时考虑非 \mathcal{H}_0 的本征值的任意常数 D , 我们有

$$(D - \mathcal{H}_0) |E_0\rangle = (D - E_0 + \lambda \mathcal{V}) |E_0\rangle, \quad (6.10)$$

进而

$$|E_0\rangle = \frac{1}{D - \mathcal{H}_0} (D - E_0 + \lambda \mathcal{V}) |E_0\rangle. \quad (6.11)$$

记

$$|\tilde{E}_0\rangle = \frac{|E_0\rangle}{\langle\eta_0|E_0\rangle}, \quad (6.12)$$

那么我们有

$$|\tilde{E}_0\rangle = |\eta_0\rangle + \frac{1}{D - \mathcal{H}_0} Q_0(D - E_0 + \lambda\mathcal{V}) |\tilde{E}_0\rangle, \quad (6.13)$$

其中我们利用了

$$[P_0, \mathcal{H}_0] = [Q_0, \mathcal{H}_0] = 0. \quad (6.14)$$

此时我们显然有

$$|\tilde{E}_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{D - \mathcal{H}_0} Q_0(D - E_0 + \lambda\mathcal{V}) \right]^n |\eta_0\rangle, \quad (6.15)$$

此时等号右边仅依赖未受到微扰的基态和微扰后的基态能量. 我们据此可以得到微扰造成的基态能量变化

$$\Delta E_0 = \langle\eta_0|\lambda\mathcal{V}|\tilde{E}_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\eta_0|\lambda\mathcal{V} \left[\frac{1}{D - \mathcal{H}_0} Q_0(D - E_0 + \lambda\mathcal{V}) \right]^n |\eta_0\rangle. \quad (6.16)$$

不同的选取 D 的方式会给出不同的微扰论:

Schrödinger 微扰论 此时

$$D = \eta_0, \quad (6.17)$$

于是

$$|\tilde{E}_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{\eta_0 - \mathcal{H}_0} Q_0(\lambda\mathcal{V} - \Delta E_0) \right]^n |\eta_0\rangle, \quad (6.18)$$

$$\Delta E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \langle\eta_0|\lambda\mathcal{V} \left[\frac{1}{\eta_0 - \mathcal{H}_0} Q_0(\lambda\mathcal{V} - \Delta E_0) \right]^n |\eta_0\rangle. \quad (6.19)$$

按照耦合常数 λ 逐阶计算即可得到我们熟知的量子力学微扰论中的结果:

$$\Delta E_0^{(0)} = \eta_0, \quad (6.20)$$

$$\Delta E_0^{(1)} = \lambda \langle\eta_0|\mathcal{V}|\eta_0\rangle, \quad (6.21)$$

$$\Delta E_0^{(2)} = \lambda^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\langle\eta_0|\mathcal{V}|\eta_n\rangle|^2}{\eta_0 - \eta_n}, \quad (6.22)$$

...

Schrödinger 微扰论的一大劣势是我们难以以一种一般化系统化的方式组织出高阶修正的表达式.

Brillouin-Wigner 微扰论 此时

$$D = E_0, \quad (6.23)$$

于是

$$|\tilde{E}_0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_0} Q_0(\lambda \mathcal{V}) \right]^n |\eta_0\rangle, \quad (6.24)$$

$$\Delta E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \eta_0 | \lambda \mathcal{V} \left[\frac{1}{E_0 - \mathcal{H}_0} Q_0(\lambda \mathcal{V}) \right]^n |\eta_0\rangle. \quad (6.25)$$

尽管此时这两个表达式在形式上是按 λ 的阶数进行的求和, 但等号右边的 E_0 其实是一个按 λ 展开的无穷级数, 因而这一微扰论也存在和 Schrödinger 微扰论一样的问题.

让我们尝试将这种一般的不含时微扰论的图像阐释得更清晰和一般一些.

我们要处理的问题其实就是用 \mathcal{H}_0 的本征态 $\{|\eta_{n,\alpha}\rangle\}$ 的线性组合去逼近 $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}$ 的本征态 $\{|E_n(\lambda)\rangle\}$. 不妨取我们感兴趣的 \mathcal{H} 本征态为 $|E_n(\lambda)\rangle$, 那么耦合常数 $\lambda \rightarrow 0$ 时其对应的能量 $E_n(\lambda)$ 肯定会等于 \mathcal{H}_0 的某个本征值 ε_n . 不失一般性地假设这个本征值是 k 重简并的, 对应的本征态为 $\{|\eta_{n,\alpha_n=1 \sim k}\rangle\}$, 那么我们便可以定义向这个本征子空间及其正交补上的投影算符 P_n 和 Q_n :

$$P_n = \sum_{\alpha_n=1}^k |\eta_{n,\alpha_n}\rangle \langle \eta_{n,\alpha_n}|, \quad Q_n = \mathbb{1} - P_n. \quad (6.26)$$

进而

$$|E_n(\lambda)\rangle = P_n |E_n(\lambda)\rangle + Q_n |E_n(\lambda)\rangle. \quad (6.27)$$

按这种方式分解 $|E_n(\lambda)\rangle$ 的一大好处为随着 $\lambda \rightarrow 0$, 第二项的贡献会越来越次要. 因而我们可以期待使用和 $\lambda \mathcal{V}$ 有关的表达式来改写这一项而让上式从一个意义平凡的等式变成一个有着非平凡意义的能让我们据此确定 $|E_n(\lambda)\rangle$ 的方程.

我们能依赖的只有 Schrödinger 方程

$$(\mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}) |E_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |E_n(\lambda)\rangle. \quad (6.28)$$

我们据此便可以得到

$$|E_n(\lambda)\rangle = \frac{1}{D - \mathcal{H}_0} (D - E_n + \lambda \mathcal{V}) |E_0\rangle. \quad (6.29)$$

因此我们得到了一个非平凡的等式

$$|E_n(\lambda)\rangle = P_n |E_n(\lambda)\rangle + \frac{1}{D - \mathcal{H}_0} Q_n (D - E_n + \lambda \mathcal{V}) |E_n(\lambda)\rangle. \quad (6.30)$$

我们可以迭代求解并得到

$$|E_n(\lambda)\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \left[\frac{1}{D - \mathcal{H}_0} Q_n (D - E_n + \lambda \mathcal{V}) \right]^i P_n |E_n(\lambda)\rangle. \quad (6.31)$$

可以看到, 如果 \mathcal{H}_0 的 ε_n 能级不存在简并, 那么这个表达式给出的结果和原推导完全一致.

仍考虑一般情况, 那么 (6.31) 仍依赖未确定的 $E_n(\lambda)$ 和 $\{\langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n(\lambda) \rangle\}$ 共 $(k+1)$ 个参数. 此时我们可以考虑根据 Schrödinger 方程构造出关于 $\{\langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n(\lambda) \rangle\}$ 的 k 元方程组

$$\langle \eta_{n,\alpha_n} | \lambda \mathcal{V} | E_n \rangle = (E_n - \varepsilon_n) \langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n \rangle. \quad (6.32)$$

我们不难意识到这是关于 $\langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n \rangle$ 的线性方程组, 进而我们得到了一个本征值问题. 将 (6.31) 代入 $\langle \eta_{n,\alpha_n} | \lambda \mathcal{V} | E_n \rangle$ 中可以得到关于 $\langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n \rangle$ 的 k 阶方阵, 其本征值可以给出一组 E_n 满足的自洽性方程, 求解它们即可得到 E_n 的可能取值; 这些本征值对应的本征矢便在相差一个归一化因子的意义上给出了所有可能的 $\{\langle \eta_{n,\alpha_n} | E_n(\lambda) \rangle\}$ 取值, 对 $|E_n\rangle$ 做归一化后便能得到所有可能的满足在 $\lambda \rightarrow 0$ 时退化回 \mathcal{H}_0 的 ε_n 本征子空间的 $|E_n\rangle$ 的形式.

可以看到, 这一 formalism 的有效性并不仅限于基态和非简并态. 虽然这种微扰论形式上不太方便解析计算, 但根据它应该可以较容易地 implement 数值算法.

6.2 含时微扰论

为了解决前述不含时微扰论存在的问题, 我们考虑人为引入假想的时间参数 t 并考虑含时 Hamilton 量

$$\mathcal{H}_\alpha = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V} e^{-\alpha|t|}, \quad \alpha > 0, \alpha \ll 1. \quad (6.33)$$

这意味着系统在 $t \rightarrow \pm\infty$ 时是自由的, 并且相互作用项在系统的演化中被绝热地引入和撤离. 我们将根据 \mathcal{H}_α 开展计算并在最后取极限 $\alpha \rightarrow 0$, 可以期待这应该给出和不含时 Hamilton 量相同的结果.

我们考虑 $t \rightarrow -\infty$ 时 \mathcal{H}_0 的一个非简并本征态 $|\eta_0\rangle$, 它绝热地演化到 $t = 0$ 时会变成 \mathcal{H} 的一个本征态 $|E_0\rangle$. 我们考虑在 Dirac 表象中研究这个问题, 于是

$$\mathcal{V}^D(t) e^{-\alpha|t|} = e^{i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{V} e^{-i\mathcal{H}_0 t} e^{-\alpha|t|}, \quad (6.34)$$

而态矢量的时间演化算符则为

$$U_\alpha^D(t, t_0) = T \left\{ \exp \left[-i\lambda \int_{t_0}^t d\tau e^{-\alpha|\tau|} \mathcal{V}^D(\tau) \right] \right\}. \quad (6.35)$$

因此

$$|\psi_\alpha^D(t)\rangle = U_\alpha^D(t, -\infty) |\eta_0\rangle. \quad (6.36)$$

根据这个表达式, 我们有

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi_\alpha^D(t)\rangle = \lambda e^{-\alpha|t|} \mathcal{V} |\psi_\alpha^D(t)\rangle, \quad (6.37)$$

这表明

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\psi_\alpha^D(t)\rangle = 0, \quad (6.38)$$

进而 $U_\alpha^D(+\infty, -\infty)$ 是一个常复相位⁹, 我们记

$$|\psi_\alpha^D(t \rightarrow +\infty)\rangle = e^{i\varphi} |\eta_0\rangle. \quad (6.40)$$

⁹如果我们在 $t \rightarrow -\infty$ 时选定的是一个简并的 \mathcal{H}_0 本征态 $|\eta_{0,\mu}\rangle$, 那么我们只能确定 $U_\alpha^D(+\infty, -\infty)$ 是一个本征子空间上的常么正矩阵, 记作

$$|\psi_\alpha^D(t \rightarrow +\infty)\rangle = \sum_\nu \mathcal{D}_{\mu\nu} |\eta_{0,\nu}\rangle. \quad (6.39)$$

直观上, 我们似乎可以取 $\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} |\psi_\alpha^D(t=0)\rangle$ 来得到 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}$ 的一个本征态 $|E_0\rangle$, 但是这个极限其实会给出不定的结果, 进而是不合法的. 幸运的是, **Gell-Mann-Low 定理**表明如果态

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{U_\alpha^D(0, -\infty) |\eta_0\rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(0, -\infty) | \eta_0 \rangle} \quad (6.41)$$

在各阶微扰论水平上均存在, 那么这一极限会给出 \mathcal{H} 的一个本征态.

我们在这里考察 Gell-Mann 和 Low 对这一定理的证明 [5].

记 $|\eta_0\rangle$ 对应的 \mathcal{H}_0 本征值是 η_0 , 那么我们便有

$$\begin{aligned} & (\mathcal{H}_0 - \eta_0) |\psi_\alpha^D(0)\rangle \\ &= [H_0, U_\alpha^D(0, -\infty)] |\eta_0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{-\alpha(|\tau_1| + \cdots + |\tau_n|)} [\mathcal{H}_0, T\{\mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n)\}] |\eta_0\rangle \\ &= \frac{1}{i} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{-\alpha(|\tau_1| + \cdots + |\tau_n|)} \sum_{\ell=1}^n \frac{\partial}{\partial \tau_\ell} (T\{\mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n)\}) |\eta_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n-1}}{(n-1)!} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{\alpha(\tau_1 + \cdots + \tau_n)} \frac{\partial}{\partial \tau_1} (T\{\lambda \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \lambda \mathcal{V}^D(\tau_n)\}) |\eta_0\rangle \\ &= - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n-1}}{(n-1)!} \int_{-\infty}^0 d\tau_2 \cdots d\tau_n e^{\alpha(\tau_2 + \cdots + \tau_n)} \lambda \mathcal{V}^D(0) T\{\lambda \mathcal{V}^D(\tau_2) \cdots \lambda \mathcal{V}^D(\tau_n)\} |\eta_0\rangle \\ &+ \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^{n-1}}{(n-1)!} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{\alpha(\tau_1 + \cdots + \tau_n)} T\{\lambda \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \lambda \mathcal{V}^D(\tau_n)\} |\eta_0\rangle \\ &= -\lambda \mathcal{V}^D(0) U_\alpha^D(0, -\infty) |\eta_0\rangle + i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} |\psi_\alpha^D(0)\rangle. \end{aligned} \quad (6.42)$$

进而¹⁰

$$(\mathcal{H} - \eta_0) |\psi_\alpha^D(0)\rangle = i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} |\psi_\alpha^D(0)\rangle, \quad (6.43)$$

我们遂有

$$\left(\mathcal{H} - \eta_0 - i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = \left(i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle \right) \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle}. \quad (6.44)$$

与此同时, 注意到

$$\langle \eta_0 | (\mathcal{H} - \eta_0) | \psi_\alpha^D(0) \rangle \frac{1}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle, \quad (6.45)$$

我们便有

$$\left(\mathcal{H} - \eta_0 - i\alpha \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = \frac{\langle \eta_0 | (\mathcal{H} - \eta_0) | \psi_\alpha^D(0) \rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle}. \quad (6.46)$$

¹⁰我们根据这个式子也能发现如果 $\lim_{\alpha \rightarrow 0} |\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 存在, 那么此时 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 将是 \mathcal{H} 的本征值 η_0 对应的本征态, 这显然是荒谬的.

取极限 $\alpha \rightarrow 0$, 我们便发现 $\frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle}$ 确实是 \mathcal{H} 的本征态:

$$\mathcal{H} \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle} = \frac{\langle\eta_0|\mathcal{H}|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle} \frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle}. \quad (6.47)$$

最后, 我们来说明 Gell-Mann-Low 定理中分子和分母在 $\alpha \rightarrow 0^+$ 下的极限不存在. 根据 (6.45), 我们有

$$i\alpha\lambda \frac{\partial}{\partial\lambda} \ln \langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle = \frac{\langle\eta_0|(\mathcal{H} - \eta_0)|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle} = \frac{\langle\eta_0|\lambda\mathcal{V}_D(0)|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle} \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} \Delta E_0(\lambda), \quad (6.48)$$

于是

$$\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} \exp\left\{-\frac{i}{\alpha} \int d\lambda \frac{\Delta E_0(\lambda)}{\lambda}\right\}. \quad (6.49)$$

进而 $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 不存在, 并且其不存在的原因是 $\lim_{\alpha \rightarrow 0} |\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 拥有一个发散的相位. Gell-Mann-Low 定理中将态矢和内积相除恰好能够消除这个发散的相位: 我们对于更一般的态矢 $|\eta_m\rangle$ 有

$$\frac{\langle\eta_m|(\mathcal{H} - \eta_0)|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_m|\psi_\alpha^D(0)\rangle} = i\alpha\lambda \frac{\partial}{\partial\lambda} \ln \langle\eta_m|\psi_\alpha^D(0)\rangle, \quad (6.50)$$

进而

$$i\alpha\lambda \frac{\partial}{\partial\lambda} \ln \langle\eta_m|\psi_\alpha^D(0)\rangle \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} E_m(\lambda) + \eta_m - \eta_0, \quad (6.51)$$

$$\langle\eta_m|\psi_\alpha^D(0)\rangle \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} \exp\left\{-\frac{i}{\alpha} \int d\lambda \frac{E_m(\lambda) + \eta_m - \eta_0}{\lambda}\right\}. \quad (6.52)$$

于是

$$\frac{|\psi_\alpha^D(0)\rangle}{\langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle} \stackrel{\alpha \ll 1}{\approx} \sum_m \exp\left\{-\frac{i}{\alpha} \int d\lambda \frac{E_m(\lambda) - \Delta E_0(\lambda) + \eta_m - \eta_0}{\lambda}\right\} |\eta_m\rangle. \quad (6.53)$$

好像发散的相位仍无法消去???

这一定理给出了通过自由基态态 $|\eta_0\rangle$ 的绝热演化确定相互作用基态的方式, 但我们在应用此定理时需要假设根据自由 Hamilton 量的基态构造出的相互作用 Hamilton 量的本征态仍是基态. 这一假设在绝热演化中不存在能级交叉时通常是成立的 [10], 但是在超导现象中特殊的相互作用会破坏这一假设 (自发对称破缺).

问题

我们并不清楚使得 Gell-Mann-Low 态矢 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 在绝热极限下收敛的条件, 仿照对 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 在绝热极限下的不定性的论证并不能得出对判断 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 在绝热极限下的收敛性有帮助的信息. 事实上, 根据 Gell-Mann 和 Low 的证明我们同样可以论证形如 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle\eta_m|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 的态矢在绝热极限下同样是相互作用 Hamilton 量的本征态, 那么我们为什么不会按这种方式选取态矢呢? 虽然我们可以借场论的语言 argue 说 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle\eta_0|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 的形式能确保 Green 函数中的非连通真空 bubble 被消去, 我们又如何仅依赖这里的材料来论证这一点呢?

构造 Gell-Mann-Low 态的物理直观或来自量子绝热定理 [14]: 根据量子绝热定理, $|\psi_\alpha^D(0)\rangle$ 在 $\alpha \ll 1$ 时与 $|E_0\rangle$ 相比会相差一个发散的动力学相位并使得其绝热极限不存在; 而 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle$ 恰可以消除这个相位. 但是这依旧无法说明为什么不将 Gell-Mann-Low 态取作 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle \eta_m | \psi_\alpha^D(0) \rangle$.

根据 [17], 演化算符

$$U_\alpha^D(0, -\infty) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \cdots \int_{-\infty}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n) e^{\alpha(\tau_1 + \cdots + \tau_n)} \quad (6.54)$$

包含连通图的共线 $U_{\alpha,c}$ 和非连通图 $U_{\alpha,dc}$ 的贡献:

$$U_\alpha^D(0, -\infty) = U_{\alpha,c} \exp(U_{\alpha,dc}). \quad (6.55)$$

并且连通图的贡献 $U_{\alpha,c}$ 是一个算符而非连通图的贡献 $U_{\alpha,dc}$ 仅是一个一般的复数. 特别的, $U_{\alpha,c}$ 在 $\alpha \rightarrow 0$ 下正规, 但是 $U_{\alpha,dc}$ 在 $\alpha \ll 1$ 时有 Laurent 展开

$$U_{\alpha,dc} = \frac{a}{\alpha} + b + \mathcal{O}(\alpha). \quad (6.56)$$

根据演化算符的么正性可以判断 a 是个纯虚数. 此时显然可以看出构造 Gell-Mann-Low 态的方式恰好可以将非连通图贡献的在绝热极限下发散的复相位消除, 并且 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle \eta_m | \psi_\alpha^D(0) \rangle$ 也可以达成同样的目的, 不过 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle / \langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle$ 更适合用于计算 Green 函数.

问题是关于非连通图的贡献的论证还是依赖于使用二次量子化的 Hamilton 量开展的微扰计算, 我们还是无法就一个一般形式的 Hamilton 量论证 Gell-Mann-Low 态矢的收敛性.

6.3 因果 Green 函数

在零温下, Green 函数中的热力学期望变成了在系统基态上求期望. 根据 Gell-Mann-Low 定理, 我们常常可以取 \mathcal{H}_0 的非简并基态 $|\eta_0\rangle$ 并得到相互作用系统 \mathcal{H} 的基态

$$|\tilde{E}_0\rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{U_\alpha^D(0, -\infty) |\eta_0\rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(0, -\infty) | \eta_0 \rangle}. \quad (6.57)$$

根据构造, 绝热演化的 Hamilton 量在 $t \rightarrow +\infty$ 时还是 \mathcal{H}_0 , 又因为我们假设 \mathcal{H}_0 基态非简并, 故我们有

$$U_\alpha^D(+\infty, -\infty) |\eta_0\rangle = e^{i\theta} |\eta_0\rangle, \quad (6.58)$$

这意味着 $U_\alpha^D(+\infty, -\infty)$ 的真空矩阵元是个常复相位

$$\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, -\infty) | \eta_0 \rangle = e^{i\theta}. \quad (6.59)$$

我们也可以选择 $t = +\infty$ 时的自由基态 $|\eta_0\rangle$ 并构造 $t = 0$ 时的相互作用基态

$$|\tilde{E}'_0\rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{U_\alpha^D(0, +\infty) |\eta_0\rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(0, +\infty) | \eta_0 \rangle}. \quad (6.60)$$

假设相互作用基态仍不简并, 那么 $|\tilde{E}_0\rangle$ 和 $|\tilde{E}'_0\rangle$ 间最多也就现相差一个常复相位 $e^{i\varphi}$, 对它们进行归一化后会给出唯一的归一化基态

$$|E_0\rangle \equiv \frac{|\tilde{E}_0\rangle}{\sqrt{\langle\tilde{E}_0|\tilde{E}_0\rangle}} = \frac{|\tilde{E}'_0\rangle}{\sqrt{\langle\tilde{E}'_0|\tilde{E}'_0\rangle}}. \quad (6.61)$$

Dirac 绘景中的时间演化算符和 Schrödinger 绘景中的演化算符存在联系

$$U_\alpha^D(t', t) = e^{i\mathcal{H}_0 t'} U_\alpha^S(t', t) e^{-i\mathcal{H}_0 t}, \quad (6.62)$$

而一个 Heisenberg 绘景中的算符和 Schrödinger 绘景中的算符的关系为

$$A_\alpha^H(t) = U_\alpha^S(0, t) A_\alpha^S U_\alpha^S(t, 0) = U_\alpha^S(0, t) e^{-i\mathcal{H}_0 t} A_\alpha^D(t) e^{i\mathcal{H}_0 t} U_\alpha^S(t, 0) = U_\alpha^D(0, t) A_\alpha^D(t) U_\alpha^D(t, 0). \quad (6.63)$$

进而在 Heisenberg 绘景中可观测量在基态上的期望如今可在相互作用绘景中被表示为

$$\begin{aligned} \langle E_0 | A_\alpha^H(t) | E_0 \rangle &= \frac{\langle \tilde{E}_0 | A_\alpha^H(t) | \tilde{E}_0 \rangle}{\langle \tilde{E}_0 | \tilde{E}_0 \rangle} = \frac{\langle \tilde{E}'_0 | A_\alpha^H(t) | \tilde{E}'_0 \rangle}{\langle \tilde{E}'_0 | \tilde{E}'_0 \rangle} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, 0) A_\alpha^H(t) U_\alpha^D(0, -\infty) | \eta_0 \rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, -\infty) | \eta_0 \rangle} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, t) A_\alpha^D(t) U_\alpha^D(t, -\infty) | \eta_0 \rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, -\infty) | \eta_0 \rangle}. \end{aligned} \quad (6.64)$$

注意在取第二个等号时利用了 $|\tilde{E}_0\rangle$ 和 $|\tilde{E}'_0\rangle$ 最多仅相差一个相位. 类似的, Heisenberg 绘景中算符乘积的期望如今可以被写作

$$\langle E_0 | A_\alpha^H(t_1) B_\alpha^H(t_2) | E_0 \rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, t_1) A_\alpha^D(t_1) U_\alpha^D(t_1, t_2) B_\alpha^D(t_2) U_\alpha^D(t_2, -\infty) | \eta_0 \rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, -\infty) | \eta_0 \rangle}. \quad (6.65)$$

更多算符乘积的期望不难以此类推. 后面为了趁手起见, 我们定义 S -矩阵为

$$S_\alpha = U_\alpha^D(+\infty, -\infty). \quad (6.66)$$

现在我们便考虑在相互作用绘景下计算零温因果 Green 函数

$$G_{AB}(t, t') \equiv -i \langle E_0 | T_\varepsilon \{ A(t) B(t') \} | E_0 \rangle. \quad (6.67)$$

这里的广义编时操作考虑到了费米子算符和玻色子算符不同的交换性质. 由于 Hamilton 量的相互作用项必然表现为玻色子算符, 故我们可以放心的把时间演化算符的定义改写为

$$U_\alpha^D(t, t_0) = T_\varepsilon \left\{ \exp \left[-i\lambda \int_{t_0}^t d\tau e^{-\alpha|\tau|} \mathcal{V}^D(\tau) \right] \right\}, \quad (6.68)$$

进而

$$\langle E_0 | A^H(t) | E_0 \rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\langle \eta_0 | S_\alpha | \eta_0 \rangle} \langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, t) A_\alpha^D(t) U_\alpha^D(t, -\infty) | \eta_0 \rangle. \quad (6.69)$$

注意到

$$\begin{aligned}
& \langle \eta_0 | U_\alpha^D(+\infty, t) A_\alpha^D(t) U_\alpha^D(t, -\infty) | \eta_0 \rangle \\
&= \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^{m+n}}{m!n!} \int_t^{+\infty} d\tau_1 \cdots d\tau_m \int_{-\infty}^t d\tau'_1 \cdots d\tau'_n e^{-\alpha(|\tau_1|+\cdots+|\tau_m|+|\tau'_1|+\cdots+|\tau'_n|)} \\
&\quad \times \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_m) \} A_\alpha^D(t) T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau'_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau'_n) \} | \eta_0 \rangle \\
&= \sum_{m,n=0}^{\infty} (-i\lambda)^{m+n} \int_t^{+\infty} d\tau_1 \cdots \int_t^{\tau_{m-1}} d\tau_m \int_{-\infty}^t d\tau'_1 \cdots \int_{-\infty}^{\tau'_{n-1}} d\tau'_n e^{-\alpha(|\tau_1|+\cdots+|\tau_m|+|\tau'_1|+\cdots+|\tau'_n|)} \\
&\quad \times \langle \eta_0 | \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_m) A_\alpha^D(t) \mathcal{V}^D(\tau'_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau'_n) | \eta_0 \rangle \\
&= \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^{m+n}}{(m+n)!} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_1 \cdots d\tau_m d\tau'_1 \cdots d\tau'_n e^{-\alpha(|\tau_1|+\cdots+|\tau_m|+|\tau'_1|+\cdots+|\tau'_n|)} \\
&\quad \times \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_m) \mathcal{V}^D(\tau'_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau'_n) A_\alpha^D(t) \} | \eta_0 \rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{-\alpha(|\tau_1|+\cdots+|\tau_n|)} \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n) A_\alpha^D(t) \} | \eta_0 \rangle \quad (6.70)
\end{aligned}$$

因此我们可以将单电子因果 Green 函数

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}(t, t') = \langle E_0 | T_\varepsilon \{ a_{\mathbf{k},\sigma}(t) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t') \} | E_0 \rangle \quad (6.71)$$

改写成方便导出图线规则的形式:

$$\begin{aligned}
& iG_{\mathbf{k},\sigma}(t, t') \\
&= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\langle \eta_0 | S_\alpha | \eta_0 \rangle} \\
&\quad \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{-\alpha(|\tau_1|+\cdots+|\tau_n|)} \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n) a_{\mathbf{k},\sigma}(t) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t') \} | \eta_0 \rangle. \quad (6.72)
\end{aligned}$$

6.4 Wick 定理

我们先处理费米子系统并考虑二粒子相互作用项

$$\mathcal{V}^D(t) = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell,m,n} v(k, \ell; m, n) a_k^\dagger(t) a_\ell^\dagger(t) a_m(t) a_n(t), \quad (6.73)$$

Schrödinger 绘景中的自由 Hamilton 量为

$$\mathcal{H}_0 = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^\dagger a_k, \quad (6.74)$$

因此相互作用绘景中的产生湮灭算符为

$$a_k(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} a_k e^{-i\mathcal{H}_0 t} = e^{-i(\varepsilon_k - \mu)t} a_k, \quad (6.75)$$

$$a_k^\dagger(t) = e^{i(\varepsilon_k - \mu)t} a_k^\dagger. \quad (6.76)$$

于是我们要处理的矩阵元的一般形式为

$$\langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ a_{i_1}^\dagger(t_1) a_{j_1}^\dagger(t_1) a_{k_1}(t_1) a_{\ell_1}(t_1) \cdots a_{i_n}^\dagger(t_n) a_{j_n}^\dagger(t_n) a_{k_n}(t_n) a_{\ell_n}(t_n) a_{\mathbf{k},\sigma}(t) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t) \} | \eta_0 \rangle. \quad (6.77)$$

在费米子系统的基态 $|\eta_0\rangle$ 中, \mathbf{k} -空间里所有位于 Fermi 面以内的态都被粒子占据. 进而 $a_{\mathbf{k},\sigma} |\eta_0\rangle$ 并不一定为零. 我们可以定义新的一组产生湮灭算符

$$\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \begin{cases} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, & |\mathbf{k}| > k_F, \\ a_{\mathbf{k},\sigma}, & |\mathbf{k}| \leq k_F. \end{cases} \quad (6.78)$$

$$\gamma_{\mathbf{k},\sigma} = \begin{cases} a_{\mathbf{k},\sigma}, & |\mathbf{k}| > k_F, \\ a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, & |\mathbf{k}| \leq k_F. \end{cases} \quad (6.79)$$

于是 $|\mathbf{k}| > k_F$ 时 $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ 和 $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ 分别在 Fermi 面外产生湮灭一个粒子, $|\mathbf{k}| < k_F$ 时二者分别在 Fermi 面内产生湮灭一个空穴, 并且此时一定有

$$\gamma_{\mathbf{k},\sigma} |\eta_0\rangle = 0. \quad (6.80)$$

我们称 $|\eta_0\rangle$ 为 **Fermi 真空**. 不难发现 γ, γ^\dagger 满足和 a, a^\dagger 一样的反对易关系. 和场论中一样, 我们定义**正规排序** $N\{\cdots\}$ 为通过不应用 (反) 对易关系仅交换算符顺序使得所有产生算符都在湮灭算符左边的排序¹¹, 如

$$N\{\gamma_1 \gamma_2^\dagger \gamma_3\} = -\gamma_2^\dagger \gamma_1 \gamma_3. \quad (6.81)$$

注意费米子产生湮灭算符满足的反对易关系要求我们每进行一次交换都得引入一个负号. 显然正规排序的算符组合在 Fermi 真空上的矩阵元等于零.

我们定义 **Wick 收缩** 为

$$\overline{A(t)B(t')} \equiv T_\varepsilon\{A(t)B(t')\} - N\{A(t)B(t')\}. \quad (6.82)$$

如果 A, B 均是产生算符或者湮灭算符, 那么显然其 Wick 收缩为零. 我们下面分两种情况讨论电子产生湮灭算符的 Wick 收缩:

如果 $\varepsilon_k > \varepsilon_F$, 那么正规排序中作为电子产生算符的 a_k^\dagger 应该在电子湮灭算符 a_k 的左边, 进而

$$\overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')} = \begin{cases} e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, & t > t', \\ 0, & t < t'. \end{cases} = \vartheta(t-t') e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, \quad (6.83)$$

$$\overline{a_{k'}^\dagger(t') a_k(t)} = \begin{cases} -e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, & t > t', \\ 0, & t < t'. \end{cases} = -\vartheta(t-t') e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}. \quad (6.84)$$

如果 $\varepsilon_k \leq \varepsilon_F$, 那么作为空穴产生算符的 a_k 应该在空穴湮灭算符 a_k^\dagger 的左边, 于是

$$\overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')} = \begin{cases} 0, & t > t', \\ -e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, & t < t'. \end{cases} = -\vartheta(t'-t) e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, \quad (6.85)$$

$$\overline{a_{k'}^\dagger(t') a_k(t)} = \begin{cases} 0, & t > t', \\ e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}, & t < t'. \end{cases} = \vartheta(t'-t) e^{-i(\varepsilon_k - \mu)(t-t')} \delta_{kk'}. \quad (6.86)$$

¹¹注意我们定义湮灭算符为作用在 Fermi 真空上的结果为零的算符并定义产生算符为其厄米共轭, 因此在 Fermi 面内 a_k 是产生算符, 但在 Fermi 面外 a_k^\dagger 是产生算符.

我们使用运动方程法不难算出自由因果 Green 函数为

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(t-t') = [\vartheta(t-t')(1 - \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)}) - \vartheta(t'-t) \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)}] e^{-i[\varepsilon(\mathbf{k})-\mu](t-t')}. \quad (6.87)$$

如果 $\varepsilon(\mathbf{k}) > \varepsilon_F$, 那么 $\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} = 0$, 进而

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(t-t') = \vartheta(t-t') e^{-i[\varepsilon(\mathbf{k})-\mu](t-t')}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) > \varepsilon_F. \quad (6.88)$$

而 $\varepsilon(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F$ 时 $\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle^{(0)} = 1$, 所以

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(t-t') = -\vartheta(t'-t) e^{-i[\varepsilon(\mathbf{k})-\mu](t-t')}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F. \quad (6.89)$$

进而我们有

$$\overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')} = iG_k^{0,c}(t-t'), \quad (6.90)$$

$$\overline{a_{k'}^\dagger(t') a_k(t)} = -iG_k^{0,c}(t-t'). \quad (6.91)$$

因此, 我们发现一对产生湮灭算符的编时乘积等于自由因果 Green 函数加上其正规乘积, 并且

$$\langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ a_k(t) a_{k'}^\dagger(t') \} | \eta_0 \rangle = \langle \eta_0 | \overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')} | \eta_0 \rangle = iG_k^{0,c}(t-t'). \quad (6.92)$$

Wick 定理进一步表明 n 个产生湮灭算符的编时乘积的真空矩阵元等于以所有可能的方式两两收缩编时乘积中相邻的产生和湮灭算符¹²得到的自由因果 Green 函数的乘积之和. 不难发现, 如果拥有非凡真空矩阵元的编时乘积应该拥有相同数目的产生算符和湮灭算符.

在进行 Wick 收缩 $\overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')}$ 时会遇到 $t = t'$ 这一特殊情况, 例如一个相互作用势会同时贡献数目相等的共时的产生湮灭算符, 而 $iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(0)$ 是没有定义的. 为了处理这一情况, 我们需要注意到这些来自相互作用项的共时产生湮灭算符组合中产生算符总是在湮灭算符的左边, 并且我们在编时乘积内也会保持这一相对位置关系不变. 因此一个合适的处理方式是认为这些共时算符组合中产生算符的时间指标略大于湮灭算符的时间指标并将共时产生湮灭算符的 Wick 收缩取作

$$\overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t)} \equiv \lim_{t' \rightarrow t^+} \overline{a_k(t) a_{k'}^\dagger(t')} = \lim_{t' \rightarrow t^+} iG_k^{0,c}(t-t') = -\langle n_k \rangle^{(0)} \delta_{kk'}, \quad (6.93)$$

$$\overline{a_{k'}^\dagger(t) a_k(t)} \equiv \lim_{t' \rightarrow t^+} \overline{a_{k'}^\dagger(t') a_k(t)} = \lim_{t' \rightarrow t^+} (-i)G_k^{0,c}(t-t') = \langle n_k \rangle^{(0)} \delta_{kk'}. \quad (6.94)$$

6.5 Feynman 图

我们可以使用 Feynman 图系统地组织微扰计算中出现的项. 我们先来考虑**真空振幅**, 即时间演化算符的真空期望

$$\langle \eta_0 | U_\alpha(t, t') | \eta_0 \rangle = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \langle \eta_0 | U_\alpha^{(n)}(t, t') | \eta_0 \rangle, \quad (6.95)$$

¹²如果编时乘积中不存在相邻的产生湮灭算符, 那么我们需要根据其 (反) 对易关系移动算符的位置来得到相邻的产生湮灭算符. 对于费米子系统这一操作会带来额外的负号.

其中

$$\langle \eta_0 | U_\alpha^{(n)}(t, t') | \eta_0 \rangle = \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_t^{t'} d\tau_1 \cdots d\tau_n e^{-\alpha(|\tau_1| + \cdots + |\tau_n|)} \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n) \} | \eta_0 \rangle. \quad (6.96)$$

我们仍不失一般性地考虑前一节中的两粒子相互作用项, 并为了形式上消除共时的产生湮灭算符而记之为

$$\mathcal{V}^D(t) = \frac{1}{2} \sum_{k, \ell, m, n} v(k, \ell; m, n) \int_{-\infty}^{\infty} dt' \delta(t - t') a_k^\dagger(t) a_\ell^\dagger(t') a_m(t') a_n(t), \quad (6.97)$$

于是真空振幅的领头阶项为

$$\begin{aligned} \langle \eta_0 | U_\alpha^{(1)}(t, t') | \eta_0 \rangle &= \frac{-i\lambda}{2} \int_{t'}^t d\tau e^{-\alpha|\tau|} \\ &\times \sum_{k, \ell, m, n} v(k, \ell; m, n) \int d\tau' \delta(\tau - \tau') \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ a_k^\dagger(\tau) a_\ell^\dagger(\tau') a_m(\tau') a_n(\tau) \} | \eta_0 \rangle. \end{aligned} \quad (6.98)$$

根据 Wick 定理,

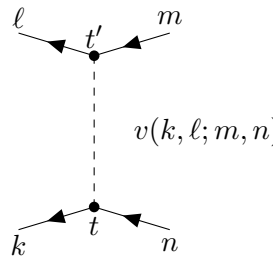
$$\begin{aligned} &\langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ a_k^\dagger(\tau) a_\ell^\dagger(\tau') a_m(\tau') a_n(\tau) \} | \eta_0 \rangle \\ &= \langle \eta_0 | \overline{a_k^\dagger(\tau) a_\ell^\dagger(\tau')} \overline{a_m(\tau') a_n(\tau)} | \eta_0 \rangle + \langle \eta_0 | \overline{a_k^\dagger(\tau) a_\ell^\dagger(\tau')} \overline{a_m(\tau') a_n(\tau')} | \eta_0 \rangle \\ &= [-iG_k^{0,c}(\tau' - \tau)][-iG_\ell^{0,c}(\tau - \tau')](-\delta_{mk}\delta_{nl}) + [-iG_k^{0,c}(0^-)][-iG_\ell^{0,c}(0^-)]\delta_{nk}\delta_{ml}. \end{aligned} \quad (6.99)$$

于是

$$\langle \eta_0 | U_\alpha^{(1)}(t, t') | \eta_0 \rangle = (-i\lambda) \int_{t'}^t d\tau e^{-\alpha|\tau|} \sum_{k, \ell} \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_\ell \rangle^{(0)} [v(k, \ell; \ell, k) - v(k, \ell; k, \ell)]. \quad (6.100)$$

可以看到, 这一项的贡献正比于 $1/\alpha$ 并且在绝热极限下发散.

我们可以引入 Feynman 规则并用 Feynman 图表示这种微扰展开中出现的项. 与高能物理中一样, 我们约定时间方向为由左至右. 每一个相互作用项都对应一个如下二顶点子图, 其中入顶点实线对应湮灭算符, 出顶点实线对应产生算符:



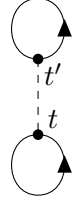
$$v(k, \ell; m, n) \quad (6.101)$$

Wick 收缩得到的 Green 函数 (传播子) 对应连接两个顶点的实线. 电子传播子便为

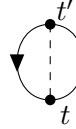
$$(t_i, k_i) \longrightarrow (t_j, k_j) \Leftrightarrow \overline{a_{k_i}^\dagger(t_i) a_{k_j}(t_j)} = -iG_{k_i}^{0,c}(t_j - t_i) \delta_{k_i k_j}, \quad (6.102)$$

$$(t_i, k_i) \longleftarrow (t_j, k_j) \Leftrightarrow \overline{a_{k_i}(t_i) a_{k_j}^\dagger(t_j)} = iG_{k_i}^{0,c}(t_i - t_j) \delta_{k_i k_j}, \quad (6.103)$$

可以看到, 两种情况分别对应于在 t_i 时刻产生了一个 k_i -电子/空穴并在后来的 t_j 时刻将其湮灭. 对一阶修正项的 Wick 收缩操作对应于将相互作用项对应的二顶点子图中的开出实线和开入实线相连. 据此我们可以得到对领头阶真空振幅有贡献的两幅图为



$$= \delta_{kn} \delta_{\ell m} [-iG_k^{0,c}(0^-)] [-iG_\ell^{0,c}(0^-)] v(k, \ell; m, n), \quad (6.104)$$



$$= \delta_{km} \delta_{\ell n} [-iG_k^{0,c}(0^-)] [iG_\ell^{0,c}(0^-)] v(k, \ell; m, n). \quad (6.105)$$

我们在收缩开线时使用如下约定:

- 收缩由同一顶点发出的两条线时, 产生算符在湮灭算符的左侧.
- 收缩自不同顶点发出的两条线时, t_{n-1} 顶点对应的产生湮灭算符在 t_n 顶点对应的产生湮灭算符的左侧. 亦即尽管在相互作用项的表达式中 t_{n-1} 和 t_n 会被 δ -函数固定为相等, 但是我们在计算矩阵元时会取 $t_{n-1} = t_n + 0^+$.

我们不难类比出对真空振幅的 n 阶修正的 Feynman 图表示: 此时我们会考虑 n 个相互作用项给出的二顶点子图, 将这些图的 $2n$ 个出开线和 $2n$ 个入开线两两相连便给出了对这一阶修正有贡献的 $(2n)!$ 个 Feynman 图. 不过由于我们最后会对各 k, ℓ, m, n 指标求和并对时间积分, 因而 $(2n)!$ 个 Feynman 图中相互作用线的指标和顶点的时间指标相差一个排列的图对这一阶修正项有着相同的贡献.

可以看到, 这里的 Feynman 图和 QED 中的 Feynman 图高度相似, 我们可以进一步将 Feynman 规则总结为:

- 每一个相互作用顶点都对应一组时间和出入电子波数指标 $(t; k, n)$, 其中 k 为出电子 (产生算符) 指标, n 为入电子 (湮灭算符) 指标. 相互作用项给出的连接顶点 $(t; k, n)$ 和 $(t'; \ell, m)$ 的虚线的贡献为

$$v(k, \ell; m, n) \delta(t - t'). \quad (6.106)$$

- 一根两段连接了不同顶点并且两顶点没有被虚线相连的电子线会给出

$$iG_{k_\nu}^{0,c}(t_\nu - t_\mu) \delta_{k_\nu, k_\mu}, \quad (6.107)$$

其中 (t_μ, k_μ) 是产生这个电子的顶点的时间指标和出电子指标, (t_ν, k_ν) 是湮灭这个电子的顶点的时间指标和入电子指标.

- 一根两端连接了同一顶点或被虚线相连的两顶点的电子线会给出

$$iG_{k_\nu}^{0,c}(0^-) \delta_{k_\nu, k_\mu} = -\langle n_{k_\nu} \rangle^{(0)} \delta_{k_\nu, k_\mu}. \quad (6.108)$$

其中 k_μ 为发出这条线的顶点的出电子指标, k_ν 为收入这条线的顶点的入电子指标.

- 一幅图的 overall 系数为

$$(-1)^S, \quad (6.109)$$

其中 S 为拓扑意义上图中电子圈的数目.

- 一幅图的贡献便是对各个指标 k_i, ℓ_i, m_i, n_i 求和并引入绝热演化因子 $e^{-\alpha(|t_1|+\dots)}$ 且对各时间变量在 $[t_i, t'_i]$ 上积分后的每条线贡献的乘积.
- 为计算结果乘上系数

$$\frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{2} \right)^n. \quad (6.110)$$

6.6 连通集团定理

目前为止我们的 Feynman 规则还是稍显复杂, 不过我们可以借助一些拓扑上的概念来让日子好过一些.

我们知道, 在计算 n 阶修正时应该考虑所有由 n 个相互作用项给出的二顶点子图收缩外线给出的 Feynman 图. 这会给出成千上万幅图, 但是的很多图对微扰计算有着相同的贡献. 我们称两幅图有着相同的**结构**, 如果二者间相差的仅是相互作用虚线的排列以及虚线两端顶点的指标的交换. 可以想见, 由某一结构的图的代表元根据这一规则生成的拥有同一结构的等价类的大小便是 $2^n n!$.

在拥有同一结构的 $2^n n!$ 幅图中还存在一些图满足更强的等价条件: 我们称两幅图**拓扑等价**, 如果二者间仅相差一个相互作用顶点指标的排列. 拓扑不等价的图对应于不同的收缩产生湮灭算符的方式. 我们记 Θ 为某一结构, $h(\Theta)$ 为此结构下拓扑等价的图的数目 (即图的几何对称因子), $A_n(\Theta)$ 为拓扑不等价的图的数目并且

$$A_n(\Theta) = \frac{2^n n!}{h(\Theta)}, \quad (6.111)$$

这给出了产生同一结构的 Feynman 图的不同 Wick 收缩方式的数目. 我们现在考虑不同的结构 $\Theta_1, \dots, \Theta_\nu, \dots$ 并在各个结构中取一个代表元 $D_\nu^{(n)}$, 记它的贡献为 $U(D_\nu^{(n)})$, 因而结构 Θ_ν 对计算结果的贡献便为

$$U(\Theta_\nu) = A_n(\Theta_\nu) U(D_\nu^{(n)}) = a_n(\Theta_\nu) U^*(D_\nu^{(n)}), \quad (6.112)$$

其中 $U^*(D_\nu^{(n)})$ 为按前述规则计算 $D_\nu^{(n)}$ 但是没有乘以系数 $\frac{1}{n!}(-\frac{i}{2})^n$ 得到的结果,

$$a_n(\Theta_\nu) = \frac{A_n(\Theta_\nu)}{(2i)^n n!} = \frac{(-i)^n}{h(\Theta_\nu)}. \quad (6.113)$$

真空振幅的 n 阶修正便为

$$\langle \eta_0 | U_\alpha^{(n)}(t, t') | \eta_0 \rangle = \sum_\nu a_n(\Theta_\nu) U^*(D_\nu^{(n)}). \quad (6.114)$$

如果结构 Θ 不是连通的, 那么它一定可以被分解为两个子结构 Θ_1 和 Θ_2 . 如果 $\Theta_1 \neq \Theta_2$, 那么

$$h(\Theta) = h(\Theta_1) h(\Theta_2), \quad (6.115)$$

$$U^*(D^{(n)}) = U^*(D_1^{(n_1)}) U^*(D_2^{(n_2)}). \quad (6.116)$$

同时

$$U(\Theta) = U(\Theta_1)U(\Theta_2), \quad \Theta_1 \neq \Theta_2. \quad (6.117)$$

如果 $\Theta_1 = \Theta_2$, 那么 Θ 中的拓扑等价图可以由 Θ_1 图和 Θ_2 图以及二者的交换生成, 故

$$h(\Theta) = 2!h(\Theta_1)h(\Theta_2) = 2!h^2(\Theta_1). \quad (6.118)$$

我们可以将这个情况推广到一般情形: 一个非连通结构 Θ 总可以被分解为一系列连通结构 Θ_i :

$$\Theta = p_1\Theta_1 + p_2\Theta_2 + \cdots + p_n\Theta_n, \quad (6.119)$$

并且

$$U(\Theta) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{p_i!} U^{p_i}(\Theta_i). \quad (6.120)$$

于是完整的真空振幅便为

$$\begin{aligned} \langle \eta_0 | U_\alpha(t, t') | \eta_0 \rangle &= 1 + \sum_i^{\text{connect}} U(\Theta_i) + \sum_{i,j}^{n_i+n_j=2} \frac{1}{n_i!n_j!} U_\alpha^{n_i}(\Theta_i) U_\alpha^{n_j}(\Theta_j) \\ &+ \sum_{i,j,k}^{n_i+n_j+n_k=3} \frac{1}{n_i!n_j!n_k!} U_\alpha^{n_i}(\Theta_i) U_\alpha^{n_j}(\Theta_j) U_\alpha^{n_k}(\Theta_k) + \cdots \end{aligned} \quad (6.121)$$

其中第一个求和为所有连通图的贡献, 而后面的依次为由两个, 三个, 乃至更多个连通图组成的非连通图的贡献. 不难看出这一表达式可以被改写为

$$\langle \eta_0 | U_\alpha(t, t') | \eta_0 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_i^{\text{connect}} U_\alpha(\Theta_i) \right)^n = \exp \left(\sum_i^{\text{connect}} U_\alpha(\Theta_i) \right). \quad (6.122)$$

这便是**连通集团定理**, 其表明在计算真空振幅时我们只需要考虑连通结构的贡献. 如今我们可以将 Feynman 规则修正为:

- 仅考虑连通图.
- 每一个相互作用顶点都对应一组时间和出入电子波数指标 $(t; k, n)$, 其中 k 为出电子 (产生算符) 指标, n 为入电子 (湮灭算符) 指标. 相互作用项给出的连接顶点 $(t; k, n)$ 和 $(t'; \ell, m)$ 的虚线的贡献为

$$v(k, \ell; m, n) \delta(t - t'). \quad (6.123)$$

- 一根两段连接了不同顶点并且两顶点没有被虚线相连的电子线会给出

$$iG_{k_\nu}^{0,c}(t_\nu - t_\mu) \delta_{k_\nu, k_\mu}, \quad (6.124)$$

其中 (t_μ, k_μ) 是产生这个电子的顶点的时间指标和出电子指标, (t_ν, k_ν) 是湮灭这个电子的顶点的时间指标和入电子指标.

- 一根两端连接了同一顶点或被虚线相连的两顶点的电子线会给出

$$iG_{k_\nu}^{0,c}(0^-)\delta_{k_\nu k_\mu} = -\langle n_{k_\nu} \rangle^{(0)} \delta_{k_\nu k_\mu}. \quad (6.125)$$

其中 k_μ 为发出这条线的顶点的出电子指标, k_ν 为收入这条线的顶点的入电子指标.

- 一幅图的 overall 系数为

$$(-1)^S, \quad (6.126)$$

其中 S 为拓扑意义上图中电子圈的数目.

- 一幅图的贡献便是对各个指标 k_i, ℓ_i, m_i, n_i 求和并引入绝热演化因子 $e^{-\alpha(|t_1|+\dots)}$ 且对各时间变量在 $[t_i, t'_i]$ 上积分后的每条线贡献的乘积.

- 为计算结果乘上系数

$$\frac{(-1)^S (-i)^n}{h(\Theta)} \quad (6.127)$$

便能得到这幅图对应的 $U_\alpha(\Theta_i)$.

计算几何对称因子 $h(\Theta)$ 的公式

如果 n 粒子相互作用项形如

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{n!} v(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n), \quad (6.128)$$

那么完全由这种相互作用项给出的 m 阶 Feynman 图的几何对称因子为

$$h(\Theta) = \frac{(n!)^m}{\text{收缩相互作用顶点的开线以得到这幅图的方法数}}. \quad (6.129)$$

对这一公式的讨论参见笔者的 QFT 笔记.

6.7 连通图主定理

现在我们将注意力从真空跃迁振幅转移到两点函数

$$\begin{aligned} & \langle E_0 | T_\varepsilon \{ A^H(t) B^H(t') \} | E_0 \rangle \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\langle \eta_0 | S_\alpha | \eta_0 \rangle} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-i)^\nu}{\nu!} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \cdots dt_\nu e^{-\alpha(|t_1|+\dots+|t_\nu|)} \\ & \quad \times \langle \eta_0 | T_\varepsilon \{ \mathcal{V}^D(t_1) \cdots \mathcal{V}^D(t_\nu) A^H(t) B^H(t') \} | \eta_0 \rangle. \end{aligned} \quad (6.130)$$

我们假设 $A^H(t)$ 和 $B^H(t')$ 都是费米子产生湮灭算符的乘积. 此时我们还是靠 Wick 定理计算真空编时乘积矩阵元, 得到的 Feynman 规则与真空跃迁振幅的相似. 唯二的区别中一个是不会对算符 A, B 带来的顶点指标求和, 一个是此时对时间的积分范围为 $(-\infty, +\infty)$ 而非 $[t', t]$.

假设 $A^H(t)$ 有 \bar{n} 个产生湮灭算符, $B^H(t')$ 有 \bar{m} 个产生湮灭算符, 并且 $\bar{n} + \bar{m}$ 是偶数. 那么此时的一副 Feynman 图在 t 时刻有 \bar{n} 条外线, 在 t' 时刻有 \bar{m} 条外线. 在 n 阶计算

中, Feynman 图还会包含 n 个由相互作用项给出的二顶点子图. 一般情况下, 这么一幅图会包含诸多连通分量, 并且有的连通分量没有外线, 有的存在外线. 我们称有外线的为**开图**, 没有外线的为**闭图**, 于是一般情况下所有开图都包含开连通子图 and 对应真空涨落的闭连通子图. 我们考虑某个开连通图 D_0 , 那么通过向图中加入各种可能出现的闭连通真空跃迁图便可以生成与 D_0 有关的各种不连通开图, 进而这些开图的总贡献为

$$U(D_0) \exp \left(\sum_i^{\text{connect}} U_\alpha(\Theta_i) \right). \quad (6.131)$$

进而真空编时乘积矩阵元受到的修正便是上式对所以开连通图构型 D_0 的求和:

$$\left(\sum_{D_0} U(D_0) \right) \exp \left(\sum_i^{\text{connect}} U_\alpha(\Theta_i) \right). \quad (6.132)$$

这便是**连通图主定理**. 将这个表达式代入 (6.130) 中, 我们发现上式的指数项刚好可以和分母的真空振幅相消, 并且

$$\langle E_0 | T_\varepsilon \{ A^H(t) B^H(t') \} | E_0 \rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{D_0} U(D_0). \quad (6.133)$$

其中 D_0 是在 t 处有 \bar{n} 条外线, 在 t' 处有 \bar{m} 条外线的开连通图. 类似的,

$$\langle E_0 | A^H(t) | E_0 \rangle = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\bar{D}_0} U(\bar{D}_0), \quad (6.134)$$

其中 \bar{D}_0 是在 t 时刻有 \bar{n} 条外线的开连通图.

6.8 能量表象中单粒子 Green 函数的 Feynman 规则

我们现在考虑使用 Feynman 图计算单粒子因果 Green 函数

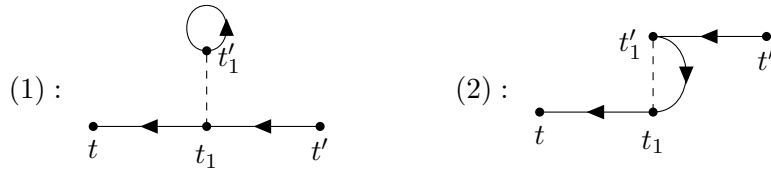
$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^c(t-t') = \langle E_0 | T_\varepsilon \{ a_{\mathbf{k},\sigma}(t) a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(t') \} | E_0 \rangle. \quad (6.135)$$

我们考虑两粒子相互作用 $v(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ 并假设系统有平移对称性, 那么此时相互作用顶点处动量必须守恒; 同时我们也要求顶点处自旋守恒, 即相连的两顶点有着相同的自旋指标.

零阶的 Feynman 图只有一个:

$$\begin{array}{c} \bullet \\ t \end{array} \xrightarrow{\mathbf{k}, \sigma} \begin{array}{c} \bullet \\ t' \end{array} = iG_{\mathbf{k},\sigma}^c(t-t'). \quad (6.136)$$

根据 Feynman 规则, 我们需要考虑的一阶图有两个:



这两幅图有着相同的对称因子 $h(\Theta) = 2$? 二阶时则有十幅开连通图, 但是外线的存在使得每幅图的对称因子都是 1.

由于 Feynman 规则使用的自由单粒子 Green 函数在时域上的形式比较复杂, 因此在时域上进行的 Feynman 图计算会比较费劲. 但是我们可以考虑 Fourier 变换

$$G_k^{0,c}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int dE G_k^{0,c}(E) e^{-iE(t-t')}, \quad (6.137)$$

$$G_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E) = \frac{1}{E - [\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F] \pm i0^+}, \quad (6.138)$$

其中 \mathbf{k} 在 Fermi 面内取正, 反之取负. 此时我们发现在进行了矩阵元展开式中的时间积分并取绝热极限 $\alpha \rightarrow 0$ 后我们得到了能量表象中的一条重要的 Feynman 规则: 相互作用顶点处能量守恒. 并且我们得到了能量表象下的 Feynman 规则:

- 相互作用虚线对应

$$\frac{1}{2\pi} v(k, \ell; m, n) \delta[(E_k + E_\ell) - (E_m + E_n)]. \quad (6.139)$$

- 所有电子内线均对应 $iG_{k_\nu}^{0,c}(E_{k_\nu})\delta_{k_\nu k_\mu}$.
- 系数为 $(-1)^S(-i)^n$.
- 对所有内部顶点的指标 k_i, ℓ_i, \dots 求和, 对所有内线的能量积分.
- 单粒子 Green 函数中两条外线均给出 $iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E)$.

6.9 Dyson 方程

很多时候仅计算有限个微扰展开项是不够的, 但是我们根据这有限个项却能组织出完整的微扰展开级数的一个子无穷级数. 我们在计算 QED 跑动耦合时便利用了这样的操作.

如果我们已经计算出了几个单粒子不可约的自能图的贡献之和 $-i\Sigma_{\mathbf{k},\sigma}(E)$, 那么我们可以利用电子线连接这些单粒子不可约自能图并将其作为完整 dressed 传播子的较好的近似. 特别的, 此时我们可以构造出一个几何级数并得到

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^c(E) = iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E) \sum_{n=0}^{\infty} \Sigma_{\mathbf{k},\sigma}(E) G_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E) = \frac{iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E)}{1 - G_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E) \Sigma_{\mathbf{k},\sigma}(E)}. \quad (6.140)$$

不难想象, 随着我们增加在计算 $-i\Sigma_{\mathbf{k},\sigma}(E)$ 时考虑的单粒子不可约自能图数目, 我们在 resummation 时考虑进的 Feynman 图便会愈发接近所有的图. 进而, 如果我们在计算自能项时考虑了所有单粒子不可约自能图, 那么我们按照上式得到的就是精确的 dressed 传播子, 并且我们在计算高阶修正时事实上只需要考虑那些单粒子不可约的图.

根据前述论证, 我们不难得到 Dyson 方程

$$iG_{\mathbf{k},\sigma}^c(E) = iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E) + iG_{\mathbf{k},\sigma}^{0,c}(E)[-i\Sigma_{\mathbf{k},\sigma}(E)]G_{\mathbf{k},\sigma}^c(E). \quad (6.141)$$

6.10 电子气的基态能量

我们现在考虑根据 Jellium 模型计算相互作用电子气的基态能量. 此时相互作用项为

$$\mathcal{V}^D(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,\ell,n,m} v(k, \ell; m, n) a_k^\dagger(t) a_\ell^\dagger(t) a_m(t) a_n(t), \quad k = (\mathbf{k}, \sigma_k). \quad (6.142)$$

顶点处能动量和自旋守恒意味着

$$v(k, \ell; m, n) = v(\mathbf{k} - \mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell, \mathbf{m}+\mathbf{n}} \delta_{\sigma_k \sigma_n} \delta_{\sigma_\ell \sigma_m}, \quad (6.143)$$

同时我们在推导 Jellium 模型时即有

$$v(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 V |\mathbf{q}|^2}, \quad v(0) = 0. \quad (6.144)$$

记自由系统的基态为 $|\eta_0\rangle$, 根据 Gell-Mann-Low 定理得到的 Jellium 模型的基态为 $|\psi_\alpha^D(0)\rangle$; 那么基态能量修正便为

$$\begin{aligned} \Delta E_0 = E_0 - \eta_0 &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | \mathcal{V}^D(0) | \psi_\alpha^D(0) \rangle}{\langle \eta_0 | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | \mathcal{V}^D(0) U_\alpha(0, -\infty) | \eta_0 \rangle}{\langle \eta_0 | U_\alpha(0, -\infty) | \eta_0 \rangle} \\ &= \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\langle \eta_0 | U_\alpha(0, -\infty) | \eta_0 \rangle} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\lambda)^n}{n!} \int_{-\infty}^0 dt_1 \cdots dt_n e^{-\alpha(|t_1| + \cdots + |t_n|)} \\ &\quad \times \langle \eta_0 | \mathcal{V}^D(0) T \{ \mathcal{V}^D(t_1) \cdots \mathcal{V}^D(t_n) \} | \eta_0 \rangle. \end{aligned} \quad (6.145)$$

其实我们也可以另一种方式计算能量修正:

$$\Delta E_0 = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \psi_\alpha^D(0) | \mathcal{H} | \psi_\alpha^D(0) \rangle}{\langle \psi_\alpha^D(0) | \psi_\alpha^D(0) \rangle} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\langle \eta_0 | U_\alpha(+\infty, 0) \mathcal{H} U_\alpha(0, -\infty) | \eta_0 \rangle}{S_\alpha}, \quad (6.146)$$

不过这会引入 \mathcal{H}_0 项而让对微扰展开式的处理复杂化.

显然我们可以用 Feynman 图处理微扰展开式 (6.145), 此时我们还是只需要考虑连接在由 $\mathcal{V}^D(0)$ 提供的 $t = t' = 0$ 处的二顶点子图上的开连通图. 零阶计算中我们仅能根据 $\mathcal{V}^D(0)$ 的图进行收缩, 此时有两种情况:

$$\mathcal{M}_1 = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = \sum_{k,\ell} v(k, \ell; k, \ell) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_\ell \rangle^{(0)} = \sum_{k,\ell} v(0) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_\ell \rangle^{(0)} = 0. \quad (6.147)$$

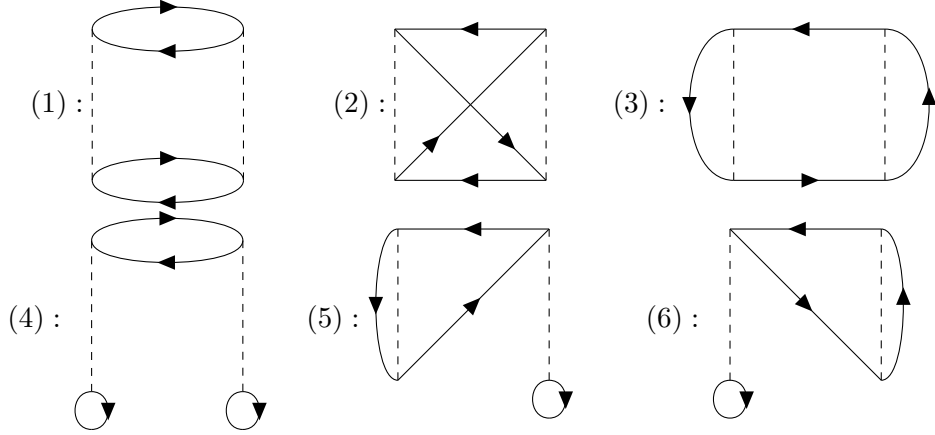
$$\mathcal{M}_2 = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \circ \text{---} \end{array} = -\frac{1}{2} \sum_{k,\ell} v(k, \ell; \ell, k) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_\ell \rangle^{(0)} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \ell, \sigma_k, \sigma_\ell} v(\mathbf{k} - \ell) \delta_{\sigma_k, \sigma_\ell} \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_\ell \rangle^{(0)}. \quad (6.148)$$

于是我们得到领头能量修正为

$$\Delta E_0^{(1)} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^{q \neq 0} v(\mathbf{q}) \vartheta(k_F - |\mathbf{k}|) \vartheta(k_F - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|). \quad (6.149)$$

我们在引入 Jellium 模型时便在连续极限下计算过上述能量修正, 对应的 Jellium 模型基态能量叫做 **Hartree-Fock 能量**.

现在考虑次领头阶修正. 如今我们需要缩并 $\mathcal{V}^D(0)$ 和 $\mathcal{V}^D(t)$ 贡献的两个二顶点的开线以得到开连通图. 此时有贡献的图为:



由于 (4), (5) 和 (6) 中存在固定在一点处的圈使得对应虚线的动量为零, 进而这几幅图的贡献都被 $v(0) = 0$ 所平凡化, 我们在计算次领头阶修正时只需要考虑第一行的三幅图的贡献即可.

我们先考虑图 (3) 的贡献, 这幅图的对称因子为 1 并且我们根据 Feynman 规则可以写出时间积分的被积函数

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathcal{M}}_3 &= i \sum_{k,\ell,n} \sum_{p,q,r} v(k,\ell;n,k) v(p,q;r,p) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_p \rangle^{(0)} [iG_n^{0,c}(t' - \tau')] [iG_r^{0,c}(\tau - t)] \delta_{n,q} \delta_{\ell,r} \\
 &= \frac{i}{4} \sum_{k,\ell,n,p} v(k,\ell;n,k) v(p,n;\ell,p) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_p \rangle^{(0)} [iG_n^{0,c}(t' - \tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau - t)] \\
 &= i \sum_{k,\ell,n,p} v(\mathbf{k} - \mathbf{n}) v(\mathbf{p} - \ell) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{k}+\mathbf{n}} \delta_{\mathbf{p}+\mathbf{n},\mathbf{p}+\ell} \delta_{\sigma_k,\sigma_n} \delta_{\sigma_\ell,\sigma_k} \delta_{\sigma_p,\sigma_\ell} \delta_{\sigma_p,\sigma_n} \\
 &\quad \times \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_p \rangle^{(0)} [iG_n^{0,c}(t' - \tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau - t)] \\
 &= i \sum_{k,\ell,p} v(\mathbf{k} - \ell) v(\mathbf{p} - \ell) \langle n_k \rangle^{(0)} \langle n_p \rangle^{(0)} [iG_\ell^{0,c}(t' - \tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau - t)]. \tag{6.150}
 \end{aligned}$$

由于 $t, t' > \tau, \tau'$, 故

$$iG_\ell^{0,c}(t' - \tau') = (1 - \langle n_\ell \rangle^{(0)}) e^{-i[\varepsilon_\ell - \mu](t' - \tau')}, \tag{6.151}$$

$$iG_\ell^{0,c}(\tau - t) = -\langle n_\ell \rangle^{(0)} e^{-i[\varepsilon_\ell - \mu](\tau - t)}. \tag{6.152}$$

但是这两个 Green 函数一个在 Fermi 面内等于零, 一个在 Fermi 面外等于零, 进而二者乘在一起会使得 \mathcal{M}_3 整体等于零——这幅图的贡献也是平凡的.

现在计算图 (1), 这幅图的对称因子为 $h(\Theta_1) = 2$, 根据 Feynman 规则写出的时间积分

的被积函数为

$$\begin{aligned}
\bar{\mathcal{M}}_1 &= \frac{-i}{2} \sum_{k,\ell,m,n} \sum_{p,q,r,s} v(k,\ell;n,m) v(p,q;s,r) [iG_n^{0,c}(t-\tau)\delta_{n,p}] [iG_s^{0,c}(\tau-t)\delta_{s,k}] \\
&\quad \times [iG_m^{0,c}(t'-\tau')\delta_{m,q}] [iG_r^{0,c}(\tau'-t')\delta_{r,\ell}] \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k,\ell,m,n} v(k,\ell;n,m) v(n,m;k,\ell) [iG_n^{0,c}(t-\tau)] [iG_k^{0,c}(\tau-t)] [iG_m^{0,c}(t'-\tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau'-t')] \\
&= \frac{-i}{2} \sum_{k,\ell,m,n} v^2(\mathbf{k}-\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}}^2 \delta_{\sigma_k,\sigma_n}^2 \delta_{\sigma_\ell,\sigma_m}^2 [iG_n^{0,c}(t-\tau)] [iG_k^{0,c}(\tau-t)] [iG_m^{0,c}(t'-\tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau'-t')] \\
&= -2i \sum_{\mathbf{k},\ell,\mathbf{m},\mathbf{n}} v^2(\mathbf{k}-\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}}^2 [iG_n^{0,c}(-\tau)] [iG_k^{0,c}(\tau)] [iG_m^{0,c}(-\tau)] [iG_\ell^{0,c}(\tau)]. \quad (6.153)
\end{aligned}$$

$\tau < 0$ 使得对求和有贡献的 $\mathbf{k}, \ell, \mathbf{m}, \mathbf{n}$ 取值应该满足 \mathbf{n}, \mathbf{m} 在 Fermi 面外但是 \mathbf{k}, ℓ 在 Fermi 面内. 利用

$$iG_k^{0,c}(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int dE \frac{i}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_F) \pm i0^+} e^{-iE(t-t')}, \quad (6.154)$$

我们接下来可以对 τ 做积分并求出这一项的贡献为

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_1 &= \int_{-\infty}^0 d\tau e^{-\alpha|\tau|} \bar{\mathcal{M}}_1 \\
&= \frac{-2i}{(2\pi)^4} \sum_{\mathbf{k},\ell,\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\varepsilon_k, \varepsilon_\ell < \varepsilon_F < \varepsilon_m, \varepsilon_n} v^2(\mathbf{k}-\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}}^2 \int_{-\infty}^0 d\tau \int dE_k dE_\ell dE_m dE_n \\
&\quad \times \frac{i}{E_k - (\varepsilon_k - \varepsilon_F) - i0^+} \frac{i}{E_\ell - (\varepsilon_\ell - \varepsilon_F) - i0^+} \frac{i}{E_m - (\varepsilon_m - \varepsilon_F) + i0^+} \\
&\quad \times \frac{i}{E_n - (\varepsilon_n - \varepsilon_F) + i0^+} e^{-i(E_k+E_\ell-E_m-E_n)\tau-\alpha\tau}. \quad (6.155)
\end{aligned}$$

使用 Cauchy 公式处理能量积分取绝热极限后便有

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_1 &= -2i \sum_{\mathbf{k},\ell,\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\varepsilon_k, \varepsilon_\ell < \varepsilon_F < \varepsilon_m, \varepsilon_n} v^2(\mathbf{k}-\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}}^2 \int_{-\infty}^0 d\tau e^{-i(\varepsilon_k+\varepsilon_\ell-\varepsilon_m-\varepsilon_n)\tau} \\
&= 2 \sum_{\mathbf{k},\ell,\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\varepsilon_k, \varepsilon_\ell < \varepsilon_F < \varepsilon_m, \varepsilon_n} v^2(\mathbf{k}-\mathbf{n}) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\ell) - \varepsilon(\mathbf{n}) - \varepsilon(\mathbf{m})}. \quad (6.156)
\end{aligned}$$

现在处理图 (2), 其对称因子为 $h(\Theta_2) = 2$. 根据 Feynman 规则可得到

$$\begin{aligned}
\bar{\mathcal{M}}_2 &= \frac{i}{2} \sum_{k,\ell,m,n} \sum_{p,q,r,s} v(k,\ell;n,m) v(p,q;s,r) [iG_s^{0,c}(\tau-t)\delta_{k,s}] [iG_n^{0,c}(t-\tau')\delta_{q,n}] \\
&\quad \times [iG_r^{0,c}(\tau'-t')\delta_{\ell,r}] [iG_m^{0,c}(t'-\tau)\delta_{m,p}] \\
&= \frac{i}{2} \sum_{k,\ell,m,n} v(k,\ell;n,m) v(m,n;k,\ell) [iG_k^{0,c}(\tau)] [iG_n^{0,c}(-\tau')] [iG_\ell^{0,c}(\tau')] [iG_m^{0,c}(-\tau)] \\
&= i \sum_{\mathbf{k},\ell,\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\varepsilon_k, \varepsilon_\ell < \varepsilon_F < \varepsilon_m, \varepsilon_n} v(\mathbf{k}-\mathbf{n}) v(\mathbf{n}-\ell) \delta_{\mathbf{k}+\ell,\mathbf{m}+\mathbf{n}} [iG_k^{0,c}(\tau)] [iG_n^{0,c}(-\tau)] [iG_\ell^{0,c}(\tau)] [iG_m^{0,c}(-\tau)]. \quad (6.157)
\end{aligned}$$

对 τ 积分后并取绝热极限便有

$$\mathcal{M}_2 = - \sum_{\mathbf{k}, \ell, \mathbf{m}, \mathbf{n}}^{\varepsilon_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\ell} < \varepsilon_F < \varepsilon_{\mathbf{m}}, \varepsilon_{\mathbf{n}}} v(\mathbf{k} - \mathbf{n}) v(\mathbf{n} - \ell) \delta_{\mathbf{k}+\ell, \mathbf{m}+\mathbf{n}} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\ell) - \varepsilon(\mathbf{n}) - \varepsilon(\mathbf{m})}. \quad (6.158)$$

\mathcal{M}_1 其实是发散的. 记

$$\mathbf{n} = \mathbf{k} + \mathbf{q}, \quad \ell = \mathbf{p}, \quad \mathbf{m} = \mathbf{p} - \mathbf{q}, \quad (6.159)$$

假设 Fermi 面是球面, 于是

$$\mathcal{M}_1 = 2 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}^{\mathbf{q} \neq 0; |\mathbf{p}|, |\mathbf{k}| < k_F; |\mathbf{k}+\mathbf{q}|, |\mathbf{p}-\mathbf{q}| > k_F} \frac{v^2(\mathbf{q})}{\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q})}. \quad (6.160)$$

取自由 Bloch 电子能量

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m}, \quad (6.161)$$

我们于是有

$$\varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{p}) - \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}) = \frac{1}{m} \mathbf{q} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{q}), \quad (6.162)$$

进而

$$\mathcal{M}_1 = \frac{2me^4}{\varepsilon_0^2 V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}}^{\mathbf{q} \neq 0; |\mathbf{p}|, |\mathbf{k}| < k_F; |\mathbf{k}+\mathbf{q}|, |\mathbf{p}-\mathbf{q}| > k_F} \frac{1}{|\mathbf{q}|^4 \mathbf{q} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{k} - \mathbf{q})}. \quad (6.163)$$

定义

$$\bar{\mathbf{q}} \equiv -\frac{\mathbf{q}}{k_F}, \quad \bar{\mathbf{k}} = -\frac{\mathbf{k}}{k_F}, \quad \bar{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{k_F}, \quad (6.164)$$

并把求和换成积分

$$\sum_{\mathbf{k}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}, \quad (6.165)$$

我们便有

$$\mathcal{M}_1 = -\frac{2mV k_F^3 e^4}{(2\pi)^9 \varepsilon_0^2} \iiint_{\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{k}} < 1}^{|\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}}|, |\bar{\mathbf{p}}+\bar{\mathbf{q}}| > 1} d\bar{\mathbf{q}} d\bar{\mathbf{k}} d\bar{\mathbf{p}} \frac{1}{\bar{\mathbf{q}}^4} \frac{1}{\bar{\mathbf{q}} \cdot (\bar{\mathbf{p}} + \bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{q}})}. \quad (6.166)$$

我们可以估计上式在积掉 $\bar{\mathbf{k}}$ 和 $\bar{\mathbf{p}}$ 后 $\bar{\mathbf{q}}$ 积分的被积函数在 $|\bar{\mathbf{q}}| \ll 1$ 时的行为 [15] 并发现这正比于

$$\int_0 \frac{d\bar{q}}{\bar{q}}, \quad (6.167)$$

因而这一项自身存在红外发散. 与之相对, \mathcal{M}_2 则不存在红外发散问题.

\mathcal{M}_1 红外发散的根源在于 $v^2(\mathbf{q})$ 项带来了过多的 $1/q$ 因子. 事实上, 在更高阶计算中这种类型的环图会在 n 阶微扰计算中带来 $v^{n+1}(\mathbf{q})$ 一项并使得对应的矩阵元存在红外发散. 但是如果我们将各阶环图的贡献相加, 那么我们会发现这些发散将互相抵消并能让能量修正保持有限.

6.11 关联能

我们在 Jellium 模型基态能量的领头阶计算中得到的 Hartree-Fock 解其实就是 Coulomb 相互作用项在自由系统基态上的期望, 这一结果计入了 Pauli 不相容原理, 确保自旋取向相同的电子不会靠得太近而降低了基态能量. 由于电子始终带有负电, 进而即使两个电子自旋相反, Coulomb 相互作用也不会允许二者靠得太近. 不幸的是, Hartree-Fock 近似解并没有考虑进电子间的这种**关联**, 因而我们会称在 Hartree-Fock 能量基础上计算的相对精确基态能量的修正为**关联能**. 我们现在便考虑在高电子密度的极限下更精确地估计 Jellium 模型的关联能. 为此我们定义无量纲密度参数 r_s 为

$$\frac{V}{N} = \frac{4\pi}{3}(a_B r_s)^3, \quad (6.168)$$

其中 a_B 是 Bohr 半径. 可以想见, 高电子密度对应小 r_s . 可以论证, n 阶微扰论会带来 $\mathcal{O}(r_s^{n-1})$ 阶的修正, 因而在高电子密度极限下我们取头几阶不发散的项便能得到比较好的结果. 但这要求微扰论中的发散项能够互相抵消, 因而我们必须考虑计算这无穷多个发散的图的和. 更麻烦的是, 在高阶计算中会发散的还不单单是环图. 一般而言, 对 Hartree-Fock 解的 n 阶修正中发散项会表现为

$$r_s^{n-1} \sum_{m=2}^{n+1} \int_0^{\infty} d\bar{q} \bar{q}^{3-2m} g_m^{(n+1)}(\bar{q}), \quad (6.169)$$

其中 $g_m^{(n+1)}(\bar{q})$ 为 $\bar{q} \rightarrow 0$ 时正规的一个函数, m 代表对应的图会给出 $v^m(\mathbf{q})$ 一项. 环图仅对应着 $m = n + 1$ 的一种情况.

这些发散的物理起源是 Coulomb 势在坐标空间的长程性带来的动量空间中积分红外发散. 一种处理这种发散的方式是为动量引入红外截断, 而合理的考虑是现实的电子气会对势场形成屏蔽效应, 进而只有波数 q 大于某个极小值 k_m 的模式才会对结果有显著贡献. 我们可以将 k_m 取作 Thomas-Fermi 屏蔽长度的倒数, 进而

$$k_m \sim r_s^{-1/2}, \quad \bar{k}_m = \frac{k_m}{k_F} \sim r_s^{1/2}. \quad (6.170)$$

进而发散项的积分在 $m = 2$ 时正比于 $\ln r_s$, 在 $m > 2$ 时正比于 r_s^{2-m} . 我们可以进而确定 $n > 1$ 时仅有环图的贡献保持为 $\mathcal{O}(r_s^0)$, 其它图的贡献在 $r_s \rightarrow 0$ 时都等于零; 而 $n = 1$ 时环图会给出 $\mathcal{O}(\ln r_s)$ 的贡献, 另一个不发散的图的贡献为 $\mathcal{O}(r_s^0)$. 于是我们可以推断在高电子密度极限下修正能应该为

$$\Delta E_{\text{corr}} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathcal{M}_n^{\text{环图}} + \mathcal{M}_2. \quad (6.171)$$

我们只需要计算各阶环图贡献之和即可. 具体计算参见 [15].

6.12 图部分和

Dyson 方程一节曾使用自能图组成能对应几何级数的图部分和来逼近 dressed propagator, 但这其实只是构造部分和的一种方式. 我们现在便来考察其它构造方式.

在很对 Feynman 图计算中, 我们可以按照如下方式极大地简化需要考虑的图数: 在计算时仅考虑所有粒子线均**不包含**自能项的**骨架图**, 同时把剩下的图中的自由传播子全换成完整传播子并重整化相互作用线.¹³

¹³好笼统...

6.13 极化传播子

我们在使用线性响应理论推导退极化函数 $\varepsilon(\mathbf{q}, E)$ 时曾引入了**密度关联函数**:

$$D_{\mathbf{q}}(t, t') = \langle \langle \rho_{\mathbf{q}}(t); \rho_{\mathbf{q}}(t') \rangle \rangle = -i \langle T_{\varepsilon} \{ \rho_{\mathbf{q}}(t) \rho_{\mathbf{q}}(t') \} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dE D_{\mathbf{q}}(E) e^{-iE(t-t')}. \quad (6.172)$$

其中密度算符为

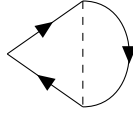
$$\rho_{\mathbf{q}}(t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}(t), \quad (6.173)$$

于是密度关联函数便可以在能量空间中被写作

$$iD_{\mathbf{q}}(E) = \int d(t-t') e^{iE(t-t')} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \sigma, \sigma'} \langle E_0 | T_{\varepsilon} \{ a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(t) a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}(t) a_{\mathbf{p}, \sigma'}^{\dagger}(t') a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}(t') \} | E_0 \rangle. \quad (6.174)$$

我们还是可以将 $|E_0\rangle$ 取为 Gell-Mann-Low 基态并按照与前面类似的方式列出 Feynman 规则并开展微扰计算. 此时我们需要考虑连接 t 顶点和 t' 顶点的开连通图, 并且各以两条外线连接这两个顶点. 如果我们仍构造保持相互作用顶点处自旋守恒的相互作用项, 那么拥有非平凡贡献的 Feynman 图中 t 和 t' 顶点应该有着相同的自旋指标, 即 $\sigma = \sigma'$.

我们仍考虑 Jellium 模型, 其中 $v(0) = 0$ 使得我们能够进一步约束需要考虑的 Feynman 图的类型: 这些图必须连通 t, t' 两个顶点. 如果不连通, 那么图必然包含形如

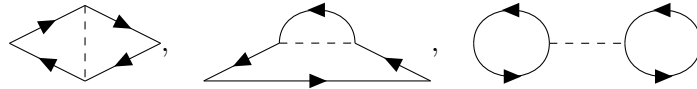


的部分, 而相互作用顶点处动量守恒会使得对应的表达式包含 $v(0)$ 项进而让整个图的贡献为零.

零阶项只有一幅图:

$$\begin{array}{c} \text{Diagram: A loop with two vertices } t \text{ and } t'. \text{ The top arc is labeled } \mathbf{k}, \sigma \text{ and the bottom arc is labeled } \mathbf{k} + \mathbf{q}, \sigma. \\ \hline \end{array} = -[iG_{\mathbf{k}, \sigma}^{0, c}(t' - t)][iG_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{0, c}(t - t')] \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}-\mathbf{q}} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{p}}. \quad (6.175)$$

一阶项有三幅图:



我们称这些对退极化函数有贡献的图截去外线的部分为**极化部分**并可以在能量表象中推导计算这些图的 Feynman 规则 [15], 并且我们可以类比在单电子 Green 函数中定义自能项的方式定记所有单粒子不可约极化部分的和的 $i\Lambda_{\mathbf{q}}(E)$ 并称之为**极化传播子**. 利用这一部分构造几何级数便能让我们得到 Dyson 方程

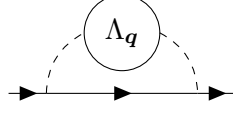
$$iD_{\mathbf{q}}(E) = i\Lambda_{\mathbf{q}}(E) + i\Lambda_{\mathbf{q}}(E)[-iv(\mathbf{q})]iD_{\mathbf{q}}(E). \quad (6.176)$$

亦即

$$iD_{\mathbf{q}}(E) = \frac{\Lambda_{\mathbf{q}}(E)}{1 - \Lambda_{\mathbf{q}}(E)v(\mathbf{q})}. \quad (6.177)$$

进而为了计算 $D_{\mathbf{q}}(E)$ 其实只需要计算由单粒子不可约图给出的 $\Lambda_{\mathbf{q}}(E)$.

我们可以利用极化传播子 $\Lambda_{\mathbf{q}}(E)$ 讨论**有效相互作用**: 我们特别考虑这类图:



我们便可以将图中的虚线加极化传播子部分视作一个有效相互作用并通过大家已经熟悉的方式得到 Dyson 方程

$$-iv_{\text{eff}}(\mathbf{q}, E) = -iv(\mathbf{q}) + [-iv(\mathbf{q})]i\Lambda_{\mathbf{q}}(E)[-iv_{\text{eff}}(\mathbf{q}, E)]. \quad (6.178)$$

进而我们也可以利用极化传播子确定有效相互作用. 我们利用有效相互作用可以很方便地确定介质的退极化函数:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, E) = \frac{v(\mathbf{q})}{v_{\text{eff}}(\mathbf{q}, E)}. \quad (6.179)$$

我们可以仅考虑极化传播子领头阶项 (单费米子圈) 的贡献并得到近似的有效相互作用并且我们可以使用这个有效相互作用替换同理论下的其它计算中的相互作用项, 这在领头阶便给出了 RPA 近似.

更一般地, 我们还可以定义**顶点函数**为所有单粒子不可约顶点图之和并借此方便我们的计算.

7 有限温微扰论

我们现在考虑将零温微扰论推广到有限温的 **Matsubara 方法**. 在有限温的情况下我们不光要考虑产生湮灭算符的乘积在自由基态 $|\eta_0\rangle$ 上的期望而会涉及各个激发态, 这使得此时我们不能再直接借助 Wick 定理来建构系统的计算因果 Green 函数的微扰论. 我们在有限温情况下会借助 **Matsubara 函数** 这一以恰当的方式推广的因果 Green 函数并发现我们可以借助修正的 Wick 定理计算它; 同时 Matsubara 函数和与物理量直接相关的推迟 Green 函数之间的关系也十分简单.

7.1 Matsubara 函数

如果允许时间变量取复数, 那么我们便会有

$$\begin{aligned}\Xi \langle A(t - i\beta) B(t') \rangle &= \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}} e^{i\mathcal{H}(t-i\beta)} A e^{-i\mathcal{H}(t-i\beta)} e^{i\mathcal{H}t'} B e^{-i\mathcal{H}t'} \right] \\ &= \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}} B(t') A(t) \right] = \Xi \langle B(t') A(t) \rangle,\end{aligned}\quad (7.1)$$

进而我们在 $\langle A(t) B(t') \rangle$ 和 $\langle B(t') A(t) \rangle$ 间建立了联系.

受到这一联系的启发, Matsubara 将 t 取作纯虚数并定义实数

$$\tau \equiv -it, \quad (7.2)$$

进而我们可以类比 Heisenberg 绘景算符而构造

$$A(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau} A(0) e^{-\mathcal{H}\tau}, \quad (7.3)$$

并得到与 Heisenberg 运动方程类似的运动方程

$$\frac{\partial}{\partial \tau} A(\tau) = -[A(\tau), \mathcal{H}]. \quad (7.4)$$

我们同样可以定义编时排序

$$T_\tau \{A(\tau) B(\tau')\} = \vartheta(\tau - \tau') A(\tau) B(\tau') + \varepsilon \vartheta(\tau' - \tau) B(\tau') A(\tau). \quad (7.5)$$

Matsubara 函数则被定义为

$$G_{AB}^M(\tau, \tau') = \langle \langle A(\tau); B(\tau') \rangle \rangle^M = -\langle T_\tau \{A(\tau) B(\tau')\} \rangle. \quad (7.6)$$

显然它的运动方程为

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} G_{AB}^M(\tau, \tau') = \delta(\tau - \tau') \langle [A, B]_{-\varepsilon} \rangle + \langle \langle [A(\tau), \mathcal{H}]; B(\tau') \rangle \rangle^M. \quad (7.7)$$

根据迹的性质 (以及时间平移对称性), 我们可以推断 Matsubara 函数亦仅依赖于两时间之差:

$$G_{AB}^M(\tau, \tau') = G_{AB}^M(\tau - \tau', 0) = G_{AB}^M(0, \tau' - \tau). \quad (7.8)$$

这个函数的另一重要性质便是周期性: 我们对 $0 < \tau - \tau' + n\beta < \beta$ 考虑

$$\begin{aligned}
\Xi G_{AB}^M(\tau - \tau' + n\beta) &= -\text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\mathcal{H}(\tau - \tau' + n\beta)} A(0) e^{-\mathcal{H}(\tau - \tau' + n\beta)} B(0) \right] \\
&= -\text{Tr} \left[B(0) e^{\mathcal{H}[\tau - \tau' + (n-1)\beta]} A(0) e^{-\mathcal{H}[\tau - \tau' + (n-1)\beta]} e^{-\beta H} \right] \\
&= \varepsilon \langle T_\tau \{ A(\tau - \tau' + (n-1)\beta) B(0) \} \rangle = \varepsilon \Xi G_{AB}^M(\tau - \tau' + (n-1)\beta).
\end{aligned} \tag{7.9}$$

特别的, 我们有

$$G_{AB}^M(\tau - \tau' + \beta) = \varepsilon G_{AB}^M(\tau - \tau'), \quad -\beta < \tau - \tau' < 0. \tag{7.10}$$

这种周期性暗示我们可以将 Matsubara 函数展开为 Fourier 级数:

$$G^M(\tau) = \frac{1}{2} a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi}{\beta} \tau + b_n \sin \frac{n\pi}{\beta} \tau \right), \tag{7.11}$$

其中

$$a_n = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G^M(\tau) \cos \frac{n\pi}{\beta} \tau, \quad b_n = \frac{1}{\beta} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G^M(\tau) \sin \frac{n\pi}{\beta} \tau. \tag{7.12}$$

记

$$E_n = \frac{n\pi}{\beta}, \quad G^M(E_n) = \frac{\beta}{2} (a_n + i b_n), \tag{7.13}$$

我们便能将 Matsubara 函数展开为

$$G^M(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iE_n \tau} G^M(E_n), \tag{7.14}$$

$$G^M(E_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G^M(\tau) e^{iE_n \tau}. \tag{7.15}$$

利用 Matsubara 函数的周期性, 这可以被化为

$$G^M(E_n) = \frac{1 + \varepsilon e^{-i\beta E_n}}{2} \int_0^{\beta} d\tau G^M(\tau) e^{iE_n \tau}. \tag{7.16}$$

可以看到, 玻色子 Matsubara 函数满足 n 为偶数时 $G^M(E_n) = 0$; 费米子 Matsubara 函数的 $G^M(E_n)$ 则在奇数 n 时等于零. 于是我们可以记

$$G^M(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-iE_n \tau} G^M(E_n), \tag{7.17}$$

$$G^M(E_n) = \int_0^{\beta} d\tau G^M(\tau) e^{iE_n \tau}, \tag{7.18}$$

$$E_n = \begin{cases} \frac{2n\pi}{\beta}, & \text{玻色子,} \\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, & \text{费米子.} \end{cases} \tag{7.19}$$

根据关联函数的谱表示

$$\begin{aligned}\langle A(\tau)B(0) \rangle &= \frac{1}{\Xi} \sum_n \langle E_n | A(\tau)B(0) | E_n \rangle e^{-\beta E_n} \\ &= \frac{1}{\xi} \sum_{n,m} \langle E_n | A | E_m \rangle \langle E_m | B | E_n \rangle e^{-\beta E_n} e^{(E_n - E_m)\tau}.\end{aligned}\quad (7.20)$$

于此同时, 谱密度的谱表示为

$$S_{AB}(E) = \frac{1}{\Xi} \sum_{n,m} \langle E_n | A | E_m \rangle \langle E_m | B | E_n \rangle e^{-\beta E_n} (1 - \varepsilon e^{-\beta E}) \delta[E - (E_m - E_n)]. \quad (7.21)$$

因此我们便建立了联系:

$$\langle A(\tau)B(0) \rangle = \int dE \frac{S_{AB}(E)}{1 - \varepsilon e^{-\beta E}} e^{-E\tau}. \quad (7.22)$$

考虑到频域上的 MatsubaraH 函数为

$$G^M(E_n) = - \int_0^\beta d\tau e^{iE_n\tau} \langle A(\tau)B(0) \rangle, \quad (7.23)$$

我们便有

$$G_{AB}^M(E_n) = \int dE' \frac{S_{AB}(E')}{iE_n - E'}. \quad (7.24)$$

进而, 我们只需要在 Matsubara 函数的谱表示中把 iE_n 换成 $E + i0^+$ 便能得到对应的推迟 Green 函数的谱表示. 类低的, $iE_n \rightarrow E - i0^+$ 能给出对应的超前 Green 函数.

7.2 巨正则配分函数

现在我们考虑一个有着两体相互作用的玻色子或费米子系统, Hamilton 量记为

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}, \quad (7.25)$$

其中

$$\mathcal{H}_0 = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) a_k^\dagger a_k, \quad (7.26)$$

$$\mathcal{V} = \frac{1}{2} \sum_{k,\ell,m,n} v(k,\ell;m,n) a_k^\dagger a_\ell^\dagger a_m a_n. \quad (7.27)$$

我们现在便期待计算算符的编时乘积在这个 Hamilton 量给出的巨正则系综中的热力学期望.

与零温情况类似, 我们可以考虑虚时 Dirac 绘景, 其中算符为

$$\mathcal{A}^D(\tau) = e^{\mathcal{H}_0\tau} \mathcal{A} e^{-\mathcal{H}_0\tau} \quad (7.28)$$

并且可以构造出时间演化算符

$$U^D(\tau, \tau') = e^{\mathcal{H}_0\tau} e^{-\mathcal{H}(\tau-\tau')} e^{-\mathcal{H}_0\tau'}. \quad (7.29)$$

与实时的情况类似, 对应的虚时 Heisenberg 绘景算符可根据

$$\mathcal{A}^H(\tau) = U^D(0, \tau) \mathcal{A}^D(\tau) U^D(\tau, 0) \quad (7.30)$$

而得到. 这个时间演化算符的运动方程满足

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} U^D(\tau, \tau') = \mathcal{V}^D(\tau) U^D(\tau, \tau'), \quad (7.31)$$

其形式解为

$$U^D(\tau, \tau') = T_\tau \left\{ \exp \left(- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \mathcal{V}^D(\tau_1) \right) \right\}. \quad (7.32)$$

特别的, 考虑到

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{-\beta \mathcal{H}_0} U^D(\beta, 0), \quad (7.33)$$

我们有

$$\Xi = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} U^D(\beta, 0) \right]. \quad (7.34)$$

亦即, 我们可以把对相互作用配分函数的计算转化为计算各相互作用项在自由系统上的期望.

7.3 单粒子 Matsubara 函数

我们来计算最重要的一类 Matsubara 函数: **单粒子 Matsubara 函数**

$$G_k^M(\tau_1, \tau_2) = - \left\langle T_\tau \{ a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \} \right\rangle. \quad (7.35)$$

我们后面会根据 Feynman 图说明它满足 Dyson 方程

$$G_k^M(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-iE_n \tau} G_k^M(E_n), \quad (7.36)$$

$$G_k^M(E_n) = \frac{1}{iE_n - (\varepsilon_k - \mu) - \Sigma^M(k, E_n)}. \quad (7.37)$$

和零温时一样, 微扰计算相互作用系统的单粒子 Matsubara 函数需要以精确可求的自由系统的单粒子 Matsubara 函数 $G_k^{0,M}(\tau)$ 为基础. 根据 \mathcal{H}_0 可得 Dirac 绘景中的产生湮灭算符满足

$$a_k(\tau) = a_k e^{-(\varepsilon_k - \mu)\tau}, \quad a_k^\dagger(\tau) = a_k^\dagger e^{(\varepsilon_k - \mu)\tau}, \quad (7.38)$$

可以看到虚时 Dirac 绘景中的产生湮灭算符不再互为厄米共轭. 我们据此可以直接算出自由 Matsubara 函数为

$$G_k^{0,M}(\tau) = -e^{-(\varepsilon_k - \mu)\tau} [\vartheta(\tau)(1 + \varepsilon \langle n_k \rangle^{(0)}) + \vartheta(-\tau)\varepsilon \langle n_k \rangle^{(0)}]. \quad (7.39)$$

考虑到无相互作用量子气中

$$\langle n_k \rangle^{(0)} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - \varepsilon}, \quad (7.40)$$

我们便能立即算出频域上的自由 Matsubara 函数为

$$G_k^{0,M}(E_n) = \frac{1}{iE_n - (\varepsilon_k - \mu)}. \quad (7.41)$$

由于 Matsubara 函数具有周期性, 我们可以限制 $G_k^M(\tau_1, \tau_2)$ 中 $-\beta < \tau_1 - \tau_2 < \beta$, 进而我们可以假设

$$0 < \tau_1, \tau_2 < \beta. \quad (7.42)$$

对于 $\tau_1 > \tau_2$, 我们有

$$\begin{aligned} G_k^M(\tau_1, \tau_2) &= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}} T_\tau \{ a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \} \right] \\ &= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}} a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \right] \\ &= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} U^D(\beta, \tau_1) a_k^D(\tau_1) U^D(\tau_1, \tau_2) a_k^{\dagger, D}(\tau_2) U^D(\tau_2, 0) \right] \\ &= -\frac{1}{\Xi} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_\tau \{ U^D(\beta, 0) a_k^D(\tau_1) a_k^{\dagger, D}(\tau_2) \} \right]. \end{aligned} \quad (7.43)$$

类似的, 我们对 $\tau_1 < \tau_2$ 也能得到相同的结果并进而能总结出有限温情况下的 Gell-Mann-Low 定理:

$$G_k^M(\tau_1, \tau_2) = -\frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_\tau \{ U(\beta, 0) a_k(\tau_1) a_k^\dagger(\tau_2) \} \right]}{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}_0} U(\beta, 0)]}, \quad (7.44)$$

其中算符均是 Dirac 绘景算符.

7.4 Wick 定理

显然零温微扰论中的方法可以被移植过来计算 (7.44). 由于 (7.44) 中在自由系统上的热力学期望本质上是计算一个 Gauss 分布随机变量的关联函数, 故此时必然 admit 某种形式的 Wick 定理. 此时两个算符 A, B 的 Wick 收缩为

$$\overline{AB} = \langle T_\tau \{ AB \} \rangle^{(0)} = \varepsilon \overline{BA}, \quad (7.45)$$

此时的 Wick 定理便指出一堆算符乘积的自由热力学期望等于所有可能的 Wick 收缩的乘积的和. 特别的, 我们使用的符号约定为在收缩两个算符前先根据对易关系将两个算符移动到相邻位置.

7.5 巨正则配分函数的 Feynman 规则

我们先来考虑巨正则配分函数

$$\frac{\Xi}{\Xi_0} = \frac{1}{\Xi_0} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} U^D(\beta, 0) \right] = \langle U^D(\beta, 0) \rangle^{(0)}. \quad (7.46)$$

显然此时需要计算的项会形如

$$\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \langle T_\tau \{ \mathcal{V}^D(\tau_1) \cdots \mathcal{V}^D(\tau_n) \} \rangle^{(0)} \quad (7.47)$$

并且最后实际需要计算的编时关联函数会形如

$$\left\langle T_\tau \{ a_{k_1}^\dagger(\tau_1) a_{\ell_1}^\dagger(\tau_1) a_{m_1}(\tau_1) a_{n_1}(\tau_1) \cdots a_{k_n}^\dagger(\tau_n) a_{\ell_n}^\dagger(\tau_n) a_{m_n}(\tau_n) a_{n_n}(\tau_n) \} \right\rangle. \quad (7.48)$$

这和零温的情况几乎完全一致并且我们依旧会得到连通集团定理

$$\Xi = \Xi_0 \exp \left(\sum_{\nu}^{\text{连通图}} U(\Theta_{\nu}) \right). \quad (7.49)$$

此时 $\tau_i \neq \tau_j$ 会给出

$$\tau_i, k \xleftarrow{\quad} \tau_j, \ell = \overline{a_k(\tau_i) a_{\ell}^{\dagger}(\tau_j)} = -G_k^{0,M}(\tau_i - \tau_j) \delta_{k\ell}, \quad (7.50)$$

$$\tau_i, k \xrightarrow{\quad} \tau_j, \ell = \overline{a_k^{\dagger}(\tau_i) a_{\ell}(\tau_j)} = -\varepsilon G_k^{0,M}(\tau_j - \tau_i) \delta_{k\ell}. \quad (7.51)$$

而 $\tau_i = \tau_j$ 时根据我们定义的相互作用项中等时产生算符均在湮灭算符左边, 我们有

$$\overline{a_k^{\dagger}(\tau) a_{\ell}(\tau)} = -\varepsilon G_k^{0,M}(-0^+) \delta_{k,\ell} = \langle n_k \rangle^{(0)} \delta_{k\ell}. \quad (7.52)$$

此时计算 Feynman 图的 Feynman 规则与零温时的唯一区别在于顶点时间指标的积分域不是 $(-\infty, 0]$ 而是 $[0, \beta]$.

类似的, 我们也可以在频域空间中处理这些微扰项并写出能量表象中的 Feynman 规则. 此时每个相互作用子图的入线的能量和等于出线的能量和, 而每一条电子线都对应着

$$-G_k^{0,M}(E_{n_k}) = \frac{-1}{iE_{n_k} - (\varepsilon_k - \mu)}, \quad (7.53)$$

并且 non-propagating 电子线会附带来自于在等时 Wick 收缩中取 $\tau_2 = \tau_1 - 0^+$ 而附加的因子¹⁴

$$e^{iE_{n_k} 0^+}. \quad (7.54)$$

此时我们要对各顶点空间指标 k 和能量指标 E_{n_k} 求和.

在热力学极限下, 对空间指标的求和可以被化为积分:

$$\sum_k \Rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}. \quad (7.55)$$

此时对 Matsubara 能量指标 E_{n_k} 的求和会 subtle 一些: 我们可以一般性考虑仅在实轴上有极点的亚纯函数 $F(iE_n)$, 那么我们根据留数定理便有

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} F(iE_n) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dE' \frac{F(E')}{1 - \varepsilon e^{\beta E'}}, \quad (7.56)$$

其中积分围道 C 由围绕被积函数在虚轴上的无穷个极点的无穷个小圆组成. 如果被积函数在无穷远处衰减速度快于 $1/E'$, 我们可以将积分围道变形为 $\infty \rightarrow 0^- + i\infty \rightarrow 0^- - i\infty \rightarrow 0^+ - i\infty \rightarrow 0^+ + i\infty \rightarrow \infty$ 并使用留数定理根据 $F(z)$ 在这个大围道内的有限个极点来计算积分的值.

¹⁴这个因子常常只在我们需要控制结果的收敛性时才需要引入.

7.6 单粒子 Matsubara 函数的 Feynman 规则

单粒子 Matsubara 函数的 Feynman 规则与零温单粒子 Green 函数的 Feynman 规则别无二致, 对最终结构有贡献的还是那些开连通图——非连通图都被有限温 Gell-Mann-Low 定理中的分母消去了. 与配分函数的 Feynman 规则不同的是此时我们只需要对内线的空间和 Matsubara 能量指标求和 (或者说在热力学极限下积分), 并且每一条电子外线的贡献为

$$G_k^{0,M}(E_n). \quad (7.57)$$

此时我们依旧可以通过 resummation 为 Matsubara 函数构造自能项以及 Dyson 方程.

8 补遗: 一些有趣的东西

本节开始为 [3, 16] 中的内容, 我们首先考察一些 [15] 中未曾涉及的东西.

8.1 Hubbard-Stratonovich 变换

我们先来考虑一个复变量的离散类的 Gauss 型积分¹⁵

$$Z = \int \prod_{j=1}^n \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{2\pi i} \exp \left\{ \sum_{j,j'=1}^n \left(\phi_j^* G_{0;j,j'}^{-1} \phi_{j'} - \frac{V_{j,j'}}{2} \phi_j^* \phi_{j'} \phi_j \phi_{j'} \right) \right\}, \quad (8.2)$$

其中 \mathbf{G}_0^{-1} 和 \mathbf{V} 都是负定的可逆矩阵. 显然, 四次项的存在让我们没法直接计算这样一个积分, 但是我们可以通过 Hubbard-Stratonovich 变换来形式上消除掉这里的四次项.

考虑如下实变量 Gauss 积分:

$$\int \prod_{j=1}^n \frac{d\eta_j}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j,j'} (\eta_j - \phi_j^* \phi_j) V_{j,j'} (\eta_{j'} - \phi_{j'}^* \phi_{j'}) \right\} = e^{-\text{Tr}[\log(-\mathbf{V})]/2} = \frac{1}{\sqrt{\det[-\mathbf{V}]}} \quad (8.3)$$

那么我们显然可以在 Z 的表达式中插入

$$1 = e^{\text{Tr}[\log(-\mathbf{V})]/2} \int \prod_{j=1}^n \frac{d\eta_j}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j,j'} (\eta_j - \phi_j^* \phi_j) V_{j,j'} (\eta_{j'} - \phi_{j'}^* \phi_{j'}) \right\}, \quad (8.4)$$

重新整理指数后便可以得到

$$\begin{aligned} Z &= \int \left(\prod_{j=1}^n \frac{d\phi_j^* d\phi_j}{2\pi i} \right) \left(\prod_{j=1}^n \frac{d\eta_j}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left\{ \frac{1}{2} \text{Tr}[\log(-\mathbf{V})] \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ \sum_{j,j'} \left(\phi_j^* G_{0;j,j'}^{-1} \phi_{j'} + \frac{1}{2} \eta_j V_{j,j'} \eta_{j'} - \eta_j V_{j,j'} \phi_j^* \phi_{j'} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (8.5)$$

此时我们可以直接进行对 ϕ 的积分了, 这会给出

$$Z = e^{\text{Tr}[\log(-\mathbf{V})]/2} \int \prod_{j=1}^n \frac{d\eta_j}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\text{Tr}[\log[-\mathbf{G}_0^{-1} + \mathbf{\Sigma}]] \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \eta_j V_{j,j'} \eta_{j'} \right\}, \quad (8.6)$$

其中

$$\Sigma_{i,j} \equiv \sum_{j'} \eta_{j'} V_{j',j} \delta_{ij}. \quad (8.7)$$

不得不说这个过程有点像 Faddeev-Popov gauge fixing.

¹⁵积分测度中的 $1/(2\pi i)$ 来自于

$$dx dy = \frac{\partial(x, y)}{\partial(z, z^*)} dz dz^* = \frac{dz dz^*}{2\pi i}. \quad (8.1)$$

Hubbard-Stratonovich 变换的真正威力在于改写路径积分: 我们在连续极限下有

$$\exp\left\{\frac{1}{2}\text{Tr}[\log(M)]\right\} \int \mathcal{D}[\kappa] \exp\left\{-\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau d\tau' (\kappa(\tau) - \kappa_0(\tau)) M(\tau, \tau') (\kappa(\tau') - \kappa_0(\tau'))\right\} = 1. \quad (8.8)$$

将这一表达式塞入包含 $\kappa_0(\tau)$ 的二次项的路径积分中即可消除该非 Gauss 项. 更一般地, 我们可以根据具体问题来选择合适的 $\kappa_0(\tau)$ 和 $M(\tau, \tau')$, 进而我们原则上可以使用这一变换消去任意我们希望消去的项. 例如, 我们考虑在四次势场中的单个粒子, 其 Hamilton 量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha \hat{x}^2 + \frac{1}{2} \beta \hat{x}^4, \quad (8.9)$$

那么我们在计算该理论的配分函数时绕不开

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}[x] \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + \alpha x^2 + \frac{1}{2} \beta x^4\right)\right\}. \quad (8.10)$$

此时我们可以取

$$\kappa_0(\tau) = x^2(\tau), \quad M(\tau, \tau') = -\beta \delta(\tau - \tau'), \quad (8.11)$$

代入原配分函数后便会给出

$$Z = \mathcal{N}' \int \mathcal{D}[x] \mathcal{D}[\kappa] \exp\left\{-\int_0^\beta d\tau \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + \alpha x^2 - \frac{\beta}{2} \kappa^2 + \beta \kappa x^2\right)\right\}. \quad (8.12)$$

现在我们可以精确算出配分函数中关于 x 部分的积分.

Hubbard-Stratonovich 变换让原先场变量变得可积的代价是引入了一个新的场 κ , 进而泛函积分整体仍是不可解的. 从这个意义上讲, 这一变换只是在形式上改写了原问题. 但是很多时候改写后的作用量形式适用于诸多近似解法, 如驻点法或者平均场近似, 进而让我们非常优雅地处理相互作用量子气.

8.2 场算符, 一次与二次量子化的等价性

我们前面在处理多体问题时几乎总是在使用单粒子本征态对应的产生湮灭算符 $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$. 我们也知道, 如果记对应的单粒子本征波函数为 $\varphi_\alpha(\mathbf{r})$, 那么我们可以定义产生或湮灭了一个位置本征态的场算符为

$$\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \int d\alpha \varphi_{\alpha,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) a_{\alpha,\sigma}^\dagger, \quad \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \int d\alpha \varphi_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) a_{\alpha,\sigma}. \quad (8.13)$$

其中 σ 是自旋指标. 我们也知道, 如果我们取 $\varphi_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r})$ 为单体 Hamilton 量的本征函数

$$\left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r})\right) \varphi_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\alpha,\sigma} \varphi_{\alpha,\sigma}(\mathbf{r}), \quad (8.14)$$

那么按照单粒子本征态的产生湮灭算符写出的包含自旋无关两体相互作用项 $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/2$ 的二次量子化后的多体 Hamilton 量为

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_\sigma \int d\alpha \varepsilon_\alpha a_{\alpha,\sigma}^\dagger a_{\alpha,\sigma} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d\alpha_1 d\alpha_2 d\beta_1 d\beta_2 \left\langle \varphi_{\alpha_1,\sigma}^{(1)} \varphi_{\alpha_2,\sigma'}^{(2)} \left| V(\hat{\mathbf{r}}^{(1)} - \hat{\mathbf{r}}^{(2)}) \right| \varphi_{\beta_2,\sigma'}^{(1)} \varphi_{\beta_1,\sigma}^{(2)} \right\rangle a_{\alpha_1,\sigma}^\dagger a_{\alpha_2,\sigma'}^\dagger a_{\beta_2,\sigma'} a_{\beta_1,\sigma}. \end{aligned} \quad (8.15)$$

而利用场算符, 我们则可以将二次量子化的 Hamilton 量组织为

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) \right) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}_1).\end{aligned}\quad (8.16)$$

粒子数算符也可以被场算符表示为

$$\hat{N} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (8.17)$$

而自旋算符则可以被表示为

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} \langle \sigma | \hat{\mathbf{S}} | \sigma' \rangle \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}). \quad (8.18)$$

利用场算符改写多体 Hamilton 量后我们几乎可以立即把 QFT 中的一系列方法移植过来.

我们现在将要 argue 一个关键结论: 粒子数为 N 不变时, 二次量子化得到的多体 Hamilton 量与量子力学中的 N -体 Hamilton 量描述相同的物理; 这也就是说限制在某一粒子数恒等的 Fock 空间子空间上时量子场论等价于对应粒子数的多体量子力学.

为了证明这一点, 我们可以用场算符构造一个一般的 N -粒子态

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \int \prod_{k=1}^N d\mathbf{r}_k \Psi_{\sigma_1 \dots \sigma_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) \hat{\psi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \dots \hat{\psi}_{\sigma_N}^{\dagger}(\mathbf{r}_N) |0\rangle. \quad (8.19)$$

这个态按二次量子化后的 Hamilton 量演化:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (8.20)$$

而我们据此经过一系列复杂无聊的代数运算便能得到

$$\begin{aligned}i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\sigma_1 \dots \sigma_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) = & \sum_{j=1}^N \left(-\frac{1}{2m} \nabla_j^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}_j) \right) \Psi_{\sigma_1 \dots \sigma_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \Psi_{\sigma_1 \dots \sigma_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t).\end{aligned}\quad (8.21)$$

这表明我们在二次量子化中用场算符构造的 N -粒子态中的 $\Psi_{\sigma_1 \dots \sigma_N}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; t)$ 正是这个态在 Schrödinger 绘景中的 N -粒子波函数.

8.3 Fock 空间中的相干态

类似于我们将一维谐振子的相干态取作湮灭算符的本征态, 我们也可以将玻色子 Fock 空间中的相干态取为湮灭算符的本征态, 并且它可以被一般性地构造为

$$|\phi\rangle = \exp \left\{ \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right\} |0\rangle. \quad (8.22)$$

可以验证, 此时

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})|\phi\rangle = \phi_\sigma(\mathbf{r})|\phi\rangle. \quad (8.23)$$

而为了构造费米子相干态, 我们需要考虑取值为 Grassmann 数的场 $\varphi_\sigma(\mathbf{r})$ 并构造

$$|\varphi\rangle = \exp\left\{-\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \varphi_\sigma(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r})\right\} |0\rangle. \quad (8.24)$$

可以验证这确乎为 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 的本征态.

玻色子和费米子相干态都无法构成对应 Fock 空间中的正交完备基: 对于两个玻色子相干态 $|\phi\rangle, |\phi'\rangle$, 我们有

$$\begin{aligned} \langle\phi|\phi'\rangle &= \langle 0 | \exp\left\{\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\right\} \exp\left\{\sum_{\sigma'} \int d\mathbf{r}' \phi'_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\right\} |0\rangle \\ &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{n!m!} \langle 0 | \left(\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\right)^n \left(\sum_{\sigma'} \int d\mathbf{r}' \phi'_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\right)^m |0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \sum_{\sigma'_1 \dots \sigma'_n} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}'_1 \dots d\mathbf{r}_n d\mathbf{r}'_n \phi_{\sigma_1}^\dagger(\mathbf{r}_1) \phi'_{\sigma'_1}(\mathbf{r}'_1) \dots \phi_{\sigma_n}^\dagger(\mathbf{r}_n) \phi'_{\sigma'_n}(\mathbf{r}'_n) \\ &\quad \times \langle 0 | \hat{\psi}_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \dots \hat{\psi}_{\sigma_n}(\mathbf{r}_n) \hat{\psi}_{\sigma'_1}^\dagger(\mathbf{r}'_1) \dots \hat{\psi}_{\sigma'_n}^\dagger(\mathbf{r}'_n) |0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \phi'_\sigma(\mathbf{r})\right)^n \\ &= \exp\left\{\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \phi'_\sigma(\mathbf{r})\right\} \equiv e^{(\phi|\phi')}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

类似的, 我们就费米子相干态也有

$$\langle\varphi|\varphi'\rangle = \exp\left\{\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \varphi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \varphi'_\sigma(\mathbf{r})\right\} \equiv e^{(\varphi|\varphi')}. \quad (8.26)$$

尽管互不正交, 但是玻色子/费米子的相干态均满足加权的完备性关系

$$\int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} |\phi\rangle\langle\phi| = \mathbb{1}. \quad (8.27)$$

对于玻色子而言, 积分测度为

$$\mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] = \prod_{\sigma, \mathbf{r}} \frac{d\phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) d\phi_\sigma(\mathbf{r})}{2\pi i}; \quad (8.28)$$

而对费米子而言, 积分测度直接就是 Grassmann 数的积分测度

$$\mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] = \prod_{\sigma, \mathbf{r}} d\phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) d\phi_\sigma(\mathbf{r}). \quad (8.29)$$

这个证明对费米子的情况是比较直接的, 毕竟 Grassmann 数的积分十分简洁, 可直接参见 [16] 而在此按下不表. 我们来简单考虑玻色子的情况: 此时需要计算的即为泛函积分

$$\int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] \exp \left\{ \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \phi'_{\sigma}(\mathbf{r}) \right\} \exp \left\{ \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right\} |0\rangle\langle 0| \exp \left\{ \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right\}. \quad (8.30)$$

我们可以将两个包含产生湮灭算符的指数展开成级数, 进而此时需要计算的泛函积分便形如

$$\int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] \exp \left\{ \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \phi'_{\sigma}(\mathbf{r}) \right\} \phi_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \cdots \phi_{\sigma_n}(\mathbf{r}_n) \phi_{\sigma'_1}^{\dagger}(\mathbf{r}'_1) \cdots \phi_{\sigma'_m}^{\dagger}(\mathbf{r}'_m). \quad (8.31)$$

这是一个相对 Gauss 型分布的关联函数, 进而根据 Wick 定理其非平凡的条件为 $n = m$ 并且 $\{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n\}$ 与 $\{\mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_m\}$ 间仅相差一个置换. 进而我们便可以论证出

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} |\phi\rangle\langle\phi| &= \sum_n \sum_{\sigma_1 \cdots \sigma_n} \int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \hat{\psi}_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \cdots \hat{\psi}_{\sigma_n}^{\dagger}(\mathbf{r}_n) |0\rangle\langle 0| \hat{\psi}_{\sigma_n}(\mathbf{r}_n) \cdots \hat{\psi}_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1) \\ &= \sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (8.32)$$

利用相干态的加权完备性, 我们可以按如下方式计算算符 \hat{O} 在 Fock 空间上的迹:

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\hat{O}] &= \sum_n \langle n|\hat{O}|n\rangle = \sum_n \int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} \langle n|\phi\rangle \langle\phi|\hat{O}|n\rangle \\ &= \int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} \langle\pm\phi|\hat{O}|n\rangle \langle n|\phi\rangle \\ &= \int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} \langle\pm\phi|\hat{O}|\phi\rangle. \end{aligned} \quad (8.33)$$

其中需要注意费米子场算符的交换反对称性使得

$$\langle n|\phi\rangle \langle\phi|\hat{O}|n\rangle = \langle-\phi|\hat{O}|n\rangle \langle n|\phi\rangle. \quad (8.34)$$

利用相干态, 我们可以非常优雅地构造配分函数的泛函积分形式. 特别的, 我们利用相干态构造路径积分可以避免涉及共轲动量.

8.4 投影解式法和有效 Hamilton 量

很多时候我们并不需要知道完整的 Hilbert 空间的信息而只对其中一个低能子空间的物理感兴趣, 此时我们便可以考虑 integrate out 与这个子空间的物理关系没那么密切的补空间中的自由度并得到一个有效理论. 为此, 我们可以在路径积分中 integrate out 高能标自由度并得到有效拉氏量; 而在正则 formalism 下我们则可以考虑使用投影解式法构造有效 Hamilton 量 [3].

由于解式 $(E - \mathcal{H})^{-1}$ 和 Hamilton 算符 H 包含有相同的物理信息, 因此我们可以通过考虑计算完整的解式在物理子空间上的有效解式并从中提取出有效 Hamilton 量. 记到低能子空间上的投影算符为 \mathcal{P} , 到其补空间的投影算符为 \mathcal{Q} , 那么我们可以将 $E - H$ 写成一个分块对角矩阵:

$$E - \mathcal{H} = \begin{pmatrix} E - \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P} & \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q} \\ \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{P} & E - \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{Q} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}. \quad (8.35)$$

进而我们可以计算出

$$(E - \mathcal{H})^{-1} = \begin{pmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & -A^{-1}B(D - CA^{-1}B)^{-1} \\ -D^{-1}C(A - BD^{-1}C)^{-1} & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{pmatrix} \quad (8.36)$$

并能从中读出

$$\mathcal{P} \frac{1}{E - \mathcal{H}} \mathcal{P} = \frac{1}{E - \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P} - \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q} \frac{1}{E - \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{Q}} \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{P}}. \quad (8.37)$$

因此, 仅限只在低能子空间上的有效 Hamilton 量便为

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P} + \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{Q} \frac{1}{E - \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{Q}} \mathcal{Q}\mathcal{H}\mathcal{P}. \quad (8.38)$$

9 泛函积分

现在我们考虑使用泛函积分来表述多体物理中的问题. 尽管这一体系与前面使用的算符体系完全等价, 但是它能让我们更系统地组织近似计算方法并简化推导过程.

9.1 巨正则配分函数

我们常依赖相互作用多体系统的巨正则配分函数

$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right] \quad (9.1)$$

来确定其平衡态下的性质. 根据前一节得到的结论, 我们可以用场算符相干态将这个迹改写成

$$Z = \int \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-(\phi|\phi)} \langle \pm\phi | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi \rangle. \quad (9.2)$$

现在我们要计算的便是矩阵元 $\langle \phi_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_0 \rangle$, 其中 $\phi_{0,\sigma} = \phi_\sigma(\mathbf{r})$, $\phi_{M,\sigma} = \pm\phi_\sigma(\mathbf{r})$. 我们可以按照推导路径积分的方式把指数上的 β 视作一个时间变量 τ , 并把区间 $[0, \beta]$ 分成长度为

$$\Delta\tau = \frac{\beta}{M} \quad (9.3)$$

的 M 份, 于是

$$\langle \phi_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_0 \rangle = \langle \phi_M | \left(\prod_{i=1}^M e^{-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right) | \phi_0 \rangle. \quad (9.4)$$

我们可以在每两个相邻的 $e^{-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})}$ 间插入一组完备的

$$\mathbb{1} = \int \mathcal{D}[\phi_j^\dagger] \mathcal{D}[\phi_j] e^{-(\phi|\phi)} |\phi_j\rangle\langle\phi_j|, \quad (9.5)$$

于是

$$\langle \phi_M | e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_0 \rangle = \int \left(\prod_{j=1}^{M-1} \mathcal{D}[\phi_j^\dagger] \mathcal{D}[\phi_j] e^{-(\phi_i|\phi_i)} \right) \prod_{i=1}^M \langle \phi_i | e^{-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_{i-1} \rangle. \quad (9.6)$$

考虑到

$$\langle \phi_i | e^{-\Delta\tau(\hat{H} - \mu\hat{N})} | \phi_{i-1} \rangle = \langle \phi_i | \phi_{i-1} \rangle e^{-\Delta\tau H[\phi_i^\dagger, \phi_{i-1}] + \mathcal{O}(\Delta\tau^2)} = e^{(\phi_i|\phi_{i-1}) - \Delta\tau H[\phi_i^\dagger, \phi_{i-1}]}, \quad (9.7)$$

其中巨正则 Hamilton 泛函被定义为

$$\begin{aligned} H[\phi^\dagger, \phi] &= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \Sigma_{\sigma} - \mu \right) \phi(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \phi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \phi_{\sigma}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (9.8)$$

进而

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_M | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi_0 \rangle \\
&= \int \left(\prod_{j=1}^{M-1} \mathcal{D}[\phi_j^\dagger] \mathcal{D}[\phi_j] e^{-(\phi_i|\phi_i)} \right) \exp \left\{ \sum_{i=1}^M [(\phi_i|\phi_{i-1}) - \Delta\tau H[\phi_i^\dagger, \phi_{i-1}]] \right\} \\
&= e^{(\phi_M|\phi_M)} \int \left(\prod_{j=1}^{M-1} \mathcal{D}[\phi_j^\dagger] \mathcal{D}[\phi_j] \right) \exp \left\{ - \sum_{i=1}^M \Delta\tau \left[\frac{(\phi_i|\phi_i) - (\phi_i|\phi_{i-1})}{\Delta\tau} + H[\phi_i^\dagger, \phi_{i-1}] \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{9.9}$$

我们记 $\phi_i(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}, \tau_i)$ 并取连续极限 $M \rightarrow \infty$ 后便可得到

$$\langle \phi_M | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi_0 \rangle = e^{(\phi(\beta)|\phi(\beta))} \int_{\phi(0)=\phi_0}^{\phi^\dagger(\beta)=\phi_M^\dagger} \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-S[\phi^\dagger, \phi]}, \tag{9.10}$$

其中欧氏作用量为

$$S[\phi^\dagger, \phi] = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_\sigma \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) + H[\phi^\dagger(\tau), \phi(\tau)] \right). \tag{9.11}$$

将这一矩阵元代入巨正则配分函数表达式即可得到

$$Z = \int_{\phi_\sigma(\mathbf{r}, \beta) = \pm \phi_\sigma(\mathbf{r}, 0)} \mathcal{D}[\phi^\dagger] \mathcal{D}[\phi] e^{-S[\phi^\dagger, \phi]}. \tag{9.12}$$

9.2 理想量子气

我们先来使用这套泛函积分 formalism 处理无相互作用的理想量子气系统, 其作用量为

$$S_0[\phi^\dagger, \phi] = \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \Sigma_\sigma - \mu \right) \phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau). \tag{9.13}$$

9.2.1 半经典方法

为了计算这个作用量对应的配分函数, 我们需要以某种方式将泛函积分离散化. 我们先来考虑使用泛函积分计算矩阵元 $\langle \pm \phi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle$. 注意到 $\phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau)$ 可以被诠释为一个单粒子波函数, 因此它总可以按单粒子 Schrödinger 方程的本征波函数 $\chi_n(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | n \rangle$ 展开为

$$\phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) = \sum_n \phi_{n,\sigma}(\tau) \chi_n(\mathbf{r}), \tag{9.14}$$

进而作用量可以被改写为

$$S_0 = \sum_{n,\sigma} \int_0^\beta d\tau \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu \right) \phi_{n,\sigma}(\tau), \tag{9.15}$$

同时

$$(\pm \phi | \pm \phi) = \sum_{n,\sigma} \phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta) \phi_{n,\sigma}(\beta). \tag{9.16}$$

于是 $\langle \pm\phi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | \phi \rangle$ 对应的路径积分为

$$\begin{aligned} & \int_{\phi(0)=\phi}^{\phi^\dagger(\beta)=\pm\phi^\dagger} \prod_{n,\sigma} d\phi_{n,\sigma} d\phi_{n,\sigma}^\dagger e^{\sum_{n,\sigma} \phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta) \phi_{n,\sigma}(\beta)} e^{-\sum_{n,\sigma} \int_0^\beta d\tau \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu \right) \phi_{n,\sigma}(\tau)} \\ &= \prod_{n,\sigma} \int_{\phi_{n,\sigma}(0)=\phi_{n,\sigma}}^{\phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta)=\pm\phi_{n,\sigma}^\dagger} d\phi_{n,\sigma} d\phi_{n,\sigma}^\dagger \exp \left(\phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta) \phi_{n,\sigma}(\beta) - \int_0^\beta d\tau \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu \right) \phi_{n,\sigma}(\tau) \right). \end{aligned} \quad (9.17)$$

我们现在可以将积分变量 $\phi_{n,\sigma}(\tau)$ 与 $\phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau)$ 在经典轨迹 $\Phi_{n,\sigma}(\tau)$ 附近展开为

$$\phi_{n,\sigma}(\tau) = \Phi_{n,\sigma}(\tau) + \xi_{n,\sigma}(\tau), \quad \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) = \Phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) + \xi_{n,\sigma}^\dagger(\tau). \quad (9.18)$$

我们根据积分边界条件可以确定

$$\Phi_{n,\sigma}(\tau) = \phi_{n,\sigma} e^{-(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)\tau}, \quad \Phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) = \pm \phi_{n,\sigma} e^{(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)(\tau-\beta)}, \quad (9.19)$$

以及

$$\xi_{n,\sigma}(0) = \xi_{n,\sigma}^\dagger(\beta) = 0. \quad (9.20)$$

进而

$$\begin{aligned} & \int_{\phi_{n,\sigma}(0)=\phi_{n,\sigma}}^{\phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta)=\pm\phi_{n,\sigma}^\dagger} d\phi_{n,\sigma} d\phi_{n,\sigma}^\dagger \exp \left(\phi_{n,\sigma}^\dagger(\beta) \phi_{n,\sigma}(\beta) - \int_0^\beta d\tau \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu \right) \phi_{n,\sigma}(\tau) \right) \\ &= \exp \left(\pm \phi_{n,\sigma}^\dagger \phi_{n,\sigma} e^{-\beta(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)} \right) \int d\xi_{n,\sigma}^\dagger d\xi_{n,\sigma} \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \xi_{n,\sigma}^\dagger(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu \right) \xi_{n,\sigma}(\tau) \right) \\ &= \exp \left(\pm \phi_{n,\sigma}^\dagger \phi_{n,\sigma} e^{-\beta(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)} \right). \end{aligned} \quad (9.21)$$

进而配分函数为

$$\begin{aligned} Z_0 &= \prod_{n,\sigma} \int \frac{d\phi_{n,\sigma}^\dagger d\phi_{n,\sigma}}{(2\pi i)^{(1\pm 1)/2}} \exp \left\{ - \sum_{n,\sigma} (1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)}) \phi_{n,\sigma}^\dagger \phi_{n,\sigma} \right\} \\ &= \prod_{n,\sigma} [1 \mp e^{-\beta(\varepsilon_{n,\sigma}-\mu)}]^\mp. \end{aligned} \quad (9.22)$$

我们发现即便单粒子的能量受到外源势场及自旋的影响, 无相互作用量子气的配分函数仍满足 B-E 分布或 F-D 分布.

9.2.2 Matsubara 方法

Matsubara 方法将 $\phi_{n,\sigma}(\tau)$ 展开成了 Fourier 级数以使得

$$\phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) = \sum_n \sum_{m=-\infty}^{\infty} \phi_{n,m,\sigma} \chi_n(\mathbf{r}) e^{-i\omega_m \tau}, \quad (9.23)$$

其中玻色子的频率取值为

$$\omega_m = \frac{\pi(2m)}{\beta}, \quad (9.24)$$

费米子的为

$$\omega_m = \frac{\pi(2m+1)}{\beta}. \quad (9.25)$$

这相当于按边界条件对玻色子场和费米子场做了周期性和反周期性延拓并展开成了 Fourier 级数, 此时作用量可以被直接化为

$$S_0 = \sum_{n,m,\sigma} \phi_{n,m,\sigma}^\dagger (-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu) \phi_{n,m,\sigma}. \quad (9.26)$$

现在我们需要仔细考虑这一变量代换为泛函积分带来的 Jacobi 行列式: 考虑将 $[0, \beta]$ 分成 M 份的离散情况, 那么

$$\phi_{n,\sigma}(\tau_j) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{m=0}^{M-1} \phi_{n,m,\sigma} e^{-i\omega_m \tau_j}, \quad (9.27)$$

并且

$$\sum_j \phi_{n,\sigma}^\dagger(\tau_j) \phi_{n,\sigma}(\tau_j) = \sum_m \frac{M}{\beta} \phi_{n,m,\sigma}^\dagger \phi_{n,m,\sigma}. \quad (9.28)$$

这表明变换后的积分变量 $\phi_{n,m,\sigma}$ 相较于原变量多了一个 β 给出的量纲, 并且 Jacobi 行列式将包含配平量纲的 $\beta^{\mp M}$ 与一个和系统的物理参数无关并且不会影响可观测量的系数. 注意, 玻色子系统对应 β^{-M} 而费米子系统对应 β^{+M} , 因为 Grassmann 数的积分相当于求导.

给出了配分函数的泛函积分便为

$$\begin{aligned} Z_0 &= \int \prod_{n,m,\sigma} \frac{d\phi_{n,m,\sigma}^\dagger d\phi_{n,m,\sigma}}{(2\pi i)^{(1\pm 1)/2}} \frac{1}{\beta^{\pm 1}} \exp \left\{ - \sum_{n,m,\sigma} \phi_{n,m,\sigma}^\dagger (-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu) \phi_{n,m,\sigma} \right\} \\ &= \prod_{n,\sigma} \prod_{m=-\infty}^{\infty} [\beta(-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu)]^{\mp 1} = \exp \left\{ \mp \sum_{n,\sigma} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln[\beta(-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu)] \right\}. \end{aligned} \quad (9.29)$$

现在的问题便是计算对 Matsubara 频率的求和. 注意到 $\beta/(e^{\beta z} \mp 1)$ 分别在偶和奇 Matsubara 频率处有着简单极点并且留数分别为 ± 1 , 我们便有

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \ln[-i\omega_m + \varepsilon - \mu] = \pm \frac{1}{2\pi i} \oint_C \ln[-z + \varepsilon - \mu] \frac{\beta}{e^{\beta z} \mp 1}. \quad (9.30)$$

其中 C 为包围虚轴的围道. 注意到被积函数有一条沿实轴从 $(\varepsilon - \mu)$ 到 $+\infty$ 的割线, 因此我们有

$$\begin{aligned} &\pm \frac{1}{2\pi i} \oint_C \ln[-z + \varepsilon - \mu] \frac{\beta}{e^{\beta z} \mp 1} \\ &= \pm \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon-\mu}^{\infty} [\ln(-z + \varepsilon - \mu + i0^+) - \ln(-z + \varepsilon - \mu - i0^+)] \frac{\beta}{e^{\beta z} \mp 1} \\ &= \mp \int_{\varepsilon-\mu}^{\infty} dz \frac{\beta}{e^{\beta z} \mp 1} = \ln(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}). \end{aligned} \quad (9.31)$$

进而

$$Z_0 = e^{\pm \sum_{n,m,\sigma} \ln \beta} \exp \left\{ \mp \sum_{n,\sigma} \ln \left(1 \mp e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) \right\}. \quad (9.32)$$

其中第一项来自于变换泛函积分参数时的 Jacobi 行列式, 这不应影响对可观测结果的预言.

9.2.3 Green 函数法

这个方法最为方便也最易推广到相互作用系统. 我们可以将自由配分函数对应的泛函积分视作

$$Z_0 = \int_{\phi(0)=\phi_0}^{\phi^\dagger(\beta)=\pm\phi^\dagger} \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \sum_{\sigma,\sigma'} \int_0^\beta d\tau d\tau' \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) G_{0;\sigma,\sigma'}^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') \phi_{\sigma'}(\mathbf{r}', \tau') \right\}. \quad (9.33)$$

根据 Gauss 积分的性质, 我们便可以直接得到

$$Z_0 = \exp \{ \mp \text{Tr} [\ln(-G_0^{-1})] \} = [\det(-G_0^{-1})]^{\mp 1} = [\det(-G_0)]^{\pm 1}. \quad (9.34)$$

对无相互作用量子气而言

$$G_{0;\sigma,\sigma'}^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \Sigma_\sigma - \mu \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau') \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (9.35)$$

Z_0 和这个算符的逆的本征值有关, 而其逆 $G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau')$ 按定义应该满足

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau') \delta_{\sigma,\sigma'} = \sum_{\sigma''} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r}'' G_{0;\sigma,\sigma''}^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}'', \tau'') G_{0;\sigma'',\sigma'}(\mathbf{r}'', \tau''; \mathbf{r}', \tau'). \quad (9.36)$$

这意味着

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \Sigma_\sigma - \mu \right) G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau') \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (9.37)$$

这正是 Green 函数满足的方程, 同时玻色子和费米子边界条件分别要求 $G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', 0)$ 在 $\tau \in [0, \beta]$ 上分别具有周期性和反周期性. 我们可以一般性地解得

$$G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = -\delta_{\sigma,\sigma'} \sum_{n,m} \frac{1}{-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu} \chi_n(\mathbf{r}) \chi_n^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^{-i\omega_m(\tau - \tau')}}{\beta}. \quad (9.38)$$

进而, 算符 $G_{0;\sigma,\sigma'}$ 在 Hilbert 空间的基矢 $|n, \omega_m, \sigma\rangle$ 上是对角的, 并且对角元为

$$G_0(n, m, \sigma) = \frac{-1}{-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu}. \quad (9.39)$$

进而

$$Z_0 = [\det(-G_0)]^{\pm 1} = \prod_{n,\sigma} \prod_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(-i\omega_m + \varepsilon_{n,\sigma} - \mu)^{\pm 1}}. \quad (9.40)$$

用前述 Matsubara 求和处理对 m 的无穷乘积即可得到我们熟知的理想量子气的配分函数.

9.3 生成泛函

我们知道, 前面遇到的 Green 函数其实是场算符编时乘积在自由系统中的热力学期望:

$$G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = - \left\langle T \{ \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \} \right\rangle_0, \quad (9.41)$$

并且 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, \tau)$ 是虚时 Heisenberg 绘景算符

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, \tau) = e^{\mathcal{H}\tau} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) e^{-\mathcal{H}\tau}. \quad (9.42)$$

显然这一个热力学期望可以被泛函积分表示为

$$\left\langle T \{ \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \} \right\rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \phi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') e^{-S_0[\phi^\dagger, \phi]}, \quad (9.43)$$

而计算这一关联函数的惯用方式便是考虑生成泛函

$$Z_0[J, J^\dagger] = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -S_0[\phi^\dagger, \phi] + \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} (\phi_\sigma^\dagger J_\sigma(\mathbf{r}, \tau) + J_\sigma^\dagger \phi_\sigma(\mathbf{r}, \tau)) \right\}, \quad (9.44)$$

$$-G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \pm \frac{1}{Z_0} \frac{\delta^2}{\delta J_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \delta J_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau')} Z_0[J, J^\dagger] \Big|_{J, J^\dagger=0}. \quad (9.45)$$

特别的, 我们可以计算得到

$$Z_0[J, J^\dagger] = Z_0[0, 0] \exp \left\{ - \sum_{\sigma, \sigma'} \int_0^\beta d\tau d\tau' \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' J_\sigma^\dagger(\mathbf{r}, \tau) G_{0;\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') J_{\sigma'}(\mathbf{r}', \tau') \right\}. \quad (9.46)$$

根据这一生成泛函, 我们不难得到 Wick 定理以及为相互作用系统发展微扰论.

10 相互作用与 Feynman 图

10.1 准粒子

无相互作用费米气的基态是按能量从低到高填充至化学势的 Fermi 海, 我们可以通过引入一个能量高于 Fermi 能的粒子或移除一个 Fermi 海内的粒子来构造一个最简单的激发态; 类似的, 我们也可以通过在基态的基础上引入或移除一个粒子构造玻色气的激发态. 这种最简单的激发态叫做单粒子激发态.

如果粒子间存在相互作用, 那么单粒子激发态中的电子或空穴会和周围粒子相互作用并使得其色散关系偏离自由的

$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - \mu. \quad (10.1)$$

尽管如此, 这样的单粒子激发态在很多方面仍然表现得像一个粒子并得名为准粒子, 对应的能谱则叫做准粒子激发谱. 一般而言, 系统中粒子的屏蔽效应使得准粒子间只有很弱的相互作用. 而为了在实验上研究准粒子谱, 我们则可以进行向系统中引入或移除一个粒子的隧穿实验.

对准粒子性质的理论预言来自相互作用单粒子 Green 函数 $G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau')$. 这一函数不仅可以给出单粒子可观测量的热力学期望, 谱表示理论还表明它的极点位置给出了系统中准粒子的能量和寿命.

10.2 Lehmann 谱表示

我们现在来考虑一般的相互作用单粒子 Green 函数的解析结构. $G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau')$ 可以按 Hamilton 量的精确单粒子本征态展开为

$$G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \sum_{n,n'} \chi_n(\mathbf{r}) \chi_{n'}^\dagger(\mathbf{r}') G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau'), \quad (10.2)$$

并且

$$G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') = - \left\langle T \{ \hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger(\tau') \} \right\rangle. \quad (10.3)$$

我们先来考虑零温并且粒子数 $N \gg 1$ 的情况, 此时我们有

$$\begin{aligned} G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') &= -\vartheta(\tau - \tau') \langle 0; N | \hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger(\tau') | 0; N \rangle \\ &\quad \mp \vartheta(\tau' - \tau) \langle 0; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger(\tau') \hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) | 0; N \rangle. \end{aligned} \quad (10.4)$$

注意, 对于一般的相互作用系统产生湮灭算符对 N 粒子基态的作用是产生一个 $N \pm 1$ 粒子 Hilbert 空间中的态, 而这个态并不一定是系统的 $N \pm 1$ 粒子本征态, 因此我们需要插入完备基而得到

$$\begin{aligned} G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') &= -\vartheta(\tau - \tau') \sum_{\mu} \langle 0; N | \hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) | \mu; N+1 \rangle \langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger(\tau') | 0; N \rangle \\ &\quad \mp \vartheta(\tau' - \tau) \sum_{\nu} \langle 0; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger(\tau') | \nu; N-1 \rangle \langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) | 0; N \rangle. \end{aligned} \quad (10.5)$$

利用巨正则系综虚时 Heisenberg 绘景中算符的定义

$$\hat{\psi}_{n,\sigma}(\tau) = e^{\mathcal{H}\tau} \hat{\psi}_{n,\sigma} e^{-\mathcal{H}\tau}, \quad \mathcal{H} = \hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (10.6)$$

我们便可以将上式改写为

$$\begin{aligned}
G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') &= -\vartheta(\tau - \tau') \sum_{\mu} \langle 0; N | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \mu; N+1 \rangle \langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | 0; N \rangle e^{-(E_0^N - \mu + E_\mu^{N+1})(\tau - \tau')} \\
&\mp \vartheta(\tau' - \tau) \sum_{\nu} \langle 0; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \nu; N-1 \rangle \langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{n,\sigma} | 0; N \rangle e^{-(E_0^N + \mu + E_\nu^{N-1})(\tau' - \tau)}. \quad (10.7)
\end{aligned}$$

我们可以直接将该式推广到有限温的情况:

$$\begin{aligned}
G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') &= -\vartheta(\tau - \tau') \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\mu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \mu; N+1 \rangle \langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \rho; N \rangle e^{-(E_\rho^N - \mu + E_\mu^{N+1})(\tau - \tau')} \\
&\mp \vartheta(\tau' - \tau) \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\nu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \nu; N-1 \rangle \langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \rho; N \rangle e^{-(E_\rho^N + \mu + E_\nu^{N-1})(\tau' - \tau)}. \quad (10.8)
\end{aligned}$$

可以看到, 此处的各个矩阵元反映了向系统的一个 N 粒子本征态引入或移除一个新粒子后得到的 $(N \pm 1)$ 粒子态与 $(N \pm 1)$ 粒子本征态的重叠情况. 我们可以将指数上的能量差改写为

$$E_\mu^{N+1} - E_\rho^N = (E_\mu^{N+1} - E_\rho^{N+1}) + (E_\rho^{N+1} - E_\rho^N). \quad (10.9)$$

第二项代表新粒子与其它粒子没有相互作用时引入它所需的能量, 这正是化学势的定义; 而第一项则代表引入的新粒子和其它粒子间的相互作用造成的能级跃迁, 这给出了准粒子谱并被记为 $\hbar\omega_{\mu\rho}$. 因此

$$E_\mu^{N+1} - E_\rho^N = \hbar\omega_{\mu\rho} + \mu. \quad (10.10)$$

类似的,

$$E_\nu^{N-1} - E_\rho^N = -\hbar\omega_{\rho\nu} - \mu, \quad (10.11)$$

进而

$$\begin{aligned}
G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') &= -\vartheta(\tau - \tau') \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\mu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \mu; N+1 \rangle \langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \rho; N \rangle e^{-\hbar\omega_{\mu\rho}(\tau - \tau')} \\
&\mp \vartheta(\tau' - \tau) \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\nu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \nu; N-1 \rangle \langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \rho; N \rangle e^{\hbar\omega_{\rho\nu}(\tau' - \tau)}. \quad (10.12)
\end{aligned}$$

将它变换到频域上便可以得到

$$\begin{aligned}
G_{\sigma,\sigma'}(n, n'; i\omega_n) &= \int d(\tau - \tau') G_{\sigma,\sigma'}(n, \tau; n', \tau') e^{i\omega_n(\tau - \tau')} \\
&= \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\mu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \mu; N+1 \rangle \langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \rho; N \rangle \frac{1}{i(\omega_n + i0^+) - \omega_{\mu\rho}} \\
&\mp \sum_{\rho} e^{-\beta E_\rho^N} \sum_{\nu} \langle \rho; N | \hat{\psi}_{n',\sigma'}^\dagger | \nu; N-1 \rangle \langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{n,\sigma} | \rho; N \rangle \frac{1}{i(\omega_n - i0^+) + \omega_{\rho\nu}}. \quad (10.13)
\end{aligned}$$

这表明完整单粒子 Green 函数在频域上的极点一定对应着系统的单粒子激发能, 即多体系统中准粒子的能量.

10.3 谱密度

我们可以一般性地定义在频域上谱密度 (谱权重函数) 为

$$\rho_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im}\{G_{\sigma,\sigma}(\mathbf{k}, \omega)\}. \quad (10.14)$$

给定粒子的动量 \mathbf{k} 及自旋 $|\sigma\rangle$, 谱密度函数 $\rho_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ 便给出了介质中该粒子相对能量参数 $(\hbar)\omega$ 的态密度分布.

为简便起见而考虑零温 Green 函数, 那么它给出的单粒子谱密度为

$$\rho_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \sum_\mu |\langle \mu; N+1 | \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger | 0; N \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_\mu) \mp \sum_\nu |\langle \nu; N-1 | \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma} | 0; N \rangle|^2 \delta(\omega + \omega_\nu). \quad (10.15)$$

那么一般情况下谱密度在频域上的积分便会给出

$$\int d\omega \rho_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \langle 0; N | \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \mp \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k},\sigma} | 0; N \rangle = 1. \quad (10.16)$$

因而我们的确可以将谱密度诠释为频域上的某种概率密度.

我们根据 Dyson 方程可知, 如果系统均匀并且相互作用与自旋无关, 那么其单粒子 Green 函数总能被写成

$$G_{\sigma,\sigma'}(\mathbf{k}, \omega_n) = -\frac{1}{-i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (10.17)$$

其中自能项 $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i\omega)$ 一般上是一个复值函数并且刻画了相互作用的影响. 因此, 从理论上近似计算相互作用系统的 Green 函数便等价于近似计算其中的自能项. 由于自能项通常是复数, 故其有限大的虚部会剧烈影响谱密度的线型: 有限大虚部会使得谱密度在频域上不再表现为一个锐利的 δ -函数而会存在有限的展宽, 这在时域上便表现为有限的粒子寿命; 同时, 频域上粒子谱密度的有限展宽让我们不再能精确地确定粒子的能量而只能言说其分布的峰值.

10.4 集体激发

我们不仅能通过改变基态的粒子数来激发一个系统. 直观上, 我们把基态中的一个粒子踢到另一个单粒子态也会造成系统的激发. 特别是对于基态费米系统而言这一操作会在 Fermi 海中创造一个空穴并在 Fermi 海上创造一个粒子并形成粒子-空穴对. 就像单粒子激发可以被单粒子 Green 函数所刻画, 我们可以用双粒子 Green 函数

$$\langle T \{ \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{x}', \tau') \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\mathbf{x}'', \tau'') \hat{\psi}_{\sigma'''}(\mathbf{x}''', \tau''') \} \rangle \quad (10.18)$$

来描述这种粒子-空穴对. 注意到 $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{x}, \tau) \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}, \tau)$ 其实是粒子数密度算符, 因此这一双粒子 Green 函数实际上描述了密度涨落的关联 (或者说传播). 鉴于这种密度涨落和声音在空气中的传播并没有本质区别, 故我们也会称这种密度涨落为声波. 如果我们考虑的是金属中的电子, 那么这种密度涨落的激发态还有一个特殊的名字: 等离激元 (plasmon).

如果系统不存在相互作用, 那么这样的多粒子 Green 函数可以根据 Wick 定理而分解为单粒子 Green 函数乘积的组合, 因此其极点与单粒子 Green 函数别无二致. 这表明为了观察到不同于单粒子激发态的极点, 我们必须考虑相互作用, 并且集体激发现象只有在相互作用系统中才可能存在. 如果系统存在集体激发自由度, 那么我们可以使用 Hubbard-Stratonovich 变换来把这个自由度引入到我们的多体理论中.

我们可以使用不改变总粒子数的实验方式来在实验上研究集体激发, 特别是散射实验.

10.5 微扰论

我们可以将一般的相互作用量子气的作用量分解为 Gauss 的自由部分与需要用微扰论处理的相互作用部分:

$$S[\phi^\dagger, \phi] = S_0[\phi^\dagger, \phi] + S_{\text{int}}[\phi^\dagger, \phi]. \quad (10.19)$$

自由部分的形式一般为

$$S_0[\phi^\dagger, \phi] = \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \Sigma_{\sigma} - \mu \right) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau). \quad (10.20)$$

而此处我们仅考虑二粒子相互作用并把相互作用项取作

$$S_{\text{int}}[\phi^\dagger, \phi] = \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_0^{\beta} d\tau \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\phi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \hat{\phi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', \tau) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\phi}_{\sigma'}(\mathbf{r}', \tau) \hat{\phi}_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau). \quad (10.21)$$

微扰计算泛函积分

$$Z = \int \mathcal{D}\phi^{\dagger} \mathcal{D}\phi e^{-\beta S_0 - \beta S_{\text{int}}} \quad (10.22)$$

以及诸 Green 函数的方式与 QFT 中几乎一模一样, 只是我们组织 Feynman 图的方式与之略有不同. 此处我们会为每个顶点赋予一组指标 $(\sigma, \mathbf{r}, \tau)$, 使用波浪线代表相互作用项 $-V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, 并使用费米子线代表自由 Green 函数 $G_{0; \sigma, \sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau')$, 其中粒子于顶点 (\mathbf{r}', τ') 处产生并在箭头指向的顶点 (\mathbf{r}, τ) 处湮灭. 如果一根费米子线的两端是同一个顶点, 那么我们会为产生算符的时间指标赋予一个无穷小增量并令这根线对应于

$$G_{0; \sigma, \sigma}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau + 0^+). \quad (10.23)$$

这一约定来自于我们在定义 Hamilton 量时使用的 normal ordering 要求产生算符在湮灭算符左侧, 因此我们可以在产生湮灭算符的共时乘积中要求产生算符的时间指标略大于湮灭算符的时间指标以使得这种 normal ordering 结构在编时乘积中仍能得到保持. 最后我们将各条线代表的项相乘并对各个顶点的指标求和 (积分), 除以图的几何对称因子后便可以得到一幅图对最终结果的贡献.

相互作用配分函数 Z 的微扰展开式中的 Feynman 图都是没有外线的 bubble 图, 这些图的存在会和我们在计算算符的期望时遇到的 bubble 图相抵消并使得我们最后只需要考虑连通开图. 而为了计算至关重要的自能项, 我们只需要考虑逐阶计算各个单粒子不可约截腿图.

如果我们仅考虑领头阶自能修正图并把图中的自由 Green 函数线换成相互作用 Green 函数并利用自洽性条件确定自能项, 那么这里得到的结果本质上等价于 Hartree-Fock 近似. 通过读取被这个自能项修正的 Green 函数的极点位置, 我们便能获悉 Hartree-Fock 近似下理论中准粒子的能量及寿命.

11 Hubbard-Stratonovich 变换与 Hartree-Fock 近似

11.1 Hartree 理论

我们考虑相互作用的无自旋粒子组成的量子气, 其作用量为

$$S[\phi^\dagger, \phi] = \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) - \mu \right) \phi(\mathbf{r}, \tau) + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \phi^\dagger(\mathbf{r}', \tau) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}', \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau). \quad (11.1)$$

我们引入一个辅助场 $\kappa(\mathbf{r}, \tau)$ 并考虑恒等式¹⁶

$$\int \mathcal{D}\kappa \exp \left\{ \frac{1}{2} (\kappa - V\phi^\dagger\phi | V^{-1} | \kappa - V\phi^\dagger\phi) \right\} = 1. \quad (11.3)$$

其中

$$\begin{aligned} & (\kappa - V\phi^\dagger\phi | V^{-1} | \kappa - V\phi^\dagger\phi) \\ &= \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \left[\kappa(\mathbf{r}_1, \tau) - \int d\mathbf{r}_3 V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \phi^\dagger(\mathbf{r}_3, \tau) \phi(\mathbf{r}_3, \tau) \right] \\ & \times V^{-1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2) \left[\kappa(\mathbf{r}_2, \tau) - \int d\mathbf{r}_4 V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4) \phi^\dagger(\mathbf{r}_4, \tau) \phi(\mathbf{r}_4, \tau) \right]. \end{aligned} \quad (11.4)$$

这一泛函积分应该给出 $\exp\{\frac{1}{2} \ln(-V^{-1})\}$, 但这一项只为泛函积分带来一个整体的系数并且对物理预言没有影响, 进而我们为了形式上的简便起见而可以直接认为上式等于 1.

将带有辅助场的恒等式插入含有原作用量的泛函积分中可以消去 ϕ^4 相互作用项, 不过其与此同时也会引入对 κ 场的泛函积分. 特别的, 此时生成泛函为

$$Z[J, J^\dagger] = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\kappa \exp \left\{ \frac{1}{2} (\kappa | V^{-1} | \kappa) + (\phi | J) + (J | \phi) + (\phi | G_0^{-1} - \Sigma | \phi) \right\}, \quad (11.5)$$

其中 Hartree 自能项为

$$\Sigma(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \kappa) = \delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \kappa(\mathbf{r}, \tau). \quad (11.6)$$

此时我们可以精确地 integrate out ϕ 场并得到

$$\begin{aligned} Z[J, J^\dagger] &= \int \mathcal{D}\kappa \exp \left\{ \frac{1}{2} (\kappa | V^{-1} | \kappa) \mp \text{Tr} [\ln(-G^{-1})] - (J | G | J) \right\} \\ &\equiv \int \mathcal{D}\kappa \exp \{ -S_{\text{eff}}[\kappa] - (J | G | J) \}. \end{aligned} \quad (11.7)$$

其中

$$G^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \kappa) = G_0^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') - \Sigma(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \kappa), \quad (11.8)$$

¹⁶注意这里的 V^{-1} 代表 V 在线性算符意义上的逆, 即

$$\int d\tau' d\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') V^{-1}(\mathbf{r}', \tau'; \mathbf{r}'', \tau'') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \delta(\tau - \tau'). \quad (11.2)$$

进而其逆应该满足

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 - \mu_V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) + \kappa(\mathbf{r}, \tau) \right) G(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \kappa) = -\delta(\tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (11.9)$$

这个传播子并非系统的精确传播子, 但是注意到我们取流的变分得到的精确传播子为

$$G(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \mp \frac{1}{Z[0, 0]} \frac{\delta^2}{\delta J^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \delta J(\mathbf{r}', \tau')} Z[J, J^\dagger] \Big|_{J, J^\dagger=0}, \quad (11.10)$$

进而我们有

$$G(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \frac{\int \mathcal{D}\kappa G(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \kappa) e^{-S_{\text{eff}}[\kappa]}}{\int \mathcal{D}\kappa e^{-S_{\text{eff}}[\kappa]}}. \quad (11.11)$$

这一泛函积分可以被鞍点法近似处理. 如果仅考虑鞍点处没有涨落的平均场贡献, 那么此时辅助场的期望为

$$\langle \kappa(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \phi^\dagger(\mathbf{r}', \tau) \phi(\mathbf{r}', \tau) \rangle. \quad (11.12)$$

将这个结果代入 Hartree 自能项便能得到 Hartree-Fock 近似中的 Hartree 项.

我们可以在直观上将这一辅助场的期望值理解为 (11.3) 中指数的驻点, 毕竟辅助场的泛函积分最终由其驻点 $k_c(\mathbf{r}, \tau)$ 附近的贡献主导. 为了更严格地论证这一点, 我们需要引入一个源 $I(\mathbf{r}, \tau) \in \mathbb{R}$ 并为作用量添加 source term

$$-(\phi^\dagger \phi | I) = - \int_0^\beta d\tau \int d\mathbf{r} I(\mathbf{r}, \tau) \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \quad (11.13)$$

并构造生成泛函¹⁷

$$Z[I] = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi^\dagger, \phi] + (\phi^\dagger \phi | I)} \equiv \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi e^{(\phi | G_0^{-1} | \phi) - \frac{1}{2}(\phi^\dagger \phi | V | \phi^\dagger \phi) + (\phi^\dagger \phi | I)}. \quad (11.14)$$

我们现在寻找合适的 Hubbard-Stratonovich 变换来同时消去 ϕ^4 相互作用项与 $\phi - I$ 耦合项, 一个合适的选择便是

$$1 = \int \mathcal{D}\kappa e^{\frac{1}{2}(\kappa - V \phi^\dagger \phi + I | V^{-1} | \kappa - V \phi^\dagger \phi + I)}, \quad (11.15)$$

变换后的泛函积分便为

$$Z[I] = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\kappa e^{\frac{1}{2}(\kappa | V^{-1} | \kappa) + (\phi | G_0^{-1} - \Sigma | \phi) + \frac{1}{2}(I | V^{-1} | I) + (\kappa | V^{-1} | I)}. \quad (11.16)$$

积出 ϕ 场便有

$$Z[I] = \int \mathcal{D}\kappa e^{\frac{1}{2}(\kappa | V^{-1} | \kappa) \mp \text{Tr}[\ln(-G^{-1})] + \frac{1}{2}(I | V^{-1} | I) + (\kappa | V^{-1} | I)}. \quad (11.17)$$

¹⁷事实上, 构造这样的生成泛函是一个很一般的计算 H-S 变换后辅助场的期望的方式, 我们借助辅助场的期望可以进一步为辅助场赋予一定的物理意义.

考虑到

$$\langle \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \frac{1}{Z[I]} \frac{\delta}{\delta I(\mathbf{r}, \tau)} Z[I] \Big|_{I=0}, \quad (11.18)$$

我们便有

$$\langle \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \int \mathcal{D}\kappa \left(\int d\mathbf{r}' V^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \kappa(\mathbf{r}', \tau) \right) e^{\frac{1}{2}(\kappa|V^{-1}|\kappa) \mp \text{Tr}[\ln(-G^{-1})]}. \quad (11.19)$$

此即

$$\int d\mathbf{r}' V^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \kappa(\mathbf{r}', \tau) \rangle = \langle \phi^\dagger(\mathbf{r}, \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \rangle, \quad (11.20)$$

这等价于

$$\langle \kappa(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \phi^\dagger(\mathbf{r}', \tau) \phi(\mathbf{r}', \tau) \rangle. \quad (11.21)$$

我们可以采用完全类似的方式计算 κ 场的两点函数并得到

$$\begin{aligned} & \langle \kappa(\mathbf{r}, \tau) \kappa(\mathbf{r}', \tau') \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2) \langle \phi^\dagger(\mathbf{r}_1, \tau) \phi(\mathbf{r}_1, \tau) \phi^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau') \phi(\mathbf{r}_2, \tau') \rangle - V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (11.22)$$

这表明量子算符 κ 并不完全等价于

$$\int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', \tau) \hat{\psi}(\mathbf{r}', \tau), \quad (11.23)$$

并且场 κ 也不完全等于 $V\phi^\dagger\phi$ 而是会在时域上按一个 Gauss 分布涨落. 这进一步表明 Hubbard-Stratonovich 变换没有正则量子化体系下的等价表述而彰显了泛函积分进路的威力.

11.2 Fock 理论

为了从 Hubbard-Stratonovich 变换出发得到 Fock 部分, 我们考虑引入辅助场¹⁸ $\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$ 使得平均场近似下

$$\langle \lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \rangle = V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \phi^\dagger(\mathbf{r}', \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \rangle. \quad (11.24)$$

此时我们需要考虑向原泛函积分中插入

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathcal{D}\lambda \exp \left\{ \pm \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau d\tau' \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4 [\lambda(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi^\dagger(\mathbf{r}_2, \tau) \phi(\mathbf{r}_1, \tau)] \right. \\ &\quad \times \frac{1}{V(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4)} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \delta(\tau - \tau') [\lambda(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tau') - V(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \phi^\dagger(\mathbf{r}_4, \tau') \phi(\mathbf{r}_3, \tau')] \Big\} \\ &\equiv \int \mathcal{D}\lambda \exp \left\{ \pm \frac{1}{2} (\lambda - V\phi^\dagger\phi | \frac{1}{V} | \lambda - V\phi^\dagger\phi) \right\}. \end{aligned} \quad (11.25)$$

¹⁸Non-local 的辅助场?

其中 $\frac{1}{V}$ 单纯的是势函数的倒数而非算符的逆. 插入这个恒等式并消除 ϕ^4 相互作用项会给出

$$\begin{aligned} Z[J, J^\dagger] &= \int \mathcal{D}\lambda \exp \left\{ \pm \frac{1}{2} (\lambda | \frac{1}{V} | \lambda) - (J | G | J) \mp \text{Tr} [\ln(-G^{-1})] \right\} \\ &\equiv \int \mathcal{D}\lambda \exp \{-S_{\text{eff}}[\lambda] - (J | G | J)\}, \end{aligned} \quad (11.26)$$

$$G^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \lambda) = G_0^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') - \Sigma(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \lambda), \quad (11.27)$$

$$\Sigma(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'; \lambda) = \pm \lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \delta(\tau - \tau'). \quad (11.28)$$

使用平均场近似将 $\langle \lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) \rangle$ 代入自能项便会给出自能领头阶近似中的 Fock 部分.

虽然我们现在仅仅在 Hubbard-Stratonovich 变换后考虑了平均场近似给出的 Hartree-Fock 理论, 但我们其实可以考虑鞍点附近的涨落对泛函积分的贡献并得到对 Hartree-Fock 近似的修正. 特别的, 如果将有效作用量展开到辅助场的二阶, 那么我们可以得到 GRPA 近似并能用来研究系统中的密度涨落以及集体激发态.

11.3 Jellium 模型

我们现在考虑均匀正电背景中的电子气, 其中电子的平均密度 n_e 等于背景正电荷的平均密度. 我们现在使用的作用量为

$$\begin{aligned} S[\phi^\dagger, \phi] &= \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau \int d\mathbf{r} \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m} \nabla^2 + V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) - \mu \right) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_0^{\beta} d\tau \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, \tau) \phi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}', \tau) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_{\sigma'}(\mathbf{r}', \tau) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau), \end{aligned} \quad (11.29)$$

其中电子间仅拥有 Coulomb 相互作用

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (11.30)$$

而 external 势来自于均匀正电背景:

$$V^{\text{ex}}(\mathbf{r}) = n_e \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (11.31)$$

现在我们可以考虑通过 Hubbard-Stratonovich 变换引入一个和系统的集体行为有关的辅助场 κ 使得

$$\langle \kappa_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}', \tau) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}', \tau) \rangle. \quad (11.32)$$

显然我们需要考虑的恒等式便为

$$1 = \int \mathcal{D}\kappa \exp \left\{ \frac{1}{2} (\kappa - V \phi^{\dagger} \phi | V^{-1} | \kappa - V \phi^{\dagger} \phi) \right\}. \quad (11.33)$$

通过和前面一样的套路, 我们可以得到 H-S 变换后的配分函数

$$Z = \int \mathcal{D}\kappa e^{-S_{\text{eff}}[\kappa]}, \quad (11.34)$$

其中

$$S_{\text{eff}}[\kappa] = -\frac{1}{2}(\kappa|V^{-1}|\kappa) - \text{Tr}[\ln(-G^{-1})], \quad (11.35)$$

$$G_{\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = G_{0,\sigma\sigma'}^{-1}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') - \Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau'), \quad (11.36)$$

$$\Sigma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}', \tau') = \kappa_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(\tau - \tau')\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (11.37)$$

对 κ 的泛函积分应该被其驻点 $\langle\kappa\rangle$ 附近的贡献主导, 我们于是可以考虑记 $\kappa = \langle\kappa\rangle + \kappa'$, 于是

$$G^{-1} = G_0^{-1} - \langle\kappa\rangle - \kappa' \equiv G^{\text{H},-1} - \Sigma' = G^{\text{H},-1}(1 - G^{\text{H}}\Sigma'). \quad (11.38)$$

将其代入有效作用量后我们会发现

$$\ln(-G^{-1}) = \ln(-G^{\text{H},-1}) + \ln(1 - G^{\text{H}}\Sigma'). \quad (11.39)$$

第一项会给出一个对可观测量没有影响的常系数, 而第二项可以被展开为

$$\ln(1 - G^{\text{H}}\Sigma') = -G^{\text{H}}\Sigma' - \frac{1}{2}G^{\text{H}}\Sigma'G^{\text{H}}\Sigma' + \dots. \quad (11.40)$$

由于构造的辅助场满足

$$\langle\kappa_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau)\rangle = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle\phi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}', \tau)\phi_{\sigma}(\mathbf{r}', \tau)\rangle, \quad (11.41)$$

我们便会在 Hartree 理论中期待

$$\langle\kappa_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau)\rangle = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r}' V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') G^{\text{H}}(\mathbf{r}', \tau; \mathbf{r}', \tau), \quad (11.42)$$

展开后的有效作用量在 $\mathcal{O}(\kappa')$ 阶上的项便为

$$-(\kappa'|V^{-1}|\langle\kappa\rangle) + \text{Tr}[G^{\text{H}}\kappa'] = 0. \quad (11.43)$$

进而我们发现领头阶非平凡有效作用量为

$$S_{\text{eff}}[\kappa'] = -\frac{1}{2}(\kappa'|V^{-1}|\kappa') + \frac{1}{2}\text{Tr}[G^{\text{H}}\Sigma'G^{\text{H}}\Sigma'] \equiv -\frac{1}{2}(\kappa'|G_{\kappa'}^{-1}|\kappa'). \quad (11.44)$$

这个表达式里的迹可以被 explicitly 地写成

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[G^{\text{H}}\Sigma'G^{\text{H}}\Sigma'] \\ &= \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_{\sigma\sigma}^{\text{H}}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) \kappa'(\mathbf{r}_2, \tau_2) G^{\text{H}}(\mathbf{r}_2, \tau_2; \mathbf{r}_1, \tau_1) \kappa'(\mathbf{r}_1, \tau_1). \end{aligned} \quad (11.45)$$

进而

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}[\kappa'] &= \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \kappa'(\mathbf{r}_1, \tau_1) \kappa'(\mathbf{r}_2, \tau_2) V^{-1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &+ \sum_{\sigma} \int_0^{\beta} d\tau_1 d\tau_2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_{\sigma\sigma}^{\text{H}}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2) \kappa'(\mathbf{r}_2, \tau_2) G^{\text{H}}(\mathbf{r}_2, \tau_2; \mathbf{r}_1, \tau_1) \kappa'(\mathbf{r}_1, \tau_1). \end{aligned} \quad (11.46)$$

这在动量空间中便为

$$S_{\text{eff}}[\kappa'] = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, n} \kappa'_{\mathbf{k}, n} \left[V^{-1}(\mathbf{k}) - \frac{1}{\beta V} \sum_{\sigma, \mathbf{k}', n'} G_{\sigma}^{\text{H}}(\mathbf{k} + \mathbf{k}', i\omega_n + i\omega_{n'}) G_{\sigma}^{\text{H}}(\mathbf{k}', i\omega_{n'}) \right] \kappa'_{\mathbf{k}, n}. \quad (11.47)$$

我们利用 Fourier 变换不难求得

$$V^{-1}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_0}{e^2} \mathbf{k}^2, \quad (11.48)$$

同时

$$G_{\sigma, \sigma'}^{\text{H}}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{-1}{-i\omega_n + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (11.49)$$

我们于是可以算出辅助场的 Green 函数满足

$$G_{\kappa'}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{V(\mathbf{k})} - \Pi(\mathbf{k}, i\omega_n), \quad (11.50)$$

其中

$$\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n) = 2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{N_{\text{FD}}(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - i\hbar\omega_n)}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - i\hbar\omega_n}, \quad (11.51)$$

这表明

$$G_{\kappa'}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{V(\mathbf{k})}{1 - V(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \quad (11.52)$$

根据谱表示, 这个 Green 函数的极点应该能告诉我们关于系统中密度涨落的信息. 我们现在仅考虑低能物理, 故我们取长波极限 $\mathbf{k} \approx 0$ 并得到

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) \approx 2 \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' - m\omega} \left. \frac{\partial N_{\text{FD}}}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=\varepsilon_{\mathbf{k}'}}. \quad (11.53)$$

通过一系列近似操作 [16], 我们最终可以得到

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{\mathbf{k}^2}{\omega^2} \sqrt{m\mu^3}. \quad (11.54)$$

利用低温下化学势约等于 Fermi 能, 我们进一步有

$$\Pi(\mathbf{k}, \omega) \approx \frac{n_e \mathbf{k}^2}{m\omega^2}, \quad (11.55)$$

进而我们发现长波极限下 Green 函数的极点会给出经典的等离子振荡频率

$$\omega = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{m\varepsilon_0}}. \quad (11.56)$$

同时, 我们可以考察 $G_{\kappa'}(\mathbf{k}, 0) = V_{\text{sc}}(\mathbf{k})$ 以得到被静电屏蔽的 Coulomb 势¹⁹, 并且在长波极限下这在实空间里恰好是 Yukawa 型的势.

¹⁹按照我们的 Hubbard-Stratonovich 变换, $\langle \kappa \kappa \rangle$ 恰好描述了不同点间电荷密度的关联.

12 Landau 相变理论

12.1 d 维 Ising 模型的平均场近似

我们记 d 维 Ising 模型的 Hamilton 量为

$$\hat{H} = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{z,i} \cdot \hat{S}_{z,j}, \quad (12.1)$$

其中 $\langle i,j \rangle$ 代表对临近格点位求和. 我们取 $J > 0$, 这样相邻两格点自选取向相同时会使系统拥有较低的能量并有可能出现有趣的铁磁序. 为了刻画铁磁序, 我们需要计算系统的磁化强度

$$\langle M \rangle \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \frac{1}{N} \sum_i \hat{S}_{z,i} \right\}. \quad (12.2)$$

对于一维和二维的情况, 这是精确可解的, 但我们目前只能通过近似方法来处理三维 Ising 模型; 对于更高维的情况, Ising 模型的解即是平均场解.

标准的近似方法是考虑某个固定的磁化强度 M 附近的涨落展开

$$\hat{S}_{z,i} = M + \hat{S}'_{z,i}, \quad (12.3)$$

并在计算结束时通过一些自洽性条件来确定 M 的取值. 如果我们假设涨落 $\hat{S}'_{z,i}$ 很小并在 Hamilton 量的展开中取到领头阶, 那么近似得到的线性 Hamilton 量的配分函数可被精确计算并会给出平均场近似:

$$\hat{H} \approx 2JzNM^2 - 4JzM \sum_i \hat{S}'_{z,i}, \quad (12.4)$$

其中 $z = 2d$ 为 d 维中一个格点的临近格点数. 我们可以将线性项解释为系统的非零磁化产生的磁场诱导的 Zeemann 项.

计算这个 Hamilton 量的正则配分函数便会给出 Landau 自由能

$$F_L(M) = 2zJNM^2 - Nk_B T \ln \left[\exp \left(\frac{2zJM}{k_B T} \right) + \exp \left(-\frac{2zJM}{k_B T} \right) \right]. \quad (12.5)$$

为了确定 M 的取值, 我们只需要利用热力学关系对 F 取偏微分并得到关于 $\langle M \rangle$ 的自洽性方程

$$\langle M \rangle = \frac{1}{2} \tanh \frac{2zJ \langle M \rangle}{k_B T}. \quad (12.6)$$

这恰好等价于要求

$$\left. \frac{dF_L(M)}{dM} \right|_{M=\langle M \rangle} = 0. \quad (12.7)$$

不过一个更加 insightful 的做法是将 $F_L(M)$ 按 M 展开为

$$F_L(M) = -k_B T N \ln 2 + \left(2JNz - \frac{2J^2 N z^2}{k_B T} \right) M^2 + \frac{4J^4 N z^4}{3(k_B T)^3} M^4 + \dots. \quad (12.8)$$

这在唯象的 Landau 理论中便被记为

$$F_L(M) = -k_B T N \ln 2 + \frac{1}{2} \alpha(T) N M^2 + \frac{1}{4} \beta(T) N M^4 + \dots. \quad (12.9)$$

如果 $\alpha, \beta > 0$, 那么 $F_T(M)$ 的极小值在 $M = 0$ 处, 此时系统处于顺磁相; 但是如果 $\alpha < 0, \beta > 0$, 那么 $F_T(M)$ 会在非零的 M 处取极小值, 此时系统处在有非平凡自发磁化的铁磁相. 我们现在不难发现铁磁-顺磁相变的临界温度为

$$k_B T_c = Jz. \quad (12.10)$$

12.2 泛函积分方法

Landau 相变理论的关键是得到 Landau 自由能泛函 $F_L[m]$, 而这其实可以被视为系统的微观涨落被 integrate out 后得到的宏观有效 Hamilton 量.

对于 Ising 模型, 我们可以定义连续的自旋密度函数

$$\hat{s}_z(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \hat{S}_{z,i}. \quad (12.11)$$

引入序参量场 $m(\mathbf{r})$ 并利用

$$\int \mathcal{D}m \delta[m(\mathbf{r}) - \hat{s}_z(\mathbf{r})] = 1, \quad (12.12)$$

我们可以将配分函数写作

$$Z = \text{Tr} \left\{ \int \mathcal{D}m \delta[m(\mathbf{r}) - \hat{s}(\mathbf{r})] e^{-\beta \hat{H}} \right\}. \quad (12.13)$$

如果我们能够计算上面的迹, 那么配分函数在最后应该能被写成

$$Z = \int \mathcal{D}m \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} F_L[m] \right\}, \quad (12.14)$$

其中 $F_L[m]$ 便是 Landau 自由能泛函. 不幸的是我们很难直接计算这个迹, 因而 Landau 的方法是利用一系列唯象上的考虑来构造 $F_L[m]$ 的可能形式并研究其蕴含的相变性质. 我们根据一系列对称性考虑可以写出 $F_L[m]$ 最一般的可能的形式为

$$F_L[m] = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \left[\gamma(T) [\nabla m(\mathbf{r})]^2 + \alpha(T) m^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \beta(T) m^4(\mathbf{r}) + \frac{1}{3} \delta(T) m^6(\mathbf{r}) + \dots \right]. \quad (12.15)$$

我们通过要求这个自由能取极小值便能确定平衡态下系统的自发磁化强度并能分析其在临界点附近的性质. 而计算这个自由能给出的关联函数随温度的行为, 我们则能揭示临界点附近系统关联长度的发散以及自发对称破缺等一系列有趣的现象. 用泛函积分方法来研究 Landau 自由能在临界温度以下的自发对称破缺和我们在 QFT 中的做法一模一样, 即选择一个作为代表元的真空期望并在其附近对场做展开, 计算展开的场的关联函数便会发现原先的模式有的被赋予了额外的质量, 有的却为无质量模式.

既然我们学了泛函积分和 Hubbard-Stratonovich 变换, 那我们肯定要拿这些玩意整点花活. 首先, 我们注意到对于相互作用与自旋无关的二自旋系统, 其相互作用 Green 函数满足

$$G_{\sigma, \sigma'}(\mathbf{r}, \tau; \mathbf{r}, \tau + 0^+) = \mp \frac{1}{2} n \delta_{\sigma \sigma'}, \quad (12.16)$$

其中 n 是粒子数密度; 但是相互作用量子气中常粒子数密度态并不一定是能量最优态, 此时系统的平移对称性会被破坏并出现自发对称破缺. 自发对称破缺是没法被微扰论处理的

非微扰效应, 但是我们可以使用 Hubbard-Stratonovich 变换将对应的序参量引入到作用量里. 例如, 我们可以使用 Hubbard-Stratonovich 变换向一个相互作用 Fermi 气理论中引入一个集体行为场 $\rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau)$ 使得其期望满足

$$\langle \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \left\langle \phi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}, \tau + 0^+) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \right\rangle. \quad (12.17)$$

为此, 我们可以考虑向泛函积分中插入

$$1 = \int \mathcal{D}\rho \exp \left\{ \frac{1}{2} (\rho - \phi^\dagger \phi |V| \rho - \phi^\dagger \phi) \right\}, \quad (12.18)$$

积出 ϕ 场后便会给出一个关于场

$$\rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau) \equiv \frac{1}{2} n(\mathbf{r}, \tau) \delta_{\sigma\sigma'} + \mathbf{m}(\mathbf{r}, \tau) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \quad (12.19)$$

的有效作用量. 此时这个有效作用量的极小值并不一定是微扰论给出的 $\langle \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = n\delta_{\sigma\sigma'}$ 而有可能表现出空间依赖性

$$\langle \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \frac{1}{2} n(\mathbf{r}) \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (12.20)$$

此时这便描述了 Wigner 晶体或电荷密度波. 如果这个期望在空间上是均匀的但是对自旋的依赖性表现为

$$\langle \rho_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \frac{1}{2} n \delta_{\sigma\sigma'} + \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'}, \quad (12.21)$$

那么此时系统便破缺到了一个有着非零磁化强度的铁磁相. 这里的讨论表明我们总可以用 H-S 变换来把序参量精确地引入到理论中并给出一个描述相变的 Landau 理论.

13 响应函数

粗略地讲, 实验凝聚态物理包含如下范畴:

- 实验测量热力学系数,
- 输运实验,
- 谱学.

相较于热力学实验, 输运与谱学实验能够探测到系统结构的更多细节, 并且这些实验方法有着如下共同特征:

- 多体系统与环境通过电磁力耦合, 而实验为系统带来的微扰相互作用项通常能被写作

$$\hat{H}_F = \int d^d r F'_i(\mathbf{r}, t) \hat{X}'_i(\mathbf{r}), \quad (13.1)$$

其中 F'_i 是测量施加微扰的广义力, 而 \hat{X}'_i 则是与之耦合的物理量对应的算符.

- 实验测量的是某个算符 \hat{X}_i 的期望值 $X_i \equiv \langle \hat{X}_i \rangle$, 而理论解释的便是这个期望值与力 F'_j 间的关系.
- 一般而言, $X_i[F'_j]$ 表现为广义力的泛函, 并且在微扰近似下这一泛函关系总能被截断到领头阶而被写作

$$X_i(\mathbf{r}, t) = \int d^d r' dt' \chi_{ij}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') F'_j(\mathbf{r}', t') + \mathcal{O}(F'^2). \quad (13.2)$$

这便是线性响应理论. 积分核 χ 是系统的内并特性并叫做响应函数并且是这个理论关心的重点.

- 我们主要关心系统低能激发态附近的响应函数, 因而凝聚态实验通常需要低温度环境.

13.1 微观线性响应理论

我们假设给出了响应信号 $X(t)$ 的算符 \hat{X} 对应某个单粒子算符

$$\hat{X} = \sum_{a, a'} c_a^\dagger X_{aa'} c_{a'} \equiv c^\dagger X c, \quad (13.3)$$

其中 c 可以是玻色子也可以是费米子. 进而 X

14 对称性破缺与集体现象

本节参考 [1].

14.1 泛函积分方法中的平均场理论

一般而言, 我们在用泛函积分方法处理包含大参数的问题时要遵循以下步骤:

1. 首先, 我们要确定和系统中的物理过程有关的能标.
2. 其次, 我们需要引入一个新的场 ϕ 以刻画和低能理论有关的自由度.
3. 将对原先自由度的泛函积分化为对 ϕ 的泛函积分, 一个典型方法是用 Hubbard-Stratonovich 变换.
4. 利用鞍点法分析 $S[\phi]$. 我们在这一阶段常常会发现理论存在不稳定性, 而这暗示了一些有趣的物理过程!
5. 将 $S[\phi]$ 在驻点 (即平均场) 附近展开便能得到刻画系统元激发 (也可能是集体激发) 的低能有效作用量, 并且我们可以据此计算物理可观测量.

14.2 相互作用电子气

作为第一个例子, 我们来考虑 Coulomb 相互作用电子气的场论表述, 其作用量为

$$S[\psi, \bar{\psi}] = \sum_p \bar{\psi}_{p,\sigma} \left(-i\omega_n + \frac{p^2}{2m} - \mu \right) \psi_{p,\sigma} + \frac{T}{2L^3} \sum_{p,p',q} \bar{\psi}_{p+q,\sigma} \bar{\psi}_{p'-q,\sigma'} V(\mathbf{q}) \psi_{p',\sigma'} \psi_{p,\sigma}, \quad (14.1)$$

其中 T 为温度, L 为系统的尺度,

$$V(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q}|^2}, \quad (14.2)$$

被求和的 $p/q = (\omega_n, \mathbf{p}/\mathbf{q})$ 同时包含了费米子 Matsubara 频率和 Bloch 动量, 并且我们默认对重复自旋指标进行了求和. $\mathcal{O}(\psi^4)$ 的相互作用项让我们无法精确计算这个作用量给出的泛函积分, 但是我们可以使用 Hubbard-Stratonovich 变换来让对电子场的泛函积分变得精确可积. 此时我们要考虑的恒等代换为

$$1 = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{e^2 \beta}{2L^d} \sum_q \phi_q V^{-1}(\mathbf{q}) \phi_{-q} \right\}, \quad (14.3)$$

其中 ϕ 是一个玻色场算符, 并且归一化系数被吸收到了泛函积分的测度定义中, 同时 $q = (\omega_m, \mathbf{q})$ 中 ω_m 为玻色子 Matsubara 频率. 定义

$$\rho_q = \sum_p \bar{\psi}_{p,\sigma} \psi_{p+q,\sigma} \quad (14.4)$$

并进行平移

$$\phi_q \rightarrow \phi_q + i \frac{e^{-1} V(\mathbf{q}) \rho_q}{\beta}, \quad (14.5)$$

我们便有

$$1 = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \frac{1}{L^d} \sum_q \left(-\frac{e^2 \beta}{2} \phi_q V^{-1}(\mathbf{q}) \phi_{-q} + i e \rho_q \phi_{-q} + \frac{1}{2\beta} \rho_q V(\mathbf{q}) \rho_{-q} \right) \right\}, \quad (14.6)$$

进而将这一项插入原先对 ψ 场的泛函积分中便能给出一个新的作用量

$$S[\phi, \bar{\psi}, \psi] = \frac{\beta}{8\pi L^d} \sum_q \phi_q \mathbf{q}^2 \phi_{-q} + \sum_{p, p'} \bar{\psi}_{p, \sigma} \left[\left(-i\omega_n + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu \right) \delta_{p, p'} + \frac{i e}{L^d} \phi_{p' - p} \right] \psi_{p', \sigma}. \quad (14.7)$$

这个作用量在实空间中便为

$$S[\phi, \bar{\psi}, \psi] = \int d\tau \int d^d \mathbf{r} \frac{1}{8\pi} (\partial \phi)^2 + \bar{\psi}_\sigma \left(\partial_\tau - \frac{\partial^2}{2m} - \mu + \frac{i e}{L^d} \phi \right) \psi_\sigma. \quad (14.8)$$

可以看到, 我们能够将 ϕ 诠释为与电子场耦合的一个有动力学的势; 并且此时作用量对电子场而言是 Gauss 的并且相对其精确可积.

我们在选择 Hubbard-Stratonovich 变换时有很大的自由度, 而具体选择什么样的恒等代换则需要一些物理上的 insight. 事实上, 在更一般的情况中我们应该考虑所有可能的 decouple 方式并考察那种变换适用于我们的物理问题.

积出电子场后, 我们可以得到配分函数

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{\beta}{8\pi L^3} \sum_q \phi_q \mathbf{q}^2 \phi_{-q}} \det \left(-i\omega + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu + \frac{i e}{L^d} \phi \right). \quad (14.9)$$

处理这一行列式的方式为考虑恒等式

$$\ln \det \hat{A} = \text{tr} \ln \hat{A}, \quad (14.10)$$

进而我们可以得到 ϕ 场的作用量

$$S[\phi] = \frac{\beta}{8\pi L^d} \sum_q \phi_q \mathbf{q}^2 \phi_{-q} - \text{tr} \ln \left(-i\omega + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu + \frac{i e}{L^d} \phi \right). \quad (14.11)$$

接下来的标准操作是分析这个作用量为驻点

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = 0, \quad (14.12)$$

而这个方程的解 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 便叫做"平均场". 我们可以通过考察 $\text{tr} \ln$ 项的物理意义来理解这个称谓: $\mathbf{p}^2/2m - \mu + i e \phi/L^d$ 的结构就像处于外场 ϕ 中的粒子的 Hamilton 量, 这个外场便是"平均场". 可以注意到平均场解只有在 $\mathbf{q} \neq 0$ 时才是非平凡的, 因而它没有零动量模式.

计算平均场满足的运动方程时的一个问题是如何计算变分

$$\frac{\delta}{\delta \phi} \text{tr} \ln G^{-1}[\phi], \quad G^{-1}[\phi] \equiv i\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu - \frac{i e}{L^d} \phi. \quad (14.13)$$

不过我们不难通过对角化想到

$$\frac{\delta}{\delta \phi} \text{tr} \ln G^{-1}[\phi] = \text{tr} \left(G[\phi] \frac{\delta}{\delta \phi} G^{-1}[\phi] \right). \quad (14.14)$$

考虑进自旋自由度带来的 2 因子, 我们有

$$\text{tr} \left(G[\phi] \frac{\delta}{\delta \phi_q} G^{-1}[\phi] \right) = 2 \sum_{q_1, q_2} G_{q_1, q_2} \frac{\delta}{\delta \phi} G_{q_2, q_1}^{-1} = -\frac{2ie}{L^d} \sum_{q_1, q_2} G_{q_1, q_2} \delta_{q_1 - q_2, q}. \quad (14.15)$$

于是, 鞍点方程为

$$\frac{\delta}{\delta \phi_q} S[\phi] = \frac{\beta}{4\pi L^d} \mathbf{q}^2 \phi_{-q} + \frac{2ie}{L^d} \sum_{q_1} G_{q_1, q_1 - q} = 0. \quad (14.16)$$

显然 $\phi = 0$ 是一个解, 这描述了电中性的均匀基态并且我们可以考虑在这附近对 ϕ 场做展开以得到刻画其涨落的理论. 此时我们可以利用

$$\text{tr} \ln G^{-1} = \text{tr} \ln G_0^{-1} + \frac{ie}{L^d} \text{tr}(G_0 \phi) + \frac{1}{2} \left(\frac{e}{L^d} \right)^2 \text{tr}(G_0 \phi G_0 \phi) + \dots, \quad G_0^{-1} \equiv i\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu. \quad (14.17)$$

可以看到, 展开的零阶项只相当于平移了作用量而不会给出物理的影响; 而一阶项在平均场解附近对结果没有贡献; 二阶项在物理上则是有趣的: 它会给出非平凡的贡献; 并且既然 ϕ 表现得像与电子耦合的电势, 那么这一项应该刻画了电子气中的电势涨落并能反映静电屏蔽现象.

注意到

$$\frac{1}{2} \left(\frac{e}{L^d} \right)^2 \text{tr}(G_0 \phi G_0 \phi) = \left(\frac{e}{L^d} \right)^2 \sum_{p, q} G_{0, p} \phi_q G_{0, p+q} \phi_{-q} \equiv \frac{e^2}{2TL^d} \sum_q \Pi_q \phi_q \phi_{-q}, \quad (14.18)$$

于是 ϕ 的有效作用量为

$$S_{\text{eff}}[\phi] = \frac{1}{2TL^3} \sum_q \phi_q (\mathbf{q}^2 - e^2 \Pi_q) \phi_{-q} + \mathcal{O}(\phi^4). \quad (14.19)$$

可以看到, Π_q 可以被诠释为电子气的存在带来的自能项, 这使得原先在实空间中电场的行为由长程的反比衰减变成了短程的指数衰减, 亦即这一项反映了静电屏蔽. 这里的结果和有效 RPA 近似给出的结果一致. 我们根据这个有效作用量便能继续算出自由能等一系列描述系统必需的函数.

14.3 Bose-Einstein 凝聚和超流

现在我们考虑弱相互作用 Bose 气并取作用量为

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[\bar{\psi} (\partial_t + \hat{H}_0 - \mu) \psi + \frac{g}{2} (\bar{\psi} \psi)^2 \right], \quad (14.20)$$

其中 ψ 为复标量场并且我们取玻色子满足的周期性边界条件 $\psi(\mathbf{r}, 0) = \psi(\mathbf{r}, \beta)$. 这个作用量刻画了 d 维中存在强度为 g 的接触性排斥相互作用的玻色子, 并且我们暂时不需要声明单体 Hamilton 算符 \hat{H}_0 的形式. 在这个系统中会出现两个有趣的现象: Bose-Einstein 凝聚和超流. 与流行的说法不同, 这两个现象其实并不是互相依赖的而是可以分别独立出现.

14.3.1 Bose-Einstein 凝聚

为了熟悉用泛函积分研究 Bose-Einstein 凝聚的方法, 我们先忽略相互作用项并选择单粒子 Hamilton 量的本征态来构造二次量子化理论, 进而无相互作用系统的配分函数为

$$\mathfrak{Z}_0 = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp \left\{ - \sum_{a,n} \bar{\psi}_{a,n} (-i\omega_n + \epsilon_a - \mu) \psi_{a,n} \right\}. \quad (14.21)$$

我们总可以平移能量零点使得 $\epsilon_a \geq 0$ 并且基态 $\epsilon_0 = 0$. 此时为了确保理论的良好定义性, 决定总粒子数的化学势必须为负数以避免正指数的出现. 我们不难计算出系统的总粒子数

$$N(\mu) = - \frac{\partial F}{\partial \mu} = T \sum_{n,a} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_a + \mu} = \sum_a n_B(\epsilon_a). \quad (14.22)$$

在给定粒子数下, 这个方程决定了化学势和温度的关系 $\mu(T)$. 温度的降低会让 $n_B(\epsilon)$ 变小, 而为了维持总粒子数不变我们必须让化学势变大. 但是在某个临界温度 T_c 以下, 即便 $\mu = 0$ 也不足以让 $n_B(\epsilon_{a \neq 0})$ 之和给出总粒子数 N , 即

$$\sum_{a>0} n_B(\epsilon_a)|_{\mu=0} = N_1 < N, \quad (14.23)$$

进而此时存在 $N - N_1$ 个粒子凝聚在单粒子基态, 此即 Bose-Einstein 凝聚.

为了从泛函积分出发描述 Bose-Einstein 凝聚, 我们直观上需要关注场的零模 $\psi_0(\tau)$. 但这里的问题是在临界温度以下这个分量的作用量看起来是无界的: 其化学势和本征值都是零, 进而零模 Matsubara 分量 $\psi_{0,0}$ 的作用量为零. 我们可以 ad hoc 地处理这个问题: 在临界温度以下时, 我们选择不将 $\psi_0(\tau)$ 处理为泛函积分变量而仅将之视作用来修正粒子数的不含时的 Lagrange 乘子. 亦即, 我们可以将作用量写作

$$S_0[\bar{\psi}, \psi] = -\bar{\psi}_0 \beta \mu \psi_0 + \sum_{a \neq 0, n} \bar{\psi}_{a,n} (-i\omega_n + \epsilon_a - \mu) \psi_{a,n}, \quad (14.24)$$

并且我们暂时先不将 μ 取作零. 如此对非零模做泛函积分得到配分函数及自由能后便有

$$N = - \left. \frac{\partial F}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = \bar{\psi}_0 \psi_0 + T \sum_{a \neq 0, n} \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_a} \equiv \bar{\psi}_0 \psi_0 + N_1. \quad (14.25)$$

此时 $\bar{\psi}_0 \psi_0$ 便给出了凝聚的粒子数.

我们能够将 ψ_0 视作不含时的理由如下: 我们在构造泛函积分表述时引入时间的原因是量子理论里参与构造 Hamilton 量的算符一般不对易, 而将这个观察反过来便表明泛函积分中的动力学项反映了理论的量子特征. 进而我们在理论中将某些分量取为不含时便相当于把其对应的量子自由度换成了经典近似. 事实上也存在含时处理零模的方法, 不过这一方法的结果表明不含时的经典近似的确是一个合理的近似.

现在我们可以考虑存在相互作用的情况. 不妨将单粒子 Hamilton 量取作自由粒子的情况

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (14.26)$$

进而这一 Hamilton 量的基态是在空间上处处均匀的零动量态. 此时整个系统的 Bose-Einstein 凝聚态仍旧应该被时空均匀的零模 ψ_0 所描述, 并且对研究 Bose-Einstein 凝聚而言重要的部分为 (我们取了不含时的经典近似)

$$-\mu\bar{\psi}_0\psi_0 + \frac{g}{2L^d}(\bar{\psi}_0\psi_0)^2. \quad (14.27)$$

此时 $g > 0$ 的相互作用部分使得零模作用量的泛函积分在 $\mu = 0$ 时也是良定义的, 进而此时我们完全可以将零模也当做积分变量而予以处理. 计算泛函积分会给出一个依赖于化学势的配分函数 $\mathcal{Z}(\mu)$, 并且我们可以根据它导出粒子数并反过来根据粒子数约束化学势. 可以看到, 此时相互作用的存在让理论摆脱了自由情况下的病态行为; 这其实是玻色系统的一个典型特征. 特别的, 存在相互作用时理论在 $\mu > 0$ 时也可以是良定义的, 进而此时有可能出现 $\mu > 0$ 的情况.

我们在计算 ψ_0 部分的泛函积分时会发现这一部分并不是 Gauss 的, 因而无法精确计算. 但是 (14.27) 在指数上的积分在温度足够低时可以再次被鞍点法处理. 考虑其相对 ψ_0 的变分给出的

$$\bar{\psi}_0 \left(-\mu + \frac{g}{L^d} \bar{\psi}_0 \psi_0 \right) = 0, \quad (14.28)$$

而这一方程的非平凡解是任意模长为

$$|\psi_0| = \sqrt{\frac{\mu L^d}{g}} \equiv \gamma \quad (14.29)$$

的复标量场 ψ_0 . 这一结果有着非常深刻的物理意义:

- 在凝聚的临界温度以上时 $\mu < 0$, 进而此时我们只有平凡鞍点解 $\psi_0 = 0$, 并且这意味着系统基态不存在稳定的凝聚.
- 在临界温度以下 $\mu \geq 0$, 我们得到了非平凡鞍点解 $|\psi_0| = \gamma$, 并且系统基态存在一个 U(1) 简并.

基态的 U(1) 简并性意味着我们没法 naive 地套用鞍点法中的涨落 ansatz $\psi_0 \rightarrow \psi_0 + \delta\psi$, 因为此时不存在任何约束限制系统基态在 U(1) 轨道上的涨落小到能被微扰处理.

解决这一问题的关键是引入自发对称破缺机制. 对于一个有着全局连续对称性 G 的理论的基态, 我们可以设想出两种情况: 基态在 G 下不变, 或者基态在 G 下会变. 第一种情况下的基态不存在由一个连续对称性联系的简并并且可以被通常的鞍点法处理, 而第二种情况中系统的简并基态可以被 G 的一个子群 H 中的元素联系在一起; 此时系统的一个基态并没有继承完整理论的对称性.

存在自发对称破缺时系统基态沿 H 轨迹的涨落会给出无质量的 Goldstone 模式并会带来长程关联. 特别的, 这些模式几乎主导了系统的所有长程可观测量. 为了理解这些 Goldstone 模式的起源, 我们注意到对于存在 SSB 的系统基态 $|\psi_0\rangle$, 我们可以构造一个非均匀的变换 $g(\mathbf{r}) \equiv \exp\{i\phi_a(\mathbf{r})T^a\} \in G/H$ 并考虑 $g(\mathbf{r})|\psi_0\rangle$; 将这个态代入作用量便会发现它并不是系统的基态, 同时 $\phi_a(\mathbf{r})$ 给出的无质量的 Goldstone 玻色子. 进而我们发现 SSB 能够产生的 Goldstone 玻色子的数目正是陪集空间 G/H 的维数.

14.3.2 超流

我们现在考虑 Bogoliubov 提出的超流模型. 此时我们还是考虑相互作用 Bose 气 (14.20) 并在使 $\mu > 0$ 的临界温度 T_c 一下考虑将理论在平均场基态 $\psi_0 = \bar{\psi}_0 = \gamma$ 附近展开. 此时我们需要考虑在基态附近将场展开为

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{\rho} e^{i\phi(\mathbf{r}, \tau)}, \quad \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{\rho} e^{-i\phi(\mathbf{r}, \tau)}, \quad (14.30)$$

其中

$$\rho(\mathbf{r}, \tau) = \rho_0 + \delta\rho(\mathbf{r}, \tau), \quad \rho_0 = \frac{1}{L^d} \bar{\psi}_0 \psi_0. \quad (14.31)$$

$\delta\rho$ 会给出有质量模式而 ϕ 对应无质量模式. 这一场代换为泛函积分带来的 Jacobi 行列式为 1, 并且将其代入作用量后展开到二阶可得

$$S[\rho, \phi] \approx \int d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[i\delta\rho \partial_\tau \phi + \frac{\rho_0}{2m} (\nabla \phi)^2 + \frac{g\rho^2}{2} \right]. \quad (14.32)$$

积出 $\delta\rho$ 会给出 ϕ 的有效作用量

$$S[\phi] \approx \frac{1}{2} \int d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{g} (\partial_\tau \phi)^2 + \frac{\rho_0}{m} (\nabla \phi)^2 \right], \quad (14.33)$$

这恰好描述了谐振子并且其元激发的色散关系为

$$\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{g\rho_0}{m}} |\mathbf{k}|. \quad (14.34)$$

为了将这里的结果与超流体相联系, 我们考虑量子力学给出的粒子流算符

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{i}{2m} [(\nabla \bar{\psi})\psi - \bar{\psi}(\nabla \psi)] \approx \frac{\rho_0}{m} \nabla \phi(\mathbf{r}, \tau), \quad (14.35)$$

其中我们忽略了 $\delta\rho$ 涨落的贡献 (它们对应着正常流体的行为). 进而我们在研究系统的超流性时只需要关注 Goldstone 模式的梯度. 特别的, $S[\rho, \phi]$ 作用量的驻点给出的经典运动方程表明

$$i\partial_\tau \phi = -g\delta\rho + \mu, \quad i\partial_\tau(\delta\rho) = \frac{\rho_0}{m} \nabla^2 \phi = \nabla \cdot \mathbf{j}. \quad (14.36)$$

第一个方程表明密度涨落会带来相位变化, 第二个方程则表明非零的流散度伴随着密度涨落. 同时我们发现临界温度以下这组方程允许 $\delta\rho = 0, \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ 的非平凡 \mathbf{j} 的存在. 这在 ϕ 场有质量时是不可能的, 因而超流性与 Goldstone 模式密不可分. 同时注意到 ϕ 作为 U(1) 相位, 其取值范围是 $\mathbb{R} \bmod 2\pi$, 这会导致超流体中最为有趣的激发: 涡旋. 此时绕涡旋中心转动一圈后 ϕ 的值会增加 2π 的整数倍并会导致非常多可观测现象, 我们会在后面着重关心它.

我们可以从另一个更加微观的角度出发来理解超流性. 通常, 系统的耗散会阻止出现稳态的流, 因而参与形成这个流的粒子会和系统中其它组分粒子发生散射并产生能量耗散. 超流部分的存在意味着超流体内不存在能量耗散, 直观上能够避免这一现象的方式只有让系统有很高的激发能以至于超流载流子的能量不足以造成激发. 但我们在超流体中遇到的情况与之大不相同: 系统的准粒子激发谱和基态间不存在能隙, 其甚至是按 $|\mathbf{k}|$ 线性变化的! 对于这一现象, Landau 又建立了一个天才的唯象模型以解释线性的激发谱足以产生无耗散的稳态输运.

设想以均匀速度 \mathbf{V} 在管道里流动的流体并记流体一部分的质料为 M , 那么这一部分流体的动能便是

$$E_1 = \frac{1}{2} M \mathbf{V}^2. \quad (14.37)$$

流体参考系中管壁在以速度 $-\mathbf{V}$ 运动. 假设流体和管壁间的摩擦为我们考虑的部分创造了在流体系中一个动量 \mathbf{p} 能量 $\epsilon(\mathbf{p})$ 的准粒子激发, 那么我们回到地面系便有

$$E_2 = \frac{(\mathbf{p} + M\mathbf{V})^2}{2M} = \frac{M}{2} \mathbf{V}^2 + \mathbf{p} \cdot \mathbf{V} + \epsilon(\mathbf{p}). \quad (14.38)$$

由于应该有 $E_1 = E_2$, 故我们便有

$$\epsilon(\mathbf{p}) = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{V}. \quad (14.39)$$

由于 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{V} \geq -|\mathbf{p}||\mathbf{V}|$, 因而我们考虑的流体管壁摩擦只有在 $\epsilon(\mathbf{p}) \leq |\mathbf{p}||\mathbf{V}|$ 时才能出现. 这在 $\epsilon(\mathbf{p}) \sim \mathbf{p}^2$ 时总能成立, 而对于 $\epsilon(\mathbf{p} \rightarrow 0) = \text{const}$ 的有能隙色散和线性色散而言总存在一个临界速度 V_* 使得流体和管壁的摩擦不能产生准粒子激发, 进而速度低于 V_* 的流体会处于无耗散的超流态.

14.4 超导

14.4.1 BCS 理论

根据 BCS 理论, 超导性来自 Fermi 面附近的导电电子在等效的吸引相互作用下形成的有序态. 在足够低的温度下, 吸引相互作用会让电子气变得不再稳定并让 Fermi 面附近一对被时间反演变换相联系的态 $\mathbf{k} \uparrow$ 和 $-\mathbf{k} \downarrow$ 互相结合形成束缚态.

在传统的 BCS 理论中, 电子间的等效吸引相互作用来自声子的交换, 进而这一过程包含两个特征时标: 首先, Fermi 面附近的电子在晶格中运动并激发声子大约需要 $\sim E_F^{-1}$ 量级的时间; 其次, 声子的弛豫时间为 $\sim \omega_D^{-1}$ 量级 (ω_D 为 Debye 频率), 并且我们有 $\omega_D^{-1} \gg E_F^{-1}$. 这意味着在一个电子扰动晶格很长一段时间后, 另一个电子仍会受到前一电子扰动的影响. 这一推迟相互作用便带来了电子间的吸引相互作用, 并且这一相互作用的范围大约为 $\sim \omega_D$ 量级. 在铜基高温超导体中这一 Cooper 对产生机制至今仍处在争议之中, 但普遍的共识是其可能与自旋涨落有关. 由于一个 Cooper 对态包含两个电子, 因而这表现得像一个玻色子态. 在足够低的温度下, 这些赝玻色自由度会出现类似 BEC 的凝聚并带来超导现象.

为了定量地理解 BCS 理论, 我们可以考虑 BCS Hamilton 量

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} - \frac{g}{L^d} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow}. \quad (14.40)$$

其中 $g > 0$. 这一 Hamilton 量应该被诠释为刻画了 Fermi 面附近厚度为 $\mathcal{O}(\omega_D)$ 量级的壳层内的电子的有效 Hamilton 量.

Cooper 不稳定性 为了研究 Cooper 对在散射下的性质, 我们可以考虑如下四点关联函数

$$C(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}(\tau) \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, \downarrow}(\tau) \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow}(0) \psi_{-\mathbf{k}', \uparrow}(0) \rangle. \quad (14.41)$$

这描述了 Cooper 对 $|\mathbf{k} + \mathbf{q}, \uparrow; -\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ 在虚时间内向 $|\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \uparrow; -\mathbf{k}', \downarrow\rangle$ 的演化, 并且我们对初末态动量进行了平均. 我们可以将其根据周期性边界条件 Fourier 变换到频域上, 记玻色子 Matsubara 频率为 ω_m 后便可得到

$$C(q) = C(\mathbf{q}, \omega_m) = \frac{T^2}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow} \bar{\psi}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} \psi_{-\mathbf{k}', \uparrow} \rangle. \quad (14.42)$$

在使用微扰论计算上述关联函数会得到一系列 ladder diagrams, 并且进入这个图的两根 Green 函数分别携带动量 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 和 $-\mathbf{k}$. 对各阶 ladder diagram 求和会给出一个有效顶点函数 Γ_q , 并且根据类似 Dyson 方程的推导, 我们不难得到描述这一 Γ_q 的 Bethe-Salpeter 方程

$$\Gamma_q = g + \frac{gT}{L^d} \sum_p G_{p+q} G_{-q} \Gamma_q, \quad (14.43)$$

进而

$$\Gamma_q = \frac{g}{1 - \frac{gT}{L^d} \sum_p G_{p+q} G_{-p}}. \quad (14.44)$$

记自由 Green 函数里 $\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu \equiv \xi_{\mathbf{k}}$, 那么 Γ_q 里包含的对自由 Green 函数的求和为

$$\frac{T}{L^d} \sum_p G_{p+q} G_{-p} = \frac{1}{L^d} \sum_p \left(\frac{1}{2} - n_F(\xi_p) \right) \left(\frac{1}{i\omega_m + \xi_{p+q} + \xi_{-p}} + (\mathbf{q} \leftrightarrow -\mathbf{q}) \right). \quad (14.45)$$

对于 Cooper 对, 我们只需要考虑 $q = (0, 0)$ 的情况. 记 Fermi 面附近的态密度为 $\nu(\epsilon)$, 我们便可得到

$$\frac{T}{L^d} \sum_p G_p G_{-p} = \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \nu(\epsilon) \frac{1 - 2n_F(\epsilon)}{2\epsilon} \approx \nu(\varepsilon_F) \int_T^{\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} = \nu(\varepsilon_F) \ln \frac{\omega_D}{T}, \quad (14.46)$$

进而我们有

$$\Gamma_{(0,0)} \approx \frac{g}{1 - g\nu \ln \frac{\omega_D}{T}}. \quad (14.47)$$

我们可以注意到有效相互作用强度不仅和耦合常数 g 有关, 其还和态密度 ν 有关; 进而态密度足够大时极弱的耦合常数也能带来可观测的效应. 同时这一相互作用强度随着 ω_D 的增大和温度的降低都会变强; 特别的, 在

$$T = T_c = \omega_D e^{-\frac{1}{g\nu}} \quad (14.48)$$

时这一有效顶点会出现奇性, 进而这一临界温度下关联函数也会发散. 事实上, T_c 代表了向超导态的转变温度, 并且此时有效相互作用的发散意味着原先微扰论方法的失效. 事实上, 这一 Cooper 不稳定性意味着我们需要寻找新的微扰计算所基于的基态, 这其实就是强耦合 Cooper 对组成的基态.

Bogoliubov 平均场理论 我们现在仍从唯象的角度出发去描述超导体. 特别的, 我们假设临界温度以下理论的基态 $|\Omega_s\rangle$ 存在宏观量级的 Cooper 对凝聚, 进而我们可以假设粒子数算符 $\sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}$ 存在非零的真空期望并且我们记

$$\Delta = \frac{g}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Omega_s | c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} | \Omega_s \rangle, \quad \bar{\Delta} = \frac{g}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Omega_s | c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger | \Omega_s \rangle \quad (14.49)$$

我们假设 Δ 仅在临界温度 T_c 一下非零无异于称之为超导相变的序参量. 目前为止这只是一个假设, 而我们便需要通过理论验证这一假设的正确性. 现在我们可以将 BCS Hamilton 量中 $\mathbf{q} \neq 0$ 的部分略去并考虑平均场代换:

$$\sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} = \frac{L^d \Delta}{g} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}}_{\text{可忽略的涨落项}} - \frac{L^d \Delta}{g}, \quad (14.50)$$

进而我们可以将平均场近似后的巨正则 BCS Hamilton 量取作

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}} - (\bar{\Delta} c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} + \Delta c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger)] + \frac{L^d |\Delta|^2}{g}, \quad (14.51)$$

其中我们记 $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. 这个 Hamilton 量叫做 Bogoliubov 或者 Gor'kov Hamilton 量, 不过盎撒文献里常称之为 Bogoliubov-de Gennes Hamilton 量. 值得注意的是, 尽管这和 Hamilton 量是厄米的, 但是它并不和粒子数算符对易. 因此, 被它描述的系统粒子数并不守恒而能从真空中产生或湮灭粒子.

为了将这个 Hamilton 量对角化, 我们可以引入南部旋量

$$\Psi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (14.52)$$

那么整个巨正则 Hamilton 量可以被改写为

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta \\ -\bar{\Delta} & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} + \frac{L^d |\Delta|^2}{g}. \quad (14.53)$$

特别的, 此时我们能通过么正变换得到新的旋量 $\chi_{\mathbf{k}}$ 来将 Hamilton 量对角化:

$$\chi_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{k}} & \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ \sin \theta_{\mathbf{k}} & -\cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \equiv U_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (14.54)$$

进而由 $\chi_{\mathbf{k}}$ 描述的准粒子态包含由 $c_{\mathbf{k}}$ 描述的粒子和空穴态的线性组合. 我们总可以将 Δ 取作实数, 那么对角化所需的为

$$(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{\Delta}{\xi_{\mathbf{k}}}, \quad (14.55)$$

并且如果我们记

$$\lambda_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}, \quad (14.56)$$

Hamilton 量可以被对角化为

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \lambda_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - \lambda_{\mathbf{k}}) + \frac{\Delta^2 L^d}{g}. \quad (14.57)$$

这一理论中的元激发叫做 Bogoliubov 准粒子, 并且其能量存在一个最小值 Δ , 我们称之为能隙. 这一能隙的存在使得低温下系统很难被激发, 亦即其基态十分的稳定.

为了确定 Bogoliubov 准粒子基态的性质, 我们需要研究被所有准粒子湮灭算符 $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$ 所湮灭的真空态 $|\Omega_s\rangle$. 事实上, 根据 $\alpha_{\mathbf{k},\sigma}$ 作为费米子湮灭算符满足的反对易关系, 我们可以任取系统的一个态 $|\psi\rangle$ 并将满足条件的真空态构造为

$$|\Omega_s\rangle \equiv \prod_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k},\uparrow} \alpha_{-\mathbf{k},\downarrow} |\psi\rangle. \quad (14.58)$$

我们常常会将 $|\psi\rangle$ 取作 $c_{\mathbf{k},\sigma}$ 的真空态 $|\Omega\rangle$, 那么我们便会有

$$|\Omega_s\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (\cos \theta_{\mathbf{k}} - \sin \theta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger) |\Omega\rangle. \quad (14.59)$$

那么我们现在便能得到 Δ 满足的自洽方程

$$\Delta = \frac{g}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Omega_s | c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} | \Omega_s \rangle \approx \frac{g\Delta}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{\nu(\xi) d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}} = g\nu\Delta \sinh^{-1} \frac{\omega_D}{\Delta}. \quad (14.60)$$

进而我们得到

$$\Delta = \frac{\omega_D}{\sinh \frac{1}{g\nu}}. \quad (14.61)$$

我们发现与产生 Cooper 对的临界温度 T_c 有关的 $\frac{1}{g\nu}$ 项在这里也出现了.

我们现在可以考虑计算 Bogoliubov Hamilton 量激发态的谱密度:

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon) &= \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \delta(\varepsilon - \lambda_{\mathbf{k}}) = \int d\xi \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \delta(\xi - \xi_{\mathbf{k}}) \delta[\varepsilon - \lambda(\xi)] \\ &\approx \nu \sum_{s=\pm 1} \int_0^\infty d\xi \frac{\delta[\xi - s\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}]}{|\partial_\xi \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}|} = 2\nu \vartheta(\varepsilon - \Delta) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (14.62)$$

据此可以看到, 此时准粒子激发态集中在能隙上方附近.

现在 BCS 超导理论的物理图像已经被建立起来了: BCS Hamilton 量在低温以下 Cooper 不稳定性导致了 Cooper 对的凝聚, 而 Cooper 对作为准粒子, 其基态和激发态之间存在一个能隙. 我们可能会简单地将能隙的存在作为对超导电性的解释: 低能准粒子激发态的缺失使得外界电流能够无能量耗散地通过系统. 但是由于我们在先前的分析中直接将 Δ 取作了实数, 这一图像其实忽略了系统中相位的集体激发; 并且由于相位应该贡献出无质量 Goldstone 模式, 这一激发态应该会影响系统的物理行为. 事实上, 接下来用场论进行的对超导体的更细致的分析会揭示这一模式对其电磁特性的影响.

14.4.2 现代场论方法

使用现代多体理论研究 BCS 超导性的出发点是坐标空间表示中的 BCS Hamilton 量

$$\hat{H} = \int d^d \mathbf{r} c_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} (-i\nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi - \mu \right] c_\sigma(\mathbf{r}) - g \int d^d \mathbf{r} c_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) c_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) c_\downarrow(\mathbf{r}) c_\uparrow(\mathbf{r}), \quad (14.63)$$

其中我们默认对重复指标求和, 并且我们为理论耦合进了电磁势以研究其非平凡的电磁现象. 这一理论对应的配分函数便是

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] e^{-S[\bar{\psi}, \psi]}, \quad (14.64)$$

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \int d^d \mathbf{r} \left[\bar{\psi}_\sigma \left(\partial_\tau + ie\phi + \frac{1}{2m}(-i\nabla - e\mathbf{A})^2 - \mu \right) \psi_\sigma - g\bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow \psi_\downarrow \psi_\uparrow \right]. \quad (14.65)$$

注意这里的产生湮灭算符是电子, 因而 ψ 是 Grassmann 数.

此时理论中的四次相互作用项再次使得我们无法精确计算这一配分函数; 我们则可以引入复标量场 Δ 并考虑 Hubbard-Stratonovich 变换

$$\begin{aligned} & \exp \left(g \int d\tau d^d \mathbf{r} \bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow \psi_\downarrow \psi_\uparrow \right) \\ &= \int \mathcal{D}[\bar{\Delta}] \mathcal{D}[\Delta] \exp \left\{ - \int d\tau d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{g} |\Delta|^2 - (\bar{\Delta} \psi_\uparrow \psi_\downarrow + \Delta \bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (14.66)$$

我们再次引入南部旋量

$$\bar{\Psi} = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_\uparrow & \psi_\downarrow \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \bar{\psi}_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (14.67)$$

那么配分函数可以被写作

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\bar{\Delta}] \mathcal{D}[\Delta] \exp \left[- \int d\tau d^d \mathbf{r} \left(\frac{1}{g} |\Delta|^2 - \bar{\Psi} \mathcal{G}^{-1} \Psi \right) \right], \quad (14.68)$$

其中

$$\mathcal{G}^{-1} = \begin{pmatrix} [G_0^{(p)}]^{-1} & \Delta \\ \bar{\Delta} & [G_0^{(h)}]^{-1} \end{pmatrix}, \quad (14.69)$$

并且

$$[G_0^{(p)}]^{-1} = -\partial_\tau - ie\phi - \frac{1}{2m}(-i\nabla - e\mathbf{A})^2 + \mu, \quad (14.70)$$

$$[G_0^{(h)}]^{-1} = -\partial_\tau + ie\phi + \frac{1}{2m}(+i\nabla - e\mathbf{A})^2 - \mu, \quad (14.71)$$

分别对应无相互作用粒子和空穴的 Green 函数, 我们称 \mathcal{G}^{-1} 为 Gor'kov Green 函数. 积出南部旋量后, 我们便得到了配分函数的等价表达式

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\Delta}] \mathcal{D}[\Delta] \exp \left(\ln(\det \mathcal{G}^{-1}) - \frac{1}{g} \int d\tau d^d \mathbf{r} |\Delta|^2 \right). \quad (14.72)$$

接下来的套路便是分析这一有效作用量的驻点并进行平均场分析. 如果假设 Δ 场的驻点构型 Δ_0 在时空上均匀分布, 那么我们可以在忽略电磁场时得到自洽方程

$$\frac{1}{g} \bar{\Delta}_0 = \frac{T}{L^d} \sum_{\mathbf{p}, n} \frac{\bar{\Delta}_0}{\omega_n^2 + \xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta_0|^2}. \quad (14.73)$$

仍定义 $\lambda_{\mathbf{p}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{p}}^2 + |\Delta_0|^2}$, 对玻色子 Matsubara 频率进行 Matsubara 求和后便有

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1 - 2n_F(\lambda_{\mathbf{p}})}{2\lambda_{\mathbf{p}}}. \quad (14.74)$$

考虑到吸引相互作用的范围为 Fermi 面附近 $\pm\omega_D$ 的区域, 我们便能据此得到 BCS 能隙方程

$$\frac{1}{g\nu} = \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh \frac{\lambda(\xi)}{2T}}{\lambda(\xi)}. \quad (14.75)$$

这一方程决定了 BCS 能隙的大小, 并且我们可以据此得到 BCS 超导相变作为一类二阶相变的临界温度满足

$$T_c \propto \omega_D e^{-\frac{1}{g\nu}}; \quad (14.76)$$

并且在临界温度 T_c 一下, 平均场能隙满足

$$\Delta_0 \propto \sqrt{T_c(T_c - T)}. \quad (14.77)$$

Ginzburg-Landau 理论 现在我们仔细考察临界温度附近的超导相变. 此时能隙参量 $\Delta \ll 1$, 并且我们可以考虑微扰展开其有效作用量. 如果我们将有效作用量中的 $\ln(\det \mathcal{G}^{-1})$ 展开到 Δ 的二阶, 那么我们会得到

$$S^{(2)}[\Delta, \bar{\Delta}] = \int d\tau d^d \mathbf{r} \frac{r(T)}{2} |\Delta|^2 + \mathcal{O}(\partial\Delta, \partial_\tau \Delta), \quad (14.78)$$

其中我们略去了和时空梯度有关的项, 并且这里 $r(T) \sim T - T_c$. 可以看到, 临界温度以下时这一项是不稳定的, 我们必须考虑四次项的贡献以确保有效路径积分的稳定性. 事实上, 我们可以得到 $2n$ 阶展开项的形式满足

$$S^{(2n)} = \text{const} \times \nu T \left(\frac{|\Delta|}{T} \right)^{2n}, \quad (14.79)$$

其中 const 仅指代一些对整体物理行为不重要的常数因子. 于是我们可以得到临界点附近展开到 $\mathcal{O}(\Delta^4)$ 的有效作用量

$$S[\Delta, \bar{\Delta}] = \int d\tau d^d \mathbf{r} \left[\frac{r(T)}{2} \bar{\Delta} \Delta + u(\Delta \bar{\Delta})^2 + \mathcal{O}(\partial\Delta, \partial_\tau \Delta, |\Delta|^6) \right]. \quad (14.80)$$

事实上, 我们也可以计算出空间涨落的贡献并得到

$$S[\Delta, \bar{\Delta}] = \beta \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{r(T)}{2} \bar{\Delta} \Delta + \frac{c}{2} |\partial\Delta|^2 + u(\Delta \bar{\Delta})^2 \right], \quad (14.81)$$

我们常称这个为 (经典)Ginzburg-Landau 作用量: "经典" 一词来自我们忽略了序参量场的虚时依赖性.

这一有效作用量的形式明确建立起了超导和超流的联系. $T > T_c$ 时, 系统的基态就是 $\Delta_0 = 0$; 但是 $T < T_c$ 时, 序参量的基态存在非零的真空期望

$$|\Delta_0| = \sqrt{\frac{-r}{4u}} \sim \sqrt{T_c(T_c - T)}. \quad (14.82)$$

但是临界温度以下的自发对称破缺仅确定了序参量场的模长, 其复相位则会在 SSB 后的理论中带来 Goldstone 玻色子. 进而我们会简单地以为这里与超流类似, 这些 Goldstone 玻色子的激发应该有着线性的色散关系, 进而此时系统中会存在带电粒子的无耗散超流态. 但问题是超流中破缺的是全局 $U(1)$ 对称性, 而超导理论则有着局域的 $U(1)$ 规范对称性: 这一差异会让两个理论产生迥异的现象.

Goldstone 模式的贡献 超导现象中 $U(1)$ 规范对称性的地位只有在引入电磁场后才能得到彰显. 我们假设电磁场足够微弱以至于其不会破坏超导性. 我们可以从 (18.72) 出发再次进行平均场分析以及在驻点附近对场构形进行展开以得到耦合进电磁场的有效作用量, 但是我们可以从对称性的考虑出发直接约束出 Goldstone 模式 (复相位 θ) 的有效理论.

首先, Goldstone 模式有着平移对称性, 因而 θ 的有效作用量在 $\theta \rightarrow \text{const}$ 的极限下消失; 同时我们假设相位涨落很小, 因此我们只需要考虑有效作用量展开式中的头几阶项; 同时系统的空间旋转对称性和局域规范对称性必须在有效作用量中得到展现. 如果不考虑电磁场, 那么最低阶的有效作用量为

$$S[\theta] = \int d\tau d^d \mathbf{r} [c_1 (\partial_\tau \theta)^2 + c_2 (\nabla \theta)^2]. \quad (14.83)$$

而为了协调存在电磁场时的规范不变性, 我们只需要进行 minimal substitution 并得到 (取 $e = 1$)

$$S[\theta, A] = \int d\tau d^d \mathbf{r} [c_1 (\partial_\tau \theta + \phi)^2 + c_2 (\nabla \theta - \mathbf{A})^2]. \quad (14.84)$$

当然, 为了确定 c_1, c_2 的值, 我们必须诉诸从微观理论出发的严格计算 (计算细节参考原书), 并且我们会得到

$$c_1 = \nu, \quad c_2 = \frac{n_s}{2m}, \quad (14.85)$$

其中 n_s 为 Cooper 对凝聚的密度.

这一有效作用量可以解释超导体的 Meissner 效应并且展示了 Higgs-Anderson 机制. 事实上, 物理上最确切的对超导性的定义应该为宏观数量的带电粒子的量子相位被锁定为了一个集体自由度. 这一定义直接在有效作用量 (14.84) 中得到了体现: Cooper 对凝聚体的相位的涨落所需的能量的源于量子效应的部分正比于凝聚的密度. 我们先来考虑一个简单情况: 假设现在的温度低于超导临界温度但又足够高以至于我们可以忽略相位涨落的量子部分 $\partial_\tau \theta$, 同时我们假设系统中仅存在磁场, 进而 $\phi = 0$, $\partial_\tau \mathbf{A} = 0$.

引入电磁场的动能项, 我们可以得到简化的有效作用量

$$S[\mathbf{A}, \theta] = \frac{\beta}{2} \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{n_s}{m} (\nabla \theta - \mathbf{A})^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right]. \quad (14.86)$$

在泛函积分中积出 θ 场会给出一个矢势的有效作用量

$$S[\mathbf{A}] = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{n_s}{m} \left(\mathbf{A}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}_{-\mathbf{q}} - \frac{(\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{-\mathbf{q}})}{q^2} \right) + (\mathbf{q} \times \mathbf{A}_{\mathbf{q}}) \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{A}_{-\mathbf{q}}) \right]. \quad (14.87)$$

如果我们将矢势分为横向和纵向部分

$$\mathbf{A}_{\mathbf{q}} = \underbrace{\mathbf{A}_{\mathbf{q}} - \frac{\mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}})}{q^2}}_{\mathbf{A}_{\mathbf{q}}^\perp} + \underbrace{\frac{\mathbf{q}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}})}{q^2}}_{\mathbf{A}_{\mathbf{q}}^\parallel}, \quad (14.88)$$

那么我们会看到仅由横向部分是规范不变的, 并且有效作用量可以被写作

$$S[\mathbf{A}] = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{n_s}{m} + q^2 \right) \mathbf{A}_{\mathbf{q}}^\perp \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}^\perp. \quad (14.89)$$

电磁场在超导体中的有效作用量出现了一个质量项! 事实上, 这一过程完全类似于 Higgs 玻色子自发对称破缺并为电弱玻色子赋予质量的 Higgs 机制, 而在凝聚态物理的语境中这便叫做 Anderson-Higgs 机制.

我们现在可以直接得到超导体中电磁场的运动方程

$$\left(\frac{n_s}{m} - \nabla^2\right) \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0, \quad (14.90)$$

对其求旋度便给出了描述超导体中磁场行为的 London 方程

$$\left(\frac{n_s}{m} - \nabla^2\right) \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0. \quad (14.91)$$

显然它的解会呈现指数衰减, 因此我们便从理论上解释了 Meissner 效应: 超导体内部无法存在磁场. 同时我们不难发现磁场从真空进入超导体后的衰减表现为 $\mathbf{B}(x) \sim \mathbf{B}_0 e^{-x/\lambda}$, 其中

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{n_s}} \quad (14.92)$$

为穿透深度.

Meissner 效应的物理图像为表现出完全抗磁性的超导体在被施加磁场时会在内部产生抵消外磁场的抗磁电流. 注意到场论中矢势与电流密度相耦合以进入作用量中, 因而为了得到电流密度, 我们只需要取作用量对 \mathbf{A} 的变分并且会得到

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} \int d^d \mathbf{r} \frac{n_s}{2m} \mathbf{A}^2 = \frac{n_s}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (14.93)$$

此即第二 London 方程, 它表明超导体内的抗磁电流密度正比于 \mathbf{A} , 同时二者遵循相似的运动方程. 因此, 超导体内的抗磁电流密度也表现为指数衰减. 为了揭示超导体的零电阻性, 我们可以选择规范使得电场为

$$\mathbf{E} = -i\partial_\tau \mathbf{A}, \quad (14.94)$$

进而对 London 第二方程取时间导数便得到

$$\partial_t \mathbf{j} = \frac{n_s}{m} \mathbf{E}. \quad (14.95)$$

这表明电场的存在会导致电流密度随时间的无耗散线性增长, 并且此时系统电阻率为零. 这一无界的生长自然是不物理的, 这恰恰表明超导体内不能存在非零的电磁场梯度.

如果我们要研究磁场更强时的情况, 那么我们必须仔细考察耦合了磁场的包含序参量相位和幅值的 Ginzburg-Landau 作用量. 此时我们根据 minimal substitution 可以立即得到

$$S[\Delta, \bar{\Delta}] = \beta \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{r}{2} |\Delta|^2 + \frac{c}{2} |(\nabla - 2i\mathbf{A})\Delta|^2 + g|\Delta|^4 \right], \quad (14.96)$$

并且变分可得平均场构形满足

$$[r + c(-i\nabla - 2\mathbf{A})^2 + 4g|\Delta|^2]\Delta = 0. \quad (14.97)$$

假设我们处于临界温度以下, 那么出现超导相要求这一方程有着非零解. 由于第三项的贡献是正的, 我们便需要要求前两项贡献之和为负值, 进而我们便要求 $(-i\nabla - 2\mathbf{A})^2$ 的本征

值小于 $|r|/c$. $(-i\nabla - 2\mathbf{A})^2$ 在形式上就是质量 $m = 1/2$, 电荷 $q = 2$ 的粒子在均匀磁场中的动能算符, 其本征值为 Landau 能级

$$E_n = \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \omega_c = \frac{qB}{m} = 4B. \quad (14.98)$$

因而出现在超导态的条件便是 $|r|/c$ 大于最低 Landau 能级, 故我们得到了临界磁场强度

$$B < B_{c2} \equiv \frac{|r|}{2c}. \quad (14.99)$$

磁场强度大于 B_{c2} 时超导性会被完全破坏. 对于第二类超导体, 当磁场强度满足 $B_{c1} < B < B_{c2}$ 时超导体中会出现磁场强度大于 B_{c1} 但是小于 B_{c2} 的存在通量量子化的涡旋管. 这些 Abrikosov 涡旋常常排列为三角形涡旋晶格. 在涡旋管的内部, 超导序参量被压制并且材料表现为常规导体; 但在其外部材料仍表现为超导相.

14.5 无序电子气的场论

现实中不可能存在没有缺陷或杂质污染的材料, 进而在考察一个电子输运问题时必须仔细考虑无序性是否会严重影响我们感兴趣的问题, 并且当无序性对所研究的问题至关重要时我们必须使用恰当的解析工具来纳入这些现象. 例如, 杂质的散射可以被微扰论所处理, 而 Anderson 局域化, 量子 Hall 效应以及相互作用多体系统中的无序性等现象则需要被非微扰的场论方法所处理. 我们本节便会介绍处理无序电子气的一般性方法, 并且它可以同时向微扰和非微扰的方向发展.

但是在 shut up and calculate 之前, 我们必须考虑一个训诂学问题: 什么叫做无序电子气的一个"理论". 显然, 就算我们把电子间的相互作用关掉, 我们也不可能对包含杂质势的随机单电子 Schrödinger 方程进行精确对角化. 我们能做的只有发展以及统计意义上的方法并使用杂质势的强度, 势涨落的尺度等普适的参量来刻画杂质的影响. 因此, 我们会考虑由各种可能出现的杂质分布方式组成的系综并计算感兴趣的观测量的系综平均.

为了引入杂质的影响, 我们可以记位于 \mathbf{r}_i 处的杂质的势为 $V_{\text{imp}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, 进而系统中杂质分布会带来总势场

$$V(\mathbf{r}) = \sum_i V_{\text{imp}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (14.100)$$

在古早的文献里人们会直接把对无序性的系综平均取作对这些杂质坐标的平均, 即

$$\langle \cdots \rangle_{\text{disorder}} = \frac{1}{L^{Nd}} \int \prod_{i=1}^N d^d \mathbf{r}_i (\cdots), \quad (14.101)$$

但是这一方法不能很好的兼容泛函积分. 人们在比较现代的做法中会认为势函数 V 满足某个泛函概率分布 $P[V]$ 并将系综平均取作

$$\langle \cdots \rangle_{\text{disorder}} = \int \mathcal{D}[V] P[V] (\cdots). \quad (14.102)$$

在大多数情况下人们常可以取

$$P[V] \propto \exp \left[-\frac{1}{2\gamma^2} \int d^d \mathbf{r}_1 d^d \mathbf{r}_2 V(\mathbf{r}_1) K^{-1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) \right], \quad (14.103)$$

其中 γ 刻画了势的强度而 K 描述了无序势空间涨落的关联函数:

$$\langle V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') \rangle_{\text{disorder}} = \gamma^2 K(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (14.104)$$

特别的, 很多时候我们会发现无序势的有限大关联长度也不是很重要, 进而我们会直接取 $K(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$, 这便会给出

$$P[V] \propto \exp \left[-\frac{1}{2\gamma^2} \int d^d \mathbf{r} V^2(\mathbf{r}) \right], \quad (14.105)$$

事实上, 很多时候无序势的微观细节并不会对无序为长程物理带来的效应产生显著影响, 因而在我们选择 $P[V]$ 时往往有着相当的自由度.

我们在无序电子气理论中的目标便是计算一个可观测量

$$\mathcal{O} = - \left. \frac{\delta}{\delta J} \ln Z \right|_{J=0} \quad (14.106)$$

在无序系综中的期望 $\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{disorder}}$. 如果我们先做泛函导数再做系综平均, 那么我们需要计算的泛函积分将形如

$$- \int \mathcal{D}[V] P[V] \left. \frac{1}{Z} \frac{\delta}{\delta J} Z \right|_{J=0}, \quad (14.107)$$

此处分母上的配分函数使得这种表达式常常很难计算.

目前规避分母出现的方式主要有三种: 超对称方法, Keldysh 方法和复本方法. 这三种方法的共性为它们都修改了配分函数的定义使得:

1. $Z[J]$ 的代数结构大体不变.
2. (14.106) 仍然成立.
3. 取归一化 $Z[J=0] = 1$, 进而在无序系综上对可观测量进行平均时分母不再出现.

由于无序性往往会以线性项的形式出现在 Hamilton 量中, 进而在这些方法中我们最后需要计算的泛函积分往往是 V 的线性函数并且问题会得到大大简化.

我们现在主要关注最为简单的复本方法. 我们可以考虑配分函数的 R 次幂 Z^R , 并且在 R 为正整数时我们可以将这个视为 R 个原系统的拷贝组成的大系统的配分函数, 并且我们有如下形式关系

$$\langle \mathcal{O} \rangle = - \frac{\delta}{\delta J} \ln Z[J] = - \frac{\delta}{\delta J} \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} (e^{R \ln Z} - 1) = - \frac{\delta}{\delta J} \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} Z^R[J]. \quad (14.108)$$

这一方法的主要问题在于我们计算到最后需要将 R 从正整数延拓到零, 但是我们并不能确定我们期待的结果在延拓过程中能保持解析性; 因而这一方法只能算一个方法而不是一个理论. 不过神奇的是这个方法只对很少一部分例子失效, 并且对于无序性能被微扰处理的情况而言复本方法大多数时候都是可行的.

14.5.1 复本场论

按照复本方法, 我们现在需要计算的便是复本配分函数

$$Z^R[J] = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] \exp\left(-\sum_{a=1}^R S[\psi^a, \bar{\psi}^a, J]\right), \quad (14.109)$$

其中 ψ^a 为刻画电子的 Grassmann 变量, 并且泛函积分测度为

$$\mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] = \prod_{a=1}^R \mathcal{D}[\bar{\psi}^a] \mathcal{D}[\psi^a]. \quad (14.110)$$

这里的作用量可以被分解为三部分:

$$S[\psi^a, \bar{\psi}^a, J] = S_0[\psi^a, \bar{\psi}^a] + S_{\text{int}}[\psi^a, \bar{\psi}^a] + S_s[\psi^a, \bar{\psi}^a, J], \quad (14.111)$$

其中

$$S_0[\psi^a, \bar{\psi}^a] = \sum_n \int d^d \mathbf{r} \bar{\psi}_n^a(\mathbf{r}) \left[-i\omega_n - \frac{\nabla^2}{2m} - E_F + V(\mathbf{r}) \right] \psi_n^a(\mathbf{r}) \quad (14.112)$$

为各个副本中不存在电子间相互作用的电子-杂质相互作用项, S_{int} 为电子-电子相互作用项而 S_s 为生成泛函中的含源项. 值得注意的是源 J 在各个副本中都是相同的, 并且这里的作用量是副本对角的: 不同副本里的场不会相互作用.

形式上记我们感兴趣的某个可观测量为

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi) \rangle_\psi = -\frac{\delta}{\delta J} \ln Z[J] \Big|_{J=0}, \quad (14.113)$$

进而在复本方法里可观测量的无序期望值便是

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} \sum_{a=1}^R \langle \mathcal{O}(\bar{\psi}^a, \psi^a) \rangle_\psi, \quad (14.114)$$

其中我们假设了 $Z[J=0] = 1$.

如果我们积出了 V , 那么复本配分函数将形如

$$\langle Z^R[J] \rangle_{\text{disorder}} = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}] \mathcal{D}[\psi] \exp\left(-\sum_{a=1}^R S_{V=0}[\psi^a, \bar{\psi}^a, J] - \sum_{a,b=1}^R S_{\text{dis}}[\psi^a, \psi^b, \bar{\psi}^a, \bar{\psi}^b]\right), \quad (14.115)$$

其中 $S_{V=0}[\psi^a, \bar{\psi}^a, J]$ 为不存在无序时各个副本的作用量, 而

$$S_{\text{dis}}[\psi^a, \psi^b, \bar{\psi}^a, \bar{\psi}^b] \equiv -\frac{\gamma^2}{2} \sum_{m,n} \int d^d \mathbf{r} \bar{\psi}_m^a(\mathbf{r}) \psi_m^a(\mathbf{r}) \bar{\psi}_n^b(\mathbf{r}) \psi_n^b(\mathbf{r}) \quad (14.116)$$

则是积出了杂质产生的副本间相互作用项.

14.5.2 杂质散射

刻画电子被静态杂质散射的特征时间为弹性散射时间 τ . 不少人都简单地将之理解为电子在杂质间隔内运动的平均时间, 但这种解释是相当具有误导性的: 例如, 污染一个系统的往往是非常稠密但是对电子的散射非常弱的杂质, 那么此时弹性散射时间往往会大于粒子在相邻杂质间运动的平均时间; 甚至很多时候对电子造成影响的杂质位于材料之外, 并且电子只会被杂质产生的微弱 Coulomb 势所散射, 因而此时粒子和杂质的碰撞甚至不是良定义的.

为了更确切地定义弹性散射时间, 我们考虑粒子在时间 t 内由 \mathbf{x} 跃迁至 \mathbf{y} 的量子力学概率幅

$$U(\mathbf{y}, \mathbf{x}; t) \equiv \langle \mathbf{y} | e^{-iHt} | \mathbf{x} \rangle. \quad (14.117)$$

如果系统存在无序性, 那么 \mathbf{x}, \mathbf{y} 相距很远时这一概率幅应该会表现得像一个依赖于杂质构型的统计分布的随机变量并且我们可以考虑它在无序系综上的期望 $\langle U(\mathbf{y}, \mathbf{x}; t) \rangle_{\text{disorder}}$. 我们会期待对无序进行平均后系统能够恢复平移不变性, 并且各个缺陷处的散射带来的随机相位互相抵消会使得跃迁振幅在长程处渐进指数衰减, 进而此时一般会有

$$\langle U(\mathbf{y}, \mathbf{x}; t) \rangle_{\text{disorder}} \sim \exp\left(-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{2\ell}\right), \quad (14.118)$$

这里的 ℓ 便能被定义为弹性平均自由程, 而 $\tau \equiv \ell/v_F$ 便是弹性散射时间. 我们再次强调, 只有在散射中心的分布非常稀薄并且各个散射中心对电子的散射效应很强时这一时间才能被认为是电子在杂质间运动的平均时间.

我们现在来具体计算一下跃迁概率幅以更定量地研究杂质对其影响. 特别的, 量子力学的跃迁概率对应着有限温场论里的虚时 Green 函数

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) = \langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \bar{\psi}(\mathbf{y}, 0) \rangle_{\psi}, \quad (14.119)$$

并且我们可以在动量空间中引入费米子 Matsubara 频率而将其写作

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) = \frac{T}{L^d} \sum_{n, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} e^{-i\omega_n \tau + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{y}} G(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \omega_n), \quad (14.120)$$

其中

$$G(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \omega_n) = \langle \psi_{n, \mathbf{p}} \bar{\psi}_{n, \mathbf{p}'} \rangle_{\psi}. \quad (14.121)$$

在我们对假设的按 Gauss 分布采样的无序性做平均后根据复本场论便可以得到

$$\langle G_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'; n} \rangle_{\text{disorder}} = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} \sum_{a=1}^R \langle \psi_{n, \mathbf{p}}^a \bar{\psi}_{n, \mathbf{p}'}^a \rangle_{\psi} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'}. \quad (14.122)$$

这里 $\langle \psi_{n, \mathbf{p}}^a \bar{\psi}_{n, \mathbf{p}'}^a \rangle_{\psi}$ 是对包含复本间相互作用的 (14.115) 中的作用量求的期望: 现在我们要做的便是微扰地计算这样的两点函数.

注意作用量中的动能项可以被写作

$$S_{V=0}[\psi^a, \bar{\psi}^a] = \sum_{n, \mathbf{p}} \bar{\psi}_{n, \mathbf{p}}^a \left(-i\omega_n + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - E_F \right) \psi_{n, \mathbf{p}}^a, \quad (14.123)$$

进而各个复本场的自由 Green 函数为

$$G_{0,p} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_p}, \quad (14.124)$$

其中我们记 $p = (\omega, \mathbf{p})$ 并且 $\xi_p = \frac{p^2}{2m} - E_F$. 根据 Dyson 方式, 我们只需要按 γ^2 的各阶计算单粒子不可约 amputated diagrams 来得到自能项并计算 dressed Green 函数. 总之在经过一系列计算后我们会近似得到

$$\langle G_p \rangle_{\text{disorder}} = \frac{1}{i\omega_n + E_F - \frac{p^2}{2m} + \frac{i}{2\tau} \text{sgn}(\omega_n)}, \quad \tau \equiv \frac{1}{2\pi\nu_F\gamma^2}. \quad (14.125)$$

我们做反变换到实空间中便会得到这一无序 Green 函数的长程行为表现为

$$\langle G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) \rangle_{\text{disorder}} = G_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) e^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{2\ell}}, \quad \ell \equiv \tau v_F, \quad (14.126)$$

其中 $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau)$ 为干净系统中自由电子 Green 函数. 这显然是一个短程 Green 函数, 不过我们马上就会看到, 无序系统中的两粒子 Green 函数会表现出和密度弛豫有关的长程关联, 并且这为我们提供了一个探索介观尺度量子干涉的机制的方法.

14.5.3 扩散

如果我们想要研究系统中电子密度涨落 $\delta\hat{\rho}(\tau, \mathbf{r}) \equiv \hat{\rho}(\tau, \mathbf{r}) - \langle \hat{\rho}(\tau, \mathbf{r}) \rangle$ 的弛豫行为, 那么我们便需要考察关联函数

$$D(\tau, \mathbf{r}) = \langle \delta\hat{\rho}(\tau, \mathbf{r}) \delta\hat{\rho}(0, 0) \rangle, \quad (14.127)$$

在无序系统中我们只需要将上式推广为

$$D(\tau, \mathbf{r}) = \langle \langle \delta\hat{\rho}(\tau, \mathbf{r}) \delta\hat{\rho}(0, 0) \rangle \rangle_{\text{disorder}}. \quad (14.128)$$

此时我们的计算策略和前一节别无二致. 根据复本场论, 我们需要计算的配分函数为

$$D(x) = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} \sum_{a,b} \left\langle \bar{\psi}^a(x) \psi^a(x) \bar{\psi}^b(0) \psi^b(0) \right\rangle_{\psi}, \quad (14.129)$$

在复本极限下有着非平凡贡献的项满足 $a = b$, 进而我们在动量空间中有

$$D(\omega_m, \mathbf{q}) = \frac{T}{L^d} \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} \sum_a \sum_{\omega_n, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2} \left\langle \bar{\psi}_{\omega_n, \mathbf{p}_1}^a \psi_{\omega_{n+m}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^a \bar{\psi}_{\omega_{n+m}, \mathbf{p}_2 + \mathbf{q}}^a \psi_{\omega_n, \mathbf{p}_2}^a \right\rangle_{\psi}. \quad (14.130)$$

为了处理这里的四点函数, 我们可以根据 amputated 单粒子不可约 ladder 图计算有效顶点函数进而使用 Bethe-Salpeter 方程进行重求和, 并且我们可以近似得到有效顶点函数为

$$\Gamma_q = \frac{1}{2\pi\nu\tau^2 L^d} \frac{1}{\omega_m + Dq^2}, \quad (14.131)$$

其中 $D \equiv \frac{v_F \ell}{d}$ 为扩散常数. 我们进而可以得到

$$D_q = \frac{\nu D q^2}{|\omega_m| + D q^2}, \quad (14.132)$$

特别的, 我们发现这里的传播子不存在质量项, 因而其关联行为是长程的.

14.5.4 平均场理论和自发对称破缺

我们已经谈到, 无序电子气中的单粒子 Green 函数会因为杂质散射而指数衰减而四点函数会表现 diffusion 和 cooperon 模式弛豫的长程行为, 而后者其实和系统的时间反演不变性有关. 对无序电子气的更完备的描述应该能更详细地刻画 diffusion 和 cooperon 模式的自由度, 而 Hubbard-Stratonovich 变换便能让我们根据完整理论构造出以这两个模式为基本场变量的低能有效场论.

我们现在的目标还是选择合适的 Hubbard-Stratonovich 变换来移除复本有效作用量中的 ψ^4 -相互作用项. 我们选择引入两个 Hubbard-Stratonovich 场来分别刻画 direct channel 和 ‘Cooper channel’ 的自由度. 不过我们可以注意到 diffusion 和 cooperon 模式之间仅相差一个时间反演变换, 因此事实上一个 H-S 场就能解决这个问题. 特别的, 我们可以引入新的场变量

$$\Psi(\tau) \equiv \begin{pmatrix} \psi(\tau) \\ \bar{\psi}^T(-\tau) \end{pmatrix}, \quad \bar{\Psi}(\tau) = \begin{pmatrix} \bar{\psi}(\tau) - \psi^T(-\tau) \end{pmatrix} = -\Psi^T(-\tau)(i\sigma_2). \quad (14.133)$$

略去 replica 指标, 我们可以将作用量改写为

$$S[\Psi] = \frac{1}{2} \int d\tau d^d \mathbf{r} \bar{\Psi} \left(\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2m} - E_F \right) \Psi + \frac{1}{16\pi\nu_F\tau} \int d\tau d\tau' (\bar{\Psi}\Psi)(\tau) (\bar{\Psi}\Psi)(\tau'). \quad (14.134)$$

现在引入与 $\Psi^\alpha(\tau)\bar{\Psi}^\beta(\tau')$ 有着类似结构的厄米矩阵场 $Q^{\alpha\beta}(\mathbf{r}; \tau, \tau')$ 并定义

$$\text{tr} Q^2 \equiv \int d\tau d\tau' Q^{\alpha\beta}(\tau, \tau') Q^{*\beta\alpha}(\tau', \tau), \quad (14.135)$$

我们可以根据

$$\int \mathcal{D}[Q] \exp \left[-\frac{\pi\nu_F}{8\tau} \int d^d \mathbf{r} \text{tr} \left(Q + \frac{i\Psi^{(1)}\bar{\Psi}^{(1)}}{\pi\nu_F} \right)^2 \right] \quad (14.136)$$

进行 Hubbard-Stratonovich 变换并得到有效作用量

$$S[Q] = \frac{\pi\nu L^d}{8\tau} \sum_{\mathbf{q}} \text{tr}[Q(\mathbf{q})Q(-\mathbf{q})] - \frac{1}{2} \text{tr} \ln \hat{G}^{-1}[Q], \quad (14.137)$$

其中

$$\hat{G}^{-1}[Q] \equiv \left(i\omega - \xi_{\mathbf{q}} + \frac{iQ}{2\tau} \right)^{-1}, \quad (14.138)$$

其中没有写出的指标都被求了迹. 这里的平均场方程便满足

$$\pi\nu Q(\mathbf{q}) - \frac{i}{L^d} \sum_{\mathbf{p}} \hat{G}[Q]_{\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q}} = 0. \quad (14.139)$$

在领头阶近似下, 我们可以解出 \hat{G} 恰好对应着杂质散射的 Green 函数.

为了得到能够反映长程扩散现象的有效场论, 我们需要注意原理论以 $\text{Sp}(4RM)$ 为近似对称性, 其中 $2M$ 为这一对称群表示算符与 Matsubara 频率算符近似对易的 Matsubara 频率数. 而保持平均场构型不变的子群为 $\text{Sp}(2RM) \times \text{Sp}(2RM)$, 进而这一理论的基态其实

存在自发对称破缺并且 Goldstone 模式由陪集空间 $\text{Sp}(4RM)/(\text{Sp}(2RM) \times \text{Sp}(2RM))$ 刻画: 这一理论中存在长程的 Goldstone 模式.

我们可以根据 $T \in \text{Sp}(4RM)$ 以及平均场构型 Λ 生成 Goldstone 模式 $Q = T\Lambda T^{-1}$. 我们可以将它代入作用量中并展开得到其有效理论. 总之, 最后我们发现其低能有效理论由非线性 σ -模型所刻画:

$$S[Q] = \frac{\pi\nu}{2} \int d^d \mathbf{r} \, \text{tr} \left[\frac{D}{4} (\nabla Q)^2 - \hat{\omega} Q \right]. \quad (14.140)$$

通常我们会对这一系统和电磁场的耦合感兴趣, 此时我们只需要根据规范不变性做 minimal substitution 而得到

$$S[Q] = \frac{\pi\nu}{2} \int d^d \mathbf{r} \, \text{tr} \left[\frac{D}{4} [(\nabla - i[\mathbf{A}, \cdot])Q]^2 - (\hat{\omega} + V)Q \right]. \quad (14.141)$$

15 重整化群

重整化群能够让我们研究相互作用理论中微扰方法失效的情况, 而这一方法本质上是通过积出短程涨落来得到长程涨落的有效理论. 在具体进行这一操作时, 我们常常会积出小于我们感兴趣的尺度 L 的物理过程, 并且我们得到的长程有效理论中的耦合常数也都会被这个尺度重整化.

15.1 一维 Ising 模型

为了初等地展示重整化群的技术, 我们考虑一维 Ising 模型

$$H = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i. \quad (15.1)$$

我们根据传输矩阵法可以得到这一模型在热力学极限下的精确解为

$$F = -k_B T \ln Z = -N \left[J + T \ln \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{e^{-4\beta J} + \sinh^2(\beta h)} \right) \right]. \quad (15.2)$$

这一精确解在零外场的情况下不会表现出自发磁化.

15.1.1 标度理论

尽管我们根据精确解出的自由能可以得到系统的一系列热力学函数, 但并非所有的理论都有这种闭形式的解析解. 一个更适于一般情况的理论工具为关联函数. 我们不仅知道物理上感兴趣的绝大多数物理量都能通过关联函数得到, 同时临界现象理论使用的一大工作假设便是临界点附近的物理仅和关联长度 ξ 这单个长度尺度有关. 在 Ising 模型里, ξ 被定义为关联函数的指数衰减速率:

$$C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \equiv \langle S(\mathbf{r}_1) S(\mathbf{r}_2) \rangle - \langle S(\mathbf{r}_1) \rangle \langle S(\mathbf{r}_2) \rangle \sim e^{-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{\xi}}. \quad (15.3)$$

磁感率便能被关联函数表示为

$$\chi = -\partial_h^2 F|_{h=0} = \beta \int d^d \mathbf{r}_1 d^d \mathbf{r}_2 C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sin \xi^d. \quad (15.4)$$

同时我们根据一维 Ising 模型的精确解可得

$$\xi \sim \chi \sim e^{2\beta J}, \quad (15.5)$$

因而此时关联长度在 $T \rightarrow 0$ 时指数发散: 此时的长程关联行为是不难预见的.

关联长度在存在临界行为的系统的临界点附近的发散则带来了系统的奇异热力学行为. 标度理论便认为长度量纲为 D_X 的可观测量 X 在临界点附近会表现出如下标度形式:

$$X \sim \xi^{D_X} g_X, \quad (15.6)$$

其中 g_X 为无量纲函数. 我们不难就一维 Ising 模型在 $T \rightarrow 0$ 时验证这一点.

15.1.2 Kadanoff 分块自旋重整化群

我们现在便来考虑一个重整化群理论的雏形. 既然临界点附近的长程关联暗示我们在这里只需要考虑 Ising 模型的长程行为, 那么我们现在便会期待建立一套方法来积出系统的短程涨落并将其影响反映在剩余的长程自由度上.

我们来按照 Kadanoff 的方式处理一维 Ising 模型. 此时我们需要将 b 个相邻自旋取作一组并对各个组内的 2^d 个自旋子构型进行求和, 这一步则会给出一个描述集团间相互作用的有效 Hamilton 量. 更幸运的是, Ising 模型是"可重整化的", 进而这一步操作给出的有效 Hamilton 量仍有着 Ising 模型的形式, 并且我们可以把每个分块自旋组视作一个大的自旋, 即"块自旋". 按照这个逻辑, 我们可以将新的有效 Hamilton 量里的 b 个相邻块自旋再次取作一组, 积出各个组内的微观自由度并得到一个描述更宏观物理的新的有效 Hamilton 量.

根据一维 Ising 模型的传输矩阵法, 记传输矩阵为

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}, \quad (15.7)$$

那么原 N -自旋配分函数为

$$Z_N(J, h) = \text{tr}(T^N). \quad (15.8)$$

对 b -自旋组的内部自由度求和相当于取矩阵乘积

$$T' \equiv T^b, \quad (15.9)$$

并且我们便有对 N/b -自旋的有效 Hamilton 量, 我们有配分函数

$$Z_{N/b}(J', h') = \text{tr}(T'^{N/b}) = \text{tr}[(T^b)^{N/b}] = Z_N(J, h). \quad (15.10)$$

注意, 这一等式成立的一大重要假设为有效传输矩阵 T' 和原传输矩阵 T 有着相同的代数结构. 我们不难验证这一点, 而这表明新的分块自旋系统也表现得像一个 Ising 自旋系统. 但是这一新的分块自旋系统中的温度, 磁场强度以及耦合常数均会不同于原先的系统, 并且此时基本涨落的空间尺度是原先系统的 b 倍大.

特别的, 我们可以记和理论两个参数有关的量为 $u = e^{-\beta J}, v = e^{-\beta h}$, 那么分块自旋变换的结果可以被表示为

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(u, v) \\ f_2(u, v) \end{pmatrix}. \quad (15.11)$$

对于 $b = 2$ 的情况, 我们可以在提取出一个不影响物理的系数后得到

$$f_1 = \frac{\sqrt{v + v^{-1}}}{(u^4 + u^{-4} + v^2 + v^{-2})^{1/4}}, \quad v' = \frac{\sqrt{u^4 + v^2}}{\sqrt{u^4 + v^{-2}}}. \quad (15.12)$$

我们可以从一个初值 (u_0, v_0) 出发不断进行分块自旋变换, 这两个参数在上述映射下的迭代也就给出了系统的 RG 轨迹. 我们不难通过不动点方程发现其存在两个不动点 $(u_1^*, v_1^*) = (0, 1)$ 以及 $(u_2^*, v_2^*) = (1, v)$.

不动点是重整化群分析中最重要的东西. 特别的, 在不动点处系统的包括关联长度在内的特征长度保持不变. 同时, 我们每进行一步二自旋分块自旋变换都会使系统的特征微观尺度变为原来的二倍, 因而按理来说此时关联长度也应该变成原来的二倍, 于是不动点处关

联长度的自治性条件表明 ξ 要么为 0, 要么为 ∞ . 注意不动点 2 对应 $T \rightarrow \infty$ 的高温极限, 显然此时系统完全热无序并且 $\xi = 0$. 与之相对, 不动点 1 对应着 $T \rightarrow 0, h \rightarrow 0$ 的零温无外场极限, 此时系统可以建立起长程序并且 $\xi \rightarrow \infty$.

一维 Ising 模型的不动点 1, 2 分别是重整化群流出和流入的排斥和吸引不动点. 不管我们出发的参数如何, 只要其不精确等于不动点 1, 那么重整化群流便会把系统带向一个等效的高温低有序参数区. 尽管此时物理参数并没有变化, 但是我们的系统在宏观上的表现就像其温度高于原先的系统.

我们可以在 $T = 0$ 的不动点 1 附近将 RG 方程线性化并在数学上分析这一不动点的稳定性. 记 $r = u^4, s = v^2$, 我们可以得到 b -自旋分块自旋变换的 RG 方程在低温不动点附近表现得像

$$\begin{pmatrix} \delta r' \\ \delta s' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^2 & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta s \end{pmatrix}. \quad (15.13)$$

考虑到低温不动点附近约化自由能密度表现为

$$f(\delta r, \delta s) = -\frac{1}{N} \ln Z_N(\delta r, \delta s) \quad (15.14)$$

以及分块自旋变换不改变系统配分函数, 我们便有

$$f(\delta r, \delta s) = -\frac{1}{N'b} \ln Z_{N'}(\delta r', \delta s') = \frac{1}{b} f(b^2 \delta r, b \delta s). \quad (15.15)$$

这便给出了它在不动点 1 附近分块自旋变换下的标度关系.

由于现在 b 是一个理论上可任意选取的参数, 我们便可以根据需求取它的值. 例如, 我们现在感兴趣的尺度满足 $b^2 \delta r = 1$, 那么我们便发现这一尺度上的自由能密度为

$$f(\delta r, \delta s) = \sqrt{\delta r} f(1, \delta s / \sqrt{\delta r}) \equiv \sqrt{\delta r} g(\delta s / \sqrt{\delta r}) = e^{-2\beta J} g(\beta h e^{2\beta J}). \quad (15.16)$$

我们通过 RG 分析便得到了标度理论假设的标度关系

$$f = \xi^{-1} g(\beta h \xi). \quad (15.17)$$

15.2 耗散量子隧穿

我们现在来使用重整化群考察耗散效应对量子隧穿的影响. 我们考虑一个处在周期势 $U(\theta) = c \cos \theta$, 那么描述其物理的作用量为

$$S[\theta] = \int d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{\theta}^2 + c \cos \theta \right) + \frac{1}{\pi T g} \sum_n |\omega_n| |\theta_n|^2, \quad (15.18)$$

其中第二项为耗散衰减项, 并且 g^{-1} 刻画了裸粘度. 假设粘度 $1/g$ 很大, 那么我们便可以忽略作用只是正规化理论紫外行为的动能项, 并且可以仅考虑有效作用量

$$S[\theta] = \frac{1}{4\pi T g} \sum_n |\omega_n| |\theta_n|^2 + c \int d\tau \cos \theta(\tau). \quad (15.19)$$

量子隧穿概率便由配分函数

$$Z = \int \mathcal{D}[\theta] e^{-S[\theta]} \quad (15.20)$$

所给出.

利用重整化群方法由这一作用量提取物理信息的第一步是将场 θ 的短波和长波自由度分离: 假设这一有效标量场论适用的最高能量为 Λ , 那么我们可以根据感兴趣的问题能标而选择一个临界能标 $\Lambda/b < \Lambda$, 并称 $\Lambda/b < |\omega_n| < \Lambda$ 的短波快自由度, 而 $|\omega_n| < \Lambda/b$ 的为长波慢自由度. 下一步便是积出快自由度并得到描述慢自由度的有效作用量. 为了在技术上实现这一点, 我们可以考虑将 $\theta(\tau)$ 分为快慢两部分:

$$\theta(\tau) = \sum_{|\omega_n| < \Lambda/b} e^{-i\omega_n \tau} \theta_n + \sum_{|\omega_n| > \Lambda/b} e^{-i\omega_n \tau} \theta_n \equiv \theta_s(\tau) + \theta_f(\tau). \quad (15.21)$$

如果我们进一步假设实验的温度很低, 那么我们便可以将离散的 Matsubara 频率求和化成连续的积分并记

$$\theta_s(\tau) = \int_s \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega \tau} \theta(\omega), \quad \theta_f(\tau) = \int_f \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega \tau} \theta(\omega). \quad (15.22)$$

将这一表达式代入原先的作用量中便给出

$$S[\theta_s, \theta_f] = S_s[\theta_s] + S_f[\theta_f] + S_U[\theta_s, \theta_f], \quad (15.23)$$

其中

$$S_{s,f}[\theta_{s,f}] = \frac{1}{4\pi g} \int_{s,f} \frac{d\omega}{2\pi} |\omega| |\theta(\omega)|^2, \quad (15.24)$$

$$S_U[\theta_s, \theta_f] = c \int d\tau \cos[\theta_s(\tau) + \theta_f(\tau)]. \quad (15.25)$$

我们在泛函积分中积出 θ_f 便会在形式上得到

$$e^{-S_{\text{eff}}[\theta_s]} = e^{-S_s[\theta_s]} \left\langle e^{-S_U[\theta_s, \theta_f]} \right\rangle_f. \quad (15.26)$$

假设 c 很小以至于我们可以做微扰论, 那么我们便有

$$\left\langle e^{-S_U[\theta_s, \theta_f]} \right\rangle_f = 1 - \langle S_U[\theta_s, \theta_f] \rangle_f + \mathcal{O}(c^2) \approx e^{-\langle S_U[\theta_s, \theta_f] \rangle_f + \mathcal{O}(c^2)}. \quad (15.27)$$

我们可以直接计算得到

$$\langle S_U[\theta_s, \theta_f] \rangle_f = cb^{-g} \int d\tau \cos \theta_s, \quad (15.28)$$

因而我们在 $\mathcal{O}(c)$ 阶可得慢自由度的有效作用量为

$$S_{\text{eff}}[\theta_s] = \frac{1}{4\pi g} \int_s \frac{d\omega}{2\pi} |\omega| |\theta(\omega)|^2 + cb^{-g} \int d\tau \cos \theta_s. \quad (15.29)$$

可以看到, 这一作用量的结构与原先的一致, 即这一理论也是可重整的. 但是值得注意的是, S_{eff} 与原作用量有两点不同: 首先, 积出快自由度改变了理论的耦合常数; 其次, 新有效作用量只描述了能标 $|\omega_n| < \Lambda/b$ 的涨落.

为了比较积出快自由度前后的有效作用量, 我们需要让两个理论在同场构形范围上取值. 因而, 我们考虑对新作用量中的能量/时间进入 rescale $(\tau, \omega) \rightarrow (\tau', \omega')$ 以使得变换后的场变量 $\theta_s(\omega) \rightarrow \theta'_s(\omega')$ 的定义域为 $|\omega'| < \Lambda$. 因而我们需要取

$$\omega' = b\omega. \quad (15.30)$$

根据量纲分析, 有效作用量里的诸有量纲参数也要随之改变, 进而我们得到 rescale 后的有效作用量为

$$S'[\theta'] = \frac{1}{4\pi g} \int_{|\omega'| < \Lambda} \frac{d\omega'}{2\pi} |\theta'(\omega')|^2 |\omega'| + cb^{1-g} \int d\tau' \cos[\theta'(\tau')]. \quad (15.31)$$

进而原理论中能标 $|\omega| < \Lambda/b$ 的低能物理能够被取这个参数的能标与原理论相同的理论等价地描述. 可以看到, 积出短程的涨落会使得耗散项 g 参与影响低能理论的有效耦合常数. 不过我们目前为止仅仅考虑了一次 RG 操作, 而在理想情况下我们会期待不断地进行 RG 操作以至于我们积出了所有高于某一特定能标 ω_{\min} 的所有自由度. 显然我们可以连续化这个过程并让 b 连续取值, 进而我们可以得到有效耦合常数 $c(b)$ 随重整化群控制参数 b 变化的微分方程:

$$\frac{dc}{d \ln b} \equiv \beta(c) = c(1 - g). \quad (15.32)$$

此即该理论的 Gell-Mann-Low 方程, 并且等号右边的项由于历史原因而被称为 β -函数. 虽然在这个简单的例子里求解 Gell-Mann-Low 方程得到的耦合常数跑动和单次 RG 得到的结果相同, 但在更复杂的情况中根据该方程做无穷次无穷小 RG 得到的直至红外截断的参数跑动和从紫外理论出发做单次 RG 直接到红外截断的参数跑动并不一致, 因而这一方程有其存在的意义.

我们在求解 Gell-Mann-Low 方程时自然会选择从紫外的裸参数出发, 然而一个重要问题是我们该让 RG 流流到哪一点 $\ln b_{\max}$. 这其实要具体问题具体分析: 例如, 如果我们把系统耦合到了一个有着特征频率 ω_m 的源上, 那么我们会考虑积出所有 $\omega > \omega_m$ 的自由度并研究能标在 $\sim \omega_m$ 处的有效理论, 进而此时 $b = \Lambda/\omega_m$. 此时我们的理论结构与原先的一致, 但是现在有效耦合常数会被重整化为

$$c = c_0 \left(\frac{\Lambda}{\omega_m} \right)^{1-g} \propto \omega_m^{g-1}. \quad (15.33)$$

我们也有可能像积出最低 Matsubara 频率 $\omega_{\min} = 2\pi T$ 以上的所有自由度, 那么此时有效理论中耦合参数便满足

$$c \propto T^{g-1}. \quad (15.34)$$

对于空间尺度为 L 的低温系统, 我们则可以认为系统的低能激发满足 $\omega_{\min} = \pi v/L$, 进而根据 RG 得到的低能有效理论满足

$$c \propto L^{g-1}. \quad (15.35)$$

总之, RG 流的终点能标取决于我们研究的问题的特征能标.

回到这一模型, 我们现在便发现 $g > 1$ 时有效耦合常数会随能标降低而减小, $g < 1$ 时则反之; $g = 1$ 则给出了一个有效耦合强度不随能标改变的"不动线". 但值得注意的是我们这里的 RG 分析依赖对耦合常数的微扰展开, 而这在 $g < 1$ 使得有效耦合常数流入强耦合区时的有效性是值得商榷的. 不过在强耦合微扰分析以及使用 CFT 技术的分析表明在这

个模型中我们 naively 地根据微扰 RG 得到的结论在强耦合区依旧成立. 总之, $g > 1$ 时相互作用强度流向零, 这表明在低温以及大尺度下粒子可以在势场的极小值间自由地隧穿; 而 $g < 1$ 时耦合常数流向正无穷, 进而低温时理论在大尺度上表现为粒子被定域在理论的极小值点.

如果我们想用一般的微扰论来处理这个问题, 那么我们在计算关联函数时会在紫外和红外区遇到对数发散. 尽管我们可以通过在形式上引入紫外与红外截断来避免发散问题, 但是截断本身便是一个不物理的存在. 尽管此处的 RG 方法也需要计算与微扰论中相似的关联函数并且也需要引入紫外截断, 但此时我们会认为紫外截断是我们构造理论时就定义好的. 特别的, 我们还能以独立于截断的方式提取出系统耦合常数随长程参数变化的行为. 但值得注意的是我们得到的结果并不意味着截断不会影响低能理论, 毕竟我们根据低能理论做微扰论还是会遇到紫外发散, 这表明我们的理论还是无法考虑场构形在紫外部分的涨落.

如果我们对理论中的算符进行量纲分析得到其量纲为 $[T]^d$, 那么 d 叫做算符的标度量纲或正则标度量纲. 重整化群会给出的一个重要结果便是算符在标度变换下的量纲并不等于这一标度量纲. 例如, 在我们考虑的模型中 $\int d\tau \cos \theta$ 的标度量纲为 1, 但 RG 给出它在标度变换下的变化规律是 b^{1-g} , 我们称 g 是这一算符的反常量纲. 我们可以将反常量纲理解为理论的紫外部分对低能理论中算符标度行为的修正, 并且它在决定理论的长程可观测行为时有着重要的意义.

15.3 重整化群的一般理论

15.3.1 Gell-Mann-Low 方程

我们可以将一个一般的场论拉氏量记作

$$S[\phi] = \sum_{a=1}^N g_a \mathcal{O}_a[\phi], \quad (15.36)$$

其中 ϕ 是场变量, g_a 为某一项的耦合常数而 \mathcal{O}_a 为一组算符组成的项. 例如, 它可以是

$$\mathcal{O}[\phi] = \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^n \phi^m. \quad (15.37)$$

在重整化群理论中, Gell-Mann-Low 方程便描述了我们在积出理论高能自由度时耦合常数 $\{g_a\}$ 的变化.

我们进行重整化群操作并获得 Gell-Mann-Low 方程要分三步:

1. 切分场构形: 我们需要将场构型分为被积出的快自由度 $\{\phi_f\}$ 和剩下的慢自由度 $\{\phi_s\}$ 两部分. 例如, 在分块自旋重整化中我们便将小于某一尺度的物理进行了粗粒化; 而在前面处理耗散量子隧穿时, 我们则在动量空间中积出了高能标自由度并在中间阶段得到了一个截断依赖的有效理论. 值得一提的是, 我们也可以考虑把某一红外截断能标 λ^{-1} 以上的所有自由度都积掉, 那么此时一般会出现紫外发散积分. 幸运的是, 这些积分一般都可以被维数正规化处理. 有时我们也会在这一步中使用算子乘积展开.
2. 积出短程自由度: 此时我们常常需要利用微扰论技巧来积出短程自由度. 不过这一微扰论只有在我们能确保高阶项贡献很小时才合法, 而这一条件其实很难成立. 我们会在后面再讨论与之有关的更多细节. 总之, 积出短程自由度后我们得到了仅包含慢自由度的有效作用量

$$S'[\phi_s] = \sum_a g'_a \mathcal{O}'_a[\phi_s]. \quad (15.38)$$

此时各个算符的耦合常数都会发生变化, 同时积出快自由度有可能会带来新的算符. 此时我们需要仔细考察这些新的算符是否为 relevant 算符; 如果是, 那么它们的贡献在低能理论中将不可忽略, 并且我们最好在一开始就考虑进这些算符同时为其耦合常数赋予一个物理意义.

3. Rescaling: 最后, 我们对动量做 rescaling $\mathbf{p} \rightarrow b\mathbf{p}$ 以使得有效理论在形式上有着与原理论完全相同的结构. 取决于联系频率 (能量) 与动量的色散关系, 此时频率的 rescaling 有可能存在某一非平凡的指数 z :

$$\omega \rightarrow b^z \omega. \quad (15.39)$$

根据作用量的量纲为 1, 我们可以确定场算符的量纲进而确定其标度量纲 d_ϕ , 进而在 rescaling 中我们有

$$\phi \rightarrow b^{d_\phi} \phi. \quad (15.40)$$

现在我们的重整化作用量便形如

$$S[\phi] = \sum_a g_a'' \mathcal{O}_a[\phi], \quad (15.41)$$

并且重整化的作用仅仅表现在了耦合常数的变化中. 我们可以记新耦合常数 \mathbf{g}'' 和旧耦合常数 \mathbf{g} 间的关系为

$$\mathbf{g}'' = \tilde{R}(\mathbf{g}), \quad (15.42)$$

同时让 RG 的控制参数 $\ell \equiv \ln b$ 取无穷小值, 那么我们便得到了上式的微分关系, 即 Gell-Mann-Low 方程

$$\frac{d\mathbf{g}}{d\ell} = R(\mathbf{g}). \quad (15.43)$$

我们可以将 Gell-Mann-Low 方程描述的 RG 流视作一个动力系统, 而在分析它时最重要的东西便是不动点, 即由 $R(\mathbf{g}) = 0$ 确定的子流形 $\{\mathbf{g}^*\}$. 一旦我们调节初始参数使得系统的 RG 流能够流向一个不动点, 那么在足够大的尺度上系统将表现出标度不变的自相似性. 正如我们前面讨论过的, 在不动点处系统的关联长度要么为零, 要么发散; 而发散的关联长度正是二阶相变临界点的标志. 因而, 我们可以通过寻找 RG 流的不动点来搜寻物理系统的临界点.

重整化群流在临界点附近的行为也非常重要. 设想一组处在某个临界点 \mathbf{g}^* 小邻域内的耦合常数 \mathbf{g} , 那么此时我们可以将 Gell-Mann-Low 方程线性化为

$$\frac{d\mathbf{g}}{d\ell} \equiv \mathbf{W}(\mathbf{g} - \mathbf{g}^*), \quad W_{ab} \equiv \left. \frac{\partial R_a}{\partial g_b} \right|_{\mathbf{g}=\mathbf{g}^*}. \quad (15.44)$$

我们记参数数量为 N , 并且 \mathbf{W} 有 N 个左本征值 λ_α (我们会称之为标度场) 以及对应的归一化左本征矢 φ_α^T , 满足

$$\varphi_\alpha^T \mathbf{W} = \lambda_\alpha \varphi_\alpha^T. \quad (15.45)$$

记 v_α 为 $(\mathbf{g} - \mathbf{g}^*)$ 在 φ_α 上的投影:

$$v_\alpha = \varphi_\alpha^T (\mathbf{g} - \mathbf{g}^*), \quad (15.46)$$

那么我们现在便有

$$\frac{dv_\alpha}{d\ell} = \lambda_\alpha v_\alpha, \quad (15.47)$$

进而

$$v_\alpha \sim e^{\ell\lambda_\alpha}. \quad (15.48)$$

如果 $\lambda_\alpha > 0$, 那么重整化群流会将参数推离不动点, 并且这些参数的值会随着 RG 流向低能区而越来越大, 进而对应的算符在低能理论中不能忽略, 我们称之为 relevant 的; 如果 $\lambda_\alpha < 0$, 那么对应群流会流向不动点, 并且低能理论中这些参数的值会被压低而在一般情况下影响不大, 我们称之为 irrelevant 的; 如果 $\lambda_\alpha = 0$, 我们称之为 marginal 的. 现在我们可以对不动点做出如下分类:

- 稳定不动点: 周围的群流都是 irrelevant 的或至少是 marginal 的. 当我们在一个稳定不动点附近制备一个系统时, 我们在越来越大的尺度上观察这个系统会发现它越来越像零或无穷长关联的自相似不动点构型. 特别的, 在稳定不动点处的系统的宏观行为对微观物理的细节并不敏感.
- 不稳定不动点: 周围的群流都是 relevant 的. 我们永远无法制备出稳定地处于这一点的系统, 但是这些点对确定系统 RG 流的全局结构非常重要.
- 一般不动点: 这些不动点附近同时存在 relevant 和 irrelevant 的群流, 它们通常和相变有关. 为理解这一点, 我们可以假设这一不动点附近存在 r 个与 irrelevant 本征值有关的左本征矢 φ_α , 那么它们便张成了一个 r -维临界曲面 S , 我们也称之为不动点的 basin of attraction. 一旦我们制备的系统中耦合常数 $\mathbf{g} \in S$, 那么我们会发现系统的大尺度宏观行为会趋近于这个不动点. 不过此时参数存在的一丁点在 relevant 方向的偏移都会让系统的宏观行为偏离不动点: 例如, 铁磁相变中相对临界温度 T_c 的偏离是 relevant 的, 进而如果我们系统的温度略高于或略低于 T_c , 那么尽管它一开始看起来像处在临界点, 但它在更大的尺度上回表现得偏离临界点 (要么表现为高温顺磁相, 要么表现为低温铁磁相).

事实上, 大多数临界系统都可以被归到几大普适类中. 尽管会存在成千上万种系统, 但是实际出现的普适类数目在 $\mathcal{O}(10^1)$ 的量级. 我们可以从临界曲面的概念出发来理解这一事实: 设想一个实验民工在研究一个系统的相变, 那么其会调节系统的各个控制参数 X_i 来让系统出现巨大的涨落. 在理论层面上, 这些控制参数便确定了模型中耦合常数的初值. 如果这些初值在参数空间中确定的点偏离了临界曲面, 那么实验者在大尺度上观测到的系统便会落在高温区或低温区; 但是我们总可以调节这些参数使得这一点落在临界面上, 进而重整化群流会确保此时系统在越大尺度上的行为表现得越像不动点处的临界系统, 并且它会表现出这一不动点的特征. 改变系统的材料组成也相当于改变了控制参数, 但是无论如何, 只要我们能够将系统调节到一个不动点的临界面上, 那么这个系统在临界点处就会表现出其对应的理论不动点的普适特征, 此即普适性的起源. 特别的, 这意味着许许多多微观上大相径庭的物理系统却有着完全相同的低能临界理论.

15.3.2 标度理论

我们已经建立了重整化群的基本理论, 而现在要做的便是建立 RG 和实验数据的联系. 假设我们以泛函积分的形式表示了某个实验可观测量 X , 那么它可以被写作一系列依赖于动

量 \mathbf{p}_i 和耦合常数 g_α 的 n -点关联函数 $C_i(\mathbf{p}_i, g_\alpha) = \langle \phi_1 \cdot \phi_n \rangle$ 之和:

$$X = \sum_i C_i(\mathbf{p}_i, g_\alpha). \quad (15.49)$$

由于 RG 操作并不会改变理论的配分函数, 因而在一步 RG 变换前后 X 并不变, 但这不代表各个关联函数不会改变. 特别的, 在假设我们位于 $\mathbf{g}^* = 0$ 不动点附近以及 RG 操作不会混合耦合常数的前提下我们会有

$$C(\mathbf{p}_i, g_\alpha) \rightarrow b^{nd_\phi} C(b\mathbf{p}_i, b^{\lambda_\alpha} g_\alpha). \quad (15.50)$$

但由于 X 是各个关联函数之和, 我们便会要求上式的箭头变成等号, 这则会建立各个量纲之间的关系.

我们现在假设在一个临界现象中仅存在一个 relevant 的标度场 g_1 并假设其它 $g_{\alpha>1}$ 都是 irrelevant 的. 进而此时关联函数满足

$$C(\mathbf{p}_i, g_1, g_\alpha) = b^{nd_\phi} C(b\mathbf{p}_i, b^{\lambda_1} g_1, b^{\lambda_\alpha} g_\alpha) = g_1^{-nd_\phi/\lambda_1} C(g_1^{-1/\lambda_1} \mathbf{p}_i, 1, g_1^{-\lambda_\alpha/\lambda_1} g_\alpha). \quad (15.51)$$

这在 $g_1 \ll 1$ 时会给出

$$C(\mathbf{p}_i, g_1, g_\alpha) \approx g_1^{-nd_\phi/\lambda_1} C(g_1^{-1/\lambda_1} \mathbf{p}_i, 1, 0) \equiv g_1^{-nd_\phi/\lambda_1} F(g_1^{-1/\lambda_1} \mathbf{p}_i). \quad (15.52)$$

这里定义的函数 F 便是一种标度函数, 它同时给出了其余 irrelevant 参数等于零时 C 相对动量和 g_1 的依赖性. 总之, 在更一般的情况中我们总可以利用选取重整化群控制参数的任意性来消除标度行为已知的关联函数中对某个参数变量的依赖性 (被消除的参数变成了一个整体系数), 得到的约化关联函数便叫做标度函数.

标度函数也是联系理论和实验的桥梁: 实验测得的结果往往是某个可观测量 X 和某些 relevant 参数 t, h 的关系 $X(t, h)$, 而标度关系则意味着这一可观测量对应的标度函数其实仅依赖于单个形如 th^x 的标度参数. 设想实验民工在研究一个理论上尚不清晰的相变现象, 那么他可以从经验上寻找和这一过程相关的标度参数并让理论家去解释其测得的标度指数 x ; 反过来, 理论家也可以在理论上预言一个系统的实验结果可以被某些标度参数所刻画, 而实验家便可以实打实地去检验这些预言.

特别的, 标度理论还可以给出临界指数间的诸多恒等关系. 例如, 在铁磁相变中 relevant 标度场仅有约化温度 t 以及约化磁场 $h \equiv H/T$, 并且约化自由能 $f \equiv \frac{1}{TL^d} F$ 会表现为

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h) = t^{d/y_t} \tilde{f}(ht^{-y_h/y_t}). \quad (15.53)$$

从这一表达式出发, 我们可以计算诸多可观测量并得到各个临界指数以及临界指数间的恒等关系.

15.4 铁磁相变

我们现在考虑使用 RG 来研究铁磁相变在临界点附近的行为, 事实上也只有 RG 才能揭示 ($d > 2$)-维 Ising 模型在相变点附近的奇妙行为. 我们需要考虑的只是耦合进磁场 h 的 Ginzburg-Landau 作用量

$$S[\phi] = \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{r}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 - h \phi \right]. \quad (15.54)$$

只需要考虑到四阶项的原因可以由量纲分析的结果佐证：假设各个算符的实际量纲和其标度量纲差别不是太大（毕竟在微扰区反常量纲来自相互作用的微扰修正），我们可以将数出来的拉氏量里算符的标度量纲估计为其实际量纲。特别的，由于 $[S] = 1$ ，我们便有

$$\left[\int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \right] = 1 \Rightarrow [\phi] = L^{1-\frac{d}{2}}. \quad (15.55)$$

于是我们会发现

$$\left[\int d^d \mathbf{r} \phi^2 \right] = L^2, \quad \left[\int d^d \mathbf{r} \phi^4 \right] = L^{4-d}, \quad \left[\int d^d \mathbf{r} \phi^n \right] = L^{d-\frac{d(n-2)}{2}}. \quad (15.56)$$

进而我们会发现

$$[r] = L^{-2}, \quad [\lambda] = L^{d-4}. \quad (15.57)$$

这表明 $d < 4$ 时 ϕ^4 算符是 relevant 的：它对更大尺度物理的贡献会更重要。同时由于这个算符在 $d = 4$ 是 marginal 的，其影响不会太强并可被微扰论处理，我们遂可以考虑在 $d = 4$ 时计算这个模型并将结果外推到实际感兴趣的三维和二维情况。同时我们可以注意到 $d = 4$ 时更高阶算符是 irrelevant 的，它们在长程物理中的贡献会被压低，进而我们在构造低能理论时可以忽略这些项。

15.4.1 Gauss 模型

我们先忽略 ϕ^4 项并让理论精确可解。此时我们可以按照 RG 的套路将场变量分为 $\phi = \phi_s + \phi_f$ ，并且我们会发现 ϕ^4 项的缺失让这两部分自由度可以脱耦为

$$S[\phi_s, \phi_f] = S_s[\phi_s] + S_f[\phi_f]. \quad (15.58)$$

于是，积出 ϕ_f 仅相当于为 ϕ_s 的配分函数带来了一个常系数，并且 RG 中仅有 rescaling 一步会影响 ϕ_s 的有效作用量中的系数。根据量纲分析，我们不难得到

$$r \rightarrow b^2 r, \quad h \rightarrow b^{1+\frac{d}{2}} h. \quad (15.59)$$

在铁磁相变中 $r \sim t$ ，进而我们便得到了约化温度和约化磁场强度的标度量纲为

$$y_t = 2, \quad y_h = \frac{d}{2} + 1. \quad (15.60)$$

此时系统的约化自由能为

$$f(t, h) = t^{\frac{d}{2}} \tilde{f}(ht^{-\frac{d+2}{4}}), \quad (15.61)$$

并且我们可以进一步得到诸临界指数。可以看到，空间维数进入了对临界指数的修正中，这恰恰表明现在的理论考虑了空间涨落的贡献。同时我们不难发现 Gauss 理论中存在一个平凡的不动点 $(r, h) = (0, 0)$ ，我们称之为 Gauss 不动点。

15.4.2 非 Gauss 模型

现在我们考虑进 ϕ^4 相互作用项并对理论做微扰 RG 分析。特别的，虽然 $d = 4$ 时 ϕ^4 为 marginal 项，但是我们可以期待在维数正规化框架 $d = 4 - \varepsilon$ 时这一项 relevant 但又没 relevant 到在低能区无法被微扰处理。进而我们可以考虑在这一维数下微扰计算这个相互

作用的贡献, 并在计算结束后将 ε 解析延拓到 1 或者 2 以得到实际感兴趣的 $d = 1$ 和 2 的情况.

按照重整化群的套路, 我们还是将 ϕ 分为对应的 $\Lambda/b < |\mathbf{p}| < \Lambda$ 的 ϕ_s 和 $|\mathbf{p}| < \Lambda/b$ 的 ϕ_f 两部分并能得到

$$S_f[\phi_f] = \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi_f)^2 + \frac{r}{2} \phi_f^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi_f^4 - h \phi_f \right], \quad (15.62)$$

$$S_s[\phi_s] = \int d^d \mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi_s)^2 + \frac{r}{2} \phi_s^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi_s^4 - h \phi_s \right], \quad (15.63)$$

$$S_c[\phi_s, \phi_f] = \frac{\lambda}{4!} \int d^d \mathbf{r} [4 \phi_s^3 \phi_f + 6 \phi_s^2 \phi_f^2 + 4 \phi_s \phi_f^3]. \quad (15.64)$$

接下来我们要做的便是在单圈水平上计算积出 ϕ_f 后的 ϕ_s 的有效作用量:

$$e^{-S_{\text{eff}}[\phi_s]} = e^{-S_s[\phi_s]} \left\langle e^{-S_c[\phi_s, \phi_f]} \right\rangle_c. \quad (15.65)$$

进而在次领头阶水平上我们要考虑的近似便为

$$e^{-S_{\text{eff}}[\phi_s]} = e^{-S_s[\phi_s] - \langle S_c[\phi_s, \phi_f] \rangle_f + \frac{1}{2} \langle S_c^2[\phi_s, \phi_f] \rangle_f}. \quad (15.66)$$

我们在积出 f 时只需要考虑连通图的贡献²⁰, 进而我们会得到 $\langle S_c[\phi_s, \phi_f] \rangle_f$ 给出的贡献到 relevant 算符的项为

$$\langle S_c[\phi_s, \phi_f] \rangle_f = \frac{\lambda}{4} \int_f \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{\mathbf{p}^2 + r} \int_s \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \phi_s(\mathbf{q}) \phi_s(-\mathbf{q}). \quad (15.67)$$

这里圈积分会给出超几何函数, 但鉴于我们在研究临界现象时会将 r 调控得很小, 我们可以考虑将其计算到按 r 展开的领头阶并得到

$$\begin{aligned} \int_f \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{\mathbf{p}^2 + r} &= \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} d\mathbf{p} \frac{p^{d-1}}{p^2 + r} \\ &\approx \frac{\lambda \Lambda^d \Omega_d}{2(d-2)} (1 - b^{2-d}) - \frac{r \lambda \Lambda^d \Omega_d}{2(d-4)} (1 - b^{4-d}) + \mathcal{O}(r^2), \end{aligned} \quad (15.68)$$

其中

$$\Omega_d \equiv \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}. \quad (15.69)$$

进而我们发现在 rescale 后 ϕ^2 项会被修正为

$$S_2[\phi] = \frac{b^2}{2} \left[r + \frac{\lambda \Lambda^d \Omega_d}{2(d-2)} (1 - b^{2-d}) - \frac{r \lambda \Lambda^d \Omega_d}{2(d-4)} (1 - b^{4-d}) \right] \int d^d \mathbf{r} \phi^2. \quad (15.70)$$

$\frac{1}{2} \langle S_c^2[\phi_s, \phi_f] \rangle_f$ 一项在单圈水平上产生的 relevant 算符仅会修正 ϕ^4 项. 特别的, 由于我们仅对长波行为感兴趣, 我们在计算这一项的修正时可以将四条 ϕ_s 外线的动量取作零, 进而我们得到这一项给出的修正为

$$\frac{\lambda^2}{16} \int d^d \mathbf{r} \phi_s^4 \int_f \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\mathbf{p}^2 + r)^2}. \quad (15.71)$$

²⁰ 此时是哪些项抵消了非连通图??

我们取这一项按 r 展开的领头阶便会得到修正后的 ϕ^4 项为

$$S_4[\phi] = b^{4-d} \left(\frac{\lambda}{4!} - \frac{\lambda^2 \Lambda^d \Omega_d}{16} \frac{1 - b^{4-d}}{d-4} \right) \int d^d \mathbf{r} \phi^4. \quad (15.72)$$

最后我们还得到了 rescale 对耦合进磁场的 ϕ^1 项的影响为

$$S_1[\phi] = h b^{1+\frac{d}{2}} \int d^d \mathbf{r} \phi. \quad (15.73)$$

现在取 $d = 4 - \varepsilon$ 并展开至 ε 的领头阶, 我们便得到 (为形式上的简便起见, 我们取 $\Lambda = 1$)

$$r \rightarrow b^2 \left[r + \frac{\lambda}{32\pi^2} (1 - b^{-2}) - \frac{r\lambda}{16\pi^2} \ln b \right], \quad (15.74)$$

$$\lambda \rightarrow (1 + \varepsilon \ln b) \left(\lambda - \frac{3\lambda^2}{16\pi^2} \ln b \right), \quad (15.75)$$

$$h \rightarrow b^{3-\frac{\varepsilon}{2}} h. \quad (15.76)$$

取 $\ell \equiv \ln b$ 并微分, 我们便得到了 Gell-Mann-Low 方程:

$$\frac{dr}{d\ell} = 2r + \frac{\lambda}{16\pi^2} - \frac{r\lambda}{16\pi^2}, \quad (15.77)$$

$$\frac{d\lambda}{d\ell} = \varepsilon\lambda - \frac{3\lambda^2}{16\pi^2}, \quad (15.78)$$

$$\frac{dh}{d\ell} = \frac{6-\varepsilon}{2} h. \quad (15.79)$$

可以看到, 单圈修正使得 Gauss 不动点附近的扰动能先以速率 ε 增长, 同时 λ^2 一项能在 $\lambda \sim \varepsilon$ 后阻值其继续变大. 我们发现此时不仅存在 Gauss 不动点 $(r_1^*, \lambda_1^*) = (0, 0)$, 其还存在一个非平凡不动点

$$(r_2^*, \lambda_2^*) = \left(-\frac{1}{6}\varepsilon, \frac{16\pi^2}{3}\varepsilon \right). \quad (15.80)$$

特别的, 我们发现 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时非平凡不动点的确会和 Gauss 不动点相合并.

计算得到的三维非平凡不动点附近的重整化群流见图3. 不难看出, 这个不动点属于附近既有 relevant 也有 irrelevant 的标度场的一般不动点. 我们也可以在这个不动点附近线性化 Gell-Mann-Low 方程, 那么我们会得到

$$W = \begin{pmatrix} 2 - \frac{\varepsilon}{3} & \frac{1+\varepsilon/6}{16\pi^2} \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (15.81)$$

尽管图中不是十分清晰, 但是我们根据这个线性化的矩阵可以看到这个不动点处的临界曲面并不完全平行于 r , 进而最终决定系统处于铁磁相还是顺磁项的不单单是物理温度而是 r 和 λ 的某个线性组合. 进而, 假设一个系统的 λ 足够大, 那么就算一开始物理温度 r 是负值, 系统的宏观行为也会从铁磁相流向无序相——这是一般的平均场理论所无法揭示的.

最后我们需要讨论在维度正规化框架下将 ε 取到 1 乃至 2 的 ε -展开方法的合法性. 如果我们愿意相信一个好的理论能够被超范围地使用, 那么我们会相信自然会喜欢重整化这个概念以及 Feynman 积分方法. 当然, 我们可以将圈积分结果展开到 ε 的更高阶, 并且

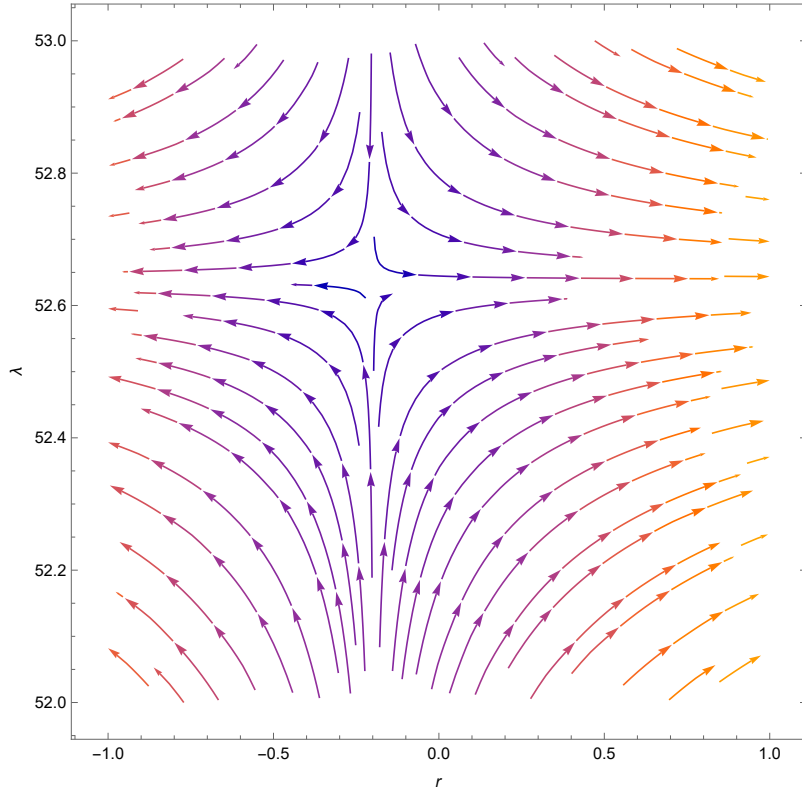


Figure 3. 三维时非平凡不动点附近的 RG 流.

领头阶展开得到的理论预言与实验结果的吻合之佳已经让人们将这一展开进行到了五阶! 尽管我们大概率正在展开的收敛半径以外作预言, 但是我们得到的结果仍与实验符合得很好! 特别的, 在二维中, 高阶 ε -展开给出的结果甚至能和精确解几乎完全吻合. 事实上, 我们不仅可以在系统的上临界维数附近做 ε 展开, 我们也可以从下临界维数出发做 ε -展开: 下一节便会处理一个这样的例子.

15.5 非线性 σ -模型

我们现在考虑使用重整化群方法来研究非线性 σ -模型的临界行为, 理论的作用量为

$$S[g] = \frac{1}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} \operatorname{tr} [\nabla g \nabla g^{-1}], \quad (15.82)$$

其中场变量 $g(\mathbf{r}) \in G$, G 为某个紧 Lie 群. 而配分函数

$$Z = \int \mathcal{D}[g] e^{-S[g]} \quad (15.83)$$

中的泛函积分测度 $\mathcal{D}[G]$ 便可以被构造为

$$\mathcal{D}[g] \equiv \prod_{\mathbf{r}} d\mu_{g(\mathbf{r})}, \quad (15.84)$$

其中 $d\mu_g$ 是在紧 Lie 群上能被唯一定义的归一化的并且左右不变的 Haar 测度.

这样一个有着连续对称性的系统的下临界维数为 $d_c = 2$. 在 $d \leq d_c$ 时, 无质量 Goldstone 模式的涨落会在任意非零的温度下破坏理论的长程序; 而在 $2 < d < 4$ 时, 我们则会期待系统存在一个有序-无序相变, 并且相变点附近的临界行为会由涨落主导. 因此, 我们在研究这个理论时可以考虑从 d_c 出发做 ε -展开.

15.5.1 Lie 群上的积分

我们在进入 RG 计算前需要先熟悉一下 Lie 群上的积分操作. 对于任意 $g \in G$, 我们总可以将其写作 Lie 代数的指数 $g = e^W$, $W \in \mathfrak{g}$; 并且 Lie 代数作为一个向量空间, 我们总可以为其赋予合适的基矢量并记

$$W = i \sum_a \pi^a T^a, \quad (15.85)$$

其中系数 i 确保了 T^a 的表示的厄米性. 一般而言, 我们可以为一个矩阵 Lie 代数的元素定义内积

$$\langle X, Y \rangle \equiv \text{tr}(X^\dagger Y), \quad (15.86)$$

而在这里的情况中我们确保了各个 Lie 代数元素的厄米性, 进而我们可以直接将内积定义为 $\text{tr}(XY)$, 并且我们可以按这个内积将各个基 T^a 正交化以使之满足

$$\text{tr}(T^a T^b) = c \delta_{ab}, \quad (15.87)$$

特别的, 对于 $U(N)$ 和 $SU(N)$, 人们常取 $c = \frac{1}{2}$; 而对于 $O(N)$, 人们则常取 $c = 1$.

因此, 对于 $\forall M \in \mathfrak{u}(N)$, 我们有

$$M = \sum_a 2 \text{tr}(M T^a) T^a, \quad (15.88)$$

这对应的分量形式便为

$$M_{ij} = \sum_a 2 M_{\ell k} T_{k\ell}^a T_{ij}^a, \quad (15.89)$$

这便给出了完备性关系

$$\sum_a T_{ij}^a T_{k\ell}^a = \frac{1}{2} \delta_{i\ell} \delta_{jk}. \quad (15.90)$$

类似的, $\forall M \in \mathfrak{su}(N)$ 也会给出

$$M = \sum_a 2 \text{tr}(M T^a) T^a, \quad (15.91)$$

$$M_{ij} = \sum_a 2 M_{\ell k} T_{k\ell}^a T_{ij}^a, \quad (15.92)$$

但此时 $\text{tr} T^a = 0$ 会让完备性关系多出来一项

$$\sum_a T_{ij}^a T_{k\ell}^a = \frac{1}{2} \left(\delta_{i\ell} \delta_{jk} - \frac{1}{N} \delta_{ij} \delta_{k\ell} \right). \quad (15.93)$$

对于 $\forall M \in \mathfrak{o}(N)$, 我们则有

$$M = \sum_a \text{tr}(M T^a) T^a \quad (15.94)$$

这会给出

$$M_{ij} = \sum_a M_{\ell k} T_{k\ell}^a T_{ij}^a. \quad (15.95)$$

直观上这会给出

$$\sum_a T_{ij}^a T_{k\ell}^a = \delta_{i\ell} \delta_{jk}, \quad (15.96)$$

但是注意到 $T \in \mathfrak{o}(N)$ 满足 $T^T = -T$, 我们便需要对这一关系中的 i, j 以及 k, ℓ 指标做反对称化, 这便会给出

$$\sum_a T_{ij}^a T_{k\ell}^a = \delta_{i\ell} \delta_{jk} - \delta_{ik} \delta_{j\ell}. \quad (15.97)$$

总之, 我们对整个群的积分便相当于对 $e^{i \sum_a \pi^a T^a}$ 中各个实系数 π^a 的积分. 现在我们需要考虑的便是将 Haar 测度 $d\mu_g$ 用这些系数做变量来表示成 $d^n \pi J(\pi)$. 其中我们记"平坦测度"为

$$d^n \pi \equiv \prod_a d\pi^a, \quad (15.98)$$

并且 $J(\pi) = 1 + \mathcal{O}(\pi^4)$. 特别的, 我们在这里进行的单圈计算中无需考虑 $\mathcal{O}(\pi^4)$ 项, 进而我们在这里可以放心地将 Haar 测度近似取作 $d^n \pi$.

注意, 由于此时 $g(\mathbf{r})$ 为 Lie 群群元, 进而我们也可以将它写作

$$g(\mathbf{r}) = \exp\left(i \sum_a \pi^a(\mathbf{r}) T^a\right), \quad (15.99)$$

并且我们在 RG 计算中对长程和短程自由度的分离便应该对 π^a 进行, 即

$$\pi^a(\mathbf{r}) = \pi_s^a(\mathbf{r}) + \pi_f^a(\mathbf{r}), \quad (15.100)$$

二者分别对应能标 $[0, \Lambda/b]$ 以及 $[\Lambda/b, \Lambda]$. 于是我们发现作为群元的场变量可以被划分为 $g(\mathbf{r}) = g_s(\mathbf{r})g_f(\mathbf{r})$, 并且原作用量可以被化为

$$S[g_s, g_f] = S[g_s] + S[g_f] + S_c[g_s, g_f], \quad (15.101)$$

$$S_c[g_s, g_f] = \frac{2}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} \operatorname{tr} \left[(g_s^{-1} \nabla g_s) (g_f \nabla g_f^{-1}) \right]. \quad (15.102)$$

接下来我们假设场的高能涨落很弱, 进而我们可以考虑展开

$$g_f \equiv e^W = 1 + W + \frac{1}{2} W^2 + \dots, \quad (15.103)$$

并且 $S[g_f]$ 和 $S_c[g_f, g_s]$ 也都能按 W 展开. 特别的, 此时 $S[g_f]$ 展开的二阶项为

$$\begin{aligned} S^{(2)}[W] &= -\frac{1}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} \operatorname{tr} [(\nabla W)(\nabla W)] = \frac{1}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} \nabla \pi^a \nabla \pi^b \operatorname{tr} (T^a T^b) \\ &= \frac{1}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \pi^a)(\nabla \pi^a) \equiv \frac{1}{2} \sum_{p \in f} \pi_p^a \Pi_p^{-1} \pi_p^a, \end{aligned} \quad (15.104)$$

其中

$$\Pi_p = \frac{\lambda}{2L^d p^2} \quad (15.105)$$

为场传播子. 由于 $S[g_f]$ 展开的 $\mathcal{O}(W)$ 项总能通过场变量的平移而被二阶项吸收, 进而我们在积出快自由度时可以在一阶近似水平上仅考虑

$$\langle \cdots \rangle_f = \int \mathcal{D}[\pi] e^{-S^{(2)}[\pi]} \cdots \quad (15.106)$$

我们在计算时一方面需要使用 Wick 定理收缩 π^a 场来得到传播子, 另一方面需要借助 \mathfrak{g} 生成元的正交性和完备性关系来处理可能出现的 Lie 代数矩阵以及迹运算.

15.5.2 单圈计算

现在将群取作 $O(N)$. 单圈水平上我们只需要将快慢场耦合项 $S_c[g_s, g_f]$ 展开到 $\mathcal{O}(W^2)$ 并得到

$$S_c^{(2)}[g_s, g_f] = \frac{1}{\lambda} \int d^d \mathbf{r} \operatorname{tr}(\Phi_\mu [\nabla_\mu W, W]) \approx -\frac{2iL^d}{\lambda} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{p} \in f} p_\mu \operatorname{tr}[\Phi_{-\mathbf{q}}^\mu W_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} W_{-\mathbf{p}}], \quad (15.107)$$

其中我们记 $\Phi_\mu = g_s^{-1} \partial_\mu g_s$ 并在得到第二个约等号时使用了近似 $2\mathbf{p} + \mathbf{q} \approx 2\mathbf{p}$. 为了得到对 relevant 算符的修正, 我们便只需要考虑

$$S[g_s] \rightarrow S[g_s] - \frac{1}{2} \left\langle (S_c^{(2)}[g_s, W])^2 \right\rangle_f. \quad (15.108)$$

在 $d = 2 + \varepsilon$ 处进行圈积分并做 rescaling 后, 我们会得到

$$S[g] \rightarrow b^\varepsilon \left[1 - \frac{(N-2)\lambda \ln b}{4\pi} \right] S[g]. \quad (15.109)$$

进而我们可以得到 Gell-Mann-Low 方程

$$\frac{d \ln \lambda}{d \ln b} = \frac{(N-2)\lambda}{4\pi} - \varepsilon + \mathcal{O}(\lambda^2, \varepsilon^2, \lambda \varepsilon). \quad (15.110)$$

这个方程表明, 对于 $N > 2$ 的情况, 在 $d < 2$ 时 RG 流会将 λ 推向正无穷, 进而此时系统在宏观上总会表现出无序特征. 但是在 $d > 2$ 时, 理论却在 $\lambda_c = \frac{2\pi\varepsilon}{N-2}$ 处存在一个不稳定不动点: $0 < \lambda < \lambda_c$ 时群流会将 λ 推向 0, $\lambda > \lambda_c$ 时 λ 则会被推向正无穷.

在 $d = 2$ 且 $N = 2$ 时系统的耦合常数并不会随 RG 跑动, 这是因为此时 NLSM 的作用量直接是

$$S = \frac{1}{\lambda} \int d^2 \mathbf{r} (\nabla \phi)^2, \quad \phi \in \mathbb{S}^1. \quad (15.111)$$

这是一个不会被 RG 重整化的自由作用量. 不过此时 ϕ 取值的 \mathbb{S}^1 拥有非平凡的拓扑, 而会让 $O(2)$ 模型有着非常有趣的涨落行为.

15.6 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 相变

场构型空间的拓扑结构会剧烈影响理论的长程行为, 我们现在便要来考察一个例子: 考虑一个二维方形格点, 并且我们在每个格点 i 上都放一个 $U(1)$ 变量 $e^{i\theta_i}$. 如果我们要求系统的 Hamilton 量对各个 θ_i 都有周期性并且在场构形均匀的情况下取极小值, 那么其最基础的构造方式便为

$$H[\theta] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (15.112)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 表示对近邻格点求和. 这一模型叫做二维 XY -模型, 其连续极限正是 $U(1)$ 非线性 σ -模型. 事实上, 这个模型在很多凝聚态系统里都可以被实现 (如 granulated metals 和 Josephson 结阵列).

我们可以通过考察高温和低温展开来获悉二维 XY -模型相较于其它经典二维自旋模型的不同之处. 在高温极限下, 我们可以将配分函数展开为

$$Z = \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} e^{-S[\theta]} \approx \int_0^{2\pi} \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \prod_{\langle k\ell \rangle} [1 + J \cos(\theta_k - \theta_\ell)]. \quad (15.113)$$

我们可以将这一展开式中每一项都视作一个图, 其中每一个 $\cos(\theta_i - \theta_j)$ 都对应着连接格点 i, j 的一条边. 由于

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta_i}{2\pi} \cos(\theta_i - \theta_j) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_i}{2\pi} \cos(\theta_i - \theta_{j_1}) \cos(\theta_i - \theta_{j_2}) \cos(\theta_i - \theta_{j_3}) = 0 \quad (15.114)$$

而剩下两个情况不等于零, 进而会为配分函数给出非平凡贡献的项中每个顶点要么没有发出的边, 要么连接有两条或四条边: 进而我们可以将这个高温展开按"圈"展开. 我们也可以按类似的方式计算关联函数 $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle = \langle \cos(\theta_r - \theta_0) \rangle$ 的高温展开, 此时在领头阶贡献到其表达式的图只有那些连接了 0 和 r 的图, 进而我们有

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle \sim \left(\frac{J}{2} \right)^{|r|} \sim e^{-|r|/\xi}, \quad \xi^{-1} \equiv \ln \frac{2}{J}. \quad (15.115)$$

可以看到, 这表现出了指数衰减. 与之相对, 在低温时相邻自旋的涨落很小, 我们可以忽略格点的高能自由度而将之连续化为

$$\frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\theta)^2, \quad (15.116)$$

并且此时我们有着截断能标 $1/a$. 如果我们忽略场构形空间的拓扑效应而将 θ 当做一个一般的标量处理, 那么此时关联函数的领头阶近似为 Gauss 的:

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle = \text{Re} \left\langle e^{i[\theta(0) - \theta(r)]} \right\rangle \approx e^{-\frac{1}{2} \langle [\theta(0) - \theta(r)]^2 \rangle}. \quad (15.117)$$

鉴于在截断后

$$\langle [\theta(0) - \theta(r)]^2 \rangle = \frac{1}{2\pi J} \ln \frac{|r|}{a}, \quad (15.118)$$

我们便有

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle \sim \left(\frac{a}{|r|} \right)^{\frac{1}{2\pi J}}. \quad (15.119)$$

可以看到, 此时它变成了代数衰减, 我们称之为准长程序²¹.

高温和低温极限下关联函数渐进行为的差异暗示了有限温处相变的存在性. 不过这其实不是 XY -模型独一无二的特征: 事实上, 任何连续自旋模型中的关联函数都会在高温下表现出指数衰减, 并且在二维时, 其低温展开的 Gauss 阶近似都会表现出幂律衰减. 然而我们目前其实并没有 justify 展开到 Gauss 阶的合法性, 现在我们并不确定剩下的高阶项会不

²¹这一准长程序其实暗示了 RG 流中临界指数连续变化的临界线的存在 [7].

会影响关联函数在低温极限下的行为. 尽管我们根据 $O(N)$ 非线性 σ -模型的 $(2 + \varepsilon)$ -展开会发现 $N > 2$ 时二维模型的 RG 流会将系统推向无序相, 但这一结论并不适用于 $N = 2$ 的情况, 尽管此时高阶微扰论给出的 β 函数依旧是零. 我们当前的问题便是在二维 XY-模型中到底是否存在一个标志渐进行为改变的相变点, 以及造成低温准长程序在高温时被破坏的机制是什么. 由于微扰 RG 已经表明梯度展开包含的高阶项并不是 relevant 的, 因而我们现在需要寻找新的 relevant 算符.

15.6.1 涡旋和拓扑相变

单纯的梯度展开只适用于场构形在基态附近的微小形变, 因而仅能用于描述能够被连续形变为均匀基态的场构形. Berezinskii, Kosterlitz 和 Thouless 在他们的开创性工作中则发现这一系统中的无序则和拓扑缺陷 (此时即涡旋) 的凝聚有关. 由于基本场变量的取值范围为 S^1 , 因而我们可以构造出绕闭合路径走一圈后角度旋转 $2\pi n$ 的场构形, 这里的 n 便被定义为了这个路径包围的拓扑荷. 这一荷的离散性使得我们没法将拓扑荷非平凡的场构形连续形变为拓扑荷平凡的均匀情况.²² XY-模型里最基本的拓扑缺陷叫做单位涡旋并且有着单位拓扑荷, 此时绕闭合路径一周后自旋指向角度变化为 $\pm 2\pi$.

如果围绕一个涡旋的路径的半径足够大, 那么相邻两个自旋的角度变化便会足够小, 进而我们能忽略格点的离散性而将此时的理论连续化并考虑角度场 $\theta(\mathbf{r})$. 此时我们便有

$$\oint \nabla \theta \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n, \quad (15.120)$$

进而我们有

$$\nabla \theta = \frac{n}{r} \hat{e}_z \times \hat{e}_r, \quad (15.121)$$

其中 \hat{e}_z 为平面的法向量, \hat{e}_r 为路径的径向矢量. 注意, 这一连续近似在靠近涡旋中心的地方会失效.

我们后面会通过 RG 来理解缺陷驱动的拓扑相变, 但是我们也可以按照 Kosterlitz 和 Thouless 一开始提出的直观图像来认识它. 形成一个 n -拓扑荷涡旋的耗能可以被分为形成核心区的耗能和形成外围能被连续理论所描述的区域耗能, 并且如果我们假设两个区域能被半径为 a 的圆周区分开, 那么这个涡旋的作用量便为

$$S_n = S_n^{\text{core}}(a) + \frac{J}{2} \int_a^L d^2\mathbf{r} (\nabla \theta)^2 = S_n^{\text{core}}(a) + \pi J n^2 \ln \frac{L}{a}. \quad (15.122)$$

由于系统体积很大, 可以看到主导作用量的部分还是由连续场论描述的构型并且激发这些拓扑非平凡构型所需的能量也十分巨大. 这使得系统在低温下很难自发产生了这些涡旋并表现出了准长程序. 为了更定量地研究低温下涡旋产生被抑制的程度, 我们可以考虑有着一个单位涡旋的构型对应的配分函数

$$Z_1 \sim \left(\frac{L}{a}\right)^2 \exp\left(-S_1^{\text{core}}(a) - \pi J \ln \frac{L}{a}\right) = \exp\left(-S_1^{\text{core}}(a) + (2 - \pi J) \ln \frac{L}{a}\right), \quad (15.123)$$

其中系数 $(L/a)^2$ 来自涡旋中心在 L^2 的面积内的位置任意性带来的态密度. 可以看到, 此时涡旋的熵和能量都按 $\ln L$ 增长, 并且在低温下 $J \ll 1$, 进而单涡旋产生的概率会被指数

²²事实上, 序参量在紧群中取值的许多模型中都可能出现这样的拓扑缺陷, 例如有着 \mathbb{Z}_2 对称性的模型里会出现瞬子 (又称为畴壁), 由 $O(3)$ 刻画的三自旋分量铁磁 Heisenberg 模型里会出现斯格明子, 我们以后会专门讨论这些拓扑效应.

压低. 但是当 $J < J_c = 2/\pi$ 时 $(2 - \pi J) > 0$ 单涡旋产生的概率便不再能被忽略, 进而我们此时可以期待涡旋的自发产生以及无序相的生成.

这里的 J_c 只是相变点的下限. 因为耦合常数更大时系统可能同时存在两个涡旋. 而如果两个拓扑荷分别为 ± 1 的涡旋的距离 d 足够小, 那么我们在外围感受到的 $\nabla\theta$ 便为

$$\nabla\theta \sim \frac{d}{|\mathbf{r}|^2}, \quad (15.124)$$

并且形成这一构型消耗的能量在热力学极限下也是有限的. 这意味着系统在任意非零温度下都可能产生这种涡旋偶极子, 并且我们应该将系统的低温状态视作紧束缚偶极子气. 随着温度的升高, 这些偶极子的密度以及各个偶极子的尺寸都会变大, 并且高温相便对应着由无束缚的涡旋组成的等离子体.

15.6.2 重整化群分析

为了定量地解释 BKT 相变, 我们还是要诉诸重整化群方法. 此时我们需要先区分系统中不同的涨落, 并且在 XY-模型里我们需要区分在在基态附近的拓扑平凡的 harmonic 涨落和存在涡旋的拓扑涨落. 记 $\mathbf{u} \equiv \nabla\theta$, 那么对于拓扑平凡的涨落我们有

$$\oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{u} = 0 \Rightarrow \nabla \times \mathbf{u} = 0, \quad (15.125)$$

我们为其赋予一个连续的处处有定义的标量势 ϕ 并记非拓扑的构型为

$$\mathbf{u}_0 \equiv \nabla\phi. \quad (15.126)$$

而对于一个在点 \mathbf{r}_i 处存在带有 n_i 拓扑荷的涡旋的拓扑激发, 我们沿一个包含各个涡旋的足够大的圆的积分会给出

$$\oint d\mathbf{l} \cdot \mathbf{u}_1 = \int d^2\mathbf{r} \hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{u}_1) = 2\pi \sum_i n_i. \quad (15.127)$$

进而我们便有

$$\hat{e}_z \cdot (\nabla \times \mathbf{u}_1) = 2\pi \sum_i n_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (15.128)$$

我们考虑 ansatz $\mathbf{u}_1 = -\nabla \times (\psi \hat{e}_z)$, 那么上式便给出

$$\nabla^2 \psi = 2\pi \sum_i n_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (15.129)$$

解便为

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i n_i \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|. \quad (15.130)$$

于是一个一般的场构形可以被记作²³

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_1 = \nabla\phi - \nabla \times (\psi \hat{e}_z). \quad (15.131)$$

²³Helmholtz 分解?? 将一个向量场分成了无旋和有旋两部分?? 我们这里区分拓扑平庸和非平庸的构型便是在区分无旋场和有旋场, 并且我们 naive 地在均匀构型附近做微扰展开时仅仅考虑了无旋项的贡献.

于是作用量便可以写成

$$\begin{aligned} S[u] &= \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} u^2 \\ &= \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} [(\nabla\phi)^2 - 2\nabla\phi \cdot [\nabla \times (\psi\hat{e}_z)] + (\nabla \times (\psi\hat{e}_z))^2]. \end{aligned} \quad (15.132)$$

第二项是一个全积分, 并且它按 $\ln L \sum_i n_i$ 的规律随系统尺寸增长. 进而为了简化我们的分析, 我们假设系统整体呈荷中性并 $n_i = \pm 1$ ²⁴, 进而这一项的贡献可以被略去. 第三项作为拓扑激发项可以被化作

$$S_t[\psi] = -\frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} \psi \nabla^2 \psi = -2\pi^2 J \sum_{i \neq j} n_i n_j C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \sum_i S_{n_i}^{\text{core}}, \quad (15.133)$$

其中

$$C(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r}| \quad (15.134)$$

正是二维 Coulomb 势. 由于这一项在 $\mathbf{r} = 0$ 处会发散, 我们便引入了正规化这一我们没法计算也不会去关心的核心处作用量的项 $S_{n_i}^{\text{core}}$.

现在我们便可以按照涡旋数 $2N$ 将系统的构型分为不同的 topological sectors, 系统的个配分函数也可以被表示为拓扑平凡部分的贡献

$$Z_{\text{trivial}} = \int \mathcal{D}[\phi] \exp\left(-\frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} (\nabla\phi)^2\right) \quad (15.135)$$

与拓扑非平凡部分

$$Z_{\text{topo}} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{(N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2\mathbf{r}_i e^{-S_t} \quad (15.136)$$

的乘积, 即 $Z = Z_{\text{trivial}} Z_{\text{topo}}$. 我们可以定义涡旋的逸度为

$$y_0 \equiv e^{-S_{\pm 1}^{\text{core}}}, \quad (15.137)$$

那么拓扑部分的配分函数可以被化为

$$Z_t = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{y_0^{2N}}{(N!)^2} \int \prod_{i=1}^{2N} d^2\mathbf{r}_i \exp\left[4\pi^2 J \sum_{i < j} n_i n_j C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right], \quad (15.138)$$

这在形式上正是有 N 个正电荷和 N 个负电荷的二维中性 Coulomb 等离子体的配分函数. 事实上, 许多二维多体系统的低维物理特征都会落到 XY -模型 (或者说二维 Coulomb 等离子体) 这个普适类里.

由于拓扑平凡部分总是解析的, 因此 XY -模型的相变行为一定由拓扑非平凡的 Coulomb 气部分描述. 如前所述, 低温下 Coulomb 等离子体中的正负电荷会紧束缚为偶极子, 而高温下偶极子会裂解为自由电荷. 我们可以通过考察介质中相距 X 的两个试探电荷间的相互作用来区分这两个相. 如果不存在 Coulomb 等离子体, 那么这两个电荷间的相互作用势就是 $C(X)$; 而 Coulomb 等离子体的存在使得二者的有效相互作用被修正为了

²⁴事实上低温时被激发的高拓扑涡旋数目很少, 我们可以将其忽略.

$C(X)/\varepsilon_r$, 其中 ε_r 为有效介电常数. 进而温度从低到高时出现的偶极子气-等离子体相变便像一个从绝缘相到完全屏蔽外电荷使得相互作用指数衰减的金属相的相变.

为了定量刻画这个图像, 我们需要计算逸度为 y_0 的两个位于 \mathbf{r} 和 \mathbf{r}' 的正负电荷间的有效相互作用. 为此, 我们考虑将 $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}_2$ 处的正负电荷孤立出来并按如下方式计算二者间的有效作用量:

$$e^{-S_{\text{eff}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \frac{1}{Z_t} \sum_{N=1}^{\infty} \frac{y_0^{2N}}{(N!)^2} \int \prod_{i=2}^{2N} d^2 \mathbf{r}_i \exp \left[4\pi^2 J \sum_{i<j} n_i n_j C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]. \quad (15.139)$$

这可以按 y_0 的阶数来开展微扰论, 并且我们在积分时加以适当的紫外截断后可以得到

$$e^{-S_{\text{eff}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = e^{-4\pi^2 J C(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \left[1 + 16\pi^5 J^2 y_0^2 C(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \int_1^{\infty} dx x^{3-2\pi J} + \mathcal{O}(y_0^4) \right], \quad (15.140)$$

进而我们可以得到有效耦合常数为

$$J_{\text{eff}} = J + 4\pi^4 J^2 y_0^2 \int_1^{\infty} dx x^{3-2\pi J} + \mathcal{O}(y_0^4), \quad (15.141)$$

其中 x 标志着两个正负电荷间的距离并且介质的有效退极化常数便为 $\varepsilon_r = J/J_{\text{eff}}$. 不过我们也可以看到, 这里微扰修正项中的积分只有在 $J > J_c = \frac{2}{\pi}$ 时才有可能收敛, 并且这里的临界值 J_c 正是我们之前分析得到的使得单涡旋自由能符号变号的临界值. 因而我们根据一般的微扰论很难看出系统的相变行为. 我们必须再次诉诸 RG 方法: 此时我们来考察 J 和 y_0 随着逐层积出 x 代表的微观自由度形成的重整化群流的跑动.²⁵

现在我们将 x 的积分域 $[1, +\infty)$ 分为 $[1, b] \cup (b, +\infty)$, 并且无论 J 取何值, 我们总可以计算在 $[1, b]$ 上的积分并利用这一结果重整化 J 而得到新的重整化耦合常数 \tilde{J} , 其满足

$$\tilde{J}^{-1} = J^{-1} + 4\pi^3 y_0^2 \int_1^b dx x^{3-2\pi J} + \mathcal{O}(y_0^4), \quad (15.142)$$

而其对应的有效耦合常数便满足²⁶

$$\tilde{J}_{\text{eff}}^{-1} = \tilde{J}^{-1} + 4\pi^3 y_0^2 \int_b^{+\infty} dx x^{3-2\pi \tilde{J}} + \mathcal{O}(y_0^4). \quad (15.143)$$

我们可以将这里的 x rescale 为 x/b , 进而上式形式上又变回了原来的积分:

$$\tilde{J}_{\text{eff}}^{-1} = \tilde{J}^{-1} + 4\pi^3 \tilde{y}_0^2 \int_1^{\infty} dx x^{3-2\pi \tilde{J}} + \mathcal{O}(y_0^4), \quad \tilde{y}_0 = b^{2-\pi J} y_0. \quad (15.144)$$

这意味着我们积出的高能自由度在做 rescale 后仍给出了 Coulomb 等离子体系统, 不过此时系统中的参数 J 和 y_0 发生了跑动——Exactly RG! 取 $\ell = \ln b$, 现在我们便能得到 J^{-1} 和 y_0 满足的重整化群方程

$$\frac{dJ^{-1}}{d\ell} = 4\pi^3 y_0^2 + \mathcal{O}(y_0^4), \quad (15.145)$$

$$\frac{dy_0}{d\ell} = (2 - \pi J) y_0 + \mathcal{O}(y_0^4). \quad (15.146)$$

²⁵从计算得到的有效耦合常数出发做 RG 看起来更像高能物理喜欢的做法?

²⁶注意将指数上的 J 直接换成 \tilde{J} 带来的误差是 $\mathcal{O}(y_0^4)$ 的.

可以看到, J^{-1} 随 ℓ 单调递增, 而 y_0 在 $J_c^{-1} = \frac{\pi}{2}$ 处会变好. 在高温下 $J^{-1} > J_c^{-1}$, y_0 是 relevant 的; 而在低温下 y_0 不再 relevant. 这一方程给出的重整化群流见图4. 可以看到, 在温度比较低且 y_0 比较小时, RG 流终止于 $y_0 = 0$ 且 $J^{-1} < \frac{\pi}{2}$ 的不动线上, 这对应着偶极子凝聚的绝缘态 (也正是因此 y_0 会在粗粒化下消失) 亦即 XY-模型的低温相. 此时有效相互作用的强度由流在不动线上的终点对应的 J^{-1} 值决定. 其余的 RG 流都会将这两个参数推向微扰论失效的区域, 而这正是涡旋占主导的高温相的信号.

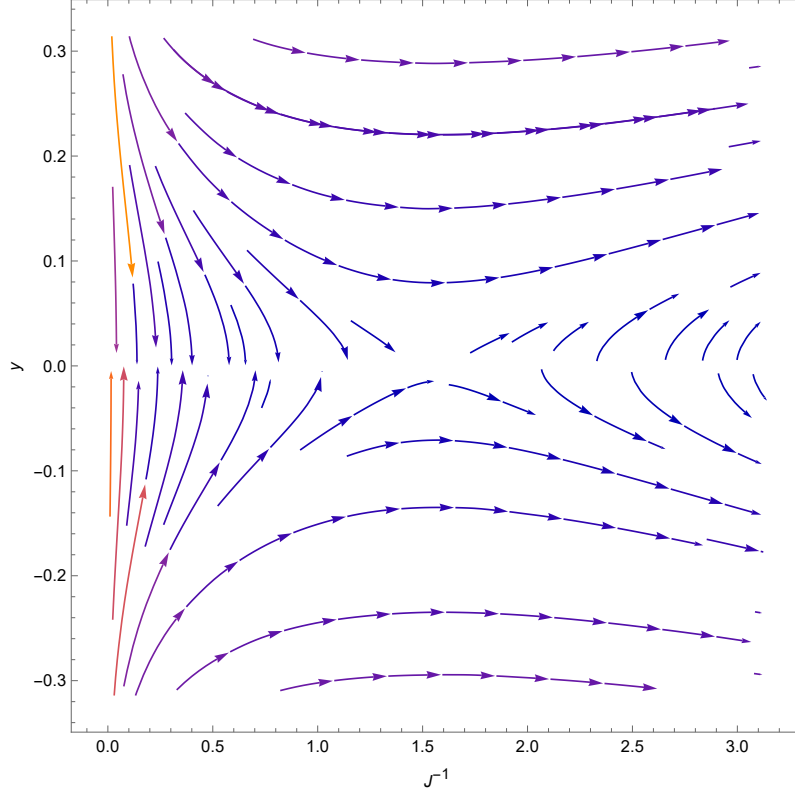


Figure 4. XY-模型的重整化群流; 其中我们为了展示的美观将 y 延拓到了负半轴.

15.7 反向重整化群

如果我们把常规重整化群的方向反过来: 不再积出高能自由度, 而是去逐步积出低能自由度. 这应该能反映我们一个紫外完备的理论中从低分辨率出发, 逐步提高分辨率时观测到的系统的性质变化. 特别的, 当我们工作在足够高的能标时, 低能的长波自由度会表现为一个没有动力学的本底, 因而我们按理来说可以放心地把它积出去. 问题是此时我们需要考虑进众多在通常的 RG 中 irrelevant 的算符, 并且我们找不到一种恰当的 rescale 方式来将积出低能自由度后的有效作用量变换到与先前一致的形式. (听起来很符合物理直观, 但是算起来不知道有什么用...)

16 拓扑相

16.1 历史故事

1980 年之前, 材料中的电子态会被分类为绝缘态、金属态、超导态以及磁性态. 超导性和磁性可以被对称性自发破缺所描述, 而绝缘态和金属态能被 Bloch 能带理论所描述. 但后来人们发现了由一类过渡金属氧化物中的电子-电子相互作用使得能带理论预言其为导体但实际上是绝缘体 (Mott 绝缘体). 1955 年, Peierls 预言一维金属中的电子-声子相互作用会造成 Fermi 面不稳定性并带来伴随晶格扰动的金属-绝缘体相变. 1958 年, Anderson 提出了由晶格的无序性造成的绝缘体并于 1979 年在此基础上引入了局域化的标度理论. 1963 年, Hubbard 提出了作为紧束缚模型的改进的 Hubbard 模型并能成功语言 Mott 绝缘体.

1980 年, von Klitzing 及其合作者观测到了整数量子 Hall 效应 (IQH) 并发现 Fermi 能位于两个 Landau 能级之间的系统表现为绝缘体, 并且测得的 Hall 电导按 e^2/h 量子化. 实验发现, Hall 电导的这一特性有材料的几何性质以及掺杂无关而仅要求两个 Landau 能级的间隔远大于 $k_B T$. 这表明 IQH 态没有破缺什么对称性并且其量子化特性相当的稳健. 后来人们发现承载 Hall 电流的 IQH 态被束缚在系统的边缘, 而其相对边界形变的稳健性来自于它保持拓扑序. 1982 年, Thouless, Kohmoto, Nightingale 和 de Nijs 证明 Hall 电导和系统的第一陈数有关; 而 1984 年 Berry 相理论的出现进一步表明这一拓扑不变量来自于在二维 Brillouin 区的闭曲面上对 Berry 曲率进行的积分.

我们这里的想法是将 Bloch 波函数视为从 \mathbf{k} -空间中的 Brillouin 区到 Hilbert 空间的映射, 这个映射的像不但是一个子空间, 其还拥有流形结构并允许我们讨论固体中的电子态在 Hilbert 空间中的拓扑性质. 在这个图像中, QHE 电子态到 Hilbert 空间的映射便有着非平凡的拓扑缠绕数并表明量子 Hall 态能在拓扑层面上区分不同的系统并启发我们采纳一种新的材料分类范式.

21 世纪的前十年见证了量子自旋 Hall (QSH) 系统和 \mathbb{Z}_2 拓扑数 ν 的发展; 2011 年又出现了拓扑晶体绝缘体和 Weyl 半金属, 前者的拓扑绝缘性由晶体点群对称性所保护而后者和三维固体中能带的偶然二重简并有关.

16.2 物理 Hilbert 空间的拓扑

我们在量子力学中使用的 Hilbert 空间 \mathcal{H} 被 Hamilton 量 \mathcal{H} 的各个本征矢 $|\psi_n\rangle$ 所张成, 记其维数为 $\mathcal{N} + 1$ 进而 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{\mathcal{N}+1}$. 由于我们可以仅考虑归一化态矢, 因此这个归一化 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_N = S^{2\mathcal{N}+1} \subset \mathcal{H}$, 其中 $S^{2\mathcal{N}+1}$ 是 $(2\mathcal{N} + 1)$ 维实球面.

\mathcal{H}_N 并不是物理 Hilbert 空间, 因为两个相差一个 $U(1)$ 相位的归一化态代表了相同的物理态, 因而物理态所在的射影空间 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 应该是 \mathcal{H}_N 和 $U(1)$ 的商空间:

$$\mathcal{P}(\mathcal{H}) = \mathcal{H}_N / U(1) = S^{2\mathcal{N}+1} / S^1. \quad (16.1)$$

我们可以将 \mathcal{H}_N 视作一个纤维丛, 其底流形为物理态空间 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 而纤维便是 $U(1)$ 相位. 我们后面便可以从纤维丛角度出发分析具体问题包含的拓扑性质.

16.3 Berry 相位

16.3.1 直观推导

我们现在考察由 Hamilton 量 $\mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)]$ 中的参数组 $\boldsymbol{\eta}(t)$ 的循环绝热演化带来的 Berry 几何相位. 为简便起见, 我们假设 Hamilton 量 $\mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}]$ 有着光滑依赖于 $\boldsymbol{\eta}$ 的离散谱 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{\eta})$, 并且绝

热演化中不存在 energy crossing. 按照一般的量子绝热定理, $\boldsymbol{\eta}(t)$ 绝热变化时处于一个本征态的系统将保持在同一能级对应的本征态中, 但这一结论其实是相当不完整的.

我们需要考虑的 Schrödinger 方程可以被记作

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)] |\psi(t)\rangle. \quad (16.2)$$

虽然 Hamilton 量含时, 但是我们总可以把解在 $\mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)]$ 的本征矢上展开而得到

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu}(t) |\mu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle. \quad (16.3)$$

将上式代入 Schrödinger 方程便会得到

$$\dot{c}_{\mu}(t) = -i\varepsilon_{\mu}(t)c_{\mu}(t) - \sum_{\nu} c_{\nu}(t) \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(t) | \partial_t | \nu, \boldsymbol{\eta}(t) \rangle. \quad (16.4)$$

因此, 如果我们把初态取作 $c_{\mu}(0) = 1, c_{\nu}(0) = 0$, 那么绝热定理在 $\langle \mu, \boldsymbol{\eta}(t) | \partial_t | \nu, \boldsymbol{\eta}(t) \rangle \ll 1$ 时可以得到满足. 我们可以具体计算一下这个内积: 考虑到

$$\mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)] |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle = \varepsilon_{\nu}(t) |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle, \quad (16.5)$$

我们在等号两边同时对时间微分可以得到

$$(\partial_t \mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)]) |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle + \mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)] \partial_t |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle = (\partial_t \varepsilon_{\nu}(t)) |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle + \varepsilon_{\nu}(t) \partial_t |\nu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle. \quad (16.6)$$

将上式与 $|\mu, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle$ 内积并利用不同本征矢间的正交性便有

$$\langle \mu, \boldsymbol{\eta}(t) | \partial_t | \nu, \boldsymbol{\eta}(t) \rangle = \frac{\langle \mu, \boldsymbol{\eta}(t) | (\partial_t \mathcal{H}[\boldsymbol{\eta}(t)]) | \nu, \boldsymbol{\eta}(t) \rangle}{\varepsilon_{\mu}(t) - \varepsilon_{\nu}(t)}. \quad (16.7)$$

绝热演化要求这是在 $\nu \neq \mu$ 时一个小量, 进而我们可以近似解得

$$c_{\mu}(t) = e^{-i \int_0^t d\tau \varepsilon_{\mu}(\tau)} e^{i \int_0^t d\tau i \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) | \partial_t | \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) \rangle} \equiv e^{i\alpha(t)} e^{i\gamma(t)}. \quad (16.8)$$

其中第一个复相位为动力学相, 第二个便是几何相. 我们可以将几何相改写为

$$\begin{aligned} \gamma &= \int_0^t d\tau i \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) | \partial_t | \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) \rangle = \int_0^t d\tau i \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) | \nabla_{\boldsymbol{\eta}} | \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) \rangle \frac{d\boldsymbol{\eta}}{d\tau} \\ &= \int_{\boldsymbol{\eta}(0)}^{\boldsymbol{\eta}(t)} d\boldsymbol{\eta} i \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) | \nabla_{\boldsymbol{\eta}} | \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) \rangle. \end{aligned} \quad (16.9)$$

因此这个相位和系统的绝热演化在参数空间中的轨迹有关. 如果这个轨迹是 $\boldsymbol{\eta}$ -空间里的一条闭合回路, 那么这一 Berry 相位便和线丛上的和乐群有着深刻的联系.

记这条闭合轨迹为 C 并记

$$\gamma = \oint_C \boldsymbol{\mathcal{A}} \cdot d\boldsymbol{\eta} \mod 2\pi, \quad \boldsymbol{\mathcal{A}} = i \langle \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) | \nabla_{\boldsymbol{\eta}} | \mu, \boldsymbol{\eta}(\tau) \rangle. \quad (16.10)$$

对于非简并态 $|\psi(\boldsymbol{\eta})\rangle$, 它有着一个相位自由度并且我们可以等价地使用 $e^{i\theta(\boldsymbol{\eta})} |\psi(\boldsymbol{\eta})\rangle$ 而不影响最后的物理. 类似的, 我们在 $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ 的表达式中使用类似的规范变换并且可以得到

$$\boldsymbol{\mathcal{A}} \rightarrow \boldsymbol{\mathcal{A}} - \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \theta. \quad (16.11)$$

可以看到, 这正是一个 $U(1)$ 规范变换并且我们会称 \mathcal{A} 为 Berry 矢势. 同时我们不难意识到环路积分 γ 是规范不变的, 并且我们可以用 Stokes 定理将其化为对以环路 C 为边界的曲面上的 Berry 曲率的面积分:

$$\gamma = \oint_C \mathcal{A} \cdot d\boldsymbol{\eta} \mod 2\pi = \iint_{S(C)} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S}_\eta \mod 2\pi, \quad (16.12)$$

其中

$$\mathcal{F} = \nabla_\eta \times \mathcal{A}, \quad \mathcal{F}_{\alpha\beta} = \partial_\alpha \mathcal{A}_\beta - \partial_\beta \mathcal{A}_\alpha = -2 \operatorname{Im}\{(\partial_\alpha \langle \psi(\boldsymbol{\eta}) |) (\partial_\beta | \psi(\boldsymbol{\eta}) \rangle)\}. \quad (16.13)$$

这一 Berry 相位只有在两种情况下非平凡: 要么 \mathcal{A} 的旋度非零, 要么 C 所在的区域非单连通.

16.3.2 纤维丛语言下的 Berry 相

为了说明这一点, 我们可以从一个更加拓扑的角度来重新处理 Berry 曲率. 由于系统的么正演化保内积和理论的 Hilbert 空间不变, 因此由不同的 $\boldsymbol{\eta}$ 确定的理论中的归一化态矢都是 Hilbert 空间里的子空间 S^{2N+1} 中的元素, 同时物理态空间 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 便是以 $U(1)$ 群为纤维的线丛 \mathbb{E} 的底流形. 我们假设 $\mathcal{H}(\boldsymbol{\eta})$ 对 $\boldsymbol{\eta}$ 光滑, 因此 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 相对 $\boldsymbol{\eta}$ 是全纯的.

我们仍然考虑一个离散并且非简并的本征态 $|\psi_\mu(\boldsymbol{\eta})\rangle$, 记对应的本征值为 $\varepsilon_\mu(\boldsymbol{\eta})$. 系统的绝热循环演化路径对应着 $\boldsymbol{\eta}$ -空间里的一条以绝热慢的速度划出的闭合曲线 $\mathcal{C}: t \mapsto \boldsymbol{\eta}(t), \boldsymbol{\eta}(0) = \boldsymbol{\eta}(T)$, 这在底流形 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 上对应着一条确定的路径. 显然, 系统的绝热演化路径应该也能被线丛 \mathbb{E} 中的一条曲线所刻画, 并且这个曲线到底流形的投影为闭合曲线 \mathcal{C} . 但这并不意味着 \mathbb{E} 中的曲线是闭合的: 显然我们只需要要求曲线的起终点位于同一根纤维上, 而这便会让循环绝热演化的初末态有着不同的复相位.

我们现在便可以考虑为线丛 \mathbb{E} 定义 Berry 联络. 为此, 我们需要定义 \mathbb{E} 的竖直方向: 取底流形 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 中的一个元素 $|\psi(\boldsymbol{\eta})\rangle$, 那么我们可以记纤维 $\pi^{-1}(|\psi(\boldsymbol{\eta})\rangle)$ 中的元素为

$$|\psi(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle = e^{i\phi} |\psi(\boldsymbol{\eta})\rangle. \quad (16.14)$$

我们可以用上式来表示 \mathbb{E} 中的任意一个元素, 并且定义垂直方向为 $U(1)$ 对底流形元素的作用生成的方向, 该方向的正交补便对应着水平方向²⁷. 系统的绝热演化 $\boldsymbol{\eta}(t)$ 在 \mathbb{E} 中生成的曲线可以被一般性地记作 $|\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$, 这条曲线的切矢量自然是

$$\frac{d}{dt} |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle := \partial_t |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle \in T\mathbb{E}. \quad (16.15)$$

$|\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 由 $U(1)$ 作用在 $|0, \boldsymbol{\eta}(t)\rangle$ 上生成, 因而它指向竖直方向, 我们便可以将切矢做如下分解:

$$\partial_t |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle = |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle \langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) | \partial_t |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle + |h_\psi(t)\rangle, \quad (16.16)$$

²⁷事实上, 纤维丛理论中对丛流形在 p 点切空间 $T_p\mathbb{E}$ 的竖直子空间的定义便为在丛的正则投影的推前映射下为零的子空间 (或者说 $\pi^{-1}[\pi(p)]$ 的切矢). 对于一般的纤维丛, 我们并不能 ad hoc 地定义与竖直子空间相对的水平子空间, 但是这里 Hilbert 空间的内积能让我们从竖直子空间出发定义出一个自洽的水平子空间, 不同点的水平子空间间的联系便给出了联络. 纤维丛上联络的意义便在于联系了不同点处的水平子空间.

我们可以利用联络把底流形上的一条曲线水平提升到纤维丛中, 即要求提升后的曲线的切矢始终位于水平子空间中; 而这样的曲线便允许我们平移不同点处的切矢并进行比较. 从这个意义上讲, 纤维丛上的联络和 Riemann 流形上的联络是一致的.

其中 $|h_\psi(t)\rangle$ 便代表切矢的水平分量. 我们可以在局域坐标系中将时间微分记作

$$\frac{d}{dt} = a_v \frac{\partial}{\partial \phi} + \sum_{\alpha} b_h^{\alpha} D_{\alpha} = a_v \frac{\partial}{\partial \phi} + \sum_{\alpha} b_h^{\alpha} \left(\frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}} + \mathcal{A}_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \quad (16.17)$$

进而

$$|\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle \langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))| \partial_t |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle = a_v \frac{\partial}{\partial \phi} |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle, \quad (16.18)$$

$$|h_\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} b_h^{\alpha} D_{\alpha} |\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle. \quad (16.19)$$

水平分量满足 $\langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) | h_\psi(t) \rangle = 0$, 进而

$$\langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) | \frac{\partial}{\partial \eta^{\alpha}} + \mathcal{A}_{\alpha} \frac{\partial}{\partial \phi} | \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) \rangle = 0. \quad (16.20)$$

鉴于 $|\psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle = e^{i\phi} |\psi(\boldsymbol{\eta}(t))\rangle$, 我们便可以得到

$$\mathcal{A}_{\alpha} = i \langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) | \partial_{\eta} | \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) \rangle. \quad (16.21)$$

可以看到, 这正是前面计算 Berry 相时出现的被积函数, 而我们现在为其赋予了一个几何意义: 系统归一化态矢组成的线丛上的由 Hilbert 空间的内积诱导的联络. 而完整的参数空间上的 Berry 联络便是一个 1-形式

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_{\alpha} d\eta^{\alpha} \equiv i \langle \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) | d | \psi(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t)) \rangle. \quad (16.22)$$

利用 Berry 联络, 我们定义底流形上曲线 $\boldsymbol{\eta}(t)$ (即我们设定的系统闭合绝热演化的一个路径) 的水平提升为 \mathbb{E} 中的曲线 $(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))$ 并且其切矢始终处在水平子空间中. 因此, 如果 $|\psi_h(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 是水平提升, 那么我们会期待

$$\langle \psi_h(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_t | \psi_h(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle = 0. \quad (16.23)$$

$|\psi_h(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 在 \mathbb{E} 中并不一定是条闭曲线; 其起点和终点的相位差在物理上可以被诠释为 Berry 相, 在几何上则可以被视作水平提升曲线的 holonomy. 我们可以引入 \mathbb{E} 中的一条投影仍为原闭曲线 $|\psi(\boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 的闭曲线 $|\psi_{\theta}(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle$. 考虑到 $|\psi_h(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 至多和 $|\psi_{\theta}(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle$ 差一个相位, 我们便可以记

$$|\psi_h(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle = e^{i\xi(t)} |\psi_{\theta}(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle, \quad |\psi_{\theta}(\phi(T), \boldsymbol{\eta}(T))\rangle = |\psi_{\theta}(\phi(0), \boldsymbol{\eta}(0))\rangle. \quad (16.24)$$

$|\psi_{\theta}(\phi(t), \boldsymbol{\eta}(t))\rangle$ 闭合的条件要求

$$\phi(T) - \phi(0) = 2n\pi, \quad (16.25)$$

同时我们有

$$|\psi_h(\phi(T), \boldsymbol{\eta}(T))\rangle = e^{i[\xi(T) - \xi(0)]} |\psi_h(\phi(0), \boldsymbol{\eta}(0))\rangle \equiv e^{i\gamma} |\psi_h(\phi(0), \boldsymbol{\eta}(0))\rangle. \quad (16.26)$$

我们现在便可以用闭合的辅助路径来将水平提升条件 (16.23) 改写为

$$\langle \psi_h(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_t | \psi_h(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle = i\xi(t) \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle + \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_t | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle = 0, \quad (16.27)$$

并且

$$\frac{d}{dt} |\psi(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle = \dot{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} |\psi(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle + \dot{\eta}^\mu \frac{\partial}{\partial \eta^\mu} |\psi(\phi, \boldsymbol{\eta})\rangle. \quad (16.28)$$

于是根据 (16.27), 几何相可以被写作

$$\begin{aligned} \gamma &= i \int_0^T dt \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_t | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle \\ &= i \int_0^T dt \dot{\phi} \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_\phi | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle + i \int_0^T dt \dot{\eta}^\mu \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_{\eta^\mu} | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle \\ &= - \int_{\phi(0)}^{\phi(T)} d\phi + i \int_{\eta^\mu(0)}^{\eta^\mu(T)} d\eta^\mu \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_{\eta^\mu} | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle \\ &= -2n\pi + \oint_{\mathcal{C}} \langle \psi(\boldsymbol{\eta}) | d | \psi(\boldsymbol{\eta}) \rangle = -2n\pi + \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}. \end{aligned} \quad (16.29)$$

注意 $\langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_{\eta^\mu} | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle$ 一定是个纯虚数, 因为

$$\partial_{\eta^\mu} \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle = 2 \operatorname{Re} \{ \langle \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) | \partial_{\eta^\mu} | \psi(\phi, \boldsymbol{\eta}) \rangle \} = \partial_{\eta^\mu} 1 = 0. \quad (16.30)$$

如果 \mathcal{C} 所在的区域单连通, 那么我们可以根据 Stokes 定理将 Berry 相位改写为

$$\gamma(\mathcal{C}) = \int_{S(\mathcal{C})} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S}, \quad (16.31)$$

其中 $S(\mathcal{C})$ 是以 \mathcal{C} 为边界的任意子流形, 其中 2-形式

$$\mathcal{F} = d\mathcal{A} \quad (16.32)$$

便是 Berry 曲率, 这在局域坐标系下便是

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \mathcal{F}_{ij} d\eta^i \wedge d\eta^j, \quad \mathcal{F}_{ij} = -\operatorname{Im} \{ \langle \partial_i \psi | \partial_j \psi \rangle - \langle \partial_j \psi | \partial_i \psi \rangle \}. \quad (16.33)$$

如果区域不是单连通的, 那么 Stokes 公式只对平凡同伦的路径 \mathcal{C} 成立, 而这种情况其实是相当常见的.

我们考虑 Hamilton 量的一个本征态 $|\psi_n\rangle$ 并记

$$\mathcal{F}_n(\boldsymbol{\eta}) = -\operatorname{Im} \langle d\psi_n(\boldsymbol{\eta}) | d\psi_n(\boldsymbol{\eta}) \rangle = -\operatorname{Im} \sum_{m \neq n} \langle d\psi_n | \psi_m \rangle \wedge \langle \psi_m | d\psi_n \rangle, \quad (16.34)$$

其中我们利用了 $\langle \psi_n | d\psi_n \rangle$ 为纯虚数进而 $\langle d\psi_n | \psi_n \rangle \wedge \langle \psi_n | d\psi_n \rangle$ 为实数. 如果系统的 Hamilton 量有着离散谱, 那么我们可以得到

$$\sum_n \mathcal{F}_n(\boldsymbol{\eta}) = 0. \quad (16.35)$$

我们还可以考虑 Schrödinger 方程

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\eta}) |\psi_n(\boldsymbol{\eta})\rangle = E_n(\boldsymbol{\eta}) |\psi_n(\boldsymbol{\eta})\rangle, \quad (16.36)$$

对其做外微分便能得到

$$\langle \psi_m(\boldsymbol{\eta}) | d\psi_n(\boldsymbol{\eta}) \rangle = \frac{\langle \psi_m(\boldsymbol{\eta}) | d\mathcal{H}(\boldsymbol{\eta}) | \psi_n(\boldsymbol{\eta}) \rangle}{E_n(\boldsymbol{\eta}) - E_m(\boldsymbol{\eta})}, \quad (16.37)$$

其中我们假设了 E_n 不简并, 而据此我们便能得到

$$\mathcal{F}_n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n(\boldsymbol{\eta}) | d\mathcal{H}(\boldsymbol{\eta}) | \psi_m(\boldsymbol{\eta}) \rangle \wedge \langle \psi_m(\boldsymbol{\eta}) | d\mathcal{H}(\boldsymbol{\eta}) | \psi_n(\boldsymbol{\eta}) \rangle}{[E_n(\boldsymbol{\eta}) - E_m(\boldsymbol{\eta})]^2}. \quad (16.38)$$

这是最趁手的计算 Berry 曲率的方式. 注意, 这个表达式在使得 $E_m(\boldsymbol{\eta}^*) = E_n(\boldsymbol{\eta}^*)$ 的参数 $\boldsymbol{\eta}^*$ 处存在奇点, 因而我们必须在参数空间里挖去这些点并破坏其单连通性, 而这会带来非平凡的拓扑数.

16.3.3 通量子化与陈数

Berry 曲率在闭曲面上的积分会表现出有趣的性质. 我们为简便起见考虑球面 \mathbb{S}^2 , 那么

$$\int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F}(\boldsymbol{\eta}) \cdot d\mathbf{S} \quad (16.39)$$

便代表了 Berry 曲率在 \mathbb{S}^2 上的通量. 事实上, 这一通量可以被表示为

$$\mathcal{C}_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F}(\boldsymbol{\eta}) \cdot d\mathbf{S} \in \mathbb{Z}, \quad (16.40)$$

\mathcal{C}_1 被称为第一类陈数.

为了说明球面的第一类陈数一定是整数, 我们不妨假设 $\mathcal{F}(\boldsymbol{\eta})$ 在 $\boldsymbol{\eta} = 0$ 处奇异并且我们考虑的球面以原点为球心. 那么我们可以按赤道面 $\eta_z = 0$ 将球面分为 S_{\pm} 上下两部分并将通量写作

$$\int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{S_+} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} + \int_{S_-} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S}. \quad (16.41)$$

注意到 ∂S_+ 和 ∂S_- 均是赤道线, 但是二者有着相反的定向. 记曲线 $\partial S_+ \equiv C$, 我们便有

$$\int_{S_{\pm}} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} = \pm \oint_C \mathcal{A}_{\pm} \cdot d\boldsymbol{\eta}, \quad (16.42)$$

$$\int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} = \oint_C \mathcal{A}_+ \cdot d\boldsymbol{\eta} - \oint_C \mathcal{A}_- \cdot d\boldsymbol{\eta}. \quad (16.43)$$

我们分割上下球面相当于选择了两个 coordinate patch, 而这两个 patch 上的 Berry 联络总能被一个规范变换

$$\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A} + d\phi \quad (16.44)$$

相联系, 进而

$$\int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} = \oint_C d\phi = \Delta\phi = 2n\pi. \quad (16.45)$$

陈数是一个相当 robust 的拓扑不变量, 并且会在量子 Hall 效应里扮演重要角色. 最近人们还发现了其它拓扑不变量, 如 \mathbb{Z}_2 ——它将时间反演对称的绝缘体分成了平凡绝缘体和拓扑绝缘体.

16.3.4 二能级系统

我们考虑一个二能级 Hamilton 量

$$\mathcal{H} = -\mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (16.46)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵, 而 $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^3$. 我们总可以将 \mathbf{d} 写作

$$\mathbf{d} = d\hat{n}, \quad \hat{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \quad (16.47)$$

于是 Hamilton 量可以被写作

$$\mathcal{H} = -d \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (16.48)$$

其本征值为 $\pm d$ 并且两个本征矢为

$$|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (16.49)$$

可以看到 d 不会影响本征态, 因而决定系统本征态的参数空间是 \mathbb{S}^2 .

现在我们考虑为基态 $|\psi_-\rangle$ 选取两个不同的规范:

$$|\psi_-^U\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_-^L\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (16.50)$$

这两个规范下的基态分别在 \mathbb{S}^2 的南极 ($\theta = \pi$) 与北极 ($\theta = 0$) 处不良定义, 因此我们必须引入两个 coordinate patches 以在 \mathbb{S}^2 上刻画系统的一个瞬时本征态. 两个规范下的基态在两个 coordinate patches 的交集 $U \cap V$ 上能被一个 $U(1)$ 转换函数 (其实就是一个规范变换) 所联系:

$$|\psi_-^U\rangle = e^{it(\varphi)} |\psi_-^L\rangle, \quad t(\varphi) = \varphi. \quad (16.51)$$

我们现在便可以具体计算与 $|\psi_-^{U,V}\rangle$ 相联系的 Berry 联络. 如果我们选择在切空间中进行计算, 那么我们需要归一化的坐标基矢为

$$\hat{e}_r = \partial_r, \quad \hat{e}_\theta = r \partial_\theta, \quad \hat{e}_\varphi = r \sin \theta \partial_\varphi, \quad (16.52)$$

继而

$$\nabla |\psi_-^U\rangle = - \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ \frac{1}{2} e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hat{e}_\theta}{d} + \begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \frac{\hat{e}_\varphi}{d \sin \theta}, \quad (16.53)$$

注意我们这里考虑到了参数流形 \mathbb{S}^2 的半径为 d . 于是

$$\langle \psi_-^U | \nabla \psi_-^U \rangle = \frac{i}{2d} \cot \frac{\theta}{2} \hat{e}_\varphi, \quad (16.54)$$

并且

$$\mathcal{F} = i \nabla \times \langle \psi_-^U | \nabla \psi_-^U \rangle = \frac{1}{2d^2} \hat{n}. \quad (16.55)$$

对 $|\psi_-^L\rangle$ 的计算会给出

$$\langle \psi_-^L | \nabla \psi_-^L \rangle = -\frac{i}{2d} \tan \frac{\theta}{2} \hat{e}_\varphi, \quad (16.56)$$

同时

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2d^2} \hat{n}. \quad (16.57)$$

可以看到, 相差一个规范变换的 Berry 联络给出了相同的曲率. 我们可以对上能级进行相似的计算并得到

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{2d^2} \hat{n}, \quad (16.58)$$

因此沿着同一路径水平移动上下能级产生的 $U(1)$ 旋转方向相反, 这种扭转有类 Möbius 带.

不过最方便的计算 Berry 联络与曲率的方式还是在余切空间里使用微分形式, 此时

$$\mathcal{A} = i \langle \psi | \partial_\theta \psi \rangle d\theta + i \langle \psi | \partial_\varphi \psi \rangle d\varphi, \quad (16.59)$$

Berry 曲率便是

$$\mathcal{F}_{\theta\varphi} = (\partial_\theta \mathcal{A}_\varphi - \partial_\varphi \mathcal{A}_\theta) d\theta \wedge d\varphi, \quad (16.60)$$

并且我们有

$$\mathcal{F}_{\theta\varphi}^\pm = \mp \frac{1}{2} \sin \theta d\theta \wedge d\varphi, \quad (16.61)$$

陈数直接就是

$$\mathcal{C}_\pm = \mp \frac{1}{2\pi} \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta = \mp 1. \quad (16.62)$$

如果我们将 Berry 曲率写作

$$\mathcal{F} = \frac{g}{2d^2} \hat{n}, \quad (16.63)$$

那么这形式上便类似于一个磁单极子, 并且

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F} \cdot d\mathbf{S} = g. \quad (16.64)$$

显然, 如果 \mathcal{F} 是由某一个在 \mathbb{S}^2 内及其边界上处处良定义的 1-形式生成的正合形式, 那么我们会期待

$$\int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{F} = \int_{\Sigma(\mathbb{S}^2)} d\mathcal{F} = 0. \quad (16.65)$$

实际上这个通量非零其实反映了 $d=0$ 时上下能级出现的简并: 如果这个点在 \mathcal{A} 的定义域内, 那么 (16.38) 会出现奇点; 因而实际情况中 \mathcal{F} 不可能由某一个在 \mathbb{S}^2 内及其边界上处处良定义的 1-形式生成的正合形式. 因此, 非平凡的陈数与我们在特殊的拓扑空间中无法定义一个 global 的连续联络有关——联络间的规范变换贡献了非零的 \mathcal{C} .

由于 \mathcal{F} 在 \mathbb{S}^2 沿径向均匀分布, 我们显然可得系统在参数空间中按划出了立体角为 $\Delta\Omega$ 的区域的曲线绝热演化产生的 Berry 相为

$$\gamma = \frac{g}{2} \Delta\Omega \mod 2\pi. \quad (16.66)$$

特别的, 通过要求在覆盖上下半球的 coordinate patches 的交集上 γ 规范不变, 我们会发现 g 必须去取整数. 我们便可将 $g \in \mathbb{Z}$ 诠释为奇点的强度.

16.4 拓扑观点下的绝缘体

我们考虑刻画了绝缘体的有能隙 Hamilton 量, 那么系统的电子状态可以由 Fermi 面下被填满的各条能带所刻画. 鉴于晶体在实空间以及倒空间中具有周期性, 我们可以将 d 维晶体理论中的一条电子能带视为从 d 维倒空间中的 Brillouin 区到闭环面 \mathbb{T}^d 的映射, 并且我们可以考察与这个映射有关的拓扑不变量. 我们会发现这个不变量与系统的维数与对称性有关, 并且我们可以通过考虑对应能带的 Bloch 波函数给出的 Berry 曲率在 Brillouin 环面上的积分来计算它.

16.4.1 绝缘体的拓扑等价性

两个拓扑空间的拓扑等价性意指二者同胚, 而对绝缘体而言我们便可以将系统基态所填充的各个电子能带视为拓扑空间并直观地认为两个绝缘体的拓扑等价性应该与连续地改变能带形状有关, 而这又可以被视为连续地改变系统的 Hamilton 量. 特别的, 我们会要求这种对 Hamilton 量的改变是绝热 (即非常缓慢) 且连续的: 绝热性保证了我们在改变 Hamilton 量时基态仍保持为基态, 而这一改变速度到底有多“慢”则取决于系统能隙的能标. 我们可以将拓扑等价性具体阐述为:

拓扑等价性

- 两个绝缘体拓扑等价, 如果存在连接二者 Hamilton 量的保持能隙有限的绝热路径.
- 如果两个绝缘体拓扑不等价, 那么绝热地联结两个绝缘体的 Hamilton 量时必然会出现能隙消失的绝缘体-导体相变.

在通过是否出现能隙闭合定义出拓扑不等价的 Hamilton 量后, 一个有趣的问题是在两个拓扑不等价绝缘体的界面上会发生什么. 我们会期待在这个界面上电子的能隙会消失, 并且系统中会出现被束缚在这个界面上的无能隙低能电子态, 并且我们可以在拓扑上分类这些态. 这一图像叫做 bulk-boundary correspondence.

如果一个可观测量与一个整数拓扑不变量有关, 那么这会产生两个重要结果:

1. 我们原则上能以无限高的精度测量这个可观测量 (对 QHE 而言这能做到 10^{-9}).
2. 除非系统经历极强的干扰, 否则这个可观测量将以相当高的程度保持稳定. 对我们考虑的拓扑绝缘体而言, 这种强干扰通常指让系统经历一个金属态, 而这会使得可观测量对应的拓扑特征数发生变化.

16.4.2 对称性与拓扑相的分类

我们使用对称性对系统的拓扑性质进行分类的动机出于以下信念:

由相同的基本对称性刻画的不同系统常会拥有一系列相似的性质.

既然绝缘体的拓扑特征对有能隙 Hamilton 量受到的扰动不敏感并且只应和能带的拓扑结构有关, 那我们从一个绝缘体的 Hamilton 量出发向它添加破坏空间对称性 (包括连续的旋转和宇称) 同时不会导致能隙闭合的微扰项后得到的 Hamilton 量应该和原 Hamilton 量拓扑等价, 因此我们可以认为每种拓扑绝缘体的拓扑特征都可以被一个与其 Hamilton 量

拓扑等价的不存在空间对称性的 Hamilton 量 \mathcal{H} 所刻画²⁸. 所有空间对称性在 Hilbert 空间上的表示都是幺正的²⁹, 这便意味着我们找不到与 \mathcal{H} 对易的对应空间对称性的幺正算符 $\hat{\mathcal{O}}$. 我们称 \mathcal{H} 为 gapped random Hamiltonian³⁰, 它和我们考虑的实际绝缘体的有空间对称性的 Hamilton 量有着相同的拓扑不变量. 因此, 我们也可以反过来认为一个有能隙拓扑相总是对应着一类没有空间对称性的 gapped random Hamiltonian, 并且分类拓扑相的问题便归约为了分类这些 gapped random Hamiltonian, 并且我们可以据此揭示系统从一个拓扑相转化到另一个拓扑相的过程中会经历多少相变.

既然空间对称性在 gapped random Hamiltonian 中已被破坏, 那么我们只剩下了一些离散的对称性可以赋予 Hamilton 量. 特别的, 对于一般的系统我们只剩下了两个其表示为反幺正算符的分立对称性:

- 时间反演对称性 (TRS) Θ : 系统的时间演化由 $e^{i\mathcal{H}t}$ 给出, 那么时间反演操作 Θ 便应该满足

$$\Theta^\dagger e^{i\mathcal{H}t} \Theta = e^{-i\mathcal{H}t}, \quad (16.67)$$

进而

$$\Theta^\dagger i\mathcal{H} \Theta = -i\mathcal{H}. \quad (16.68)$$

Θ 的反线性反幺正性便表明³¹

$$\Theta^\dagger \mathcal{H} \Theta = \mathcal{H} \Leftrightarrow [\Theta, \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x})] = 0. \quad (16.70)$$

对于玻色子态我们有

$$\Theta^2 |\psi\rangle = +|\psi\rangle, \quad (16.71)$$

对于费米子态则有

$$\Theta^2 |\psi\rangle = -|\psi\rangle. \quad (16.72)$$

- 粒子-空穴共轭对称性 (PHS, 或称为荷共轭对称性) Ξ : 我们在考虑拓扑绝缘体时往往只需要关注刻画 band edges 附近能带行为的有效 Hamilton 量, 并且在发生我们感兴趣的拓扑相变时价带的峰值位置往往和导带的极小值位置一致. 根据 Kohn-Luttinger $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法, 我们会发现在 band edges 附近价带和导带的形状是对称的, 并且价带中的空穴和导带中的电子有着相同的有效质量、相同的位置、相反的动量、相反的电荷以及相反的自旋. 特别的, 空穴的能量与电子的能量相反. 因而对于一个拥有粒子-空穴对称性的正能态描述电子的 Hamilton 量, 我们会期待构造出一个反线性的算符 Ξ 使

²⁸事实上这一陈述的地位更像一个公设?

²⁹根据幺正表示定理, 任何对称性在 Hilbert 空间上的表示要么是线性幺正的, 要么是反线性反幺正的. 连续空间对称性与恒等元的连通性要求其表示必须是幺正的, 而我们要求系统能量存在下限会使得宇称变换这一离散对称性也拥有幺正表示.

³⁰这里使用 “random” 一词意指我们破坏原 Hamilton 量空间对称性的方式常为引入一些带来无序的微扰项; 特别的, 我们在实验中改变 Hamilton 量的方式往往是引入不同浓度的杂质, 而杂质在材料中的分布是随机的.

³¹如果我们假设 Θ 为线性幺正的, 那么我们便会要求

$$\Theta^\dagger \mathcal{H} \Theta = -\mathcal{H} \quad (16.69)$$

由于我们假设系统具有时间反演对称性, 这一表达式便表明对于给定电荷, 任意能量 $E > 0$ 的态均存在能量 $-E < 0$ 的态, 进而系统的能量不存在下限且会产生无穷递降的衰变——这一情况自然是非物理的.

得它对 Hamilton 量的作用能给出一个正能态描述空穴的 Hamilton 量, 因而我们会期待

$$\Xi^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \Xi = -\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \Leftrightarrow \{\Xi, \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{x})\} = 0. \quad (16.73)$$

这也就意味着对于 \mathcal{H} 的能量为 ε 的本征态 $|\psi\rangle$, $\Xi|\psi\rangle$ 是 \mathcal{H} 的能量为 $-\varepsilon$ 的本征态. 与荷共轭处我们为了避免不存在基态而反对负能态的存在不同, 这里 $\Xi|\psi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 应当具有不同的荷指标, 并且这是由 Ξ 的反线性性保证的.

对于三重态配对我们有

$$\Xi^2 |\psi\rangle = +|\psi\rangle, \quad (16.74)$$

对于单态配对则有

$$\Xi^2 = -|\psi\rangle. \quad (16.75)$$

费米子系统的 TRS 意味着系统存在 Kramers 简并性, 而一个存在 PHS 的系统的能量谱则相对零能面对称. 如果一个系统同时具有时间反演对称性与粒子-空穴对称性, 那么我们可以构造么正算符 $\Pi \equiv \Xi\Theta$ 并且我们可以得到

$$\Pi^\dagger \mathcal{H} \Pi = 0 \Leftrightarrow \{\mathcal{H}, \Pi\} = 0. \quad (16.76)$$

这叫做手征对称性. 不过也存在手征对称但是并不存在 TRS 及 PHS 的 Hamilton 量. 因而, 根据系统是否拥有 TRS、PHS 和手征对称性以及其本征态在 Θ^2 和 Ξ^2 变换下的本征值, 我们可以将 Hamilton 量分为十类.

16.4.3 具有周期平移不变性的绝缘体

我们现在考虑将 Berry 相理论应用于晶态固体, 此时 Bloch 定理表明

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle, \quad \langle \mathbf{x} + \mathbf{R} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle = \langle \mathbf{x} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (16.77)$$

其中 n 为能带指标而 \mathbf{R} 是一个晶格矢量. 显然, 电子的本征态在倒空间中也有应该拥有相对倒格矢的周期性平移对称性, 因而对于给定倒格矢 \mathbf{G} 而言 $|\psi_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle$ 和 $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ 至多相差一个复相位, 并且我们可以将这一相位约定为零, 而这便要求

$$|u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle = e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{x}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle, \quad (16.78)$$

进而在我们的约定下函数 $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ 在实空间的周期性并未被继承到倒空间中.

我们对 Berry 曲率的计算将不可避免地涉及对 Bloch 波矢的梯度运算, 而此时 $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$ 将不是一个好的选择: 因为 Bloch 定理给出

$$\nabla_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) + i\mathbf{x} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (16.79)$$

因而在大 $|\mathbf{x}|$ 处这一表达式将不可避免地发散. 幸运的是, 态矢 $|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ 与 $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ 可以等价地刻画我们的系统, 并且 $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$ 同样满足一个 Schrödinger 方程, 因而我们可以根据对 Bloch 波矢的梯度不一定发散的 $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ 计算理论的拓扑指标.

我们称 $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ 满足的 Hamilton 量为 Bloch Hamilton 量 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, 显然

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \mathcal{H} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (16.80)$$

注意到

$$\mathcal{H}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) |u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{G}} \mathcal{H}(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{G}} |u_{n,\mathbf{k}}\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}+\mathbf{G}}\rangle, \quad (16.81)$$

因此 Bloch Hamilton 量也有着按倒格矢平移的周期性

$$\mathcal{H}(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = \mathcal{H}(\mathbf{k}). \quad (16.82)$$

特别的, 在有效单电子理论下

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{x}). \quad (16.83)$$

按照这种方式, 我们将完整理论的 Hamilton 量约化为了一个分块对角阵, 其分块对角元为由第一 Brillouin 区内的 N 个 Bloch 波矢给出的 $\mathcal{H}(\mathbf{k}_i)$. 我们对 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 进行对角化便能得到其本征能量 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 并得到由 $u_{n,\mathbf{k}}$ 张成的理论 Hilbert 空间的一个子空间 $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$. 我们通常只对数目很少的能带感兴趣, 因此我们要考虑的 $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$ 的维数并不会很大.

当我们仅在第一 Brillouin 区内考虑问题时, 我们求解出的 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 相对 \mathbf{k} 的各个分量均应该满足在 Brillouin 区的两端互相衔接的周期性边界条件, 因此一个 d 维问题在第一 Brillouin 区内能带总能被映射到

$$\bigotimes_{i=1}^d \mathbb{S}^1 \cong \mathbb{T}^d \quad (16.84)$$

上. 我们称这一闭流形为 Brillouin 环面 (Brillouin torus, BT).

问题的本征态满足实空间中的周期性

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{R}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (16.85)$$

因而我们的本征值问题包含了一个依赖 \mathbf{k} 的 Hamilton 量与不依赖 \mathbf{k} 的边界条件. 因此我们可以将取值范围为 Brillouin 流形 \mathbb{T}^d 的 \mathbf{k} 视作绝热演化中的参数组 $\boldsymbol{\eta}$, 并且我们可以将 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 中的 \mathbf{k} 视为某种矢势. 在这些观察的驱使下, 我们可以构造 Bloch 丛:

记 $\mathfrak{N} \equiv \dim(\mathbb{H}_{\mathbf{k}} \cong \mathbb{C}^{\mathfrak{N}})$. $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$ 便刻画了实空间一个原胞内所有可能出现的 \mathfrak{N} 个电子态, 并且我们可以将其视为 Brillouin 环面上 \mathbf{k} 点处长出的纤维, 进而每一 Bloch 波矢处的纤维之并集便给出了底流形 \mathbb{T}^d 上的矢丛 \mathbb{H} . 人们已证明 $d \leq 3$ 的周期性晶格上总 Berry 曲率平凡, 因而这一矢丛总是平凡的并同构于 $\mathbb{T}^d \times \mathbb{C}^{\mathfrak{N}}$.

$\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 在 Brillouin 环面上给出了第 n 条能带. 绝缘体中被填满的价带与空的导带被能隙所分隔, 因而我们可以在这个平凡矢丛中勾勒出两个子丛: 价带丛与导带丛. 我们关注的重点便是基态时填满了电子的价带丛.

价带丛的拓扑特性给出了拓扑绝缘体基态的性质: 尽管 \mathbb{H} 是平凡丛, 价带丛却会拥有奇异的拓扑结构. 按照前面的方式, 我们可以在线丛 $\mathbb{E}(\mathbb{H}, \text{U}(1))$ 上定义 Berry 联络

$$\mathcal{A}_{n,\mathbf{k}}^\mu = i \langle u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{k^\mu} u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (16.86)$$

我们先假设在晶态固体中改变 Bloch 波矢给出的是同一能带 n 中的不同态 $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$, 那么我们便可以得到阿贝尔 Berry 联络与对应的 Berry 曲率

$$\mathcal{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n,\mathbf{k}} | du_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (16.87)$$

$$\mathcal{F}_n(\mathbf{k}) = i \langle du_{n,\mathbf{k}} | \wedge | du_{n,\mathbf{k}} \rangle = \mathcal{F}_{\mu\nu} dk^\mu \wedge dk^\nu, \quad \mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_{k^\mu} A_\nu - \partial_{k^\nu} A_\mu. \quad (16.88)$$

对于有着 \mathcal{N} 个被填满的互不相同的能带的绝缘体, 系统的一个态由各个电子态的张量积所刻画, 因而刻画了系统整体拓扑性质的总 Berry 相为各个能带的 Berry 相之和, 即

$$\gamma = i \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_n = \sum_{n=1}^{\mathcal{N}} \oint_{\mathcal{C}} \langle u_{n,\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}^\mu} u_{n,\mathbf{k}} \rangle d\mathbf{k}^\mu. \quad (16.89)$$

一般而言, 会给出非平凡 Berry 相位的非平凡回路为环面上非平凡同伦的大小环路, 并且这一相位的数值也和我们研究晶体时在单位晶胞内选择的坐标原点有关. 对于原点取在反演对称中心的中心对称晶体而言, 所有可能出现的 Berry 相位只有 $\gamma = 0$ 或者 $\gamma = \pi \bmod 2\pi$.

如果系统中能带存在交叉, 那么改变 Bloch 波矢会导致电子从一个能带跑到另一个能带, 先前的阿贝尔 Berry 联络将不再适用. 对这一情形的推广给出了非阿贝尔 Berry 联络.

能量不存在简并时系统的闭合绝热演化仅仅是给出一个 $U(1)$ 的 Berry 相位, 而如果一个本征态属于一个 n 重简并的本征值, 那么此时一个闭合绝热演化的 holonomy 将是一个 $U(n)$ 么正矩阵, 即

$$|\psi'_i\rangle = \sum_{j=1}^n U_{ij}(\mathcal{C}) |\psi_j\rangle, \quad U(\mathcal{C}) \in U(n), \quad (16.90)$$

并且³²

$$U_{ij}(\mathcal{C}) = P \left\{ \exp \left(i \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{ij} \right) \right\}, \quad \mathcal{A}_{ij} = i \langle \psi_i | d | \psi_j \rangle, \quad (16.91)$$

其中 $P\{\dots\}$ 为 path-ordering 操作. 对于拓扑绝缘体中 \mathcal{N} 条能带存在交叉的情况, 我们选择将 $U(\mathcal{N})$ Berry 联络矩阵定义为

$$\mathbf{a}^{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_{m,\mathbf{k}} | -i\nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (16.92)$$

而非阿贝尔 Berry 曲率则为

$$\mathfrak{F}_{\mu\nu}^{mn} = \partial_\mu a_\nu^{mn} - \partial_\nu a_\mu^{mn} - i[a_\mu, a_\nu]_{mn}. \quad (16.93)$$

这看起来就是 Yang-Mills 场强.

时间反演对称性 如果 $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ 时间反演不变, 那么它应该满足

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \Theta \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (16.94)$$

进而 Bloch 态 \mathbf{k} 与 $-\mathbf{k}$ 应该拥有相同的能量. 特别的, 第一 Brillouin 区内存在一些特殊的在时间反演下不变的 Bloch 波矢, 我们称之为 TRIM(time-reversal invariant momenta) 并记为 Λ , 它们

$$\mathbf{k} = -\mathbf{k} + \mathbf{G} \equiv \Lambda \Rightarrow \Lambda = \frac{1}{2}\mathbf{G}. \quad (16.95)$$

在 TRIM 处一定存在两条能带的交叉, 并且这一简并性是被 TRI 保护的. 存在 TRI 时, 一个 d 维的第一 Brillouin 区存在 2^d 个不等价的 TRIM 点. 我们根据 Kramers 简并性能得到的另一个结论是 TRI 绝缘体中被填满的能带数总是偶数, 因为被占据的态总是成对出现.

³²这看起来好像 Wilson line.

如果我们将 Θ 作用于 Bloch 丛, 那么它应该能给出一个联系了 $\pm \mathbf{k}$ 处纤维的反么正映射. 我们定义底流形上地映射 $\vartheta: \mathbb{T}^d \rightarrow \mathbb{T}^d$ 为 $\vartheta: \mathbf{k} \mapsto -\mathbf{k}$, 那边 Θ 便可以视为 ϑ 到 Bloch 丛上的提升. 记取复共轭操作为 K 而 U_Θ 是一个作用于 $\mathbb{H}_{\pm \mathbf{k}}$ 上的么正矩阵, 那么我们有

$$\Theta: (\mathbf{k}, |n\rangle) \mapsto (\vartheta \mathbf{k}, \Theta |n\rangle) = (-\mathbf{k}, U_\Theta K |n\rangle), \quad (16.96)$$

这是个从 $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$ 到 $\mathbb{H}_{\Theta \mathbf{k}} = \mathbb{H}_{-\mathbf{k}}$ 的映射.

可以看到, TRIM 点之外的 Kramers 对处于不同的纤维上. 我们考虑的电子态在时间反演变换下满足 $\Theta^2 = -1$, 因此在 TRIM 点处的一对 Kramers 简并态一定是正交的:

$$\langle \mathbf{k} | -\mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k} | \Theta | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k} | \Theta^\dagger | \mathbf{k} \rangle = -\langle \mathbf{k} | \Theta | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k} | -\mathbf{k} \rangle \Rightarrow \langle \mathbf{k} | -\mathbf{k} \rangle = 0. \quad (16.97)$$

价带丛中 Kramers 简并对产生的约束是 \mathbb{Z}_2 拓扑序的起源.

现在我们考虑一对能被时间反演算符相联系的 Kramers 态 $|u_{1,2}(\mathbf{k})\rangle$, 那么

$$|u_2(\mathbf{k})\rangle = e^{i\chi(\mathbf{k})} \Theta |u_1(-\mathbf{k})\rangle, \quad (16.98)$$

其中 $\chi(\mathbf{k})$ 是任意复相位. 那么我们计算 Berry 联络便能得到

$$\mathcal{A}_1(-\mathbf{k}) = i \langle u_1(-\mathbf{k}) | \nabla_{-\mathbf{k}} u_1(-\mathbf{k}) \rangle = \mathcal{A}_2(\mathbf{k}) + i \nabla_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}), \quad (16.99)$$

因此

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{k}) = -\mathcal{F}_1(-\mathbf{k}), \quad (16.100)$$

并且这两个态对 Berry 曲率的总贡献表现为

$$\mathcal{F}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}_1(\mathbf{k}) - \mathcal{F}_1(-\mathbf{k}) = -\mathcal{F}(-\mathbf{k}). \quad (16.101)$$

特别的, 时间反演对称的系统中价带总是成对出现的 Kramers 态, 因而上式对整个系统的总 Berry 曲率而言也是成立的, 并且这是系统对称性对 Berry 曲率的约束的一大彰显.

更一般的讲, 系统的对称性对 Berry 曲率的影响可以被总结为

1. 晶体的反演对称性要求 $\mathfrak{F}(\mathbf{k}) = \mathfrak{F}(-\mathbf{k})$.
2. 时间反演对称的晶体要求 $\mathfrak{F}(\mathbf{k}) = -\mathfrak{F}(-\mathbf{k})$, 进而 Berry 曲率在第一 Brillouin 区上的积分等于零.
3. 以上两点的直接推论是同时具有空间反演对称和时间反演对称的晶体的 $\mathfrak{F}(\mathbf{k})$ 处处为零.
4. 可能存在的其它点群对称性可能为 $\mathfrak{F}(\mathbf{k})$ 施加进一步的约束.

因此, 时间反演不变的系统的陈数一定为零. 我们为了获得非平凡的陈数必须打破时间反演对称性——而这正是量子 Hall 效应中磁场的作用. 对于时间反演不变的系统, 我们必须寻找能够刻画其特征的其它拓扑不变量, 而 \mathbb{Z}_2 拓扑数便是可选方案之一.

16.4.4 整数量子 Hall 效应

二维电子气的 Landau 能级 考虑 xy -平面上的二维电子气并对其施加沿 z 方向的强磁场 B . 为简便起见, 我们忽略晶格结构产生的周期势, 那么单电子 Hamilton 量为

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2, \quad (16.102)$$

其中我们使用了自然单位制 $\hbar = c = 1$ 并且选取了 Landau 规范下的矢势

$$A_x = -By, \quad A_y = 0. \quad (16.103)$$

记系统的尺寸为 $L_x \times L_y$, 我们沿 x 轴选取周期性边界条件并沿 y 轴取开边界条件, 那么这一问题的 Bloch Hamilton 量便可以表示为

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = e^{-ik_m x} \mathcal{H} e^{ik_m x} = \frac{1}{2m_e} p_y^2 + \frac{1}{2} m_e \omega_c^2 (y - k_m \ell_B^2)^2, \quad (16.104)$$

其中

$$k_m \equiv \frac{2\pi m}{L_x}, \quad \omega_c \equiv \frac{eB}{m_e}, \quad \ell_B \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (16.105)$$

可以看到, 这一问题在 y 方向上被约化为了一系列初始位置在 $y_m = k_m \ell_B^2$ 的谐振子问题, 其本征值就是

$$\varepsilon_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (16.106)$$

并且系统的 (k_m, n) 本征态波函数为

$$\psi_{n, k_m}(x, y) = e^{-ik_m x} H_n(y - y_m), \quad (16.107)$$

其中 $H_n(x)$ 为 n 阶 Hermite 多项式. 鉴于 $y_m \leq L_y$, 我们遂可以得到

$$k_{\max} = \frac{L_y}{\ell_B^2}, \quad m_{\max} = \frac{L_x L_y}{2\pi \ell_B^2}. \quad (16.108)$$

这便给出了每一 Landau 能级 n 上的态数目, 并且我们可以进一步算出每一 Landau 能级中单位面积的态密度为 (注意我们没有考虑电子态的二重简并性)

$$\mathcal{D}_{LL} = \frac{1}{2\pi \ell_B^2} \equiv \frac{B}{\phi_0}, \quad (16.109)$$

其中 $\phi_0 \equiv h/e$ 为单位磁通量子.

Laughlin 的思想实验 Laughlin 从改变磁通量时的规范不变性出发推导了 Landau 能级与 Hall 电流的量子化之间的关系. 鉴于我们在 x 方向上选择了周期性边界条件, 那么我们可以将二维电子气嵌入到一个柱面上, 而磁场方向便径向向外. 将 x 方向的 Bloch 波矢由 k_m 变到 k_{m+1} 不会改变 Landau 能级的能量, 但是会将对应本征态的中心沿柱面的轴向平移

$$\Delta y = \frac{2\pi \hbar}{eBL_x}. \quad (16.110)$$

现在我们设想对系统进行规范变换 (这等价于向系统中绝热地插入一个磁通量子 $\delta\Phi$)

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \delta\mathbf{A}, \quad \delta\mathbf{A} = \left(\frac{\delta\Phi}{L_x}, 0 \right), \quad (16.111)$$

其中

$$\delta\Phi = \phi_0 = \frac{h}{e}. \quad (16.112)$$

我们考虑 Fermi 面位于 Landau 能级 ε_n 与 ε_{n+1} 之间的绝缘体. 根据 Hellman-Feynman 定理, 这一变换/这一磁通量子的插入造成的各个 Landau 能级中的被填充本征态的总能量改变为

$$\delta \langle \mathcal{H} \rangle = \left\langle \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{A}} \right\rangle \cdot \delta \mathbf{A} = e \left\langle \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathbf{p}} \right\rangle \cdot \delta \mathbf{A} = \frac{eN \langle v \rangle}{L_x} \delta\Phi = I_x \delta\Phi. \quad (16.113)$$

因此, 我们可以将 Hall 电流表示为

$$I_x = \frac{\delta \langle \mathcal{H} \rangle}{\delta\Phi}. \quad (16.114)$$

规范不变性要求在插入一个磁通量子后, 系统的基态仍为原来的基态, 唯一的变化是组成原先基态中每一个被填满的 Landau 能级中的单电子态 $|k_m\rangle$ 变成了态 $|k_{m+1}\rangle$ (特别的, $|k_{m_{\max}}\rangle$ 会变成 $|k_{m_{\max}+1}\rangle = |k_1\rangle$), 而这会使得每一个被填充的电子态贡献出沿 y 方向距离为 Δy 的电荷输运. 但是规范不变性要求系统的总能量不应该在磁通量子的插入下发生变化, 因而此时必须存在沿 y 轴的电场

$$E_y = \frac{V(L_y) - V(0)}{L_y}, \quad (16.115)$$

并且电子气在这个电场中集体移动 $\Delta y = \frac{2\pi\ell_B^2}{L_x}$ 时的能量变化应该与 $\delta \langle \mathcal{H} \rangle$ 相抵消

$$\delta \langle \mathcal{H} \rangle = -e\Delta y \frac{V(L_y) - V(0)}{L_y} \nu m_{\max} = -e\nu [V(L_y) - V(0)] = I_x \delta\Phi. \quad (16.116)$$

其中 ν 是被填满的 Landau 能级数, m_{\max} 是每一 Landau 能级的简并度. 因此理论上 Hall 电流表现为

$$I_x = \nu \frac{e^2}{h} [V(L_y) - V(0)], \quad (16.117)$$

电导恰好表现出了与系统尺寸无关的量子化.

IQHE 中的拓扑不变量: 第一陈数 [18] 我们考虑二维周期晶格势以及垂直于材料的磁场 \mathbf{B} 中的二维电子气. 磁场的存在打破了原先晶格的周期性, 因而无磁场时的 Bloch 波矢不再是一个好量子数. 幸运的是, 此时我们仍能找到一个可供使用的对称性 (磁平移群 [19, 20]) 并且其表示理论表明我们此时仍能写 Bloch Hamilton 量

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2m} \left[\mathbf{p} + \hbar \mathbf{k} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 + V(\mathbf{x}), \quad (16.118)$$

不过此时 \mathbf{k} 可取连续值并且态 $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ 会满足一个我们现在暂时不需关心的 modified 周期性边界条件. 根据线性响应定理给出的 Kubo 公式, 面积为 Ω 的样品的 Hall 电导为³³

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= \frac{e^2}{i\hbar\Omega} \sum_{E_n < EE_F < E_m} \left(\left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_1} \middle| u_m(\mathbf{k}) \right\rangle \left\langle u_m(\mathbf{k}) \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_2} \middle| u_m(\mathbf{k}) \right\rangle \left\langle u_m(\mathbf{k}) \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_1} \right\rangle \right) \\ &= \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \sum_n \int_{\mathbb{T}^2} d\mathbf{k} \left(\left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_1} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_2} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_2} \middle| \frac{\partial u_n(\mathbf{k})}{\partial k_1} \right\rangle \right),\end{aligned}\quad (16.119)$$

其中我们对 Fermi 面下的 Landau 能级求和. 可以看到, 在 Brillouin 环面上的被积函数正是 Berry 曲率并且我们计算的 Hall 电导正比于第一类陈数 \mathcal{C} . 具体计算表明每一 Landau 能级的陈数都是 1, 因而 Hall 电导便正比于被填满的 Landau 能级数 ν .

为了说明这一点, 我们考虑单能带对电导的贡献

$$\sigma_{xy} = \int_{\mathbb{T}^2} d\mathcal{A}, \quad (16.120)$$

根据 Stokes 公式, 如果 Berry 曲率是由某个在 \mathbb{T}^2 上连续存在的 1-形式 Berry 联络给出的正合形式, 那么这个积分等于 Berry 联络在 $\partial\mathbb{T}^2 = \emptyset$ 上的积分, 进而是平凡的. 而实际情况中这一积分的非平凡性意味着我们在 Brillouin 环面上定义 Berry 联络时会遇到无法通过规范变换消去的固有奇点, 进而我们必须把空间剖分为几个部分并分别定义 Berry 联络, 而不同坐标卡间联络的跃迁函数给出了非平庸的拓扑数.

考虑一个简单的例子: 考虑将二维一个系统任意本征态 $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ 的相位固定为零, 我们可以考虑选择特定位置矢 $|\mathbf{x}\rangle$ 并进行规范变换

$$|u'_{\mathbf{k}}\rangle = e^{-ig_{\mathbf{k}}} |u_{\mathbf{k}}\rangle, \quad e^{ig_{\mathbf{k}}} = \frac{u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{|u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})|}. \quad (16.121)$$

如果存在 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ 使得 $u_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{x})$ 为零, 那么这里便是一个奇点. 此时我们可以将 Brillouin 区分为包含 \mathbf{k}_0 的 H_I 和其补集 H_{II} . 我们在 H_{II} 上可以使用前述规范变换固定波函数, 而在 H_I 上则可以选择一个使得 $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')$ 在其上不消失的位矢并取规范变换

$$|u''_{\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\hbar_{\mathbf{k}}} |u_{\mathbf{k}}\rangle, \quad e^{i\hbar_{\mathbf{k}}} = \frac{u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')}{|u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}')|}. \quad (16.122)$$

在 H_I 和 H_{II} 的边界 ∂H 上, 我们在形式上有

$$|u_{H_I}\rangle = e^{-it_{\mathbf{k}}} |u_{H_{II}}\rangle, \quad (16.123)$$

并且我们可以分别在区域 I, II 上使用 Stokes 定理而得到

$$\sigma_{xy} \sim \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial H} (\mathcal{A}_I - \mathcal{A}_{II}) = \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial H} d\mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} t_{\mathbf{k}} = \mathcal{C}_1. \quad (16.124)$$

由于 $t_{\mathbf{k}}$ 给出了规范变换的相位, 因此为了让沿 ∂H 转过一圈后的态矢与初态相容, 其梯度沿 ∂H 的线积分必须为 2π 的整数倍. 特别的, 这一非平凡的拓扑数的存在与无法消去的奇点有关, 它在不闭合系统能隙的外界扰动下是稳健的.

³³Kubo 公式只是作为领头阶的线性响应定理给出的结果; 对响应函数的更高阶修正会给出怎样的结果?

边缘态 我们前面在处理 IQHE 时一直假设系统的 Fermi 能 (即化学势) 始终处于能隙中, 而这导致绝缘体 bulk 内不存在净电流. 然而这一图像在样品的边缘处会出现改变: 我们可以使用一个充当势垒的束缚势 $-eW(y)$ 来刻画边缘的影响, 进而根据微扰论这个势对 Landau 能级的领头阶修正为

$$\varepsilon_{n,k} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \langle n, k | -eW(y) | n, k \rangle. \quad (16.125)$$

注意到本征态 $|n, k\rangle$ 的波函数在 y 方向上以 $y_k = k\ell_B^2$ 为中心, 我们于是可以假设 $W(y)$ 在 ℓ_B 尺度上变化很慢并进而得到

$$\varepsilon_{n,k} \approx \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - eW(y_k). \quad (16.126)$$

我们感兴趣的是那些在边缘处会越过 Fermi 面 (化学势面) 的态, 即边缘态 (edge state).

鉴于每一 Landau 能级中单位面积上的态密度均为 $\frac{1}{2\pi\ell_B^2}$, 我们便可以计算出边缘处第 n 个 Landau 能级贡献的 Hall 电流密度

$$j_{n,x} = -ev_x \frac{1}{2\pi\ell_B^2} = -\frac{e}{2\pi\hbar\ell_B^2} \vartheta[\mu - \varepsilon_{n,k}] \frac{\partial \varepsilon_{n,k}}{\partial k} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \vartheta[\mu + eW(\mathbf{x}) - \hbar\omega_c(n + 1/2)] \frac{\partial W}{\partial y}. \quad (16.127)$$

注意到在样品的两侧 $W(y)$ 有着相反的斜率, 因而两侧的 Hall 电流方向相反. 边缘处电子均沿一个方向运动的特性叫做边缘态的手性. 由于每一边上的电子都是 chiral 的, 因而样品里唯一的背散射机制便是电子隧穿过整个样品而到达另一边, 而这一过程的发生率会被指数压低, 进而系统的 Hall 电导几乎完美地不依赖系统的细节.

样品上第 n 个 Landau 能级贡献的沿 x 方向的总电流为

$$I_n(\mathbf{x}) = \frac{e^2}{h} \int_0^{L_y} dy \vartheta[\mu + eW(y_k) - \hbar\omega_c(n + 1/2)] \frac{\partial W}{\partial y}, \quad (16.128)$$

而样品在 y 方向上存在的 Hall 电压使得两侧的束缚势不同, 进而净 Hall 电流可以被表示为

$$I_{n,x} = \frac{e^2}{h} [W(L_y) - W(0)] = \frac{e^2}{h} V, \quad (16.129)$$

并且如果系统中被填满的 Landau 能级数为 ν , 那么总 Hall 电流便为

$$I_x = \nu \frac{e^2}{h} V. \quad (16.130)$$

我们也可以通过设想样品中存在一系列环路电流来理解边缘模式. 磁场造成的环形电子轨道让材料体内的微观电流互相抵消而在材料边缘处形成了陆路运输电子的手性态, 这一图像刚好能刻画边缘两侧的手性态运输电流方向相反这一现象.

总之, Hall 效应中存在净电流表明系统中一定存在穿越了 Fermi 能的态, 而材料的能隙禁止这些态在 bulk 内出现. 唯一能出现的运输电流的态必须是定域的边缘态, 而这一图像与观测到的量子化的 Hall 电导与系统尺寸无关这一现象相容. 特别的, 在 bulk 内进行的电导率计算表明这一电导的量子化与 bulk 内 Landau 能级的第一陈数有关, 因而我们在此观察到了一种 bulk-edge correspondence 并且类似的对应关系可以被应用于一大类拓扑绝缘体.

16.5 Dirac 材料与 Dirac 费米子

虽然 Dirac 费米子的概念源于高能理论, 但是近年人们已经在从石墨烯到拓扑绝缘体再到 d -波超导体等一大类材料中发现了类似无质量 Dirac 费米子的低能费米性的色散关系, 而拥有此类色散关系特征的材料也因而得名 Dirac 材料. 系统中的对称性, 如拓扑绝缘体的时间反演对称性、拓扑晶体绝缘体的点群对称性以及石墨烯的子晶格对称性, 控制了材料中 Dirac 锥的形态以及其激发谱.

对 Bloch 丛的拓扑学研究表明, 特定条件下由 Dirac 方程给出的色散关系并不能在 Brillouin 环面上全局存在而只能局域出现.

被研究得最为详尽的 Dirac 材料是石墨烯, 其中低能无质量 Weyl 费米子激发态会出现在二维 Brillouin 区的 K 和 K' 点, 而 Bloch 电子的类相对论行为来自于石墨烯的蜂巢形格点包含的两组子晶格为 Hamilton 量带来的动量-赝自旋耦合项 $\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. 这里的赝自旋其实是和子晶格对称性有关的指标, 而不是真实的电子自旋——石墨烯中电子的自旋-轨道耦合效应十分微弱.

16.5.1 石墨烯

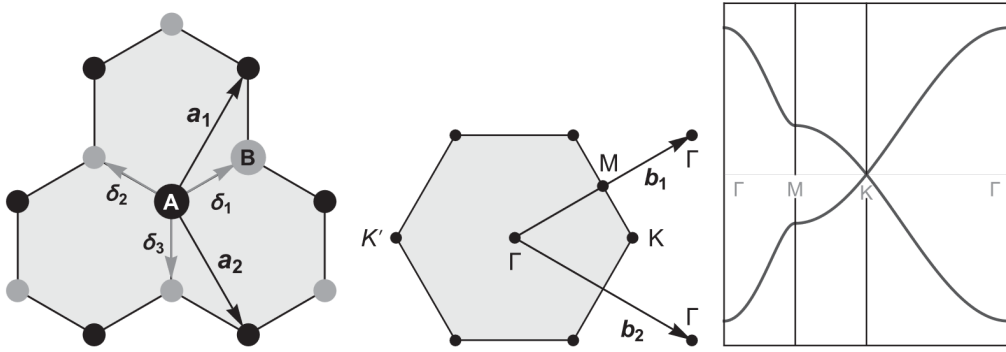


Figure 5. 最左侧为石墨烯晶格示意图, 其中 \mathbf{a}_i 为我们选择的子晶格的基矢, 而 δ_i 为指向最邻近格点的矢量; A, B 标记了组成蜂巢形格点的两组 Bravais 格子. 中间的是蜂巢形的第一 Brillouin 区, 图中绘出了倒格矢基矢 \mathbf{b}_i 以及高对称点. 最右侧图则绘出了高对称方向上的 π 能带.

几何结构 石墨烯的蜂巢形格点结构并不能被视作单个单点 Bravais 格子组成的晶格, 而是能被视作两组互相嵌套的三角形子晶格 A, B ³⁴, 并且两个子晶格的原初晶格矢量均可以被取为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, -3). \quad (16.131)$$

我们可以计算出这两个基矢对应的倒格矢为

$$\mathbf{k}_1 = \frac{2\pi\mathbf{a}_2 \times \hat{z}}{(\mathbf{a}_2 \times \hat{z}) \cdot \mathbf{a}_1} = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, -1), \quad \mathbf{k}_2 = \frac{2\pi\mathbf{a}_1 \times \hat{z}}{(\mathbf{a}_1 \times \hat{z}) \cdot \mathbf{a}_2} = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1). \quad (16.132)$$

石墨烯的每一个六边形原胞内平均包含两个碳原子, 并且每个碳原子有四个价电子轨道: $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$. 其中 $2s, 2p_x, 2p_y$ 轨道波函数会互相杂化形成在 xy 平面上互成 120°

³⁴我们也可以将石墨烯的晶格结构视作一个带有两原子基的 Bravais 格子, 但这并不会影响我们构造的基矢和倒格矢.

的 sp_2 杂化轨道, 而这三个新轨道会分别和三个最近邻碳原子的 sp_2 杂化轨道结合形成共价键. 碳原子中余下的一个电子占据了 p_z 轨道并产生了石墨烯有趣的电子性质. 具体计算表明石墨烯的能带包含由 $2s, 2p_x, 2p_y$ 轨道相互左右产生的 σ -能带以及在 Fermi 面附近由 $2p_z$ 轨道相互作用产生的一对 π -能带. 根据 Wigner-Seitz 构造, 我们不难发现由 $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ 张成的倒格矢空间中的第一 Brillouin 区是一个正六边形, 并且对其能带结构的计算表明这里存在三个高对称点:

- Γ 和 M 点处 $\pi - \pi^*$ 带的斜率为零并标志着体系的 van-Hove 奇点, 此处态密度 (DOS) 对数发散.
- K 点处 $\pi - \pi^*$ 带相交并且态密度线性地变为零.

为了具体计算石墨烯的 π -能带结构, 我们考虑紧束缚模型并将相邻 p_z 电子互相耦合的 Hamilton 量构造为

$$\mathcal{H}_\pi = -t \sum_{A,\ell} (|p_z, A\rangle\langle p_z, B, \delta_\ell| + h.c.), \quad (16.133)$$

其中 t 是电子的 hopping energy 而 δ_ℓ 是图5中标记的连接了最邻近原子的矢量. 我们这里使用其实是紧束缚模型中的 Wannier 态, 而我们也可以考虑使用 Bloch 态

$$|\mathbf{k}, A/B\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_{A/B}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{A/B}} |p_z, A/B\rangle, \quad (16.134)$$

来改写 Hamilton 量. 这个表达式对应的反变换为

$$|p_z, A/B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{R}_{A/B}\cdot\mathbf{k}} |\mathbf{k}, A/B\rangle, \quad (16.135)$$

于是

$$\begin{aligned} |p_z, A\rangle\langle p_z, B, \delta_\ell| &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{-i(\mathbf{R}_{B, \delta_\ell}\cdot\mathbf{k}_2 - \mathbf{R}_A\cdot\mathbf{k}_1)} |\mathbf{k}_1, A\rangle\langle\mathbf{k}_2, B| \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{-i[\mathbf{R}_A\cdot(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + \delta_\ell\cdot\mathbf{k}_2]} |\mathbf{k}_1, A\rangle\langle\mathbf{k}_2, B|, \end{aligned} \quad (16.136)$$

将其代入 Hamilton 量后便能得到

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\pi &= -\frac{t}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{A,\ell} e^{-i[\mathbf{R}_A\cdot(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) + \delta_\ell\cdot\mathbf{k}_2]} |\mathbf{k}_1, A\rangle\langle\mathbf{k}_2, B| + h.c. \\ &= -t \sum_{\ell, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{-i\delta_\ell\cdot\mathbf{k}_2} |\mathbf{k}_1, A\rangle\langle\mathbf{k}_2, B, \delta_\ell| + h.c. \\ &= -t \sum_{\ell, \mathbf{k}} e^{-i\delta_\ell\cdot\mathbf{k}} |\mathbf{k}, A\rangle\langle\mathbf{k}, B| + h.c. \end{aligned} \quad (16.137)$$

因此我们可以记

$$h(\mathbf{k}) = -t \sum_{\ell} e^{-i\delta_\ell\cdot\mathbf{k}} \equiv h_1(\mathbf{k}) + ih_2(\mathbf{k}), \quad (16.138)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & h(\mathbf{k}) \\ h^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \equiv h_1(\mathbf{k})\sigma_1 + h_2(\mathbf{k})\sigma_2 = \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (16.139)$$

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \begin{pmatrix} |\mathbf{k}, A\rangle \\ |\mathbf{k}, B\rangle \end{pmatrix}, \quad (16.140)$$

那么原 Hamilton 量便能被改写为

$$\mathcal{H}_\pi = \sum_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \mathcal{H}(\mathbf{k}) \langle \psi_{\mathbf{k}}|. \quad (16.141)$$

特别的, 我们注意到

$$h(-\mathbf{k}) = h_1(\mathbf{k}) - i h_2(\mathbf{k}) = h^*(\mathbf{k}), \quad (16.142)$$

这一关系在对称性分析中很有用. 同时我们不难得到

$$\sigma_3 \mathcal{H}(\mathbf{k}) \sigma_3 = -\mathcal{H}(\mathbf{k}). \quad (16.143)$$

这一关系式刻画了在存在近邻相互作用的蜂巢形格点上的手征对称性 (或者说粒子-空穴对称性): 如果 $|\psi\rangle$ 是能量为 E 的本征态, 那么 $\sigma_3 |\psi\rangle$ 是能量为 $-E$ 的本征态.

对角化这个 Hamilton 量便能得到紧束缚近似下石墨烯的两条 π -能带:

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \left| \sum_{\ell} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_{\ell}} \right|, \quad (16.144)$$

其中正负号便分别对应着导带 (记为 π^*) 和价带 (记为 π), 并且这彰显了粒子-空穴对称性: 由于每个碳原子均只贡献一个 p 电子并且每个电子都会占据一个自旋正或负的态, 因此能量较低的 π 能带会被填满而导带 π^* 是全空的, 二者恰好相对 Fermi 能对称. 具体计算表明 (参见图6) 在第一 Brillouin 区两个互补等价 (无法被倒格矢连接) 的 K, K' 点出 $\varepsilon_{\pm}(K/K') = 0 = \varepsilon_F$, 我们称这些点为 Dirac 点³⁵; 同时这条能带的带宽为 $3t$. 值得强调的是我们目前构造的 Hamilton 量在倒空间并不具有周期性, 而为了让其具有周期性我们需要重新定义相位 (即进行规范变换):

$$|\mathbf{k}, B\rangle \rightarrow e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_3} |\mathbf{k}, B\rangle \Rightarrow h(\mathbf{k}) \rightarrow e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_3} h(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}. \quad (16.145)$$

显然规范变换后的 $h(\mathbf{k})$ 在倒格矢平移下不变.

我们将 \mathcal{H}_π 的本征态记作类似二分量旋量的形式

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \equiv \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^{\lambda} \\ b_{\mathbf{k}}^{\lambda} \end{pmatrix}, \quad \lambda = \pm, \quad (16.146)$$

显然其上下两个分量可以被诠释为在 Bloch 波函数子晶格 A, B 上的概率幅, 并且我们不难算出

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ \lambda \end{pmatrix}, \quad \phi_{\mathbf{k}} \equiv \arctan \frac{\text{Im}\{h(\mathbf{k})\}}{\text{Re}\{h(\mathbf{k})\}}. \quad (16.147)$$

我们可以在相差一个规范变换的意义上定义这个本征态. 鉴于子晶格 A, B 的对称性, 我们不难意识到 $\psi_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ 两个分量给出的概率分布是相等的.

如果在拥有蜂巢形格点的二维系统中两组子晶格有着不同的原子并且 $\varepsilon_A \neq \varepsilon_B$ (一个典型的例子便是二维氮化硼 BN), 那么我们需要为系统的 Hamilton 量添加修正项

$$\Delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \Delta \sigma_3, \quad \Delta = \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2}, \quad (16.148)$$

来刻画这一效应. 这一修正项的引入会让 π, π^* 能带在 K, K' 处不再相遇而存在大小为 2Δ 的能隙.

³⁵我们称存在这种 Dirac 点的材料为半金属恰是因为材料的价带和导带间存在这些能隙消失的点, 因而材料中会存在一定数目 (尽管可能很少) 的载流子.

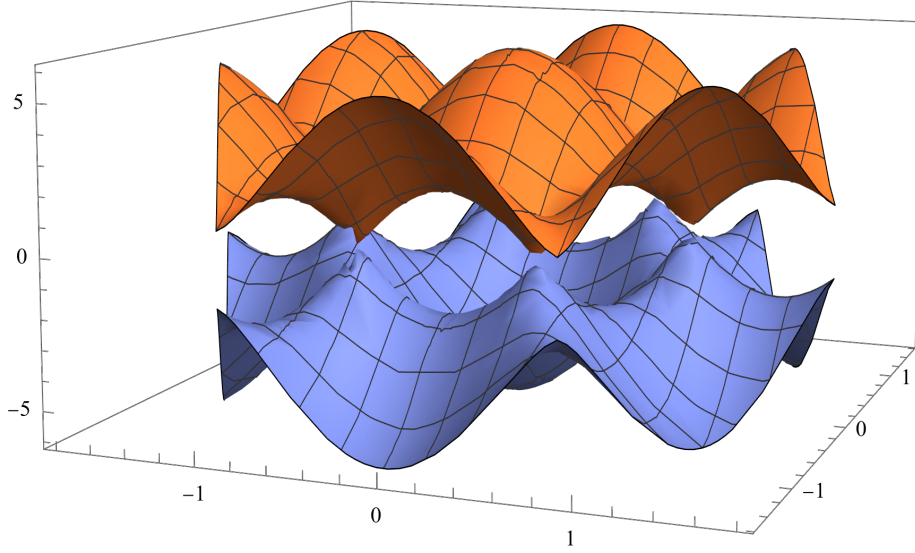


Figure 6. 石墨烯的 π -能带示意图

Dirac 费米子的涌现 我们考虑石墨烯中 Fermi 面附近的能标远小于 π 电子能带带宽 $3t$ 的电子激发, 那么这意味着我们只需要考虑 K 或 K' 点附近的物理. 进而我们可以考虑将色散关系 $h(\mathbf{k})$ 在 $\pm\mathbf{K}$ 附近按 $\pm\mathbf{K} + \mathbf{q}$ 展开到领头阶并得到

$$h^\pm(\mathbf{q}) \approx -i\frac{\sqrt{3}at}{2}[(q_x + \sqrt{3}q_y)e^{\pm i2\pi/3} + (-q_x + \sqrt{3}q_y)e^{\mp i2\pi/3}] = \pm\frac{3at}{2}(q_x \mp iq_y). \quad (16.149)$$

进而 Bloch Hamilton 量在 \mathbf{K} 附近可与被展开为

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}}(\mathbf{q}) = \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \equiv \hbar v_F(q_x \sigma_1 + q_y \sigma_2), \quad v_F \equiv \frac{3at}{2\hbar}. \quad (16.150)$$

在 \mathbf{K}' 附近的计算则会给出

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}'}(\mathbf{q}) = \hbar v_F(-q_x \sigma_1 + q_y \sigma_2). \quad (16.151)$$

可以看到, 在 K, K' 处低能电子激发的有效 Hamilton 量均拥有无质量 Dirac 费米子的形式, 因而我们称这些点为 Dirac 点并称这些点拥有近似锥形色散关系的邻域为 Dirac 谷 (valleys). 这里出现的 σ 矩阵可以被认为反映了两组子晶格的赝自旋特征. 我们可以引入赝自旋指标 $\xi = \pm 1$ 来把 K, K' 附近的有效 Hamilton 量统一表述为

$$\mathcal{H}_\xi^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \xi \hbar v_F(k_x \sigma_1 + \xi k_y \sigma_2) = \xi \hbar v_F |\mathbf{k}| (\sigma_1 \cos \phi_{\mathbf{k}} + \xi \sigma_2 \sin \phi_{\mathbf{k}}), \quad (16.152)$$

并且我们有色散关系

$$\varepsilon_\xi^\lambda(\mathbf{k}) = \lambda \hbar v_F |\mathbf{k}|, \quad \lambda = \pm 1. \quad (16.153)$$

电子的赝自旋和其动量有关, 这表明 Dirac 点附近的波函数是手性费米子并且其一大后果是 Dirac 谷中电子由 \mathbf{k} 到 $-\mathbf{k}$ 的背散射过程会被压制; 同时, K, K' 谷中的电子有着不同的手性.

为了得到更好看的 Hamilton 量形式, 我们可以考虑调换 K' 处的两个旋量分量并记

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(K)} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}}^A \\ \psi_{\mathbf{k}}^B \end{pmatrix}, \quad \psi_{\mathbf{k}}^{(K')} = \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k}}^B \\ \psi_{\mathbf{k}}^A \end{pmatrix}, \quad (16.154)$$

进而此时 Hamilton 量能被记作

$$\mathcal{H}_{\xi}^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \xi \hbar v_F (k_x \sigma_1 + k_y \sigma_2). \quad (16.155)$$

这一形式启发我们进一步定义双旋量

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \equiv \begin{pmatrix} \psi_{\mathbf{k},+}^A \\ \psi_{\mathbf{k},+}^B \\ \psi_{\mathbf{k},-}^B \\ \psi_{\mathbf{k},-}^A \end{pmatrix}, \quad (16.156)$$

其前两个分量对应着 K 点处两组子晶格上的电子态, 而后两个分量对应 K' 处的电子态, 并且我们可以将它对应的 Hamilton 量写成无质量 Dirac 方程 (或者成为 Weyl 方程) 的 Hamilton 量

$$\mathcal{H}^{\text{eff}}(\mathbf{k}) = \hbar v_F \tau_3 \otimes (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k}), \quad \tau_3 \otimes \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (16.157)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2)$, 并且我们可以将这里的 Pauli 矩阵 τ_3 与和两条谷有关的赝自旋相联系. 这个 Hamilton 量的本征态为

$$\Psi_{\mathbf{k},+}^{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ \lambda e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\mathbf{k},-}^{\lambda} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{-i\phi_{\mathbf{k}}/2} \\ -\lambda e^{i\phi_{\mathbf{k}}/2} \end{pmatrix}. \quad (16.158)$$

注意在这里的 Dirac Hamilton 量中存在两类赝自旋结构:

- 我们使用 Pauli 矩阵 σ_i 标记的是子晶格赝自旋, 其中自旋上下两分量分别代表在两个子晶格上的分量. 我们可以将对石墨烯 Hamilton 量的对角化诠释为在子晶格赝自旋表示空间中的 $\text{SU}(2)$ 旋转.
- 我们使用 Pauli 矩阵 τ_3 表示的谷赝自旋刻画了 twofold valley degeneracy 并且仅和两组子晶格存在间接联系.

更一般地讲, 我们可以将任意二能带 Bloch Hamilton 量借助 Pauli 矩阵写成

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (16.159)$$

这里的 Pauli 矩阵可能代表系统的一些内部自由度, 如真实的自旋, 子晶格指标或者轨道指标. 系统中相互作用的细节由 \mathbf{k} 的周期性函数 $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = (h_1(\mathbf{k}), h_2(\mathbf{k}), h_3(\mathbf{k}))$ 所刻画, 并且 Bloch Hamilton 量的形式会被系统的对称性所约束. 因而系统波函数的所有特征都应该被包含在定义在 Brillouin 环面 \mathbb{T}^2 上的 $(h_0(\mathbf{k}), h_1(\mathbf{k}), h_2(\mathbf{k}), h_3(\mathbf{k}))$ 之中. 不过 $h_0(\mathbf{k})$ 的作用只是对 Hamilton 量的本征值进行平移而不会改变本征态, 因而其不应该对材料的拓扑性质

造成影响. 尽管如此, 这一函数仍会影响材料中电子的色散关系并且会参与决定 Fermi 面的位置, 因而仍是不能忽略的.

如果我们还要考虑自旋-轨道相互作用, 那么原来的两条能带会劈裂为四条并且我们的应该考虑 4×4 的 Hamilton 量. 一般而言, 这样的 4×4 么正矩阵总能按 Dirac Γ -矩阵展开为

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k})\mathbb{1} + \sum_i h_i(\mathbf{k})\Gamma_i + \sum_{ij} h_{ij}(\mathbf{k})\Gamma_{ij}, \quad (16.160)$$

其中 Γ_i 为五个满足反对易关系

$$\{\Gamma_i, \Gamma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (16.161)$$

的 Dirac 矩阵, 而 Γ_{ij} 则被定义为

$$\Gamma_{ij} = \frac{1}{2i}[\Gamma_i, \Gamma_j]. \quad (16.162)$$

16.5.2 陈拓扑绝缘体

陈拓扑绝缘体指那些即便在没有磁场的情况下也会发生时间反演对称性破缺并且其电子能带结构表现有鲜明拓扑特性的二维绝缘体. 理论上构造的陈拓扑绝缘体的结构多少类似于石墨烯: 我们要干的事情只是让类石墨烯结构中的电子出现存在边缘态的类量子 Hall 相, 而达到这一目的的第一步便是在 Dirac 点出打开一道能隙. 对石墨烯 Hamilton 量对称性的研究表明 Dirac 点受子晶格反演和时间反演对称性的保护, 因此我们可以考虑破缺其中一个对称性并得到能隙.

平凡的 Semenoff 绝缘体 最简单的在石墨烯结构中打开一条能隙的方式便是打破子晶格反演对称性而保持时间反演对称, 这只需要我们考虑氮化硼这样的两组子晶格格点被不同种类原子占据的情况. 记 A, B 晶格上的点分别被赋予了能量 $\pm\Delta$, 那么此时 Bloch Hamilton 量便为

$$h_1(\mathbf{k})\sigma_1 + h_2(\mathbf{k})\sigma_2 + \Delta\sigma_3 \quad (16.163)$$

并会带顶附近的色散关系表现为

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{|h(\mathbf{k})|^2 + \Delta^2}. \quad (16.164)$$

可惜的是这没有破坏时间反演对称性, 进而此时第一陈数仍为零并且不会出现有趣的手性边缘态. 同时如果 $|\Delta| \gg t$, 我们会得到更无聊的情况: 此时电子态总会定域在子晶格 A, B 之一上.

Haldane 陈绝缘体 Haldane 考虑了在垂直的周期性磁场中的二维蜂巢形晶格, 并且他考虑的磁场在单位原胞中净通量为零且保持晶格的完整对称性. 这一磁场的存在不会产生 Landau 能级, 但是它会破坏系统的时间反演对称性并且会让电子在次临近 (NNN) 格点间的跃迁振幅获得额外的复相位 $e^{\pm i\phi}$. 我们可以将这一复相位的起源视为一种 AB 效应: 记系统中的磁矢势为 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$, 那么

$$e^{-i\phi} = e^{-i\frac{e}{\hbar} \int d\mathbf{x} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})}. \quad (16.165)$$

电子在 NNN 格点间跃迁的两种闭合路径如图7(b) 所示, 此时电子跃迁一周后获得的相位正比于三角形区域内的磁通量. 由于两种路径对应的相位相反, 因而磁场对一个晶胞中电子

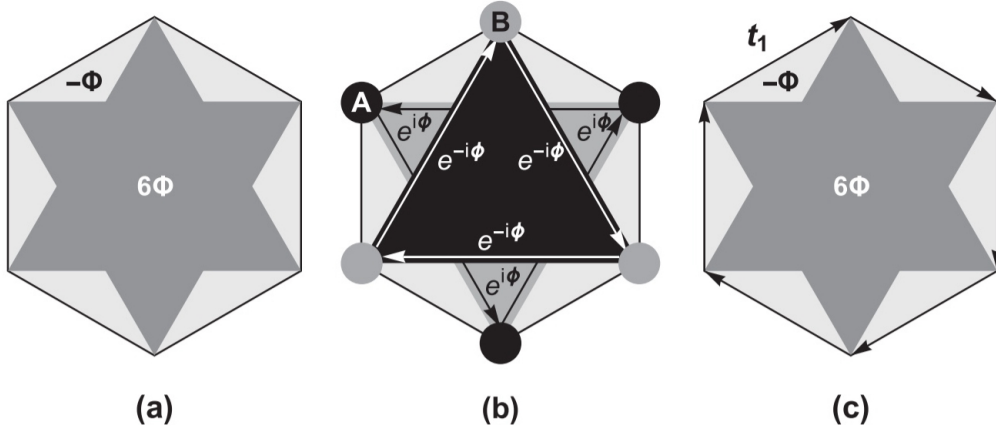


Figure 7. Haldane 模型. (a) 展示一种可能的磁场构形. (b) 中绘出的两种次临近格点间的跃迁分别具有额外的复相位 $e^{\pm i\phi}$. (c) 绘制出了由最临近格点间的跃迁形成的闭合路径, 可以看到环路包围的净通量为零.

的净作用为零. 同时我们根据图7(c) 绘制的最近邻跃迁形成的路径可以看出这一回路包括的净通量为零, 因而此时电子也不会获得额外的复相位. 通过写下动量空间中的 Hamilton 量, Haldane 证明了这个系统的陈数对 $-\pi < \phi < 0$ 而言等于 $+1$, 而对 $0 < \phi < \pi$ 而言等于 -1 , 而 $\phi = 0$ 的点可以被视作 (\mathbf{k}, ϕ) 空间中的 Weyl 点.

可以看到, 在 Haldane 模型中两组子晶格也不再完全等价, 因而这个模型同时破缺了蜂巢形格点的子晶格反演对称性和时间反演对称性并进而在 $\mathbf{K}, \mathbf{k}K'$ 点处打开了能隙. Haldane 在特定条件下证明了系统中可以观测到 $\sigma_{xy} = \pm e^2/h$ 的 Hall 电导, 并且这个模型标志了拓扑凝聚态物理飞速发展的开端.

Haldane 模型的 Hamilton 量可以被取作

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & t_1 \sum_{\langle ij \rangle} (|A, i\rangle \langle B, j| + h.c.) + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (e^{i\phi} |A, i\rangle \langle A, j| + e^{-i\phi} |B, i\rangle \langle B, j|) \\ & + \Delta \sum_i (|A, i\rangle \langle A, i| - |B, i\rangle \langle B, i|). \end{aligned} \quad (16.166)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 和 $\langle\langle ij \rangle\rangle$ 分别代表对最邻近和次最邻近格点求和, 同时我们约定逆时针方向的次最邻近跃迁会获得复相位 $e^{+i\phi}$, 顺时针方向的跃迁则有相位 $e^{-i\phi}$.

使用与我们处理石墨烯时相似的方式考虑由反 Wannier 态的 Bloch 态给出的动量空间表象, 我们便可以得到 Bloch Hamilton 量

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \sum_{i=0}^3 h_i(\mathbf{k}) \sigma_i \equiv h_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (16.167)$$

其中

$$h_0(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos \phi \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i), \quad (16.168)$$

$$h_1(\mathbf{k}) = t_1 [\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 1], \quad (16.169)$$

$$h_2(\mathbf{k}) = t_1 [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)], \quad (16.170)$$

$$h_3(\mathbf{k}) = \Delta + 2t_2 \sin \phi \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i), \quad (16.171)$$

并且 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 与石墨烯子晶格的基矢一致, 而

$$\mathbf{v}_1 = \boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3, \quad \mathbf{v}_2 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1, \quad \mathbf{v}_3 = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2. \quad (16.172)$$

这一 Hamilton 量的本征值和本征态为

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k}) \pm |\mathbf{h}(\mathbf{k})| \equiv h_0(\mathbf{k}) \pm h(\mathbf{k}), \quad |\mathbf{h}, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2h(h \mp h_3)}} \begin{pmatrix} h_3 \pm h \\ h_1 - ih_2 \end{pmatrix}. \quad (16.173)$$

鉴于 h_0 只是平移了能量并破坏了电子-空穴对称性, 我们可以将其忽略并分析此时 Hamilton 量的性质. 此时我们发现:

- $|\Delta| > 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ 时系统存在能隙, 并且 \mathbf{K}, \mathbf{K}' 处能隙符号相同.
- $|\Delta| = 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ 时系统会在 \mathbf{K}, \mathbf{K}' 之一 (分别对应 $\Delta < 0$ 和 $\Delta > 0$) 存在能隙闭合.
- $|\Delta| < 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ 时系统又存在能隙. 对于 $\Delta > 0$, 我们发现此时 $\Delta\varepsilon(\mathbf{K}) > 0$ 而 $\Delta\varepsilon(\mathbf{K}') < 0$, 这表明在两个点间两个本征态出现了互换. 我们称这一现象为 band inversion, 其表明我们从 \mathbf{K} 移到 \mathbf{K}' 时本征态出现了交缠, 并且我们不可能在不闭合能隙的前提下从这一情况变回一开始 (作为平凡绝缘体) 的情况. 事实上, 在从拓扑绝缘体到平凡绝缘体的转变过程中必然会出现存在 Dirac 点的半金属态

可以看到, Haldane Hamilton 量的形式 $\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ 形如一个二能级系统, 并且我们猜测其物理性质可以被一个 Dirac 单极子所反映. 为此我们考虑将两组本征矢利用

$$\cos \theta_{\mathbf{k}} \equiv \frac{h_3(\mathbf{k})}{h(\mathbf{k})}, \quad \tan \varphi_{\mathbf{k}} = \frac{h_2(\mathbf{k})}{h_1(\mathbf{k})} \quad (16.174)$$

重参数化为

$$|\mathbf{h}, -\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ -\cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix}, \quad |\mathbf{h}, +\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix} \quad (16.175)$$

特别的, 我们还能把 Hamilton 量中 $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ 方向的单位矢量写作

$$\hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{h}(\mathbf{k})}{h(\mathbf{k})} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ \sin \varphi_{\mathbf{k}} \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ \cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (16.176)$$

$\hat{h}(\mathbf{k}) \in \mathbb{S}^2$, 而 $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^2$. 由于在有能隙的系统中 $h(\mathbf{k})$ 在 \mathbb{T}^2 上始终不为零, 因而此时映射 $\mathbf{k} \rightarrow \hat{h}(\mathbf{k})$ 在 Brillouin 环面上处处是良定义的. $\Delta > 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ 时 \mathbb{T}^2 在此映射下的像仅覆盖 \mathbb{S}^2 的一个半球, 因而其对应的 (刻画了环绕数) 陈数为零; 而 $\Delta < 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$ 时 \mathbb{T}^2 的像覆盖了整个球面, 故其第一陈数为 1.

我们可以利用本征态来计算 Berry 联络并得到

$$\mathcal{A}_\ell^{(\pm)} = \sum_i \frac{\partial h_i}{\partial k^\ell} a_i^{(\pm)}(\mathbf{h}), \quad a_i^{(\pm)}(\mathbf{h}) = i \langle \mathbf{h}, \pm | \partial_{h_i} | \mathbf{h}, \pm \rangle. \quad (16.177)$$

并且 Berry 曲率可以被写成

$$\mathcal{F}_{xy}^{(\pm)} = \mp \frac{1}{h^3} \mathbf{h} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{h} \wedge \partial_{k_y} \mathbf{h}), \quad (16.178)$$

进而陈数为

$$\mathcal{C} = \mp \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} d\mathbf{k} \frac{1}{h^3} \mathbf{h} \cdot (\partial_{k_x} \mathbf{h} \wedge \partial_{k_y} \mathbf{h}). \quad (16.179)$$

这里的被积函数其实就是映射 $\hat{h}: \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$ 的 Jacobi 行列式, 进而积分结果便是 Brillouin 环面的像在 \mathbb{S}^2 上的面积, 即环绕数 (陈数). 我们也知道, Hall 电导可以被表示为 Berry 曲率在 Brillouin 环面上的积分并能被陈数表示为

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \mathcal{C}, \quad (16.180)$$

因而 Haldane 绝缘体在陈数非零时会表现出量子化的 Hall 电导.

我们现在考虑两个拓扑不等价的绝缘体的边缘处涌现的费米子边缘态. 具体而言, 我们考虑宇称破缺的二维 Semenoff 绝缘体和宇称和时间反演均破缺的 Haldane 绝缘体的一维边缘. 我们假设 Semenoff 绝缘体占据了 $x < 0$ 的左半平面, 而 Haldane 绝缘体占据了 $x > 0$ 的右半平面, 二者的边缘便是直线 y 轴. 我们可以仅考虑被组织成 Dirac 方程形式的在 K, K' 点附近有效的态的运动方程³⁶:

$$[-i\hbar v_F \sigma_1 \tau_3 \partial_x + \hbar v_F k_y \sigma_2 + m(x)]\psi = \varepsilon \Psi, \quad (16.181)$$

其中

$$m(x) = \Delta \vartheta(-x) \sigma_3 + m_\phi \vartheta(x) \sigma_3 \tau_3. \quad (16.182)$$

这一简单的突变模型适用于边缘态的衰减长度远小于晶格常量的情况. 对这一方程的求解会给出

$$\varepsilon(k_y) = -\text{sign}(\xi \Delta) \hbar v_F k_y = \text{sign}(m_\phi) \hbar v_F k_y, \quad (16.183)$$

其中界面处的边界条件要求 $-\text{sign}(\xi \Delta) = \text{sign}(m_\phi)$ 使得这些边缘态定域在 Dirac 谷 $\xi = -\text{sign}(m_\phi \Delta)$ 附近, 进而本征态的 Dirac 旋量仅拥有左手或右手 Weyl 旋量分量, 因而我们称它们是手性的. 特别的, 我们注意到 $\Delta \gg 1$ 时 Semenoff 绝缘体可以被视作真空, 因此二维的 Haldane 在真空中会拥有一维的手性边缘态, 并且 $m_\phi \Delta < 0$ 时其方向沿绝缘体边缘顺时针, 而 $m_\phi \Delta > 0$ 时其沿逆时针. 特别的, 此时 $m_\phi \Delta$ 的符号就是 $m_\phi = 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi$, 而其正负恰由 Haldane 模型的微观图像中电子跃迁路径的手性所决定.

³⁶注意我们关注波函数在实空间的 x 轴向的性质, 因而我们将 k_x 变成了 $-i\partial_x$.

16.5.3 Weyl 与 Dirac 半金属

拓扑绝缘体中 bulk 能隙的存在极大地方便了我们描述能带的非平凡拓扑相, 而现在我们则要考虑刻画没有全局 bulk 能隙的系统 (如金属和半金属) 的拓扑特性. 我们会发现系统保持平移对称性时许多拓扑能带特征仍能得到保留, 并且无能隙 Weyl 半金属中会有许多有趣的非平凡拓扑性质.

偶然简并与维数 在经典的电子能带论中, Bloch 波矢 \mathbf{k} 点处的简并性对应着系统对称群在该点处的不可约表示的维数. 然而在拓扑半金属中在诸多 \mathbf{k} 点处能隙的闭合源于拓扑效应并会被其保护, 进而会出现额外的能带简并性.

我们先来考虑两条能带并探索是否能通过调节 Hamilton 量的参数来让这两条能带出现简并. 这一系统的 Hamilton 量的最一般形式为

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k})\sigma_0 + h_1(\mathbf{k})\sigma_1 + h_2(\mathbf{k})\sigma_2 + h_3(\mathbf{k})\sigma_3, \quad (16.184)$$

并且其本征值为

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{h_1^2(\mathbf{k}) + h_2^2(\mathbf{k}) + h_3^2(\mathbf{k})}. \quad (16.185)$$

因而只有在存在使得 $h_i(\mathbf{k}_0) = 0$ 的 \mathbf{k}_0 时两条能带才会相交. 这一情况在三维空间中其实并不罕见³⁷: 毕竟单个方程 $h_j(\mathbf{k}) = 0$ 确定了一条曲面, 而我们要找的便是两个曲面交出的曲线和第三个曲面的交点. 事实上, 这样的点 \mathbf{k}_0 往往成对存在, 并且色散关系在其附近总能被线性化. 考虑 $\mathbf{k}_0 + \delta\mathbf{k}$, 那么线性化的有效 Hamilton 量可以被记作

$$\mathcal{H}(\delta\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \hbar\mathbf{v}_0 \cdot \delta\mathbf{k}\sigma_0 + \sum_{j=1}^3 \hbar\mathbf{v}_j \cdot \delta\mathbf{k}\sigma_j, \quad (16.186)$$

其中 $\mathbf{v}_\mu = \nabla_{\mathbf{k}} h_\mu(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$. 如果 $|\mathbf{v}_0| = 0$ 并且三个 \mathbf{v}_i 彼此正交, 那么这便是各向异性 Weyl Hamilton 量——它和高能理论中的 Weyl 方程相比仅是少了些 Lorentz 对称性.

三维材料中的这种偶然简并很早就为人所知, 但是直到最近人们才开始理解其对应的拓扑内涵. 注意到 $|\mathbf{v}_0| = 0$ 时我们得到的 Weyl Hamilton 量很像我们在 Berry 曲率一节讨论过的二能级 Hamilton 量, 进而其两个本征态分别对应 Berry 曲率

$$\mathcal{F} = \pm \frac{\hat{\delta\mathbf{k}}}{2|\delta\mathbf{k}|^2}. \quad (16.187)$$

这恰好对应着有着正负磁荷的磁单极子的场强, 在这里我们可以将磁荷称为 Berry 荷并且其正负反映了态的 helicity.

我们现在考虑一个有着正或者负 Berry 荷的节点附近的 Hamilton 量

$$\mathcal{H} = \pm v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0). \quad (16.188)$$

假设赝自旋的行为与自旋一致, 那么在时间反演下 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}$ 而

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}' = \pm v\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{k}_0). \quad (16.189)$$

³⁷ 二维时 \mathbf{k}_0 的存在性则没有那么普遍, 此时我们常常需要微调 Hamilton 量才能构造出有公共零点的三个 $h_i(\mathbf{k})$. 因而如果系统没有约束 $h_i(\mathbf{k})$ 的额外对称性, 两条能带常常不会相遇.

因此 TRS 的存在还存在一个有着相同 Berry 荷的 Weyl 点 $-\mathbf{k}_0$. 而在空间反演下 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}, \sigma \rightarrow \sigma$, 因而

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}' = \mp v \sigma \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{k}_0), \quad (16.190)$$

故空间反演对称表明存在有着相反 Berry 荷的 Weyl 点 $-\mathbf{k}_0$. 因此如果系统同时存在 TRS 和 IS, 那么每个 Weyl 点都会伴随三个 Weyl 点并且此时系统的净拓扑荷为零. 因而, 我们必须得至少破缺其中一个对称性来获得有趣的东西.

如果系统中存在 IS 而没有 TRS, 那么系统中如果有便会至少有两个于 $\pm \mathbf{k}_0$ 处有着相反拓扑荷的 Weyl 点; 而如果存在 TRS 而不存在 IS, 那么非平凡的 Weyl 点数目下限为 4, 因为此时不仅存在 $\pm \mathbf{k}_0$ 处的 Weyl 点, 在每个点处还存在 TRS 保护的 helicity 的二重简并性. 在 TRS 与 IS 之一破缺的情况下无质量晶格费米子必须以有着相反 helicity 或者 Berry 荷的形式成对出现的这一事实叫做 Nielson-Ninomiya 定理或 fermion-doubling 定理. 我们可以通过考察 Brillouin 区的拓扑来理解 Weyl 点一定以具有相反手性的方式成对出现这一事实: 注意到 Weyl 点附近的有效 Hamilton 量具有二能级系统的形式, 因此包裹它的一个闭曲面的净 Berry 通量为 $2\pi\mathcal{C}$, 其中 $\mathcal{C} = \pm 1$ 为第一陈数. 但是如果我们扩张这个闭曲面以使得其刚好为第一 Brillouin 区的边界, 那么根据倒空间的周期性这个闭曲面必然平凡同伦并且其第一陈数一定为零, 因而 Brillouin 区内所有 Weyl 点的陈数之和必须为零.

因此, 我们为了实现 Weyl 半金属态只需要通过在能带非简并的三维晶体中恰当地引入对称性破缺并寻找 band crossings. 而为了在实验上观察到 Weyl 点的效应, 我们还得引入一个额外要求: 这些点应该在 Fermi 能附近. 这一要求意味着在我们考虑的情况中 $h_0(\mathbf{k})$ 几乎为零并且此时我们的有效 Hamilton 量在恰当的条件下确乎会给出 Weyl 方程. 特别的, 我们约定这些点处涌现的 Weyl 费米子的手性为

$$C = \text{sign}[\mathbf{v}_x \cdot (\mathbf{v}_y \times \mathbf{v}_z)]. \quad (16.191)$$

TRS 破缺的 Weyl 半金属 我们现在考虑拥有 IS 而破缺 TRS 的 Weyl 半金属, 此处 TRS 的破缺要求系统中存在内禀的或外源的磁场. 此时系统中 Weyl 点的数目下限为 2, 二者拥有相反的手性并且 IS 确保它们有着相同的能量. 考虑一个能带不存在自旋简并的磁致有序 (magnetically ordered) 系统的例子: 简单立方晶格的每个格点上都存在一对有着相反宇称的轨道 (如 s, p 轨道). 两个轨道间的反演对称性由 τ_z 矩阵通过

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) \rightarrow \tau_z \mathcal{H}(-\mathbf{k}) \tau_z \quad (16.192)$$

给出. 系统的 Hamilton 量被取作

$$\mathcal{H} = t_z[2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a) + \gamma - \cos(k_z a)]\tau_z + t_x \sin(k_x a)\tau_x + t_y \sin(k_y a)\tau_y. \quad (16.193)$$

这一构造使得系统在 $-1 < \gamma \equiv \cos(k_0 a) < 1$ 时于 $\pm \mathbf{k}_0 = (0, 0, \pm k_0)$ 处分别存在一个 Weyl 点. 从 $\gamma = -1$ 出发, Weyl 点会在 Brillouin 区的边界处出现并互相靠近直至在 $\gamma = 1$ 时于 Brillouin 区的中心处湮灭. 在 Weyl 点附近的由 $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}_0 + \mathbf{q}$ 标记的低能激发态 Hamilton 量为

$$\mathcal{H}_{\pm} \approx \sum_i v_i^{\pm} q_i \tau_i, \quad (16.194)$$

其中

$$\mathbf{v}^{\pm} = (t_x, t_y, \pm t_z \sin(k_0 a)). \quad (16.195)$$

现在考虑 Brillouin 区内的八个时间反演不变动量 (TRIMs). $\gamma > 1$ 时各个 TRIM 处的宇称本征值均相同, 因而此时没有 band inversion. 然而 $\gamma = 0$ 时 Γ -点处的宇称本征值会变号, 这标志了 band inversion 和 Weyl 点的出现, 并且偶数个宇称本征值变号处的出现正是 Weyl 物理的特征.

我们现在考虑动量空间中 $k_z = 0$ 与 $k_z = \pi/a$ 平面上的陈数 $\mathcal{C}(k_z)$: 计算表明 $\mathcal{C}(\pi/a) = 0$ 而 $\mathcal{C}(0) = 1$. 随着 $\gamma \rightarrow 0$, 整个 Brillouin 区会沿着 k_z 方向填满一个单位陈数并且系统会表现三维版的整数量子 Hall 效应.

如果系统中的化学势恰好为 $E_F = 0$, 那么 Fermi 面只会包含 $\pm \mathbf{k}_0$ 两点. 而如果我们略微增大 E_F , 那么两个 Weyl 点附近会出现两个近球形 Fermi 面并让材料表现为金属态. 由于此时这两个 Fermi 面是 Brillouin 区中的二维闭子流形, 我们自然可以考虑计算穿过它们的 Berry 通量并会发现此时其被量子化为 ± 1 , 而这正是 Weyl 金属的特征. 如果 $E_F > E^* = t_z(1 - \gamma)$, 那么两个 Weyl 点处的 Fermi 面会通过一个 Lifshitz transition 相融合并使得此时 Fermi 面上的总陈数为零, 并且此时我们将不再认为材料处于 Weyl 金属态. 理想情况下, 我们可以通过 stoichiometry 来调控这一化学势的位置.

宇称对称破缺的 Weyl 半金属 如果 TRS 对称性被保留, 那么我们必须破缺反演对称性以获得 Weyl 半金属并且此时 Weyl 点的总数必须是 4 的整数倍. 并且此时 TRS 的存在保证了 \mathbf{k}_0 处的一个 Weyl 点都对应着 $-\mathbf{k}_0$ 处的一个手性相同的 Weyl 点. 由于 Brillouin 区的净 Berry 通量必须为零, 系统中必然存在另外一对有着与 $\pm \mathbf{k}_0$ 处的手性相反的 Weyl 点, 但是它们的位置不一定与 $\pm \mathbf{k}_0$ 处简并.

Fermi arc 表面态 在拓扑绝缘体中, 我们将能量位于 bulk 能隙中并且在表面处指数级定域的金属态称为 Dirac 费米子表面态; 现在我们的问题是如何就 bulk 中不存在 global 能隙的 Weyl 半金属的表面 Brillouin 区中定义这样的态.

我们考虑一大块三维 Weyl 半金属并假设其在 $z = \pm Z_0$ 上有界, 那么沿着 x, y 方向的平移对称性便给出了一个表面 Brillouin 区 (SBZ). 我们考虑一对 Weyl 点位于 E_F 上的理想情况, 因而在 E_F 处 bulk 态向 SBZ 的投影只会包含动量 $\pm \bar{\mathbf{k}}_0$ 处的 Weyl 点. 由于表面态能量不应与 bulk 态相同, 因此表面态会存在于 SBZ 的 projected gap 内, 进而我们可以在 E_F 中除 $\pm \mathbf{k}_0$ 以外的所有动量值处定义表面态. 随着我们逐渐接近 Weyl 点, 表面态在 bulk 内的穿透深度会增大以至于最后它们不再良定义, 这最后导致了弧形 Fermi 面 (arc-shaped Fermi surface).

我们可以从拓扑上理解这些态: Berry 曲率场从一个 Weyl 点出发并在另一个点终止, 进而横亘这对 Weyl 点连线上的任意二维 \mathbf{k} -平面均拥有非零的陈数 $\mathcal{C} = 1$ 并拥有和量子 Hall 效应有关的边缘态; 与之相反, 其余曲面上的陈数总是零. 这是由 bulk 费米面在 Weyl 点附近消失而产生的纯拓扑效应. 而在边界上拓扑边缘态会存在于 $\mathcal{C} = 1$ 的二维平面的边缘并在 $\mathcal{C} = 0$ 的平面边缘处消失.

如果我们考虑 Weyl 点位置偏离 Fermi 面的情况, 那么此时 bulk 态占据的动量空间区域会扩大, 并且这些额外的 bulk 态的出现会带来在二维和三维绝缘体的边界上均不会出现表面态: 此时整个表面 Brillouin 区内均会存在一个有限大的能隙. Haldane 认为由于表面态在趋近于其终止点时必须连续地变成 bulk 态, 故此时 Fermi arc 表面态必须和 bulk Fermi 面在 SBZ 上的投影相切. 亦即此时表面态的隐失深度会不断变大, 以至于在抵达 bulk 态的投影点时表面态会和 bulk 态互相融合; 进而这些表面态必然继承了 bulk 态的速度, 并且它们必须和 bulk Fermi 面的投影相切.

第二类 Weyl 半金属 我们在一般的 Weyl 点附近展开得到的一般低能有效 Hamilton 量 (16.186) 的能量本征值为

$$\varepsilon_{\pm}(\delta\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}_0} + \sum_i v_0^i \delta k_i \pm \sqrt{\sum_{j=1}^3 \left(\sum_{i=1}^3 v^{ij} k_i \right)^2}. \quad (16.196)$$

一般情况下非零的速度参数 v_0 会让 Weyl 锥出现一个倾角. 这一项在相对论性的理论中会被 Lorentz 对称性所禁止, 但由于凝聚态系统并不一定得遵循 Lorentz 对称性, 我们并没有先验的原则排除来这一项并会导致对 Fermi 面的更精细的分类. 一般而言, 如果我们在孤立的二重 band crossing 点附近取线性化的长波理论, 那么此时一般会出现非零的 v_0 ; 而这个 v_0 存在会为 Weyl 点附近的能带色散关系诱导出一个晶体场各向异性. 如果 v_0 足够大, 那么系统中会产生定性上全新的动量空间几何, 此时等能面是开曲面而非闭曲面并让 Weyl 锥在 Fermi 面上交出了以 Weyl 点为顶点的一对粒子-空穴锥. 这一半金属相被分类为“第二类 Weyl 半金属”.

第一类 Weyl 半金属在 Weyl 点附近的有效理论遵循 Lorentz 对称性, 而第二类则不存在 Lorentz 对称性. 尽管第一类好第二类 Weyl 半金属拓扑不等价, 但是二者共享着由 bulk 能谱中孤立的能带交点带来的电子行为. 第二类 Weyl 半金属中 Weyl 点的拓扑特征仍由 (16.186) 等号右边的第三项所控制, 因而其在表面上仍具有终止于 Weyl 点在 SBZ 上的投影的表面 Fermi arc, 而这正是半金属态的拓扑本质的特征.

17 多体物理中的拓扑

在特定条件下, 一个系统可能会出现拥有非平凡长程特征的平均场构型 (即非平凡长程序), 而一个很重要的造成非平凡长程序的机制便是理论非平凡的拓扑结构: 在有着非平凡拓扑结构的理论中一个平均场解无法被连续形变为均匀解. 我们在本节中便要着重考察拓扑效应的影响. 特别的, 我们会强调拓扑项的概念: 这是一个通过改变理论拓扑结构来影响其低能行为的算符. 我们对场构形的拓扑分类则会强烈依赖于同伦论. 我们将讨论不同的拓扑项 (θ -项, Wess-Zumino 项以及 Chern-Simons 项) 并介绍其在凝聚态物理中的应用. 我们将会看到, 一旦理论中出现了这样的项, 那么理论的长程行为将会受到极大的影响. 同时值得注意的是, 我们极易在根据微观过程建立低能理论时忽视这些拓扑项!

17.1 玩具模型: 环上的粒子

我们考虑单位环上的一维粒子并且环中通有磁通量 Φ , 那么系统的 Hamilton 量便为

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(-i\partial_\phi - A)^2, \quad (17.1)$$

其中

$$A = \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad \Phi_0 = \frac{hc}{e} = 2\pi, \quad (17.2)$$

我们取了自然单位制 $\hbar = c = 1$ 并假设粒子电荷 $e = 1$.

我们直接可得 Hamilton 量的本征函数及对应的本征值:

$$\psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\phi}, \quad \varepsilon_n = \frac{1}{2} \left(n - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2. \quad (17.3)$$

事实上, 拓扑量子场论中的许多概念都可以和这一形式极其简单的波函数建立联系. 为了看到这一点, 我们可以考虑理论对应的虚时路径积分

$$Z = \int_{\phi(\beta) - \phi(0) \in 2\pi\mathbb{Z}} \mathcal{D}[\phi] e^{-\int d\tau \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi})}, \quad (17.4)$$

其中拉氏量可以根据 Legendre 变换由 Hamilton 量得到: 我们有

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} = p_\phi + iA \quad (17.5)$$

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = p_\phi \dot{\phi} - H = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 - iA \dot{\phi}. \quad (17.6)$$

现在假设我们并不知晓这一问题的精确解, 那么处理这一泛函积分的标准方法便是分析拉氏量的鞍点并在其附近做展开. 我们不难得到 ϕ 的经典运动方程为

$$\ddot{\phi} = 0, \quad (17.7)$$

而这有着两个有趣的性质:

- 一方面这个方程并不包含矢势, 但是我们通过求解 Hamilton 量又会发现矢势会影响能量本征值.

- 我们可以找到一系列经典解

$$\phi_W(\tau) = \frac{2\pi W \tau}{\beta}, \quad W \in \mathbb{Z}, \quad (17.8)$$

并且这些解在 $A = 0$ 时的经典作用量满足

$$S[\phi_W]|_{A=0} = \frac{1}{2\beta}(2\pi W)^2. \quad (17.9)$$

可以看到鞍点作用量会按 W 不连续地变化.

为了理解这一现象, 我们需要注意 ϕ 本质上是一个 $S^1 \rightarrow S^1$ 的映射, 而这种映射的拓扑特征便有环绕数 W 标志. 鞍点运动方程与 A 无关是因为拉氏量里 $A\dot{\phi}$ 项为全微分项, 它不会影响局域的运动方程; 但是我们不难发现这一项对路径积分中的指数因子有一个整体的贡献

$$-iA[\phi_W(\beta) - \phi_W(0)] = -2\pi i A. \quad (17.10)$$

进而我们发现配分函数的积分可以被分在诸多 topological sectors 上进行, 并且我们可以得到

$$Z = \sum_W e^{2\pi i W A} \int_{\phi(\beta) - \phi(0) = 2\pi W} \mathcal{D}[\phi] e^{-\frac{1}{2} \int d\tau \dot{\phi}^2}. \quad (17.11)$$

特别的, 我们注意到其实只有矢势项是对场的拓扑构型敏感的项, 而动能项对场的拓扑特性并不十分敏感并且可以按照一般的方法处理. 事实上, 这一矢势项属于一类叫做 θ -项的拓扑项.

17.2 同伦

为了讨论更复杂情形下的场拓扑, 我们需要引入同伦的概念. 一般而言, 我们可以将场 ϕ 抽象为从基流形 M 到靶流形 T 的映射

$$\phi : M \rightarrow T. \quad (17.12)$$

一般而言, $M = \mathbb{R}^d$. 我们在拓扑场论中对自发对称破缺产生的 Goldstone 模式的长程序尤其感兴趣, 而此时靶流形便是陪集空间

$$T = G/H, \quad (17.13)$$

其中 G 是原先的对称群, 而 $H \subset G$ 是联系系统的简并基态的 G 子群. 事实上, 我们还应该留心底流形 M 的拓扑结构: 从微观理论出发定义一个场论时我们所基于的往往只是一个局域单连通子流形 $M \subseteq \mathbb{R}T^d$; 如果我们仅仅是单纯考虑热力学极限下的性质, 那么我们可以搞理论时把 M 扩张为无限大的单连通流形; 但如果我们着重关心系统的低能行为, 那么场构形在在边界 ∂M 上的值便是不可忽略的. 现在我们又要考虑 ∂M 又要考虑无穷大的热力学极限, 那么一个通行的做法便是借助 Riemann 球面而将 ∂M 认同为球极投影中的无穷远点, 并且我们可以拓扑等价地将场构形抽象为

$$\phi : S^d \rightarrow G/H. \quad (17.14)$$

两个这种场构形的拓扑等价性等同于二者间能否连续形变, 这也就是说二者是否同伦. 特别的, 从 d -维球面到一个流形 T 的映射的同伦等价类还可以被赋予群结构并且对分类 T 的拓扑极为重要, 我们称之为 d -阶同伦群 $\pi_d(T)$. 因此, d -维自发对称破缺场论的拓扑结构其实被 $\pi_d(G/H)$ 所编码.

17.3 θ -项

现在我们知道一个场构形 $\phi: M \rightarrow T$ 总可以按同伦群 $\pi_d(T)$ 中的拓扑等价类来分类, 并且我们可以将配分函数组织为

$$Z = \sum_{W \in \pi_d(T)} \int \mathcal{D}[\phi_W] e^{-S[\phi]}. \quad (17.15)$$

一个拓扑上有趣的场论会包含拓扑项, 我们将之记作

$$S[\phi] = S_0[\phi] + S_{\text{topo}}[\phi], \quad (17.16)$$

其中 $S_{\text{topo}}[\phi] \equiv F(W)$ 的值仅和场 ϕ 所处的同伦类有关; 特别的, 如果 $W \in \mathbb{Z}$, 那么我们会称这样的项为场构形的拓扑荷. 此时配分函数可以被写作

$$Z = \sum_{W \in \pi_d(T)} e^{-F(W)} \int \mathcal{D}[\phi_W] e^{-S_0[\phi]}. \quad (17.17)$$

在最简单的情况中, $F(W)$ 线性依赖于拓扑指标并且我们记作³⁸

$$F(W) = i\theta W, \quad \theta \in \mathbb{R}. \quad (17.18)$$

通常我们会称 θ 为拓扑角, 并且满足这一性质的拓扑项叫做 θ -项. 虽然我们并没有一般性的判断 θ -项的方式, 但是我们通过接下来几个例子会发现判断作用量里的一个项是否为 θ -项通常是十分简单的.

17.3.1 θ -项的几何构造

对于能构造 θ -项的场 $\phi: M \rightarrow T$, θ -项刻画了 ϕ 在 T 上的覆盖度. 这要求靶流形 T 紧致, 进而我们总可以将其上的体积形式 ω 归一化得到

$$\int_T \omega = 1. \quad (17.19)$$

根据 ϕ , 我们可以得到 ω 在 M 上的拉回 $\phi^*\omega$, 并且 θ -项便可以构造为

$$S_{\text{top}}[\phi] = i\theta \int_M \phi^*\omega. \quad (17.20)$$

这一拉回映射在 M 上的积分恰给出了 ϕ 在 T 上的覆盖度: 它总是一个整数.

值得一提的是, 虽然 θ -项常常出现在 $\dim M = \dim T$ 的场论中 (毕竟我们会直观地期待 M 能映满 T), 但其实我们也可以对 $\dim M < \dim T$ 的情况构造这一项. 例如, 一个从奇数维 M^d 到 $U(n)$ 或 $SU(n)$ 的场论 $g(x)$ 的 θ -项可以依据测度 $\text{tr}[(g^{-1}dg)^{\wedge d}]$ 构造. 例如, $d=1$ 时我们直接有

$$S_{\text{top}}[g] = \frac{\theta}{2\pi} \int dx \text{tr}(g^{-1}dg), \quad (17.21)$$

而 $d=3$ 时我们有

$$S_{\text{top}}[g] = \frac{i\theta}{24\pi^2} \int dx \text{tr}[(g^{-1}dg)^{\wedge 3}]. \quad (17.22)$$

不过我们能为 $n > d$ 构造 θ 项是因为 $n > 2$ 时 $U(n)$ 和 $SU(n)$ 的拓扑信息都被编码在了 $SU(2)$ 子群中, 因而衡量一个到其上的映射的拓扑性质也只需要相对这个子群去衡量. 这好比我们在二维平面上挖去了原点这个空间对于一维的曲线也是拓扑非平凡的, 我们可以将它当成 S^1 来对曲线进行分类.

³⁸ 其中 i 应该可以通过拓扑项的全微分性以及时间/空间反演不变性 argue 而来?

17.3.2 $\pi_2(\mathbb{S}^2)$ 玩具模型

我们可以考虑一个从紧化的二维空间到 \mathbb{S}^2 的场论. 实际上, 量子自旋链, 二维经典 Heisenberg 模型以及整数量子 Hall 效应的场论表述都和这一模型有关. 我们记场变量为

$$\mathbf{n} : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2, \quad \mathbf{x} \mapsto \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad |\mathbf{n}| = 1. \quad (17.23)$$

分类场构形的同伦群为 $\pi_2(\mathbb{S}^2) \cong \mathbb{Z}$.

我们可以为这一场论构造拓扑项

$$\begin{aligned} S_{\text{top}}[\mathbf{n}] &= \frac{i\theta}{4\pi} \int dx_1 dx_2 \mathbf{n} \cdot (\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n}) \\ &= \frac{i\theta}{4\pi} \int dx_1 dx_2 \varepsilon_{ijk} (\partial_1 n^i) (\partial_2 n^j) n^k. \end{aligned} \quad (17.24)$$

为了说明这一项是拓扑的, 我们可以先来考察它对场构形的微小变动的敏感度: 考虑变分

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{n}(\mathbf{r}) + \epsilon^a(\mathbf{r}) R_a \mathbf{n}(\mathbf{r}), \quad (17.25)$$

其中 R_a 为三个无穷小旋转而 ϵ^a 为无穷小参数, 那么我们可以得到这个扰动对 S_{top} 的影响为

$$\delta S_{\text{top}}[\mathbf{n}] = \frac{3i\theta}{4\pi} \int dx_1 dx_2 \epsilon^a (R_a \mathbf{n}) \cdot (\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n}). \quad (17.26)$$

注意 $(\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n})$ 平行于 \mathbf{n} 而 $R_a \mathbf{n}$ 垂直于 \mathbf{n} , 进而我们发现这一项等于零. 特别的, 我们在这里进行的其实就是一个一般的场变分, 进而我们可以发现这一项也不会影响我们通过变分法得到的场运动方程.

不过这一 θ -项也可以通过我们前面考虑的拉回映射构造而来: 靶流形 \mathbb{S}^2 上的体积形式为

$$\omega = \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta \wedge d\varphi, \quad (17.27)$$

而场构形 $\phi(x, y)$ 可以被记作 $(\theta(x, y), \varphi(x, y))$, 进而我们得到它在底流形 \mathbb{S}^2 上的拉回为

$$\begin{aligned} \phi^* \omega &= \frac{1}{4\pi} \sin \theta(x, y) \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} dx + \frac{\partial \theta}{\partial y} dy \right) \wedge \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} dx + \frac{\partial \varphi}{\partial y} dy \right) \\ &= \frac{1}{4\pi} \sin \theta(x, y) \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx \wedge dy = \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n}) dx \wedge dy. \end{aligned} \quad (17.28)$$

我们不难通过 explicit 的矢量分析计算验证最后一个等式的成立性 (感谢 Mathematica).

S_{top} 对场构形变分的不敏感性表明我们可以在诸多比较方便计算的测试构形 \mathbf{n}_0 上计算这一项的值, 而那些能够被连续形变到 \mathbf{n}_0 的场构形便与之属于相同的 topological sector. 例如, 我们可以考虑构形 $\mathbf{n}^{(W)} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$ 为

$$(x_1, x_2) \mapsto \left(\phi = W \tan^{-1} \frac{x_2}{x_1}, \theta = 2 \tan^{-1} \frac{a^2}{x_1^2 + x_2^2} \right). \quad (17.29)$$

这样的场构形常被称为斯格明子 (或者 \mathbb{S}^2 -孤子), 其中 W 标志的其实是它的环绕数, 并且我们将这一表达式代入 S_{top} 便可以计算得到其拓扑荷为

$$S_{\text{top}}[\mathbf{n}^{(W)}] = i\theta W, \quad (17.30)$$

可以看到这确实表现得像一个 θ -项.

17.3.3 泛函积分

我们分清理论中存在的 topological sectors 后只需要在各个 sector 上分别计算泛函积分即可。尽管拓扑项并不会改变拓扑非平凡的构形的运动方程,但在实际操作中寻找运动方程的携带有非平凡拓扑指标的解要比寻找拓扑平凡的节困难得多,因而在拓扑非平凡的 sector 上的泛函积分也要困难的多:此时我们通常无法基于均匀的平均场来微扰地计算量子涨落的贡献。

如果理论中分类拓扑孤子的同伦群表现为 $\pi(M, T) \cong \mathbb{Z}^{39}$, 那么我们可以设想把一个拓扑荷 W 的构形和与之相距很远的拓扑荷 W' 的构形粘在一起能够给出一个拓扑荷为 $(W + W')$ 的构形,我们称这样的构形为稀薄孤子气并且我们可以忽略两个孤子间的相互作用。如果两个孤子的距离很接近,那么我们将无法忽略两个构形间的关联(即"相互作用"),并且这个相当难处理的构形被称为孤子液体。特别的,此时我们可以将 $W > 0$ 与 $W < 0$ 的构形分别视为粒子和反粒子:二者的拓扑荷在粘合过程中会互相抵消。

因而我们处理拓扑非平凡的 sector 的方案通常为:

1. 求解平均场方程,寻找拓扑非平凡的低拓扑荷经典孤子。
2. 把多个拓扑孤子粘合在一起构造其他 topological sectors 里的平均场,分析这一稀薄孤子气系统。
3. 考察不同孤子间的关联并确定稀薄孤子气假设不再成立的情况。
4. 如果可以的话再去考察各个孤子强关联的情况。

17.3.4 自旋链

现在我们回头来讨论 S^2 -孤子在实际凝聚态系统中的物理意义。我们可以根据 Holstein-Primakoff 变换按自旋大小的倒数 $1/S$ 的领头阶展开得到铁磁和反铁磁系统中自旋波长波激发态的线性色散关系

$$\epsilon(\mathbf{p}) \sim v_s |\mathbf{p}|. \quad (17.31)$$

但是我们按照这一方法并不能确定 $1/S$ 展开失效时系统的行为,并且我们也不能据此推知实际观测的自旋波激发谱是否会被相互作用所重整化。

处理这种问题的通行做法是先寻找一个精确可解的系统并基于这一系统对我们感兴趣的系统进行微扰计算。对于这里的情况,我们可以选择 $S = 1/2$ 的反铁磁自旋链作为参照系统:它在低能下可以被处理为一维手性费米子。这些手性费米子的激发态会给出电荷密度波,并且它有着线性的色散关系。因而我们现在发现无论是 $S \gg 1$ 还是 $S = \frac{1}{2}$, 系统的低能色散谱都是线性的。据此可以做出的一个天真的猜测便是 $S \sim 1$ 时相互作用依旧不会破坏反铁磁自旋链的线性色散谱。

神奇的是,中子散射实验表明 $S = 1$ 的自旋链不存在任何低能的磁性激发。更进一步地讲,半整数自旋组成的反铁磁自旋链存在相对论性的低能激发,而整数自旋组成的自旋链都是有能隙的。这以奇怪的现象可以利用拓扑解释。⁴⁰

为了从拓扑上理解这一现象,我们需要注意系统中一个经典自旋的构形空间是 S^2 , 而自旋链所处的 $(1+1)$ -维时空也可以被紧化为 S^2 。因此,自旋链的低能连续理论中的场便可以按 $\pi_2(S^2)$ 分类:这正是我们之前讨论的情况。

³⁹其实我们可以利用稀薄孤子气来研究同伦群有限生成的任意拓扑场论。

⁴⁰事实上,大多数与整数自旋有关的物理现象都有着一个拓扑的起源。

我们记自旋幅长为 S , 其指向为 $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, 此时单个孤立自旋的量子配分函数便为

$$Z^{(1)} = \int \mathcal{D}[\mathbf{n}] e^{iS \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}[\mathbf{n}, \partial_\tau \mathbf{n}]}. \quad (17.32)$$

其中拉氏量为

$$\mathcal{L}[\mathbf{n}, \partial_\tau \mathbf{n}] = (1 - \cos \theta) \dot{\phi}. \quad (17.33)$$

作用量是纯虚数并且在 $\tau \rightarrow \tau'(\tau)$ 这一重参数化下不变这两点强烈暗示了这一项是拓扑项. 事实上, 这一项和我们后面讨论的 Wess-Zumino 项有关.

现在我们需要写出自旋链的有效作用量. 先考虑铁磁自旋链, 这里的相互作用项为

$$-J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rightarrow -JS^2 \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_{i+1} \rightarrow \frac{JS^2}{2} (\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_{i+1})^2, \quad (17.34)$$

注意第三步只会带来一个不会影响最终结果的常数. 进而离散的铁磁自旋链的有效作用量为

$$S[\mathbf{n}] = \int d\tau \sum_i \left[\frac{JS^2}{2} (\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_{i+1})^2 + iS \mathcal{L}[\mathbf{n}, \partial_\tau \mathbf{n}] \right]. \quad (17.35)$$

铁磁系统的自旋构形往往是可微的, 因而我们可以记晶格常量为 a 并取连续极限而得到

$$S[\mathbf{n}] = \frac{1}{a} \int d\tau dx \left[\frac{JS^2 a^2}{2} (\partial \mathbf{n})^2 + iS \mathcal{L}[\mathbf{n}, \partial_\tau \mathbf{n}] \right]. \quad (17.36)$$

反铁磁系统中交换相互作用的耦合常数是负的, 因而相邻两个自旋更倾向于反向排列, 于是我们可以根据如下 ansatz 引入反铁磁序参量场 \mathbf{n}' :

$$\mathbf{n}_i = (-1)^i \mathbf{n}'_i. \quad (17.37)$$

将这一表达式代入离散自旋链的有效作用量后再做梯度展开便能得到一个反铁磁系统的低能有效场论; 不过这一计算过程相当繁琐. 我们也可以从对称性考虑出发来构造反铁磁系统的有效理论: 系统的 $O(3)$ 不变性以及低能波动解的存在性要求领头阶有效作用量形如

$$S_0[\mathbf{n}] = \frac{S}{4} \int d\tau dx \left[\frac{1}{v_s} (\partial_x \mathbf{n})^2 + v_s (\partial_\tau \mathbf{n})^2 \right], \quad (17.38)$$

其中 $v_s = 2aJS$ 为自旋波的波速. 我们接下来做 rescale 使得

$$\tau \rightarrow v_s^{-1/2} \tau \equiv x_0, \quad x \rightarrow v_s^{1/2} x \equiv x_1, \quad (17.39)$$

于是

$$S_0[\mathbf{n}] = \frac{1}{\lambda} \int d^2x (\partial_\mu \mathbf{n}) \cdot (\partial^\mu \mathbf{n}), \quad \lambda = \frac{4}{S}. \quad (17.40)$$

这正是 $O(3)$ 非线性 σ -模型的作用量. 现在我们需要基于单个自旋的作用量为反铁磁系统构造出拓扑项. 注意单个自旋的量子作用量

$$iS \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}[\mathbf{n}, \partial_\tau \mathbf{n}] = iS \int_0^{2\pi} d\phi (1 - \cos \theta) \quad (17.41)$$

正比于曲线 $\mathbf{n}(\tau)$ 在上半球面围出的定向面积 $\Gamma[\mathbf{n}]$, 同时我们有

$$\Gamma[\mathbf{n}] = 4\pi - \Gamma[\mathbf{n}] = -\Gamma[\mathbf{n}] \pmod{4\pi}, \quad (17.42)$$

进而我们可以将自旋的动能项取作

$$S_{\text{top}}[\mathbf{n}] = iS \sum_i (-1)^i \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}[\mathbf{n}_i, \partial_\tau \mathbf{n}_i] = iS \sum_i (-1)^i \Gamma[\mathbf{n}_i]. \quad (17.43)$$

在连续极限下, 我们假设 \mathbf{n}_i 和 \mathbf{n}_{i+1} 差别不大, 进而根基 $\Gamma[\mathbf{n}]$ 的几何意义不难得到

$$\Gamma[\mathbf{n}_{i+1}] - \Gamma[\mathbf{n}_i] \approx \int_0^\beta d\tau \mathbf{n}_i \cdot [(\mathbf{n}_{i+1} - \mathbf{n}_i) \times \partial_\tau \mathbf{n}], \quad (17.44)$$

于是连续极限下的拓扑项为

$$S_{\text{top}} = i\theta \int d\tau dx \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}), \quad \theta = \frac{S}{2}. \quad (17.45)$$

这正是我们在 $\pi_2(\mathbb{S}^2)$ 玩具模型部分讨论过的 θ -项!

如果不存在这一 θ -项, 那么 RG 会将 $S_0[\mathbf{n}]$ 刻画系统推向无序相, 而这里拓扑项的存在要求我们在计算配分函数时分别考虑各个 topological sector 的贡献:

$$Z = \sum_{W \in \mathbb{Z}} \int \mathcal{D}[\mathbf{n}_W] e^{2\pi i S W} e^{-S_0[\mathbf{n}_W]}, \quad (17.46)$$

注意 $\pi_2(\mathbb{S}^2) \cong \mathbb{Z}$ 使得我们可以用环绕数 $W \in \mathbb{Z}$ 来标记场的拓扑指标. 这一表达式已经体现了整数和半整数自旋行为的差异: 对整数自旋而言 $e^{2\pi i S W} = 1$, 进而拓扑相不存在任何可观测的影响; 对半整数自旋而言 $e^{2\pi i S W} = (-1)^W$, 显然此时拓扑指标会影响系统的可观测行为.

我们按天真的平均场理论得到的结果是配分函数被一个线性色散的模式所主导, 并且我们会期待量子涨落会改变色散关系甚至创造出能隙. 现在我们便发现在自旋为整数时, 各个 topological sectors 中的量子涨落对配分函数的影响会直接相加, 进而在 S 较小时量子涨落的贡献会盖过平均场的贡献并带来能隙; 而在自旋为半整数时, 相邻 topological sectors 的贡献会部分相消, 因而我们可以期待平均场的贡献仍然在最终的配分函数里占有较大的权重, 系统仍会表现低能线性色散谱. 这一观察便是 Haldane 猜想的基础, 这一猜想认为 S 为整数的自旋链会流向无长程激发的 gapped 无序相, 而半整数自旋链会保持为无能隙相.

这一猜想目前只是猜想, 但是其已经被诸多中子散射实验所验证. 特别的, 这一猜想依赖于二维 $O(3)$ 非线性 σ -模型在强耦合区也不会被重整化这一假设, 而我们一般只能在弱耦合区 $\lambda \ll 1$ 处使用微扰论证明这一模型的标度不变性. 而事实上有研究表明, 在强耦合区时描述半整数自旋链行为的临界理论并不是 $O(3)$ 非线性 σ -模型而是一个 $SU(2)$ 场论. 我们会在介绍 Wess-Zumino 项时再展开讨论这一点.

17.3.5 整数量子 Hall 效应

事实上人们常常将一大类相当不同的现象都称作量子 Hall 效应. 如果我们测量强磁场中低温二维电子气的 Hall 电阻 ρ_{xy} 以及纵向电阻 ρ_{xx} , 那么我们会发现 ρ_{xy} 并不像经典的 Hall 电阻一样随磁场现行增大, 同时 ρ_{xx} 也不像 Drude 理论一样表现为近似的常数. 特别的, 实验结果会具有下述几个特征:

1. 弱磁场下 ρ_{xx} 的 Subnikov-de Haas 振荡.
2. 由有理数填充率 $\nu \in \mathbb{Q}$ 刻画的一系列量子 Hall 平台 $\rho_{xy} = \frac{h\nu^{-1}}{e^2}$.
3. 纵向电阻在量子 Hall 平台处骤减.
4. 从一个量子 Hall 平台到另一个的跃迁由一个温度的幂律函数描述, 这暗示了二级相变的存在, 即零温量子 Hall 相变.
5. $\nu = \frac{1}{2}$ 处存在第二组 Subnikov-de Haas 振荡.
6. 只有在特定的一些有理数 ν 处才会形成平台, 我们称这些有理数的集合为量子 Hall hierarchy.

这仅仅是实验展现的量子 Hall 效应的冰山一角, 不过我们目前先将注意力集中于由整数填充率因子描述的一系列平台, 即整数量子 Hall 效应 (IQHE). 那些有理数平台对应的分数量子 Hall 效应 (FQHE) 则要留待我们发展好更完备的理论工具后再去讨论.

IQHE 中电导率 ρ_{xy}^{-1} 由一系列整数刻画, 这意味着除非我们改变系统的物理参数否则它不可能连续地改变, 同时取整数值这一事实强烈暗示了它可能有着拓扑的起源.

Landau 能级 实验观察到 QHE 的系统可以被抽象为强磁场 (我们规定其方向为 z) 中的二维电子气, 其中 x 方向上的电势差 V_x 诱导了 x 方向的电流; 与此同时, 磁场带来 Lorentz 力使得 y 方向存在 Hall 电流 I_y . I_x 和 I_y 的关系便给出了 Hall 电导. 特别的, 我们可以记

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} I_x \\ I_y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \end{pmatrix}, \quad (17.47)$$

那么系统的输运性质便可以用电导张量

$$\sigma \equiv \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \quad (17.48)$$

刻画为 $\mathbf{I} = \sigma \mathbf{V}$. 电阻张量便对应着 $\rho = \sigma^{-1}$. 对于尺度为 L 的维数为 d 的系统, 系统的电导 g 的电导率 σ 的关系为 $g = \sigma L^{d-2}$, 进而二者在二维完全相等. 这意味着系统的微观物理量 σ 和宏观物理量 g 的联系是独立于系统的几何的. 我们在研究 QHE 时千万不能忽视 σ 和 ρ 的张量结构; 例如假设 $\sigma_{xy} \neq 0$, 那么 $\rho_{xx} = 0$ 意味着 $\sigma_{xx} = 0$ 而非 $\sigma_{xx} \rightarrow \infty$.

在 QHE 中衡量磁场强度的自然单位为填充比

$$\nu \equiv \frac{2\pi N \ell_0^2}{A}, \quad (17.49)$$

其中 N 为总电子数, A 为样品面积而

$$\ell_0 = \sqrt{\frac{\Phi_0}{2\pi|B|}}, \quad \Phi_0 = \frac{h}{e} \quad (17.50)$$

为磁通量子. 这也就是说, 通过面积为 ℓ_0^2 的区域的磁通量为 $\frac{\Phi_0}{2\pi}$.

实验在 $\mathcal{O}(10^{-10})$ 的精度上表明, 磁场取值使得 ν 近似为正整数时的 Hall 电阻是量子化的并且表现为

$$\rho_{xy} = \frac{h}{\nu e^2}; \quad (17.51)$$

在 Hall 电导跃变的同时, 纵向电导率会下降十三个量级.

既然我们假设 IQHE 是拓扑的, 那么样品的缺陷和 static disorder 对 Hall 电导的量子化没有影响. 事实上, 这一现象反而需要无序的存在. 为说明这一点, 我们假设系统平移不变并且不存在外源电压, 进而系统中 $\mathbf{E} = 0$, $\mathbf{I} = 0$. 现在假设材料相对实验者沿 \hat{e}_1 方向运动, 那么实验者会观测到电流密度 $\mathbf{j} = -n\rho\hat{e}_1$ 并且会观测到一个有限大的电场 $\mathbf{E} = -vB\hat{e}_2$, 进而此时 Hall 电导表现为 $\sigma_{12} = \rho B^{-1}$, 它总会线性依赖于磁场. 因此, QHE 的存在依赖于破缺掉系统平移对称性的无序. 具体而言, 它和无序诱导的局域化和 Landau 能级量子化有关.

取对称规范, 磁场的矢势为

$$A_i = \frac{B}{2}\epsilon_{ij}x_j, \quad (17.52)$$

进而自由电子 Hamilton 量可以被写作⁴¹

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} - \mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m^*} \left[\left(-i\partial_1 - \frac{x_2}{2\ell_0^2} \right)^2 + \left(-i\partial_2 + \frac{x_1}{2\ell_0^2} \right)^2 \right]. \quad (17.53)$$

考虑由 $S = \exp[\frac{1}{4\ell_0^2}(x_1^2 + x_2^2)]$ 给出的相似变换

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = S\hat{H}S^{-1}, \quad \psi_n \rightarrow \psi'_n = S\psi_n, \quad (17.54)$$

那么我们便有

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m^*} \left[\left(-i\partial_1 + i\frac{x_1 + ix_2}{2\ell_0^2} \right)^2 + \left(-i\partial_2 + \frac{x_1 + ix_2}{2\ell_0^2} \right)^2 \right]. \quad (17.55)$$

引入复坐标 $z = x_1 + ix_2$, $\bar{z} = x_1 - ix_2$, 我们便有

$$\hat{H}' = \frac{1}{2m^*} \left(-4\partial_z\partial_{\bar{z}} + \frac{2z}{\ell_0^2}\partial_z + \frac{1}{\ell_0^2} \right). \quad (17.56)$$

这一算符的本征函数为 $\psi'_n = z^n$, 本征值为

$$\epsilon_n = \frac{1}{m^*\ell_0^2} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (17.57)$$

同时根据相似变换不难得到原 Hamilton 量的本征态

$$\psi_n = z^n e^{-\frac{1}{4\ell_0^2}z\bar{z}}. \quad (17.58)$$

这里 ϵ_n 便给出了 Landau 能级, 而相邻两个 Landau 能级的插值 $\omega_c = B/m^*$ 叫做 cyclotron 频率.

⁴¹我们取自然单位 $\hbar = e = c = 1$.

每一个 Landau 能级上都填充着许许多多电子态, 这一简并性则和系统的对称性有关. 特别的, 此时存在磁平移算符

$$k = \partial_z - \frac{\bar{z}}{4\ell_0^2}, \quad \bar{k} = \partial_{\bar{z}} + \frac{z}{4\ell_0^2}, \quad (17.59)$$

其满足 $\bar{k}\psi_n = 0$. 我们不难验证

$$[\hat{H}', k] = [\hat{H}', \bar{k}] = 0, \quad [k, \bar{k}] = \frac{1}{2\ell_0^2}. \quad (17.60)$$

k, \bar{k} 便可作为产生与 ψ_n 简并的态的生成元. 我们定义

$$T = \exp\left(\frac{4\pi\ell_0^2}{L}k\right), \quad U = \exp\left(i\frac{2\pi\ell_0^2}{L}\bar{k}\right), \quad (17.61)$$

我们便可以得到磁代数

$$TU = UT \exp\left[4\pi^2 i \left(\frac{\ell_0}{L}\right)^2\right]. \quad (17.62)$$

我们现在便可以构造态

$$\psi_{n,m} = \mathcal{N}_{n,m} T^m \psi_n, \quad (17.63)$$

不难验证它仍是 Hamilton 量的 ϵ_n 本征态但是它不同于 ψ_n . 根据 $U\psi_n = \psi_n$, 我们有

$$U\psi_{n,m} = \exp\left[-4\pi^2 i m \left(\frac{\ell_0}{L}\right)^2\right] \psi_{n,m}, \quad (17.64)$$

可以看到它表现得就像一个 Bloch 态. 同时我们可以推知 m 的取值范围为 0 到 $\frac{L^2}{2\pi\ell_0^2}$, 这便给出了单个 Landau 能级的简并度.

拓扑观点下的 IQHE 实验发现 IQHE 后不久 Laughlin 便提出了一个天才的思想实验. 在一个很一般的条件下解释了 Hall 电导的量子化, 并且他的论证其实揭示了处于磁场和 static 无序中的电子的诸多神奇特性.

这一思想实验考虑到了 IQHE 对材料几何形态的连续改变的不敏感性, 因而我们可以将实验使用的片状 Hall 材料连续形变为闭合的空心圆环, 并且此时 Hall 效应所需的偏置电压可以由通过环中心的随时间绝热变化的磁通量产生的感生电动势提供. 取自然单位 $\hbar = e = c = 1$, 进而此时磁通量子 $\Phi_0 = 2\pi$, 并且如果环中心的磁通量取值为 $\phi = n\Phi_0$, 那么这一系统的 Hamilton 量规范等价于不存在磁场时的 Hamilton 量: 我们总可以对系统的量子态做规范变换并把矢势项从 Hamilton 量里消去. 现在我们设想将穿过圆环的磁通量 ϕ 从零逐渐增大至 2π , 那么这一绝热演化初末态的系统彼此规范等价. 但这并不意味着这一绝热演化把原来的一个本征态映射到了相同的本征态: 此时系统中的一个本征态并不会保持不变.

这种产生规范等价的 Hamilton 量的绝热演化并不会保持单个本征态不变的现象叫做 spectral flow 并且是 Laughlin 思想实验的关键. 具体而言, Laughlin 论证道, 当磁通量增大一个磁通量子时, 圆环半径较小处能量低于 Fermi 能的 n 个 Landau 能级会被推到 Fermi 能之上, 与此同时半径较大处的 n 个态会沉到 Fermi 面下. 系统为了保持平衡便需要将 n 个电子从环内输送到环外, 并且这一过程发生的时标为我们绝热改变磁通量的时标

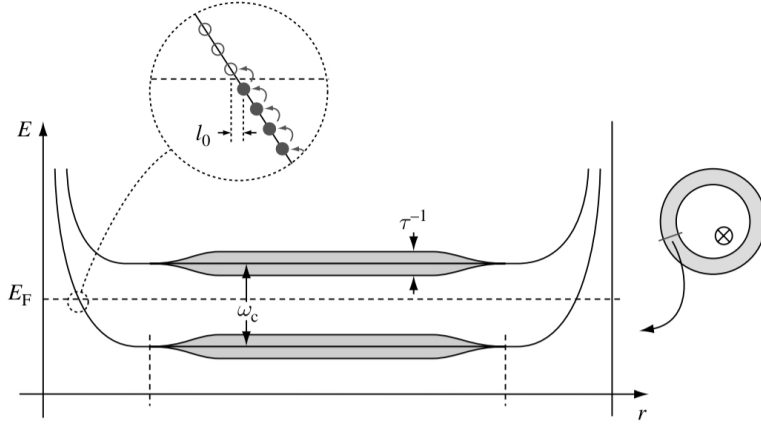


Figure 8. 圆环材料中 Landau 能级随径向距离变化的示意图, 其中我们假设 Fermi 面位于两个 Landau 能级之间.

t_0 , 于是系统中会出现大小为 $I_2 = n/t_0$ 的径向电流; 同时改变磁通量产生的感生电动势为 $V = \dot{\phi} = 2\pi/t_0$, 进而 Hall 电导便表现为 $\sigma_{12} = I_2/V = \frac{n}{2\pi}$, 在自然单位下便是 ne^2/h : 恰好是 IQHE 的电导率!

为了更具体地解释磁通量变化对 Landau 能级的影响, 我们来考虑 E_F 位于第一和第二 Landau 能级间的情况, 同时我们假设系统的无序性仅在样品的内部区域里有所表现. 特别的, 我们假设无序性带来的电子在材料内被散射的平均自由时间 τ 给出的特征长度 τ^{-1} 远小于 Landau 能级的间隔, 即 $\omega_c\tau \gg 1$: 这其实正是避免 Hall 电导平台被抹掉的条件. 如图 8 所示, 在样品的 bulk 内无序性为 Landau 能级带来了大小为 τ^{-1} 的展宽, 而在圆环的内外边缘处束缚势会将 Landau 能级的能量往上推. 这意味着在边缘处的 Fermi 面附近被填充的电子态的数目 (即边缘态) 等于被填充的 Landau 能级数 (对我们这里的情况也就是 1). 正是这些态而非 bulk 内位于 Fermi 面以下的 Landau 能级态才提供了系统中纵向电流的载流子, 并且我们会假设这些边缘态会被无序性定域在边缘处的尺度 $\xi \ll L_{\parallel}$ 上, 其中 L_{\parallel} 为材料的周长.

为了研究这一系统中的 spectral flow, 我们需要更精细地描述 Landau 能级中每一个态的演化. 注意到最低 Landau 能级中的一个非简并波函数近似为

$$\phi_{0,m} \approx \mathcal{N}_{0,m} e e^{-im} e^{-\frac{3}{4\ell_0^2}(r-r_m)^2}, \quad (17.65)$$

其中 r_m 为流经了 m 个磁通量子的圆盘的半径. 这一描述了 bulk 内电子态的波函数以 r_m 为中心对称分布并且携带角动量 $L = m$. 如果 r_m 位于 bulk 内, 那么我们可以计算得到其承载的沿圆环的电流为零; 而如果 r_m 位于环的边缘, 那么束缚势一方面会提高 $\phi_{0,m}$ 的能量, 一方面则会让这一波函数在 r_m 两侧表现出强烈的不对称性, 进而其承载的电流不再为零, 并且我们可以推知此时圆环内外边缘处的电流方向相反.

如果我们为圆环芯部加上一个绝热变化的弱磁场并为之带来通量 $\tilde{\phi}(t)$, 那么圆环切向会存在感生电场

$$E_{\parallel}(r) = \frac{1}{r} \dot{\tilde{\phi}}, \quad (17.66)$$

并且此时系统中的矢势为

$$\mathbf{A} = \frac{\phi(r) + \tilde{\phi}}{2r} \hat{e}_\theta, \quad \phi(r) = Br^2. \quad (17.67)$$

$\tilde{\phi}$ 的存在使得最低 Landau 能级内 $\phi_{0,m}$ 态的中心由 $r_m(\phi)$ 收缩为了 $r_m(\phi + \tilde{\phi})$. 特别的, 如果 $\tilde{\phi}$ 恰好等于单个磁通量子 2π , 那么这一中心会收缩为 $r_m(\phi + 2\pi) = r_{m-1}(\phi)$, 并且我们此时又恢复了一个 Landau 能级内简并的态的分布. 但是此时这个能级内简并的态却发生了改变: 在材料的内缘处一个原先被填充的态被推到了 Fermi 面以上, 而在外缘处原先在 Fermi 面上方的一个空态被推到了其下方. 系统为了保持平衡便会将一个电子从内缘输运到外缘.

在 QHE 理论发展之前, 人们普遍认为无序系统中的二维电子气会在某个尺度 ξ 上局域化, 并且在 $\xi/L_{\parallel} \ll 1$ 时这些局域化的态完全不会受驱动磁通量 $\tilde{\phi}$ 的影响, 这便会让人以为此时系统的内外边缘态是无关的. 那么系统到底是如何知道只需要在边缘间输运一个电子的呢? 解决这一悖论的方案只能是大胆假设尽管系统中存在无序性, 但是 Fermi 面下依旧存在着至少一个离域 bulk 态沟通着内外边缘态. 事实上, 后来人们确实发现在接近 Landau 能级中心时局域化尺度会发散, 并且正是这个态实现了内外边缘间的电荷输运.

Laughlin 的思想实验揭示了 QHE 的拓扑特征: 与系统的微观细节无关, 单位磁通量子的改变总是会在径向带来整数电荷的输运. 这强烈暗示了 IQHE 可能和从参数空间到理论的 Hilbert 空间的映射的某种拓扑指标有关. 后来, Avron, Seiler, Thouless, Kohmoto, Nightingale 和 den Nijs 在一系列工作中发现了与之有关的拓扑不变量: 二维环面上 $U(1)$ 主丛的第一陈类.

量子反常 Hall 效应 在拓扑绝缘体中, 量子 Hall 系统属于分类 A (Hamilton 量除了厄米性外没有其它对称性), 并且这类系统的拓扑指标为整数: IQHE 中量子化的电导率恰好反映了这点. 根据拓扑绝缘体理论, 我们应该能将这一拓扑指标与其基态的性质相联系; 但磁场和无序性的存在使得描述量子 Hall 系统的理论较为复杂, 进而我们选择在讨论 IQHE 的场论之前先考察量子反常 Hall 效应 (QAH): 这类系统和 IQHE 同属于 A 类, 但是它并不依赖于磁场和无序性的特征使得对它的理论描述会更为简单并能展示二维拓扑绝缘体的主要特性.

根据 Haldane 最初的设计 [6], QAH 的紧束缚 Hamilton 量为六边形格点的两组子晶格赋予了两种不同的势 A, B ; 同时格点上的最近邻跃迁强度为 t , 次近邻跃迁强度为 t' . 这一 Hamilton 量在动量空间中可以被写作

$$H_{\mathbf{k}} = \sigma_1 \sin k_1 + \sigma_2 \sin k_2 + \sigma_3 (r - \cos k_1 - \cos k_2), \quad (17.68)$$

其中 Pauli 矩阵结构来自 A, B 子晶格带来的赝自旋. 这一系统的本征值为

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\sin^2 k_1 + \sin^2 k_2 + (r - \cos k_1 - \cos k_2)^2}. \quad (17.69)$$

这在 $r = -2, 0, 2$ 时能隙会闭合. 特别的, $r = 2$ 时能隙闭合的位置为 Γ -点. 我们可以就 $|\mathbf{k}| \ll 1$ 以及 $|r - 2| = m \ll 1$ 的情况将 Hamilton 量线性化为

$$H_{\mathbf{k}} \approx k_1 \sigma_1 + k_2 \sigma_2 + m \sigma_3, \quad (17.70)$$

这刚好给出了一个 Dirac Hamilton 量.

在改变 r 的过程中能隙的闭合分隔了拥有不同拓扑的基态. 在这个简单的系统中我们可以通过简单地考察 Hamilton 量来判断不同基态的拓扑指标: 我们可以记

$$\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\varepsilon_+(\mathbf{k})} \left(\sin k_1, \sin k_2, r - \cos k_1 - \cos k_2 \right), \quad (17.71)$$

进而 $\mathbf{n}_{\mathbf{k}} \in \mathbb{S}^2$ 并且我们可以将 Hamilton 量写作

$$H_{\mathbf{k}} = \varepsilon_+(\mathbf{k}) \mathbf{n}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (17.72)$$

显然, 如果 $r \gg 2$, 那么 $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ 在 \mathbf{k} 变化时几乎将始终指向北极; 而 $0 < r < 2$ 时 $\mathbf{n}_{\mathbf{k}}$ 会在 \mathbf{k} 走遍第一 Brillouin 区时遍历整个球面. 显然我们此时可以定义环绕数

$$W = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{1B.Z.}} dk_1 dk_2 \mathbf{n} \cdot (\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n}), \quad (17.73)$$

并且在 r 由大于 2 到小于 -2 的过程中这一取值会经历 $0, 1, -1, 0$ 的变化. 偶数维流形上的这类环绕数叫做陈数, 我们以后会讨论其一般定义以及如何就一般的偶数维量子基态计算它. 这一系统在拓扑非平凡相里也会产生无能隙边缘态以及量子化的输运系数.

IQHE 的场论 为了从第一性原理出发构造 IQHE 的理论, Pruisken 考虑了强磁场中描述无序费米子系统的非线性 σ -模型. 我们在无序电子气一节已知描述无序电子气在大于弹性平均自由程的尺度上的物理的有效理论为非线性 σ -模型

$$S[Q] = \frac{\sigma_{11}}{8} \int d^2 \mathbf{r} \operatorname{tr}(\partial_i Q \partial_i Q), \quad (17.74)$$

其中 $Q = Q^{as, a' s'}$ 既包含复本指标 $a = 1, \dots, R$, 又携带因果性指标 $s = \pm$. 在取无序平均之前的理论对称性为 $U(2R)$, 而取无序平均后对称群退化为了 $U(R) \times U(R)$, 而 Q 便是这一因果对称性破缺产生的属于 $U(2R)/(U(R) \times U(R))$ 的 Goldstone 模式.

这一作用量的耦合常数 σ_{11} 在平均自由程的尺度上正比于纵向电导率, 而在更大的尺度上 Q 的涨落会让这个常数向下跑动 (这其实反映了 Anderson 局域化). Pruisken 发现强磁场中这一有效作用量会被修正为

$$S[Q] = \frac{1}{8} \int d^2 \mathbf{r} [\sigma_{11} \operatorname{tr}(\partial_i Q \partial_i Q) - \sigma_{12} \epsilon_{ij} \operatorname{tr}(Q \partial_i Q \partial_j Q)], \quad (17.75)$$

而第二项其实是个拓扑 θ -项. 为了理解这一点, 我们可以考察 $R = 1$ 的情况: 此时 $Q = n^i \sigma_i$, 其中 $\mathbf{n} \in \mathbb{S}^2$ 并且拓扑项变成了

$$S_{\text{top}} = \frac{i\sigma_{12}}{2} \int d^2 \mathbf{r} \mathbf{n} \cdot (\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n}). \quad (17.76)$$

我们又看到了这个熟悉的表达式. 对于一般的 R , 我们有

$$\pi_2[U(2R)/(U(R) \times U(R))] \cong \mathbb{Z}, \quad (17.77)$$

进而复本场论中的场构形也被一个整数拓扑指标所标记, 并且更细致的分析表明 Pruisken 场论中的修正项恰是给出了这个指标的拓扑项. 但是值得注意的是, 我们只有在系统尺寸无限大的情况下才能利用这些拓扑不变量对场构形进行分类.

一个实际的 IQHE 系统总具有有限大的尺度 L . 为考察有限尺寸的影响, 我们记电导张量两个分量在 $L \rightarrow \infty$ 时的裸值为 σ_{11} 和 σ_{12} . 直观上, 有限尺度时 Q 的涨落应该将 σ_{11} 重整化到零以反映 Anderson 局域化, 并且 σ_{12} 作为拓扑项的系数不应该被重整化, 进而保持为无限大尺寸下的裸值. 但我们下面的分析会表明这一理论并不会给出不动线 $(0, \sigma_{12})$ 而会给出整数取值的一系列不动点 $(0, n)$.

我们首先来论证如果局域化要求 $\sigma_{11} \rightarrow 0$, 那么这必然伴随着 σ_{12} 的整数量子化: 考虑 $\sigma_{11} = 0$ 的情况, 此时系统的作用量完全是拓扑的. 为了方便起见我们假设样品的几何结构为圆盘 D , 并且我们以自然坐标 $s \in [0, L]$ 来参数化 ∂D 这个圆. 记 $\theta = 2\pi\sigma_{12}$, 那么拓扑相可以被记作

$$S_{\text{top}}[Q] = -\frac{\theta}{16\pi} \int_D \text{tr}(Q dQ \wedge dQ). \quad (17.78)$$

鉴于无序电子气理论表明 Q 总能被 $T \in \text{U}(2R)$ 写成

$$Q = T\sigma_3 T^{-1}, \quad (17.79)$$

故拓扑项可以被写成

$$S_{\text{top}} = \frac{\theta}{4\pi} \int_D \text{tr}(dT \wedge \sigma_3 dT^{-1}) = \frac{\theta}{4\pi} \int_D d[\text{tr}(T\sigma_3 dT^{-1})] = \frac{\theta}{4\pi} \int_{\partial D} \text{tr}(T\sigma_3 dT^{-1}). \quad (17.80)$$

由于 D 的拓扑平庸, 我们可以直接使用 Stokes 定理将这一作用量化为边界上的积分. 特别的, 我们利用边界上的参数化可以将这个作用量写作

$$S_{\text{top}} = \frac{\theta}{4\pi} \int_0^L ds \text{tr}(T\sigma_3 \partial_s T^{-1}). \quad (17.81)$$

现在我们发现, 在 $\sigma_{11} = 0$ 的深度局域化相中, 系统被一个一阶导数的边界作用量所描述, 它描述的正是手性边界流 (即拓扑边缘态); 并且此时局域化的 bulk 作用量完全消失不见了.

原来的 bulk 作用量存在一个局域对称性: 对于满足 $[H(\mathbf{x}), \sigma_3] = 0$ 的算符 $H(\mathbf{x})$, 作用量在变换 $T(\mathbf{x}) \rightarrow T(\mathbf{x})H(\mathbf{x})$ 下不变. 我们期待边界作用量也能保持这个对称性, 但是实际进行代换后我们会发现

$$S_{\text{top}}[TH] = S_{\text{top}}[T] + \delta S_{\text{top}}[H], \quad (17.82)$$

其中

$$\delta S_{\text{top}}[H] = \frac{\theta}{4\pi} \int_0^L ds \text{tr}(H\sigma_3 \partial_s H^{-1}). \quad (17.83)$$

为简便起见考虑单复本 $R = 1$ 的情况, 此时 H 属于 $\text{SU}(2)$ 绕 σ_3 旋转的 $\text{U}(1)$ 子群并且我们可以记 $H(s) = e^{i\phi(s)\sigma_3}$, 并且

$$\delta S_{\text{top}}[H] = \frac{i\theta}{2\pi} \int_0^L ds \partial_s \phi = \frac{i\theta}{2\pi} [\phi(L) - \phi(0)]. \quad (17.84)$$

∂D 上的周期性边界条件要求 $\phi(L) - \phi(0) = 2\pi W$, $W \in \mathbb{Z}$, 进而 $\delta S_{\text{top}}[H] = i\theta W$. 又因为规范不变性要求这一项对路径积分没有贡献, 进而我们要求 $\theta W = 2\pi N$, 即 $\theta = 2\pi n$. 我们就此论证了 bulk 内的局域化要求 Hall 系数的量子化.

不过这一论证又带来了一个问题: 如果微扰重整化会压低 σ_{11} 的值但是不改变 σ_{12} , 那么这一参数是如何流到整数值的呢? Pruisken 同样解决了这一问题.

我们首先注意到 θ -项的存在使得我们在计算配分函数时必须对各个 topological sector 分别做泛函积分, 不同 sector 上 $S_{\text{top}}[Q]$ 会取不同的值. 而重整化群操作只会积出各个 sector 里短程的涨落而不会改变场构形的拓扑指标, 所以我们可以分别在各个 sector 内进行 RG 计算. 特别的, 我们不难想到由于非平凡的场构形拓扑会带来场的扭曲, 因而在一个非平凡的 topological sector 内作用量有一个极小值, 并且 Pruisken 的分析表明此时我们有

$$S[Q] \geq 2\pi W \sigma_{11}. \quad (17.85)$$

如果改变磁场的方向相当于对系统做了一个宇称变换, 并且我们从物理的角度出发不难意识到此时 Hall 电导 σ_{12} 以及场构形的环绕数 W 都会反号而 σ_{11} 保持不变. 综合以上这些考虑, Pruisken 根据 $1/\sigma_{11}$ 开展了微扰计算并得到了如下重整化群流方程:

$$\beta_{11} \equiv \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \ln L} = -\frac{1}{2\pi^2 \sigma_{11}} - c\sigma_{11}e^{-2\pi\sigma_{11}} \cos(2\pi\sigma_{12}), \quad (17.86)$$

$$\beta_{12} \equiv \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \ln L} = c\sigma_{11}e^{-2\pi\sigma_{12}} \sin(2\pi\sigma_{12}), \quad (17.87)$$

其中 $c > 0$ 是一个常数. β_{11} 中的非指数项刻画了无序导致的纵向电导的衰减; 而 β_{11} 和 β_{12} 中的余弦正弦函数分别刻画了前面提到的输运系数在宇称变换下的性质. 特别的, β_{12} 表明, 如果 σ_{12} 不等于半整数, 那么 RG 流会将它推离与之最接近的半整数. 与此同时, σ_{11} 会被持续压低, 最终系统的参数会流向不动点 $(\sigma_{11}, \sigma_{12}) = (0, n)$. 但值得注意的是, 这个重整化群流基于的微扰论是就 $\sigma_{11} \gg 1$ 的情况进行的, 因而在数学上并不能确定将它应用到 $\sigma_{11} = 0$ 附近的正当性. 我们还可以注意到, $\sigma_{12} \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$ 的半整数值给出了一系列 σ_{12} 不被重整化而 σ_{11} 会流向一个不动点 $\sigma_0 \sin \mathcal{O}(1)$ 的临界面, 而这恰好和实验观测到的量子 Hall 相变时纵向具有的 $\mathcal{O}(1)$ 电导相符.

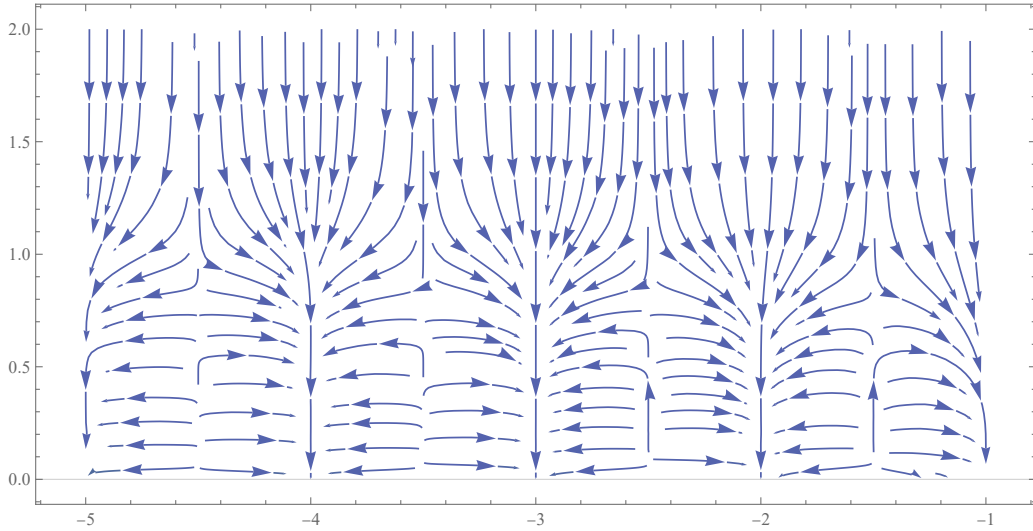


Figure 9. Pruisken 理论的重整化群流

如果我们接受用这套 RG 方程描述系统的整个参数空间, 那么我们得到的结果确实很符合实验现象: 短程理论中的裸参数一般会被重整化到 Hall 电导被量子化而径向电导消失

的不动点; 而 Hall 相变的临界态对应着 $\sigma_{12} = n + \frac{1}{2}$ 的临界面, 此时纵向会存在 $\mathcal{O}(1)$ 的电导. 不过 Pruisken 的理论并不能定量地描述量子 Hall 相变的临界物理: 这些相变发生在强耦合区, 此时 Pruisken 的方法是可靠的并且系统的有效理论很可能不再是非线性 σ -模型. 事实上, 迄今为止我们仍尚未建立起刻画量子 Hall 相变的有效理论.

17.4 Wess-Zumino 项

一般而言, 如果一个 $(d+1)$ 维的理论拥有 θ 项, 那么其对应的 d 维理论会拥有 Wess-Zumino(WZ) 项. 在讨论其几何构造前, 我们先来看一个简单的例子.

17.4.1 自旋路径积分

凝聚态物理中 WZ 项发挥作用的典型理论是自旋链, 并且我们会先来讨论关于这个理论的更多细节. 直观上, 一个经典自旋对应着半径固定的球面上的一个点, 并且我们可能会下意识地使用这个点对应的角坐标及其共轭动量来构造相空间并做量子化. 但问题是在量子力学中并没有与这些角坐标的共轭动量相对应的厄米算符, 因而这一简单的进路其实是行不通的.

假设一个自旋角动量 $\mathbf{L} \equiv S\mathbf{n}$ 的磁矩为 1, 那么它在磁场 $\mathbf{B} = B\hat{e}_z$ 中的运动方程满足

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{L} \times \mathbf{B} = SB\mathbf{n} \times \mathbf{e}_z. \quad (17.88)$$

如果我们在球坐标系中利用 (θ, φ) 标记自旋的指向, 那么这个运动方程给出的这两个坐标的运动方程为

$$\frac{d}{dt} \cos \theta = 0, \quad \frac{d\varphi}{dt} = -B. \quad (17.89)$$

进而如果我们想用 Hamilton 力学描述这个系统, 我们发现此时 φ 和 $\cos \theta$ 分别为正则坐标 q 及对偶的正则变量 p , 并且 Hamilton 量为

$$H = -Bp. \quad (17.90)$$

我们就此发现刻画自旋的流形 \mathbb{S}^2 本身就是一个相空间, 这事实上和球面的几何结构相符: 球面上存在自然的 2-形式 $\omega = d\varphi \wedge d\cos \theta$, 并且它可以被视作一个辛形式并让 \mathbb{S}^2 能被处理为一个辛流形.

根据构造出的 Hamilton 量, 我们可以立即得到对应的拉氏量

$$\mathcal{L} = \dot{q}p - H = S(\dot{\varphi} \cos \theta + B \cos \theta), \quad (17.91)$$

其中我们恢复了自旋角动量 S . 其对应的虚时作用量为

$$S[\theta, \varphi] = S \int_0^\beta d\tau (-i\dot{\varphi} \cos \theta + B \cos \theta). \quad (17.92)$$

由于我们常用的球坐标在北极和南极处的 φ 无法定义, 因而在这两点处作用量中的 $\dot{\varphi}$ 项会带来问题. 不过我们可以利用作用量的全导数自由度为其添加一项

$$\frac{d}{d\tau} F(\cos \theta, \varphi) = \frac{\partial F}{\partial \varphi} \dot{\varphi} + \frac{\partial F}{\partial \cos \theta} d_\tau(\cos \theta). \quad (17.93)$$

不同的 F 对应不同的坐标奇点位置. 例如, 我们可以选择 $F = \pm iS\dot{\varphi}$, 这会给出

$$S_{\pm} \equiv S \int_0^{\beta} d\tau [-i(\cos \theta \mp 1)\dot{\varphi} + B \cos \theta]. \quad (17.94)$$

S_+ 在北极点处不存在导数项, 因而它对南极点外的位置是良定义的; S_- 则反之. 这一结构便和 Wess-Zumino 项有关. Anyway, 在得到作用量后我们可以立马用路径积分写出配分函数

$$Z = \int \mathcal{D}[\varphi] \mathcal{D}[\theta] e^{-S[\theta, \varphi]}, \quad \mathcal{D}[\varphi] \mathcal{D}[\theta] = \prod_{\tau} d\varphi_{\tau} d(\cos \theta_{\tau}) = \prod_{\tau} d\varphi_{\tau} d\theta_{\tau} \sin \theta_{\tau}. \quad (17.95)$$

我们也可以从 $SU(2)$ 的表示出发严格地构造自旋的路径积分. $\mathfrak{su}(2)$ 由三个满足对易关系

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\varepsilon_{ijk} \hat{S}_k \quad (17.96)$$

的生成元张成, 而任意一个 $SU(2)$ 群元都能在 Euler 角表示下被写成

$$g(\phi, \theta, \psi) = e^{-i\phi \hat{S}_3} e^{-i\theta \hat{S}_2} e^{-i\psi \hat{S}_3}, \quad \phi, \psi \in [0, 2\pi], \quad \theta \in [0, \pi]. \quad (17.97)$$

单个量子自旋的 Hilbert 空间 \mathcal{H}_S 上承载着 $SU(2)$ 的不可约表示, 并且我们知道在这个空间中存在一个 \hat{S}^2 和 S_3 的共同最高权本征态 $|\uparrow\rangle$ 满足

$$S_3 |\uparrow\rangle = S |\uparrow\rangle. \quad (17.98)$$

我们向这个最高权态作用 $SU(3)$ 的群元便可以得到 \mathcal{H}_S 的其它元素. 特别的, 在 Euler 角表示下我们有

$$|g(\phi, \theta, 0)\rangle = e^{-i\phi \hat{S}_3} e^{-i\theta \hat{S}_2} |\uparrow\rangle, \quad (17.99)$$

我们称之为自旋相干态. 所谓相干态常常指其行为和经典态相似的量子态, 而此处我们称 $|g(\phi, \theta, 0)\rangle$ 为相干态即指角动量算符 \hat{S} 在它上面的期望值和经典情况一致. 为了验证这一点, 我们利用

$$e^{-i\phi \hat{S}_i} \hat{S}_j e^{i\phi \hat{S}_i} = \hat{S}_j \cos \phi + \varepsilon_{ijk} \hat{S}_k \sin \phi \quad (17.100)$$

以得到

$$\mathbf{n} \equiv \langle g(\phi, \theta) | \hat{S} | g(\phi, \theta) \rangle = S \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} = S \mathbf{n}. \quad (17.101)$$

为了构造路径积分, 我们考虑与磁场耦合的自旋的 Hamilton 量

$$H = \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (17.102)$$

并计算配分函数

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta H}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}[(e^{-\epsilon H})^N], \quad \epsilon \equiv \frac{\beta}{N}. \quad (17.103)$$

接下来我们便需要插入 \mathcal{H}_S 上的完备性关系, 并且这一完备性关系可以利用 $SU(2)$ 上的积分构造为

$$1 = \int dg |g\rangle \langle g|. \quad (17.104)$$

其中 $|g\rangle$ 正是按前述方法构造的自旋相干态, 而 dg 为左右不变的 Haar 测度. 为了验证这一完备性关系, 我们考虑 $\forall h \in \text{SU}(2)$ 在 \mathcal{H}_S 上的表示, 那么

$$\int dg h |g\rangle\langle g| = \int dg |hg\rangle\langle g| = \int dg |g\rangle\langle h^{-1}g| = \int dg |g\rangle\langle g| h, \quad (17.105)$$

进而我们构造的算符与任意群元的表示算符均对易, 并且根据 Schur 引理它必正比于单位算符. 考虑到我们总可以重整化 Haar 测度, 故构造出的算符能被直接视作恒等算符.

将这一恒等元插入到 Trotter 展开后会给出矩阵元

$$\begin{aligned} \langle g' | e^{-\epsilon \mathbf{B} \cdot \mathbf{S}} | g \rangle &= \langle g' | g \rangle - \epsilon \langle g' | \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} | g \rangle = 1 - \langle g | g \rangle + \langle g' | g \rangle - \epsilon \langle g' | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} | g \rangle \\ &= \exp \left\{ \langle g' | g \rangle - \langle g | g \rangle - \epsilon \langle g' | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} | g \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (17.106)$$

于是配分函数为

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{g_N = g_0} \prod_{i=0}^N dg_i \exp \left[-\epsilon \sum_{i=0}^N \left(-\frac{\langle g_{i+1} | g_i \rangle - \langle g_i | g_i \rangle}{\epsilon} + \langle g_{i+1} | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} | g_i \rangle \right) \right], \quad (17.107)$$

这在连续极限下也就是

$$Z = \int \mathcal{D}[g] \exp \left[-\int_0^\beta d\tau (-\langle \partial_\tau g | g \rangle + \langle g | \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} | g \rangle) \right]. \quad (17.108)$$

利用 $\text{SU}(2)$ 群元的 Euler 角表示, 我们便能得到前面推导过的自旋路径积分并得到所期待的作用量. 特别的, 我们会记

$$\Gamma[\phi, \theta] = -\int_0^\beta d\tau \langle \partial_\tau g | g \rangle = -iS \int_0^\beta d\tau \dot{\phi} \cos \theta. \quad (17.109)$$

这一项其实是拓扑的并且属于 Wess-Zumino 项.

17.4.2 自旋的量子化

我们注意到作用量的正则部分 $\Gamma[\phi, \theta]$ 有两个特点: 首先, 它不能跟 $B \cos \theta = \mathbf{B} \cdot \mathbf{n}$ 一样以一种独立于坐标的方式通过问题的自然自由度 \mathbf{n} 表示出来; 其次, 这一理论对应的二维问题中存在造成了斯格明子的 θ -项. 这两点暗示了理论的拓扑非平凡性.

磁单极子 我们先把这个问题和典中典的磁单极子扯上关系. 注意到 $\Gamma[\phi, \theta]$ 的拉氏量里仅包含 ϕ 的一阶导数, 而同时这长得很像一个速度为 $\dot{\mathbf{q}}$ 的粒子与一个矢势 \mathbf{A} 耦合的作用量

$$i \int d\tau \dot{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{A}. \quad (17.110)$$

我们利用全导数自由度考虑在北半球良定义的正则作用量

$$\Gamma_n[\theta, \phi] \equiv -iS \int d\tau \dot{\phi} (\cos \theta - 1), \quad (17.111)$$

同时注意到球面上一个点的速度为

$$\dot{\mathbf{n}} = \dot{\theta} \hat{\mathbf{e}}_\theta + \dot{\phi} \sin \theta \hat{\mathbf{e}}_\phi, \quad (17.112)$$

那么现在我们此时应该将矢势取作

$$\mathbf{A}_n = S \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi. \quad (17.113)$$

$\mathbf{B} \equiv \nabla \times \mathbf{A}_n = S \hat{e}_r$ 意味着这其实是一个磁荷为 S 的磁单极子对应的矢势.

既然这里的矢势在北半球良定义, 那我们便可以借助 Stokes 定理计算作用量. 规定曲线 $\mathbf{n}(\tau)$ 的正方向为逆时针方向, 那么我们便有

$$\Gamma_n = \oint_{\mathbf{n}(\tau)} d\mathbf{n} \cdot \mathbf{A}_n = \iint_{\Sigma_n} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \equiv B \Sigma_n. \quad (17.114)$$

亦即这个作用量给出了曲线 $\mathbf{n}(\tau)$ 在北半球圈出的面积 Σ_n 通过的磁通量.

按理来说我们也可以借助曲线在南半球圈出的面积来计算作用量. 此时我们只需要将矢势换成在南半球良定义的

$$\mathbf{A}_s = -S \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi. \quad (17.115)$$

在默认的定向下 Stokes 定理给出的在南半球上的面积分为 $-\Sigma_s$, 我们遂能够得到根据南北半球计算得到的作用量的差值为

$$B \Sigma_n - B(-\Sigma_s) = 4\pi S. \quad (17.116)$$

可是两个作用量必须描述相同的物理, 这便要求 $4\pi S$ 的差异不能影响泛函积分, 因此我们必须要求

$$e^{4\pi i S} = 1 \Rightarrow S \in \frac{1}{2} \mathbb{Z}. \quad (17.117)$$

我们在构造自旋路径积分时从未要求自旋的量子化, 但此处这却作为一个后验的自洽性条件涌现了出来.

另一个有趣的观察是我们一边没法以坐标独立的方式写出作用量 $S[\theta, \phi]$, 一边发现作用量正比于路径围出来的面积, 而这一陈述显然是独立于坐标的. 为了调和这两个论据的矛盾, 我们需要注意到对这个作用量几何意义的解释指涉了高一维的几何对象: 我们将一维的路径诠释为了某一二维区域的边界并将其作用量与这一区域的面积相联系. 我们可以考虑一组刻画了 $\mathbf{n}(\tau)$ 与北极点间同伦等价性的曲线 $\mathbf{n}(s, \tau)$, $s \in [0, 1]$ 使得

$$\mathbf{n}(0, \tau) = \mathbf{n}(\tau), \quad \mathbf{n}(1, \tau) = \hat{e}_z, \quad (17.118)$$

那么作用量可以被写作

$$\Gamma[\mathbf{n}] = iS \int_0^1 ds \int_0^\beta d\tau \mathbf{n} \cdot (\partial_s \mathbf{n} \times \partial_\tau \mathbf{n}). \quad (17.119)$$

这正是二维球面上的面积积分, 并且它也是场 \mathbf{n} 对应的坐标独立的 Wess-Zumino 项. 事实上, 我们引入新的一维以得到坐标独立的表示正是 Wess-Zumino 项的共同特征.

几何观点 为了从更底层的角度出发理解这里发生的事情, 我们必须抛弃磁单极子的图像. 注意到球面上的辛形式 $\omega = d\phi \wedge d(\cos \theta) = \sin \theta d\theta \wedge d\phi$ 有三个重要特征:

- 二维流形上的辛形式是顶形式.

- 二维球面的辛形式等于其正则面积形式.
- ω 局域正合但并非全局正合, 即它仅在局域上等于某个 1-形式 κ 的外微分 $d\kappa$. 如果不这样的话我们根据 Stokes 公式便可以得到

$$\int_{\mathbb{S}^2} \omega = \int_{\partial\mathbb{S}^2} \kappa = 0, \quad (17.120)$$

这显然不对. 而在局域水平上我们会有 $\omega = -d(\cos\theta d\phi)$, 但是 $\kappa = -\cos\theta d\phi$ 仅在极点以外的地方才有定义.

为了将这些观察与我们的路径积分相联系, 我们只需要将这些几何对象拉回到所考虑的场论的基流形上. 路径积分中考虑的场为 $\mathbf{n} : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^2$, $\tau \mapsto \mathbf{n}(\theta(\tau), \phi(\tau))$, 这一映射的像便为 \mathbb{S}^2 上的一条闭曲线 γ . 假设这一曲面的邻域内 ω 可以被局域地表示成 $d\kappa$, 那么我们能考虑积分

$$\int_{\gamma} \kappa = \int_{\mathbb{S}^1} \mathbf{n}^* \kappa = - \int_0^\beta d\tau \dot{\phi} \cos\theta. \quad (17.121)$$

这恰好给出了作用量的正则部分. 事实上, 我们在球面相空间上写下 $\int d\tau p_i \dot{q}^i$ 时其实就是在对辛形式 $\omega = dp_i \wedge dq^i$ 对应的局域辛势 $p_i dq^i$ 在 \mathbb{S}^1 上的拉回进行积分.

我们在经典力学中并没有什么强调这种观点的必要, 但是在这里几何的观点能够阐明磁单极类比背后的数学结构. 首先, 我们发现正则作用量不能被写成坐标独立的全局表达式, 这其实正是辛形式没有全局表达式在拉回后的体现. 不过我们可以构造出一个二维的场论 $\tilde{\mathbf{n}} : I \times \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^2$, $(s, \tau) \mapsto \mathbf{n}(s, \tau)$ 并规定这一映射在球面上的像 S_γ 的边界正是 $\mathbf{n}(0, \tau) = \mathbf{n}(\tau) \equiv \gamma$. 在这一构造下我们自然可以考虑将 ω 拉回到二维基流形 $I \times \mathbb{S}^1$ 并计算

$$\int_{I \times \mathbb{S}^1} \tilde{\mathbf{n}}^* \omega = \int_{S_\gamma} \omega, \quad (17.122)$$

而这不依赖于局域的辛势并且是坐标独立的. 如果 ω 在 S_γ 上能被局域地写成 $\omega = d\kappa$, 那么我们根据 Stokes 公式便有

$$\int_{S_\gamma} \omega = \int_{\gamma} \kappa, \quad (17.123)$$

这便给出了一开始的拉回后的线积分.

注意到我们有着许多不同的选择 S_γ 的内部的方式. 如果 S_γ 在北半球 (我们记作 $S_{n,\gamma}$), 那么不同的参数化方式应该能给出相同的结果; 而如果 S_γ 在南半球, 那么这一选择方式与北半球的差异为

$$\int_{S_{n,\gamma}} \omega - \left(- \int_{S_{s,\gamma}} \omega \right) = \int_{\mathbb{S}^2} \omega = 4\pi. \quad (17.124)$$

我们前面已经看到, 正是这个关系要求了自旋必须是半整数.

注意到我们这里构造 Wess-Zumino 项的方式并没有涉及特别多的球面的几何特征, 而这套微分几何语言应该能够比较容易地推广到更一般的情况. 我们下面便来考察下其一般构造.

17.4.3 Wess-Zumino 项的几何

我们来考虑一个定义在 $(d+1)$ 维基流形 $N \equiv I \times M$ (其中 M 为 d 维流形) 的理论, 那么将该理论约束在 M 上后便会得到 WZ 项. 假设场论的靶流形 T 无边界并且场论 $\tilde{\varphi} : N \rightarrow T$ 存在 θ -项, 那么 T 上存在 $(d+1)$ -形式 ω 使得

$$\int_{I \times M} \tilde{\varphi}^* \omega \in 2\pi\mathbb{Z}. \quad (17.125)$$

现在我们可以不失一般性地选择 $i_0 \in I$ 并考虑限制在 d 维流形 M 上的场 $\varphi(x) \equiv \tilde{\varphi}(x, i_0) : M \rightarrow T$, 那么如今 N 便被 i_0 分成了两部分:

$$N = N_+ \cup N_-, \quad (17.126)$$

场 $\tilde{\varphi}$ 分别将两部分映射到了 T_{\pm} , 并且 φ 场的像正是这两个区域的公共边界.

通常 φ 便是我们真正感兴趣的场构型, 而 $\tilde{\varphi}$ 是我们延拓出来的在 T 上环绕一次的构型, 因而我们通常会假设

$$\int_{I \times M} \tilde{\varphi}^* \omega = 2\pi. \quad (17.127)$$

现在我们便假设 ω 在 T_{\pm} 上分别有局域的正合形式 $\omega = d\kappa_{\pm}$, 那么我们便可以在 T_{\pm} 边界上考虑 φ 拉回的 κ_{\pm} 在 M 上的积分

$$\Gamma_{\pm}[\varphi] \equiv ik \int_M \varphi^* \kappa_{\pm}, \quad (17.128)$$

这便给出了 WZ 项的坐标表示. 其中整数因子 $k \in \mathbb{Z}$ 被称作 WZ 理论的 level.

为了得到其坐标独立的表示, 我们考虑到流形的定向要求 $M = \pm \partial N_{\pm}$ 并利用 Stokes 定理而得到

$$\int_M \varphi^* \kappa_{\pm} = \int_M \tilde{\varphi}^* \kappa_{\pm} = \pm \int_{N_{\pm}} \tilde{\varphi}^* d\kappa_{\pm} = \pm \int_{N_{\pm}} \tilde{\varphi}^* \omega, \quad (17.129)$$

这便给出了 WZ 项的坐标不变表示

$$\Gamma_{\pm}[\varphi] \equiv \pm ik \int_{N_{\pm}} \tilde{\varphi}^* \omega. \quad (17.130)$$

由于 N_{\pm} 选择的任意性不应该对物理造成影响, 于是我们便有

$$\Gamma_+[\varphi] - \Gamma_-[\varphi] = ik \int_{N_+ \cup N_-} \tilde{\varphi}^* \omega = 2\pi ik \in 2\pi i\mathbb{Z}, \quad (17.131)$$

因而我们得到了拓扑要求的 WZ 项耦合常数的量子化条件 $k \in \mathbb{Z}$. 不同于 θ -项的耦合常数可以是任意选择的拓扑角, 我们现在发现 WZ 项只能通过整数值的耦合常数进入到作用量中, 并且这一整数叫做理论的 level.

为了检查一个项是否为 WZ 项, 我们最好还是将其用微分形式表示出来. 同时, 在包含 WZ 项的有效场论计算中, 其系数的量子化条件是在计算途中检查结果正确性的重要依据.

17.4.4 与费米子耦合的磁矩

我们来考虑一个玩具模型: 与外磁矩 $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\tau)$ 耦合的仅拥有单个能级 ϵ 的费米子系统, 其相干态作用量为

$$S[\psi, \mathbf{n}] = \int_0^\beta d\tau \bar{\psi}(\partial_\tau + \xi + \gamma \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})\psi, \quad (17.132)$$

其中 γ 为耦合常数而 $\xi \equiv \epsilon - \mu$. 当然, 完整的理论还需要引入控制磁矩演化的动能项 $S[\mathbf{n}]$, 但是我们这里只需要关心磁矩-费米子耦合项. 我们假设磁矩仅在 $\Delta\tau \gg 1$ 的时标上绝热演化, 并且 $\gamma\Delta\tau \gg 1$, 进而磁矩不会诱导自旋态间的跃迁. 我们同时假设低温极限 $\gamma/T \gg 1$.

积出费米子自由度便会给出约化作用量

$$S[\mathbf{n}] = -\text{tr}[\ln(\partial_\tau + \xi + \gamma \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})]. \quad (17.133)$$

由于 $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \in \mathfrak{su}(2)$, 我们便可以将其利用 $U \in \text{SU}(2)$ 表示为

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = U^\dagger \sigma_3 U. \quad (17.134)$$

例如, 对于 $\mathbf{n} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$, 我们需要选择的 U 便形如

$$U = e^{-i\phi\sigma_3/2} e^{-i\theta\sigma_2/2} e^{-i\psi\sigma_3/2}. \quad (17.135)$$

将这一表达式代入到约化作用量中便有

$$\begin{aligned} S[U] &= -\text{tr} \left[\ln \left(\partial_\tau + \xi + \gamma U^\dagger \sigma_3 U \right) \right] = -\text{tr} \left[\ln \left(U(\partial_\tau + \xi + \gamma U^\dagger \sigma_3 U) U^\dagger \right) \right] \\ &= -\text{tr} \left[\ln \left(\xi + \gamma \sigma_3 + U \partial_\tau U^\dagger \right) \right]. \end{aligned} \quad (17.136)$$

记 $\dot{U} = \partial_\tau U$, 我们便可得到展开到二阶的有效作用量

$$S[U] = - \int d\tau \text{tr} \left[\left(\vartheta(-\xi - \gamma \sigma_3) - \frac{1}{2} \right) U \dot{U}^\dagger \right], \quad (17.137)$$

其中单位阶跃函数 $\vartheta(x)$ 对应着零温的 Fermi-Dirac 分布, 同时我们引入了一个 $1/2$ 因子不会影响作用量, 因为

$$\text{tr} \left(U \partial_\tau U^\dagger \right) = -\partial_\tau \text{tr} \ln U = -\partial_\tau \ln \det U = 0. \quad (17.138)$$

如果 $-\xi \mp \gamma$ 两个能级都被占据或都未被占据, 那么作用量会化为 $S \propto \text{tr}(U \partial_\tau U^\dagger) = 0$. 但是如果激发态 $\xi + \gamma > 0$ 是空的但是 $\xi - \gamma < 0$ 是满的, 我们便有

$$S[U] \equiv \Gamma[U] = -\frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \text{tr} \left(\sigma_3 U \dot{U}^\dagger \right). \quad (17.139)$$

这一作用量的 τ -重参数化不变性暗示了其拓扑性. 为了确定其类型, 我们注意到其靶空间 $T = \text{SU}(2)$ 是三维流形, 但是 U 作为参数化 \mathbb{S}^2 上的单位矢量的群元张成的其实是 $\text{SU}(2)$ 的二维子流形. 事实上, 我们也可以从 (17.135) 中看到变量 ψ 其实构成了 U 的一个冗余自由度, 变换 $U \rightarrow U e^{i\psi\sigma_3}$ 为作用量带来的改变

$$\frac{1}{2} \int d\tau \text{tr} \left[\sigma_3 (i\dot{\psi}\sigma_3) \right] = i[\psi(\beta) - \psi(0)] = 2\pi i W \quad (17.140)$$

亦表明其对物理没有影响. 因此, 实际的靶流形为 $\mathrm{SU}(2)/\mathrm{U}(1) \cong \mathbb{S}^2$, 其维数比基流形高一维并暗示着 Wess-Zumino 项的存在. 代入 U 的坐标表示后我们便得到了熟悉的表达式

$$\Gamma[\phi, \theta] = -\frac{i}{2} \int_0^\beta d\tau \dot{\phi} (1 - \cos \theta). \quad (17.141)$$

这一作用量常被称为自旋- $\frac{1}{2}$ 的 Berry 相作用量. 对于绝热演化的 Hamilton 量 $\mathcal{H}[\mathbf{x}(t)]$, 记我们感兴趣的各个瞬时基态为 $|0(t)\rangle$, 那么绝热演化的 Berry 相位为

$$\gamma = i \int_0^t ds \langle 0(s) | \partial_s | 0(s) \rangle. \quad (17.142)$$

显然, 如果记参数 $\mathbf{x}(t)$ 绝热演化的路径为 Γ , 那么这个相位可以被写成一个线积分:

$$\gamma = \int_\Gamma dx_i \langle 0(\mathbf{x}) | \partial_i | 0(\mathbf{x}) \rangle = \int_\Gamma \langle 0(\mathbf{x}) | d | 0(\mathbf{x}) \rangle. \quad (17.143)$$

如果 Γ 是闭曲线, 那么我们便可以利用 Stokes 公式将几何相改写为

$$\gamma = i \oint_\Gamma \langle 0(\mathbf{x}) | d | 0(\mathbf{x}) \rangle = i \int_S d(\langle 0(\mathbf{x}) | \wedge d | 0(\mathbf{x}) \rangle), \quad (17.144)$$

其中 S 是任意以 γ 为边界的区域. 这一表达式可以被改写为

$$\gamma = i \int_S \sum_{m \neq 0} \frac{\langle 0 | d\mathcal{H} | m \rangle \wedge \langle m | d\mathcal{H} | 0 \rangle}{(\epsilon_m - \epsilon_0)^2}. \quad (17.145)$$

如果我们计算在绝热变化的外磁场 $\mathbf{n}(t)$ 中的自旋的 Berry 相, 那么我们要考察的 Hamilton 量便是

$$\mathcal{H} = \mu \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mu U \sigma_3 U^\dagger, \quad (17.146)$$

其瞬时基态为

$$|0(\mathbf{n})\rangle = U |\downarrow\rangle, \quad (17.147)$$

并且

$$\langle 0 | d | 0 \rangle = \langle \downarrow | U d U^\dagger | \downarrow \rangle = \frac{i}{2} (1 - \cos \theta) d\phi, \quad (17.148)$$

进而

$$\gamma = \frac{1}{2} \oint d\phi (\cos \theta - 1). \quad (17.149)$$

可以看到, 它和 Wess-Zumino 项仅仅相差一个 overall 的系数:

$$\gamma = -i\Gamma, \quad (17.150)$$

并且我们可以说 Berry 相就是一维的 Wess-Zumino 作用量.

17.5 Chern-Simons 项

我们现在讨论 $(2+1)$ -维理论中的 Chern-Simons 项及其在二维拓扑物质理论中的应用. 在引入 Chern-Simons 项之前, 我们需要来看看二维空间里物理的特殊之处.

17.5.1 二维拓扑物相

玻色和费米的 N -体量子波函数在交换两粒子坐标下分别会不变和反号. 人们常把这一结论当成一个公理而没有仔细考察粒子交换的实现过程. 1977 年, Leinaas 和 Myrheim 研究了粒子的重排列通过具体的物理路径而实现的机制并探索了这可能带来的除符号改变以外的后果.

为了构造性地实现粒子的交换, 我们设想已经通过设计势阱而得到了一个诸粒子分别位于 x_1, \dots, x_N 的 N -体基态波函数并假设系统存在能隙. 现在我们以 x_1 处的粒子为轴心绝热地将 x_2 处的粒子转 π 角, 随后将两个粒子整体地平移 $x_2 - x_1$ 使得两个粒子的位置发生了交换. 忽略各个粒子间的相互作用, 那么第二步操作后的波函数应该和原先的波函数一样描述了相同的物理. 不过这里第一步的 π 旋转会带来一个复相位 $e^{i\theta}$, 而旋转 2π 则会带来复相位 $e^{2i\theta}$ 并且保持系统不存在粒子交换. 在维数不等于 2 的单连通空间内, 旋转一周的道路平凡同伦并使得这等于一个平凡操作, 进而 $e^{2i\theta} = 1 \Rightarrow \theta = 0, \pi$. 这便给出玻色统计和费米统计. 但是 $d = 2$ 时 2π 旋转并不等同于零旋转, 进而 2θ 并不一定等于 $2\pi n$, 这使得系统可能存在分数统计的任意子并满足 $e^{i\theta} \neq \pm 1$. 如果系统基态是被量子数 a 标记的简并态 $|\Psi_a\rangle$, 那么对粒子的绝热旋转甚至可能带来对基态的非阿贝尔操作 $|\Psi_a\rangle \rightarrow U_{ab} |\Psi_b\rangle$, 这便带来了非阿贝尔任意子.

大于二维时的玻色统计与费米统计分别对应重排群的平凡和反对称表示, 而二维空间中的粒子统计则与辫群的表示有关. 引入时间轴 τ 并追踪各个粒子在交换中的世界线会让这一系统的辫织特性变得十分显然, 一个交换操作对应着一个辫, 而两组连续的交换操作可以被组合成一个新辫. 如果我们在时间轴引入周期性边界条件, 那么一个辫便会变成一个扭结, 并且系统对相位变化 (阿贝尔任意子) 或对作用于其上的么正算符 (非阿贝尔任意子) 的记录便与扭结不变量有关.

17.5.2 非阿贝尔统计与基态简并性

我们来通过一个简单的例子来展示任意子统计与简并基态的关系. 假设空间流形为 \mathbb{T}^2 并且其基态对应着统计角 $2\theta = 2\pi/k$ 的阿贝尔任意子. 定义 T_1 为在环上某点创造一对粒子-空穴并将它们分别方向相反地绝热地沿环面大圆拖行并让二者在对跖点互相湮灭的算符并记 T_2 为沿小圆进行同样操作的算符, 那么我们会证明

$$T_2^{-1} T_1^{-1} T_2 T_1 = e^{2\pi i/k}. \quad (17.151)$$

为了理解这个关系, 我们再次考虑引入时间维并考察等号左边的算符对应的粒子世界线: 这刚好给出了两个链接在一起的圆环! 因此这个操作等同于一个辫织操作, 并且两粒子相对转角为 2π . 进而我们构造的这个算符会为基态带来复相位 $e^{2i\theta}$ 并保持基态仍为基态.

现在考虑能实现这个关系的最小 Hilbert 空间. 假设 T_1 可以被对角化并且其一个本征值为 $e^{i\lambda}$. T_1^k 应该给出平凡操作 $(e^{2\pi i/k})^k = 1$, 进而 $\lambda k = 0 \pmod{2\pi}$, 我们便可假设 T_1 能被对角化为

$$T_1 = \text{diag}(1, e^{2\pi i/k}, \dots, e^{2\pi i(k-1)/k}), \quad (17.152)$$

这便要求基态 k 重兼并. 前述关系则表明 T_2 的作用好似下降算符: 它把态 $|\ell\rangle$ 变成了 $T_2 |\ell\rangle = |(\ell - 1) \pmod{k}\rangle$. 如果我们选择了 T_2 的本征基, 那么 T_1 则会像阶梯算符. 总之, 为了实现 $2\pi/k$ 的任意子统计, 系统的基态至少是 k -重简并的. 系统中存在遵循不同统计的准粒子的情况会更加复杂. 就像两个电子可以结合成遵循玻色统计的准粒子 (比如 Copper 对), 两个任意子也可以融合成其辫织性质与其组分粒子有关的有效准粒子, 其统计性质由融合规则给出.

17.5.3 Chern-Simons 理论

前面的拓扑项总是作为一个非拓扑理论作用量的附加项存在, 并且其行为往往是在长程引入新的物理; 但这里的 Chern-Simons 理论则完全是一个拓扑场论 (TQFT): 这里的拉氏量是纯拓扑的. 我们会看到, Chern-Simons 理论描述了二维 gapped 拓扑相, 刻画了其基态简并性与任意子统计.

(2+1)-维 CS 作用量为

$$S[A] = \frac{k}{4\pi} \int_M \text{tr} \left(A \wedge dA + \frac{2}{3} A \wedge A \wedge A \right). \quad (17.153)$$

记 $A = A_\mu dx^\mu$, 此即

$$S[A] = \frac{k}{4\pi} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} \text{tr} \left(A_\mu \partial_\nu A_\rho + \frac{2}{3} A_\mu A_\nu A_\rho \right), \quad (17.154)$$

其中 A_μ 在规范群的 Lie 代数中取值. 根据惯用约定, 联络 A 是实数并且 CS 作用量也是实的, 并且它在配分函数中的形式为 e^{iS} , 即这是个拓扑项.

如果 A 所取值的 Lie 代数是而非阿贝尔的, 那么这里的 level 参数 k 将会整数量子化. 因为这一作用量在环绕数为 W 的规范变换 $g(x)$ 下会表现为 $S \rightarrow S + 2\pi k W$, 故理论的自洽性要求 k 的整数量子化. 不过我们这里先来考虑阿贝尔的情况, 此时作用量为

$$S[A] = \frac{k}{4\pi} \int_M A \wedge dA = \frac{k}{4\pi} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} A_\mu \partial_\nu A_\rho, \quad (17.155)$$

其中 A_μ 为 (2+1)-维矢势而 k 可以取任意值.

17.5.4 阿贝尔 Chern-Simons 理论的一般性质

我们来考虑定义在 $\mathbb{T}^3 = \mathbb{S}^1 \times \mathbb{T}^2$ 上的 Chern-Simons 理论, 其中 \mathbb{S}^1 对应时间维. 此时对 CS 作用量的泛函积分将会揭示 gapped 阿贝尔拓扑物质的三个关键特征: 基态的稳定性, 简并性, 以及准粒子激发态的分数统计.

动力学演化的缺失与基态简并性 我们可以考虑 CS 作用量对应的 Hamilton 量. 做规范固定使得 $A_0 = 0$, 作用量化为

$$S[A] = \frac{k}{2\pi} \int d^3x A_2 \partial_0 A_1. \quad (17.156)$$

我们可以将这个对应到正则作用量

$$S = \int dt (p \partial_t q - H), \quad (17.157)$$

那么这便表明 CS 理论对应的 Hamilton 量等于零, 故理论不存在动力学: 基态以上的激发态应该对应着附加在 CS 作用量上的其它项.

在这儿的诠释下 A_1, A_2 分别对应正则坐标与动量, 进而二者对应的量子算符应该满足对易关系

$$[A_1(\mathbf{r}_1), A_2(\mathbf{r}_2)] = \frac{2\pi i}{k} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (17.158)$$

不过这两个算符并不是规范不变的: 即便已经规范固定 $A_0 = 0$, 我们还是可以做规范变换 $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\phi$, 因而我们并不能将 A_i 与物理量相联系. 不过我们可以考虑规范不变的 Wilson loop 算符

$$T_i = \exp\left(i \int_{\gamma_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}\right), \quad (17.159)$$

其中曲线 γ_i 为沿 r_i 方向绕环面一周的圆. 注意到 γ_1, γ_2 总有一个交点, 我们便有

$$\left[\int_{\gamma_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}, \int_{\gamma_j} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \right] = \int dr_i dr_j [A_i, A_j] = \frac{2\pi i}{k} \epsilon_{ij}, \quad (17.160)$$

于是我们根据 BCH 公式即得

$$T_1 T_2 = \exp\left(i \int_{\gamma_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} + i \int_{\gamma_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \frac{\pi i}{k}\right), \quad (17.161)$$

$$T_2 T_1 = \exp\left(i \int_{\gamma_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} + i \int_{\gamma_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} + \frac{\pi i}{k}\right), \quad (17.162)$$

此即

$$T_2^{-1} T_1^{-1} T_2 T_1 = e^{2\pi i/k}. \quad (17.163)$$

这一结果可以被诠释为 Wilson loop 算符的对易关系要求 k -维 Hilbert 空间, 而 Hamilton 量的平凡性暗示了这个 Hilbert 空间其实是系统的基态空间.

分数统计 分数统计的准粒子激发在交换下应该获得相位 $2\pi/k$. 为了在 CS 理论中描述这一现象, 我们需要耦合进描述了至少两个准粒子的辫织的流 j^μ 并记

$$S[A] = S_{\text{CS}}[A] + \int d^3x j^\mu A_\mu, \quad (17.164)$$

其中

$$j^\mu(x) \equiv \sum_{i=1}^N (\partial_t x_i^\mu(t)) \delta[\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)]. \quad (17.165)$$

我们可以将 CS 作用量部分理解为描述了 $(2+1)$ -维时空中粒子绝热辫织的作用量. 前面讨论过, 在辫织前后各个粒子的位置应该与初态一致, 进而我们可以在时间方向取周期性边界条件并将各个粒子的世界线都取成闭合环路.

取 $N = 2$, 我们会发现对 A 的泛函积分会为一个环路构型给出复相位 $\exp\left[\frac{2\pi i}{k} I(\gamma_1, \gamma_2)\right]$, 其中 $I(\gamma_1, \gamma_2)$ 是曲线 γ_1 穿过 γ_2 内部区域的次数, 即二者的链接数; 这刚好等于辫织操作在交换粒子的次数并且给出了统计相位. 事实上, CS 项会将各个环路感受为 $(3+0)$ -维欧氏空间里的单位电流环并会产生等效磁场. 积出 A 后的作用量形式为 γ_1 产生的磁场的旋度在 γ_2 的内部的积分, 这便给出了链接数. 这一链接数其实是个扭结不变量, 并且能被推广到非阿贝尔 CS 理论中.

规范 (非) 不变性 Chern-Simons 作用量的规范不变性是个非常微妙的问题. 如果底流形 M 无边, 那么 CS 作用量在无穷小规范变换

$$A' = gAg^{-1} + gdg^{-1} \quad (17.166)$$

下的确不变. 但是如果 M 有边, 那么阿贝尔和非阿贝尔 CS 理论都不是规范不变的. 对于阿贝尔的情况, $A \rightarrow A + df$ 会给出

$$S_{\text{CS}}[A] \rightarrow S_{\text{CS}}[A] + \frac{k}{4\pi} \int_{\partial M} f dA. \quad (17.167)$$

这一规范缺陷表明带边流形上的纯 CS 理论是不完备的, 进而暗示我们需要一个边界上的非规范不变理论来抵消 bulk 内的 CS 理论规范变换后出现的项. 我们后面会看到这一理论的规范非不变性与对应的边界理论的手征反常有关, 并且这一联系是如此之强以至于 bulk 和边界理论会互相调节并使得理论整体上规范不变并且反常自由. 最后注意到 CS 作用量仅包含一阶导数, 进而其缺乏宇称对称性, 并且这一宇称对称性破缺也和后面会涉及的宇称反常有关.

17.5.5 分数量子 Hall 效应 (FQHE)

我们现在考虑分数量子 Hall 绝缘体, 它是一个以阿贝尔 Chern-Simons 理论作为有效理论的长程纠缠拓扑序. 从第一性原理出发对这一理论的推导会揭示阿贝尔任意子从微观水平中涌现的过程以及在对空间做粗粒化后这些准粒子又如何被 Chern-Simons 规范场的涨落所表示. 我们还会讨论如何从 CS 理论中提取出分数量子化的输运系数.

FQHE 的唯象学 人们在发现 IQHE 不久后就明白整数量子化的 Hall 电导与第一陈数有关并受拓扑保护, 进而 Tsui, Stormer 与 Gossard 在 high-mobility 样品中发现的 $\sigma_{xy} = \frac{\nu}{2\pi}$, $\nu = \frac{1}{3}$ 这一 Hall 平台着实出人意料. 后续的实验更是发现了一族位于有理数填充比的 Hall 平台. FQHE 在实验上的突出特征为:

- 只有对相对简单的有理数 n/m 才会出现 Hall 平台, 其中最突出的平台对应取值在主序列 $1/m$ 中, m 为偶数. 更一般地讲, 实验观测到的填充比大多满足

$$\nu = \frac{n}{m} = \frac{p}{2sp+1}, \quad s, p \in \mathbb{Z}. \quad (17.168)$$

不过实验还观测到了 $\nu = \frac{5}{2}$ 的态, 这被认为是准粒子自由度的奇异配对态并且和非阿贝尔任意子的激发有关.

- 对于 $\nu = \frac{1}{2}$ (即 $p \rightarrow \infty, s = 1$), 系统的行为表现得好似不存在外场. 在这一填充比附近, 系统会表现一般只在弱场 Fermi 液体中才存在的 Shubnikov-de Haas 振荡.

FQHE 的底层原理可以从其不同于 IQHE 的对无序的敏感性而一窥端倪. 不存在无序时磁场中的自由电子气基态会填充各个 Landau 能级并出现巨大的简并性, 并且外界的扰动会让这些简并的态出现劈裂. 我们可以据此推测 FQHE 可能对应这系统在受到扰动后于宏观水平上 reordering 时产生的奇特量子态.

FQHE 中量子化电导以及仅在 Fermi 面附近才会出现的 Shubnikov-de Haas 振荡的存在性暗示这一现象依赖的准粒子应该是费米子. 人们在对这一现象的早期研究中曾提出过一个天才的费米子平均场图像并在唯象水平上解释了 FQHE 的大部分内容. 我们先将样品里的磁场想象为大量 (记 N_Φ 个) 的穿过样品单位磁通量子的管道, 磁场的均匀性意味着这些磁通管的分布在宏观上也是均匀的. 对于填充比 $\nu = N/N_\Phi < 1$ 的系统, 磁通量子的数目大于电子数 N . 现在我们假设存在某种机制使得每一个电子都和偶数个磁通量子结合形成一个复合粒子, 如 $\nu = 1/3$ 时一个电子与两个磁通量子配对并剩下三分之一的未配对通量子. 这一复合系统便有如下特点:

- 复合粒子遵循费米统计并被称为复合费米子.
- 复合费米子感受到的是未配对的磁通量子产生的约化外场. 例如, 对 $\nu = 1/3$ 而言约化外场由未配对的 $\frac{1}{3}N_\Phi$ 个磁通量子产生并比施加的外场小三倍, 这诱惑着我们将 FQHE 认作复合费米子在约化外场里的 IQHE. 对于 $\nu = \frac{1}{2}$ 的半满带, 我们有 $N_\Phi - 2N = 0$, 进而复合费米子感受到的平均场为零, 这恰好解释了实验观测到的该填充比附近系统表现出的弱场行为.

早期理解 FQHE 的另一关键一步便是 Laughlin 波函数的提出:

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \mathcal{N} \prod_{1 \leq i < j \leq N} (z_i - z_j)^m \prod_{k=1}^N e^{-|z_k|^2}, \quad (17.169)$$

这是为填充比 $\nu = 1/m$ 的最低 Landau 能级量身定制的试探基态波函数. 这里 $z = (x + iy)/(2\ell_0)$, $\ell_0 = 1/\sqrt{B}$ 为磁长度. 这个波函数的第二项正是和 Landau 能级有关的基态谐振子波函数, 而第一项则包含了使得 FQHE 不同于 IQHE 的三大关键要素:

- 非平凡准粒子统计: 改变任意坐标 z_i 都会带来一个与其它坐标以及填充比有关的相位.
- 强纠缠: 这个波函数与一个简单的张量积态相差甚远.
- 粒子相互作用: 两粒子坐标过于接近时波函数消失.

我们下面便会从微观理论出发引入合适的规范变换来将复合费米子作为有效自由度引入到理论中. 进一步, 我们会表明问题被粗粒化到宏观尺度后对应着一个阿贝尔 CS 理论并且它的确刻画了 FQHE 的关键物理特征.

Chern-Simons 理论的构造 考虑垂直磁场里二维电子气的 Hamilton 量 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}}$, 其中

$$\hat{H}_0 = \int d^2x a^\dagger(\mathbf{x}) \frac{1}{2m} (-i\partial_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}_0) a(\mathbf{x}), \quad (17.170)$$

其中我们取矢势为 $\mathbf{A}_0 = \frac{B_0}{2}(y, -x)^T$ 并记 \hat{H}_{int} 为电子间的相互作用项.

我们前面已经 argue 了复合费米子应该是描述 FQHE 的最合适的准粒子, 而它和一般费米子的最大区别是旋转两个复合费米子相对位矢会产生由两个磁通量子带来的额外复相位 $e^{-2is\theta}$, 我们可以通过所谓的奇异规范变换来手动引入这个相位:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \rightarrow \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \exp\left(-2is \sum_{i < j} \arg(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right), \quad (17.171)$$

其中 $\arg(\mathbf{x}) = \arctan \frac{x_2}{x_1}$ 便是相对位矢与正实轴的夹角. 这并不是一个规范变换, 因为它并不是单值的, 其在 $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}_j$ 时甚至是奇异的. Anyway, 理论在这一“规范”变换下的不变性要求系统必须耦合进矢势

$$\mathbf{a} = -2s\partial_{\mathbf{r}} \sum_i \arg(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = -2s \sum_i \frac{(r_1 - r_{i,1})\mathbf{e}_2 - (r_2 - r_{i,2})\mathbf{e}_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2}, \quad (17.172)$$

而它的旋度会带来“磁场”

$$\mathbf{b} = \epsilon^{ij} \partial_{r_i} a_j = -4\pi s \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (17.173)$$

进而, 如果系统存在 N 个粒子, 那么满足任意子统计的复合费米子会随身携带 N 个总通量为 $2sN$ 的流管. 因而我们可以把复合费米子作为基本自由度并将外磁场取作 $B_0 - b$.

在二次量子化的框架下, 我们对波函数的变换相当于

$$a^\dagger(\mathbf{r}) \rightarrow a^\dagger(\mathbf{r}) \exp \left[-2is \int d^2\mathbf{x} \arg(\mathbf{r} - \mathbf{x}) \hat{\rho}(\mathbf{x}) \right], \quad (17.174)$$

其中 $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ 为粒子数密度算符. 这一代换要求我们将 Hamilton 量里的规范场变为 $\mathbf{A}_0 \rightarrow \mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_0 + \mathbf{a}$, 其中

$$\mathbf{a}(\mathbf{r}) = -2s \int d^2\mathbf{x} \frac{(r_1 - x_1)\mathbf{e}_2 - (r_2 - x_2)\mathbf{e}_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|^2} \hat{\rho}(\mathbf{x}). \quad (17.175)$$

考虑实时路径积分 $Z = \int \mathcal{D}\psi e^{iS[\psi]}$, 其中 $S = S_0 + S_{\text{int}}$ 并且

$$S_0[\psi] = \int d^3x \bar{\psi} \left[i\partial_t - \mu - \frac{1}{2m} (-i\partial_x + A[\psi])^2 \right] \psi, \quad (17.176)$$

其中化学势 μ 给出了填充比. 这一作用量的矢势项使得它相对于 ψ 场非线性也非局域, 但是我们可以通过如下技巧来消除非线性: 考虑恒等式

$$1 = \int \mathcal{D}\theta \prod_x \delta(\nabla^2\theta + 4\pi s \rho(x)) = \int \mathcal{D}\theta \mathcal{D}\phi \exp \left[-i \int d^3x \phi \left(\frac{\nabla^2\theta}{4\pi s} + \rho \right) \right] \quad (17.177)$$

并将其插入到配分函数中, 那么我们便自动引入了一个 Chern-Simons 项. 为了看到这一点, 我们定义三分量矢势为

$$\mathbf{v}_\mu = (-\phi, \partial_2\theta + \partial_1\psi, -\partial_1\theta + \partial_2\psi)^T, \quad (17.178)$$

那么我们便有

$$\frac{1}{4\pi s} \int d^3x \phi \nabla^2\theta = \frac{1}{8\pi s} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\rho} a_\mu \partial_\nu a_\rho. \quad (17.179)$$

注意到 $\nabla \times \mathbf{v} = -2s\rho = -2s\bar{\psi}\psi$, 我们便 shift 电磁势使得 $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}_0 + \mathbf{v}$ 后积出电子场二得到

$$S[v] = -i \text{tr} \ln \left[i\partial_t - \mu - \phi + \frac{1}{2m} (-i\partial_x + \mathbf{A}_0 + \mathbf{v})^2 \right] + \frac{1}{8\pi s} \int d^3x \epsilon^{\mu\nu\sigma} a_\mu \partial_\nu a_\sigma. \quad (17.180)$$

可以看到, 这里 Chern-Simons 项的 level 为 $k = \frac{1}{2s}$.

对这有效作用量的变分会给出

$$\rho[\bar{v}] = -\frac{1}{4\pi s} \bar{b}, \quad (17.181)$$

其中

$$\rho[v] = i \left[i\partial_0 + \mu - \phi + \frac{1}{2m} (-i\nabla + \mathbf{A})^2 \right]^{-1} (x, x) \quad (17.182)$$

给出来复合费米子的局域密度. 如果我们假设其处处均匀并记填充比为 ν , 那么我们便有

$$\rho = \frac{\nu B_0}{2\pi}, \quad \bar{b} = -2sB_0\nu. \quad (17.183)$$

Anyway, 平均场分析表明 FQHE 就是复合费米子的 IQHE.

18 自旋轨道耦合

本节参考 [3].

18.1 原子中的自旋轨道耦合

自旋轨道耦合 (SOC) 的概念最早出现在原子光谱精细结构的计算中, 而如今这一现象在诸多基础研究和技术应用中都有着重要地位. 从技术上讲, 这允许我们操纵自旋的大小和取向并建造自旋电子学元器件以及借助其存储信息; 同时 SOC 在拓扑绝缘体中可以等效地诱导出一个内禀的磁场并产生类似于量子 Hall 态的拓扑电子态. 与外磁场不同, SOC 的存在不会破坏系统的时间反演对称性, 但是其会造成 band inversion, 形成由 \mathbb{Z}_2 拓扑数刻画的状态并带来量子自旋 Hall 效应.

18.1.1 Dirac 方程

处在矢势 \mathbf{A} 和标势 V 中的电子的 Dirac 方程为

$$\mathcal{H}_D |\psi\rangle = \mathcal{E}' |\psi\rangle, \quad \mathcal{H}_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] - eV(\mathbf{r}) + \beta m_0 c^2, \quad (18.1)$$

其中 m_0 为电子质量,

$$\alpha^i \equiv \gamma^0 \gamma^i, \quad \beta \equiv \gamma^0, \quad (18.2)$$

并且 γ^μ 满足 Clifford 代数

$$\frac{1}{2} \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \eta^{\mu\nu}, \quad \eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (18.3)$$

在凝聚态中我们常用 γ -矩阵的 Dirac 表示:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (18.4)$$

进而

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (18.5)$$

我们可以将 Dirac 方程中的四分量旋量 $|\psi\rangle$ 分解为两个二分量旋量 $|\psi_{A/B}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_A\rangle \\ |\psi_B\rangle \end{pmatrix}. \quad (18.6)$$

进而两个分量分别满足

$$[\mathcal{E} + eV(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle = \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] |\psi_B\rangle, \quad (18.7)$$

$$[\mathcal{E} + 2m_0 c^2 + eV(\mathbf{r})] |\psi_B\rangle = \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle, \quad (18.8)$$

其中我们记

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}' - m_0 c^2. \quad (18.9)$$

在非相对论极限下我们认为 $\mathcal{E} + eV \ll 2m_0c^2$, 因而

$$|\psi_B\rangle \approx \frac{1}{2m_0c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle, \quad (18.10)$$

并且我们可以得到 $|\psi_A\rangle$ 的运动方程

$$\left[\mathcal{E} + eV(\mathbf{r}) - \frac{1}{2m_0} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \right] |\psi_A\rangle = 0. \quad (18.11)$$

这正是没有自旋-轨道耦合项的 Schrödinger 方程.

为了得到 SOC 修正项, 我们考虑 $|\psi_B\rangle$ 的精确形式解

$$|\psi_B\rangle = \frac{1}{\mathcal{E} + 2m_0c^2 + eV(\mathbf{r})} \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle, \quad (18.12)$$

进而

$$[\mathcal{E} + eV(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle = \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] \frac{1}{\mathcal{E} + 2m_0c^2 + eV(\mathbf{r})} \boldsymbol{\sigma} \cdot [c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})] |\psi_A\rangle. \quad (18.13)$$

将等号右边展开到 $\mathcal{O}(v^2/c^2)$ 并记

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \nabla V(\mathbf{r}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (18.14)$$

我们便得到了携带相对论效应修正项的 Schrödinger 方程 (又叫做 Pauli 方程)

$$\left[\mathcal{E} + eV(\mathbf{r}) - \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 + \frac{1}{2mc^2} (\mathcal{E} + eV(\mathbf{r}))^2 \right. \\ \left. + i \frac{e\hbar}{(2mc)^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) - \frac{e\hbar}{(2mc)^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \right] |\psi_A\rangle = 0. \quad (18.15)$$

其前三项和 Schrödinger 方程一致; 第四项和第五项不包含 Pauli 矩阵并叫做标量相对论项, 它们对重元素的能级结构有着重要影响; 第六项为电子磁矩与磁场互相耦合的 Zeeman 项; 最后一项则是自旋-轨道耦合项.

我们可以将自旋-轨道耦合项记作

$$\mathcal{H}_{\text{S.O.}} = \frac{\hbar}{(2mc)^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (18.16)$$

而对于球对称势而言我们有

$$(\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (18.17)$$

考虑到 p -轨道 $\ell = 1$ 而 $s = 1/2$, 进而总角动量子数 $j = 3/2, 1/2$, 并且

$$\left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\rangle \equiv \frac{\xi}{2} [j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)] = \begin{cases} 1/2, & j = 3/2, \\ -1, & j = 1/2, \end{cases} \quad (18.18)$$

其中我们记

$$\xi = \hbar \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right\rangle. \quad (18.19)$$

进而我们得到 SOC 对 p -轨道能量的两个领头阶修正为

$$\Delta_{j=3/2} = \frac{1}{2} \frac{\xi \hbar^2}{(2mc)^2}, \quad \Delta_{j=1/2} = -\frac{\xi \hbar^2}{(2mc)^2}, \quad (18.20)$$

故它造成的能级劈裂为

$$\Delta = \frac{3}{2} \frac{\xi \hbar^2}{(2mc)^2}. \quad (18.21)$$

这一劈裂会正比于原子序数的平方, 因而其在重原子中效果会更加明显.

18.2 固体物理中的自旋轨道耦合

现在我们考虑晶体中电子的自旋轨道相互作用带来的后果.

18.2.1 半导体能带结构中的 SOC

如果不考虑自旋-轨道相互作用, 那么钻石型, 闪锌矿型和纤锌矿型半导体的能带结构可以由其组分原子的最外层电子态 (主要为 s 和 p 轨道态) 导出; 而 SOI 在半导体中常见的原子中都极其重要. 例如, 它可以部分消除闪锌矿型半导体的能带结构在 Γ -点 ($\mathbf{k} = 0$) 处的简并性并带来能带劈裂 Δ_0 , 并且其数值和组分原子种类有关. 一般而言 Δ_0 近似正比于原子序数的平方, 并且其大小和单个组分原子中的 SOI 劈裂 $\Delta_{\text{S.O.}}$ 相近. 这表明价电子主要受到其所属的原子的束缚势场的影响. 尽管半导体化合物中的阳离子和阴离子有着不同的 SOI 裂距, 但由于电子主要来自阴离子, 故其自身的裂距会更多地贡献到能带的劈裂中. 因此, 半导体中的 SOI 裂距会近似正比于其中阴离子原子序数的平方.

时间反演和空间反演对称性 在时间反演操作 Θ 下 σ 和 \mathbf{p} 均变号, 因此 $\mathcal{H}_{\text{S.O.}}$ 保持不变. 同时 TR 对称性意味着 Kramers 简并性

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(-\mathbf{k}, \downarrow), \quad \Theta |n, \mathbf{k}, \uparrow\rangle = |n, -\mathbf{k}, \downarrow\rangle. \quad (18.22)$$

这可能会带来依赖自旋的能带色散关系. 如果系统存在宇称对称性 π , 那我们则有

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow\downarrow) = E_n(-\mathbf{k}, \uparrow\downarrow), \quad \pi |n, \mathbf{k}, \uparrow\downarrow\rangle = |n, -\mathbf{k}, \uparrow\downarrow\rangle. \quad (18.23)$$

进而一个同时存在时间反演对称和宇称对称的系统会满足

$$E_n(\mathbf{k}, \uparrow) = E_n(\mathbf{k}, \downarrow), \quad (18.24)$$

此时即便存在 SO 相互作用也不会出现依赖自旋的色散关系.

在非磁性半导体中 TR 对称性总是存在的, 进而在宇称对称的晶体 (如金刚石型晶体) 中所有能带都有自旋带来的二重简并. 而不存在空间反演对称性闪锌矿和纤锌矿结构中 SOI 则可能导致能带的自旋简并性被消除.

18.2.2 Bulk 反演对称性破缺与 Dresselhaus Hamilton 量

如果系统不存在空间反演对称性, 那么此时 $E(\mathbf{k}, \uparrow)$ 一般不等于 $E(\mathbf{k}, \downarrow)$ 并且 Hamilton 量应该会存在同时为 \mathbf{k} 和 σ 的奇函数的项——只有这样时间反演对称性才能得到保留. 我

们称这种项为体反演不对称 (bulk inversion assymetry, BIA) 自旋轨道耦合项. 对于自旋- $\frac{1}{2}$ 的电子, 其自旋算符对应的 Pauli 矩阵满足

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (18.25)$$

因此任意 Pauli 矩阵的乘积都能通过上式被约化为关于 σ 的线性表达式. 特别的, 一个任意的自旋轨道耦合项

$$\mathcal{H}_{\text{S.O.}} \equiv \sum_{i,j,m,n} C_{mn}^{ij} \sigma_i^n k_j^m \quad (18.26)$$

总能通过 (18.25) 被约化为 σ 的线性项. 因此我们可以考虑将最一般的 BIA 自旋轨道耦合项构造为

$$\mathcal{H}_{\text{S.O.}} = \frac{1}{2} \Omega(\mathbf{k}) \cdot \sigma, \quad (18.27)$$

其中 $\Omega(\mathbf{k})$ 是 \mathbf{k} 的奇函数并起到了一个有效磁场的作用.

事实上, 半导体中只有破缺掉空间反演对称性才可能出现自旋-轨道耦合项. 特别的, G.Dresselhaus 最先意识到在 bulk 结构缺乏反演对称性的半导体中 SOC 会带来重要结果. 此时我们在不施加磁场的情况下也能观察到 $\mathbf{k} \neq 0$ 的电子和空穴态的 SO 劈裂, 这叫做 Dresselhaus 效应, 而我们构造的自旋轨道耦合项 (18.27) 便叫做 Dresselhaus BIA 自旋轨道耦合.

18.3 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法与有效质量张量

由于半导体一般有着小于 1 eV 的能隙, 故其中的自由载流子要么由热涨落产生 (这会产生数目相同的电子和空穴), 要么由掺杂提供. 无论如何, 其中的载流子浓度都不会超过 10^{20} cm^{-3} . 与之相对, 一条能带中态的数目通常为 10^{23} cm^{-3} 量级, 这便表明半导体中大部分载流的电子和空穴态都集中于 band edges 附近大小为 eV 量级的区域内, 并且我们只需要研究能带结构的这一小部分便能理解半导体的大多数物理性质.

因此, 我们现在关心的是半导体价带峰和导带谷处的能带结构. 价带的最高点是 Γ -点, 但是导带的极小值点却可能出现在 Brillouin 区的其它地方. 我们称导带谷也处在 Γ -点的半导体为 direct-gap 半导体, 并且它们是大多数光学器件的核心; 与之相对, 价带谷不在 Γ -点的半导体则叫做 indirect-gap 半导体.

如果我们已知能带极值处的波函数和能量, 那么微扰论应该能够辅助我们导出极值点附近其他 \mathbf{k} 点处的波函数和能量. Kohn-Luttinger $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法便是实现这一目的非常有用亦非常常用的途径.

这一方法的出发点是 Bloch 电子满足的 Schrödinger 方程

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (18.28)$$

根据 Bloch 定理, 这一波函数可以被分离出一个相位以及一个有着晶格周期性的部分 $i_n(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle$:

$$\langle \mathbf{r} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle, \quad (18.29)$$

进而我们可以得到 Bloch 态满足的 Schrödinger 方程

$$\underbrace{\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right]}_{\mathcal{H}_0} + \underbrace{\frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}_{\mathcal{H}'} |n, \mathbf{k}\rangle = \underbrace{\left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right]}_{\mathcal{E}_n(\mathbf{k})} |n, \mathbf{k}\rangle, \quad (18.30)$$

进而我们可以将 $|n, \mathbf{k}\rangle$ 满足的本征值问题表述为

$$(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}') |n, \mathbf{k}\rangle = \mathcal{E}_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle. \quad (18.31)$$

我们不妨记 band edge 处的 Bloch 波矢 $\mathbf{k}_0 = 0$, 并假设已知此处的波函数 $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle$. 由于 \mathbf{k}_0 为能带的极值点, 我们便有

$$\nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} = 0. \quad (18.32)$$

进而在 \mathbf{k}_0 附近展开 $E_n(\mathbf{k})$ 时得到的一阶项为零. 我们不难意识到对 $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ 而言也会出现类似的情况. 我们不难根据微扰论得到近似到 $\mathcal{O}(\mathbf{k}^2)$ 的 $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$:

$$\mathcal{E}_n(\mathbf{k}) = \mathcal{E}_n(0) + \langle n, 0 | \mathcal{H}' | n, 0 \rangle + \sum_{\ell \neq n} \frac{\langle n, 0 | \mathcal{H}' | \ell, 0 \rangle \langle \ell, 0 | \mathcal{H}' | n, 0 \rangle}{\mathcal{E}_n(0) - \mathcal{E}_\ell(0)}. \quad (18.33)$$

注意到

$$\langle n, 0 | \mathcal{H}' | n, 0 \rangle = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \langle n, 0 | \mathbf{p} | n, 0 \rangle, \quad (18.34)$$

因而在存在宇称对称性的系统中这一项等于零, 而二阶修正项中的矩阵元则不一定为零. 因此我们根据 \mathcal{E}_n 和 E_n 的关系便可以得到在 \mathbf{k}_0 附近能带的二阶近似

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{\mu, \nu} \sum_{\ell \neq n} k_\mu k_\nu \frac{\langle n, 0 | p^\mu | \ell, 0 \rangle \langle \ell, 0 | p^\nu | n, 0 \rangle}{E_n(0) - E_\ell(0)}. \quad (18.35)$$

我们进而可以得到有效质量 $m_{\mu\nu}^*$ 为

$$\frac{1}{m_{\mu\nu}^*} \equiv \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\mu \partial k_\nu} = \frac{1}{m} \delta_{\mu\nu} + \frac{1}{m^2} \sum_{\ell \neq n} \frac{\langle n, 0 | p^\mu | \ell, 0 \rangle \langle \ell, 0 | p^\nu | n, 0 \rangle + \langle n, 0 | p^\nu | \ell, 0 \rangle \langle \ell, 0 | p^\mu | n, 0 \rangle}{E_n(0) - E_\ell(0)}, \quad (18.36)$$

并且对于主轴方向我们有

$$\frac{m}{m_i^*} = 1 + \frac{2}{m} \sum_{\ell \neq n} \frac{|\langle n, 0 | p^i | \ell, 0 \rangle|^2}{E_n(0) - E_\ell(0)}. \quad (18.37)$$

我们常用这一公式计算 direct-gap 半导体中价带峰和导带谷处的电子有效质量. 具体计算发现对求和贡献最大的矩阵元是价带顶端的 p_x, p_y 或 p_z 本征态和导带底端的 s -型本征态间的矩阵元, 我们将这些矩阵元记为 p , 那么能隙附近的有效质量便可以写作

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{2}{m} \frac{p^2}{\pm E_g}, \quad (18.38)$$

其中 $-E_g$ 对应价带态, $+E_g$ 对应导带态, E_g 为能隙宽度. 同时我们可以将能量记作

$$E_{c/v}(\mathbf{k}) = E_{c/v}(0) \pm \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2|m^*|}, \quad (18.39)$$

其中 $-$ 依旧对应价带, $+$ 对应导带.

18.3.1 空穴和价带有效质量

根据上述对有效质量的定义, 我们发现在半导体价带顶处有效质量可能是负值! 为了避免这种诡异的现象, 我们可以引入空穴的概念来描述一个几乎满的能带带顶出的零星空态.

我们记一个满价带中的各个电子有着 Bloch 波矢 \mathbf{k}_j 以及能量 $E(\mathbf{k}_j) < 0$, 并且我们记带顶的能量 $E = 0$. 全满价带中

$$\sum_i \mathbf{k}_i = 0. \quad (18.40)$$

现在我们移除一个电子来创造激发态, 这会导致价带里出现一个空穴. 记我们移除的是电子 l , 那么此时整个能带会获得非零的净动量 \mathbf{k} 并且我们将这个动量视作空穴的动量. 进而

$$\mathbf{k} = \sum_{i \neq l} \mathbf{k}_i = -\mathbf{k}_l \equiv \mathbf{k}_h. \quad (18.41)$$

同时我们将空穴的能量取作激发出这个空穴所需的能量, 因而如果 \mathbf{k}_l 对应的电子能量 $E(\mathbf{k}_l)$ 越小 (注意这是一个负数), 那么空穴的能量越大, 并且

$$E_h(\mathbf{k}_h) = -E(\mathbf{k}_l). \quad (18.42)$$

空穴的群速度为

$$\mathbf{v}_h = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}_h} E_h(\mathbf{k}_h) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{-\mathbf{k}_l} [-E(\mathbf{k}_l)] = \mathbf{v}_l, \quad (18.43)$$

因而移除电子 l 后产生的净电流为

$$\sum_i (-e) \mathbf{v}_i = -(-e) \mathbf{v}_l = +e \mathbf{v}_h, \quad (18.44)$$

进而空穴看起来携带了正电荷. 同时我们也可以计算空穴的有效质量

$$\frac{1}{m_{\mu\nu}^{*h}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E_h}{\partial k_\mu^h \partial k_\nu^h} = -\frac{1}{m_{\mu\nu}^{*e}}, \quad (18.45)$$

因此我们避免了负质量电子的奇怪概念.

Luttinger 模型 现在我们考虑 Γ -点附近价带的类似 p -轨道的三重简并特征并考虑建立起关于其结构的有效质量描述. 为了简化我们的处理, 我们进一步假设系统拥有各向同性对称性 (旋转对称性), 因而此时系统中好用的量子数除了 Bloch 波矢 \mathbf{k} 对应的动量 $\boldsymbol{\kappa} \equiv \hbar \mathbf{k}$ 外还有角动量算符 \mathbf{L} 对应的量子数. 此时系统对称性允许的最低阶 Hamilton 量应该是 $\mathcal{O}(\boldsymbol{\kappa}^2)$ 阶并且其应该形如

$$\mathcal{H} = A\boldsymbol{\kappa}^2 + B(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{L})^2. \quad (18.46)$$

考虑到能带三重简并, 这里的角动量算符应该对应着 $\mathfrak{su}(2)$ 的三维表示 ($\ell = 1$ 表示), 并且明确地写出角动量自由度后 \mathcal{H} 应该是一个 3×3 矩阵.

对角化这个 Hamilton 量便能给出价带的能谱. 特别的, 我们可以利用旋转不变性来将 $\boldsymbol{\kappa}$ 指向 z 轴并且使得 Hamilton 量变成

$$\mathcal{H} = A\kappa_z^2 + B\kappa_z^2 L_z^2. \quad (18.47)$$

通常 $B < 0$ 而 $A + B > 0$, 并且我们可以立即看出这个 Hamilton 量有一个二重简并 (对应 $m_z = \pm 1$) 的本征值

$$E_h(\boldsymbol{\kappa}) = (A + B)\boldsymbol{\kappa}^2 \equiv \frac{\boldsymbol{\kappa}^2}{2m_h} \quad (18.48)$$

与一个不简并的本征值 (对应 $m_z = 0$):

$$E_l(\boldsymbol{\kappa}) = A\boldsymbol{\kappa}^2 \equiv \frac{\boldsymbol{\kappa}^2}{2m_l}. \quad (18.49)$$

其中角标 h 和 l 分别代表价带中的重空穴和轻空穴, 因为

$$m_h = \frac{1}{2(A + B)} > m_l = \frac{1}{2A}. \quad (18.50)$$

同时我们发现重空穴的 helicity $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{L}/|\boldsymbol{\kappa}| = \pm 1$, 而轻空穴的 helicity 为零.

18.3.2 存在自旋轨道耦合时的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法

存在自旋轨道耦合时 Bloch 波函数的存在晶格周期性的部分 $u_{n,\mathbf{k}}(x)$ 变成了一个二分量旋量

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} |\nu, \mathbf{k}, \uparrow\rangle \\ |\nu, \mathbf{k}, \downarrow\rangle \end{pmatrix}, \quad (18.51)$$

其中 n 变成了标记轨道和自旋自由度的记号. 根据 Pauli-Schrödinger 方程, 存在自旋轨道耦合时 Bloch 波函数满足

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{(2mc)^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right] |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle, \quad (18.52)$$

进而我们有

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{(2mc)^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right] |n, \mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle, \quad (18.53)$$

其中我们记

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + \frac{m}{\hbar} \frac{\hbar}{(2mc)^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V. \quad (18.54)$$

此时自旋轨道耦合的存在让自旋量子数不再是一个好量子数. 并且对于 $\mathbf{k} \neq 0$, 我们可以将 Hamilton 量的微扰项视作

$$\mathcal{H}' = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} \quad (18.55)$$

为简便起见, 我们还是取能带极值点为 $\mathbf{k} = 0$ 并考虑根据不存在 SOI 时的晶格上的周期函数 $|\nu, 0\rangle$ 来微扰计算 $|n, \mathbf{k}\rangle$, 因而我们考虑 ansatz

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\nu} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} C_{n,\nu,\sigma}(\mathbf{k}) |\nu, 0\rangle \otimes |\sigma\rangle \equiv \sum_{\nu} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} C_{n,\nu,\sigma}(\mathbf{k}) |\nu, \sigma\rangle. \quad (18.56)$$

因此

$$\begin{aligned} \sum_{\nu} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} C_{n,\nu,\sigma}(\mathbf{k}) \left[\mathcal{E}_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar}{(2mc)^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right] |\nu, \sigma\rangle \\ = \sum_{\nu} \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} C_{n,\nu,\sigma}(\mathbf{k}) E_n(\mathbf{k}) |\nu, \sigma\rangle, \end{aligned} \quad (18.57)$$

进而

$$\sum_{\nu', \sigma'} \left[\left(E_{\nu'}(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right) \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\Pi}_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} + \Delta_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} \right] C_{n,\nu',\sigma'}(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) C_{n,\nu,\sigma}(\mathbf{k}). \quad (18.58)$$

其中

$$\Pi_{\sigma\sigma'}^{\nu\nu'} = \langle \nu, \sigma | \boldsymbol{\pi} | \nu', \sigma' \rangle, \quad \Delta_{\sigma\sigma'}^{\mu\mu'} = \frac{\hbar}{(2mc)^2} \langle \nu, \sigma | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} | \nu', \sigma' \rangle, \quad (18.59)$$

并且我们注意 \mathcal{E}_{ν} 为不存在 SOI 时的 $|\nu, \sigma\rangle$ 对应的本征值, 而 $E_n(\mathbf{k})$ 是存在 SOI 时的本征值. 原则上 (18.58) 是由无穷多个线性方程组成的本征值问题, 但在实际问题中我们只会对几个能带感兴趣并将这个方程组截断到有限维.

注意到 (18.58) 等号左边第二项正比于 \mathbf{k} 而第三项和 \mathbf{k} 无关: 这来自于单原子内的 SOI 并带来了 Γ -点处简并能级的部分退简并劈裂.

Luttinger 模型的推广 我们注意到 $\mathbf{k} = 0$ 的价带态和其所基于的单原子中的电子态有着相同的对称性. 因而在 $\mathbf{k} = 0$ 处 $j = 3/2$ 的四重简并态和 $j = 1/2$ 的二重简并态之间应该有一个自旋轨道耦合造成的劈裂 Δ_0 . 同时导带底部类似 s -轨道的态也应该是二重简并的. 我们可以根据对称性构造与 Luttinger Hamilton 量类似的能够刻画存在 SOI 并且 $\mathbf{k} \neq 0, E(\mathbf{k}) \ll \Delta_0$ 时的能带的 Hamilton 量. 此时我们要使用 $\mathfrak{su}(2)$ 的 $j = 3/2$ 表示中的 4×4 矩阵 \mathbf{J} 来替换 (18.46) 中的 \mathbf{L} 并得到

$$\mathcal{H} = A\kappa^2 \mathbb{1} + B(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{J})^2. \quad (18.60)$$

对角化这个 Hamilton 量便能再次得到二重简并的重空穴能带

$$E_h(\boldsymbol{\kappa}) = \left(A + \frac{9B}{4} \right) \kappa^2 \equiv \frac{\kappa^2}{2m_h}, \quad J_z = \pm \frac{3}{2}, \quad (18.61)$$

以及有着相同简并度的轻空穴能带

$$E_l(\boldsymbol{\kappa}) = \left(A + \frac{B}{4} \right) \kappa^2 \equiv \frac{\kappa^2}{2m_l}, \quad J_z = \pm \frac{1}{2}. \quad (18.62)$$

这一有效理论适用的前提是 $E_{h/l} \ll \Delta_0$. 重空穴有着螺旋度 $\pm 3/2$, 而轻空穴有着螺旋度 $\pm 1/2$. 一般而言, 两类空穴的有效质量都是正的; 而在一些材料中重空穴会有负的有效质量, 而这表明该能带此时实际上是导带并且系统出现了 band inversion.

我们在构造 (18.60) 时亦作了系统各向同性的假设, 而这在更现实的系统中是不成立的. 例如, 适用于立方晶体的 Luttinger Hamilton 量为

$$\mathcal{H} = A\kappa^2 \mathbb{1} + B(\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{J})^2 + C(J_x^2 \kappa_x^2 + J_y^2 \kappa_y^2 + J_z^2 \kappa_z^2), \quad (18.63)$$

其中 xyz 轴必须与晶轴方向一致. 我们新添加的一项会为让等能面形状存在各向异性而偏离抛物面.

18.3.3 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 方法下的有效 Hamilton 量

我们现在基于 [8, 9] 讨论如何根据 (18.58) 构造描述能带电子的有效 Hamilton 量. 显然, 这需要微扰论的介入. 但是我们熟知的微扰论成立的前提是需要被微扰处理的非对角元相比未微扰 Hamilton 量的本征值间隔而言很小; 这对于我们需要考虑的带顶处存在简并, 同时系统存在能隙的情况而言是不成立的. 此时我们需要使用 Löwdin 微扰论⁴²[13]: 在这套微扰论体系中系统的态被分为两个集合 A, B . 每一集合内的态之间可以有较强的相互作用, 但是两个集合之间的相互作用被假设为很弱. 我们可以使用微扰论逐阶地积出属于集合 B 的自由度并使得 A 中的相互作用项被重整化为了有效相互作用. 接下来我们便可以精确地对刻画了属于 A 的自由度的有效 Hamilton 量进行对角化.

我们可以在形式上将 Hamilton 量的本征值问题记作

$$\sum_n \mathcal{H}_{mn} c_n = E c_m, \quad m = 1, \dots, N. \quad (18.64)$$

这可以被改写为

$$(E - \mathcal{H}_{mm}) c_m = \sum_{n \in A} \mathcal{H}'_{mn} c_n + \sum_{n \in B} \mathcal{H}'_{mn} c_n, \quad \mathcal{H}'_{mn} \equiv \mathcal{H}_{mn} (1 - \delta_{mn}). \quad (18.65)$$

进一步, 我们记

$$h'_{mn} = \frac{\mathcal{H}_{mn}}{E - \mathcal{H}_{mm}} (1 - \delta_{mn}), \quad (18.66)$$

那么我们便有

$$c_m = \sum_{k \in A} h'_{mk} c_k + \sum_{\ell \in B} h'_{m\ell} c_\ell. \quad (18.67)$$

我们根据这个表达式可以迭代地积出属于 B 的自由度并就 $m \in A$ 时得到

$$c_m = \sum_{k \in A} h'_{mk} c_k + \sum_{k \in A} \sum_{\alpha \in B} h'_{m\alpha} h'_{\alpha k} c_k + \sum_{k \in A} \sum_{\alpha, \beta \in B} h'_{m\alpha} h'_{\alpha\beta} h'_{\beta k} c_k + \dots. \quad (18.68)$$

截断到二阶便有

$$(E - \mathcal{H}_{mm}) c_m = \sum_{n \in A} \mathcal{H}_{mn} (1 - \delta_{mn}) c_n + \sum_{n \in A} \sum_{\alpha \in B} \frac{\mathcal{H}_{m\alpha} \mathcal{H}_{\alpha n}}{E - \mathcal{H}_{\alpha\alpha}} c_n, \quad m \in A. \quad (18.69)$$

这便给出了适用于 A 子空间上的有效 Hamilton 量

$$\mathcal{H}_{mn}^{\text{eff}} = \mathcal{H}_{mn} + \sum_{\alpha \in B} \frac{\mathcal{H}_{m\alpha} \mathcal{H}_{\alpha n}}{E - \mathcal{H}_{\alpha\alpha}}, \quad (18.70)$$

并且其中的能量参数 E 可以通过求解本征值问题

$$\sum_{n \in A} \mathcal{H}_{mn}^{\text{eff}}(E) c_n = E c_m \quad (18.71)$$

给出的自洽性方程而得到确定.

⁴²这一方法和 Brillouin-Wigner 微扰论的联系可以参见 [4]13.5 节对类似公式的推导.

我们在写出 (18.64) 时并没有对这个分量形式所基于的 Hilbert 空间的基做特殊要求, 这让我们能通过选择合适的基来让日子好过一些. 特别的, 如果 \mathcal{H} 有着微扰论便于处理的形式

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{V}, \quad (18.72)$$

并将 \mathcal{H}_0 精确可解的本征态记作 $\{|n\rangle\}$, 对应的本征值记作 $\{\mathcal{E}_n\}$; 那么我们可以把 c_m 定义为 \mathcal{H} 的本征态 $|\psi\rangle$ 在 $|m\rangle$ 上的投影 $\langle m|\psi\rangle$, 同时对于 $m, n \in A$ 而言有效 Hamilton 量便为

$$\mathcal{H}_{mn}^{\text{eff}} = \varepsilon_m \delta_{mn} + \lambda \langle m|\mathcal{V}|n\rangle + \lambda^2 \sum_{\alpha \in B} \frac{\langle m|\mathcal{V}|\alpha\rangle \langle \alpha|\mathcal{V}|n\rangle}{E - (\varepsilon_\alpha + \lambda \langle \alpha|\mathcal{V}|\alpha\rangle)}. \quad (18.73)$$

进而我们在实际应用中可以将一组距离很近的价带和导带归为集合 A , 将剩下的能带归为集合 B 并积出.

对于给定 Bloch 波矢 \mathbf{k}_0 , 不同能带之间的间隔通常为 $3 \sim 5$ eV. 如果一族能带之间的间隔小于 3 eV, 我们可以将它们均归到集合 A 内并使用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamilton 量来构造描述这组能带的有效 Hamilton 量.

不存在自旋-轨道耦合的情况 我们先忽视自旋-轨道耦合项, 那么此时我们期待求解的 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] |n, \mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle. \quad (18.74)$$

假设我们已知 Bloch 动量为 \mathbf{k}_0 时的本征值 $E_n(\mathbf{k}_0)$ 以及各本征态 $|n, \mathbf{k}_0\rangle$, 那么我们便可以将 Hamilton 量分解为两部分:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_0^2}{2m} + \frac{1}{m} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p}, \quad (18.75)$$

$$\mathcal{V} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}. \quad (18.76)$$

如果我们期待构造强耦合的能带 $1, \dots, \ell$ 的有效 Hamilton 量, 那么我们便可以根据 Löwdin 微扰论得到截断到 $\mathcal{O}(\mathbf{k}^2)$ 的有效 Hamilton 量:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{mn}^{\text{eff}} = & \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{mn} + \frac{\hbar}{m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \langle m, \mathbf{k}_0 | \mathbf{p} | n, \mathbf{k}_0 \rangle \\ & + \frac{\hbar^2}{m^2} (k - k_0)_\mu (k - k_0)_\nu \sum_{\alpha \in B} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0 | p^\mu | \alpha, \mathbf{k}_0 \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0 | p^\nu | n, \mathbf{k}_0 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)}. \end{aligned} \quad (18.77)$$

存在自旋-轨道耦合的情况 此时我们需要考虑的 Schrödinger 方程为

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{m}{\hbar} \frac{\hbar}{(2mc)^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V \right) + \frac{\hbar}{(2mc)^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right] |n, \mathbf{k}\rangle \\ & = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle. \end{aligned} \quad (18.78)$$

此时我们还是假设已知

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_0^2}{2m} + \frac{1}{m} \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{p} \quad (18.79)$$

的本征态 $|n, \mathbf{k}_0, \pm\rangle$ 及其本征值 $E_n(\mathbf{k}_0)$, 那么微扰相互作用项便为

$$\mathcal{V} = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{(2mc)^2}(\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{p}). \quad (18.80)$$

我们据此可以构造截断到 $\mathcal{O}(\mathbf{k}^2)$ 阶的有效 Hamilton 量:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m,n;\sigma_1,\sigma_2}^{\text{eff}} = & \frac{\hbar}{(2mc)^2} \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle + \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{mn} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ & + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | \mathbf{p} | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle \delta_{\sigma_1 \sigma_2} + \frac{\hbar}{(2mc)^2} \mathbf{k} \cdot \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle \\ & + \frac{\hbar^2}{m^2} (k - k_0)_\mu (k - k_0)_\nu \sum_{\alpha \in B, \sigma_\alpha} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | p^\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha | p^\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ & + \frac{\hbar^2}{(2mc)^4} k_\mu k_\nu \sum_{\alpha \in B, \sigma_\alpha} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \\ & + \frac{\hbar}{m} \frac{\hbar}{(2mc)^2} (k - k_0)_\mu k_\nu \sum_{\alpha \in B, \sigma_\alpha} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | p_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \\ & + \frac{\hbar}{m} \frac{\hbar}{(2mc)^2} k_\mu (k - k_0)_\nu \sum_{\alpha \in B, \sigma_\alpha} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha | p_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)}. \end{aligned} \quad (18.81)$$

考虑到自旋自由度给出的限制, 我们可以将这个 Hamilton 量的求和约化为

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{m,n;\sigma_1,\sigma_2}^{\text{eff}} = & \frac{\hbar}{(2mc)^2} \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle + \left[E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_0^2) \right] \delta_{mn} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ & + \frac{\hbar}{m}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | \mathbf{p} | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle \delta_{\sigma_1 \sigma_2} + \frac{\hbar}{(2mc)^2} \mathbf{k} \cdot \langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle \\ & + \frac{\hbar^2}{m^2} (k - k_0)_\mu (k - k_0)_\nu \sum_{\alpha \in B} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | p^\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_1 \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | p^\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \\ & + \frac{\hbar^2}{(2mc)^4} k_\mu k_\nu \sum_{\alpha \in B, \sigma_\alpha} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_\alpha | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \\ & + \frac{\hbar}{m} \frac{\hbar}{(2mc)^2} (k - k_0)_\mu k_\nu \sum_{\alpha \in B} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | p_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_1 \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)} \\ & + \frac{\hbar}{m} \frac{\hbar}{(2mc)^2} k_\mu (k - k_0)_\nu \sum_{\alpha \in B} \frac{\langle m, \mathbf{k}_0, \sigma_1 | (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\mu | \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle \langle \alpha, \mathbf{k}_0, \sigma_2 | p_\nu | n, \mathbf{k}_0, \sigma_2 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_\alpha(\mathbf{k}_0)}. \end{aligned} \quad (18.82)$$

19 粒子-空穴对称性

我们在本节根据 [21] 来详细分析凝聚态物理中被滥用的“粒子-空穴对称性”.

20 聚乙炔, SSH 模型与分数激发

能带理论预言一维聚乙炔链应该是半填充的金属, 而实验却表明它是有着 1.8 eV 能隙的半导体. 这一能隙源自电子-声子相互作用带来的一维 Peierls 相变. 作为半导体的聚乙炔是首个实现了可逆拓扑相的材料, 它的一些激发态携带有分数量子数.

聚乙炔中的碳原子按 sp^2 杂化, 并且 π 键在碳链上交错排列. π 轨道电子的离域性质让聚乙炔的电子输运性质表现出来强烈的各向异性: 沿碳链方向的纵向直流电导比横向电导高好一两个数量级. 因此, 聚乙炔中的电子输运是准一维的, 这能够被一个仅考虑纵向电子输运的紧束缚一维 Hamilton 量所描述.

我们在紧束缚模型中考虑的是碳链上最近邻 π -电子的跃迁. 记 \mathbf{r}_i 为一维碳原子链中碳原子的位置, 那么紧束缚模型中耦合原子 i 与 $i+1$ 的 π 电子的跃迁矩阵元可以被取作

$$t_i = te^{-c|\mathbf{r}_i\mathbf{r}_{i+1}|/\alpha}, \quad (20.1)$$

其中 $t > 0$ 为控制能带宽度的特征能量 (第一性原理计算及实验表明 $4t \sim 12$ eV), c 是一个 $\mathcal{O}(1)$ 的与材料有关的常数, α 是原子链没有畸变时的平均格点间距. 进而紧束缚 Hamilton 量为

$$H = - \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma} (t_i c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma} + h.c.), \quad (20.2)$$

其中产生湮灭算符应当是满足正则反对易关系的费米子算符.

由于每个原子都贡献了一个 π 电子, 故系统的基态应该是个 N 电子态并属于 Fock 空间的 N 体子空间

$$\mathfrak{F} = \left\{ \prod_{i=1}^N \prod_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger})^{n_{i,\sigma}} |0\rangle : n_{i,\sigma} = 0, 1 \right\}. \quad (20.3)$$

我们在不关心边缘态时可以直接取周期性边界条件 $c_{i+N,\sigma} = c_{i,\sigma}$, 但是周期性边界条件会约束各个格点间的单粒子态间的相位并使得我们一般不能通过重定义各个单粒子态的相位来让各个跃迁矩阵元 t_i 都是实数. 与之相对, 开边界条件下各个单粒子态的相位都是独立的, 我们总能够通过重定义相位来让 $t_i \in \mathbb{R}$. 同时开边界条件还能揭示我们感兴趣的边缘态, 因而这将是我们的重点.

20.1 对称性

Hamilton 量 (20.2) 在 $t_i \in \mathbb{R}$ 时拥有如下对称性:

- 时间反演对称性 (TRS),
- 粒子-空穴对称性 (PHS),
- 手征对称性 (CHS),
- 全局及规范 $U(1)$ 对称性.

我们现在取 N 为偶数并构造这些对称性对应的算符.

TRS: 如果近邻跃迁常数 t_i 是实数并且边界条件在反线性且局域的变换

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \mapsto (-1)^\sigma (a^* c_{i,\sigma}^\dagger + b^* c_{i,-\sigma}), \quad (20.4)$$

不变, 那么在这个变换下不变的 Hamilton 量便拥有时间反演对称性. 这一定义的直观来自于角动量在时间反演下反号并且自旋- j 粒子的磁量子数 σ 的本征态的时间反演宇称为 $(-1)^{|j-\sigma|}$, 同时时间反演应该反么正以保证系统能量存在下界. 如果系统存在自旋-轨道耦合, 那么我们必须使用这样的时间反演变换. 不过如果系统中自旋角动量是守恒量, 那么自旋指标只会为能级带来一个二重简并, 进而我们可以忽略 σ 指标的变换而简单地把时间反演变换取成

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \mapsto a^* c_{i,\sigma}^\dagger + b^* c_{i,\sigma}, \quad (20.5)$$

这本质上就是无质量费米子的时间反演变换. 对于我们现在考虑的情况, 自旋角动量是守恒的, 因而我们采纳这个形式的时间反演变换.

PHS: 注意到 Hamilton 量与局域的反线性变换

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \mapsto a^* c_{i,\sigma} + b^* c_{i,\sigma}^\dagger \quad (20.6)$$

反对易⁴³, 因而对于 N 为偶数并且取周期性边界条件 $c_{i+N,\sigma} = c_{i,\sigma}$ 的系统, 我们可以为格点 i 处的产生湮灭算符赋予粒子-空穴共轭宇称 $(-1)^i$ 而将 PHS 变换取作

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \mapsto (-1)^i (a^* c_{i,\sigma} + b^* c_{i,\sigma}^\dagger). \quad (20.7)$$

在这个变换下 Hamilton 量会获得一个额外的负号并使得它与这个反线性变换对易.

CHS: Hamilton 与线性局域变换

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \rightarrow (-1)^i (ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma}) \quad (20.8)$$

反对易, 进而我们可以将 CHS 变换取作

$$ac_{i,\sigma}^\dagger + bc_{i,\sigma} \rightarrow (-1)^i (ac_{i,\sigma} + bc_{i,\sigma}^\dagger) \quad (20.9)$$

并使得 Hamilton 量与之对易同时保持边界条件不变. 按照我们的定义, TRS, PHS 以及 CHS 三者中任意二者的存在都会导致第三者的出现.

20.2 跃迁振幅与能带结构

Hamilton 量 (20.2) 的性质强烈依赖于跃迁振幅 t_i . 取 $t_i = t$ 的均匀情况以及周期性边界条件会得到

$$\hat{H} = \sum_{k \in 1\text{BZ}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma}, \quad \varepsilon_k = -2t \cos(ka). \quad (20.10)$$

这在每个格点贡献一个电子的情况下会给出半满的能带, 因而它应该表现为金属. 但是实际上聚乙炔链表现为半导体, 这要求我们对模型做出修正以为基态打开能隙.

⁴³注意费米子产生湮灭算符反交换.

注意到 (20.10) 满足

$$\hat{H} = \sum_{k \in 1\text{BZ}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma} = - \sum_{k \in 1\text{BZ}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_k \hat{c}_{k-\pi,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k-\pi,\sigma}, \quad (20.11)$$

我们可以定义

$$\hat{\chi}_{k,\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\sigma} \\ \hat{c}_{k-\pi,\sigma} \end{pmatrix} \quad (20.12)$$

使得

$$\hat{H} = \sum_{|k| \leq \pi/2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_k \hat{\chi}_{k,\sigma}^\dagger \tau_3 \hat{\chi}_{k,\sigma}. \quad (20.13)$$

现在手征变换可以被刻画为 $\hat{\chi}_{k,\sigma} \mapsto \tau_1 \hat{\chi}_{k,\sigma}$. 分析表明正是这个手征对称性保护了能隙的闭合, 并且它和一维格点奇数位同偶数位间的对称性有关. 因而打开能隙的一种方式便是破缺掉这个对称性并将平移对称性破缺为 $i \mapsto i + 2n$. 此时我们要用两组产生湮灭算符来刻画奇偶格点处的电子并记

$$\hat{\psi}_{k,\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{k,\sigma} \\ \hat{b}_{k,\sigma} \end{pmatrix} \quad (20.14)$$

为一个原胞的湮灭算符. 如此操作后最一般的无相互作用厄米 Hamilton 量便可以写作

$$\hat{H} = \sum_{k,\sigma} \hat{\psi}_{k,\sigma}^\dagger \mathcal{H}_k \hat{\psi}_{k,\sigma}, \quad \mathcal{H}_k = h_k^\mu \tau_\mu, \quad (20.15)$$

其中 h_k^μ 应为在第一 Brillouin 区内满足周期性边界条件的缓变实函数. CHS 要求 $h_{k,0} = h_{k,3} = 0$, 而 TRS 会进一步要求 $h_{k,1} = h_{-k,1}$, $h_{k,2} = -h_{-k,2}$. 取

$$h_{k,1} = -t_1 - t_2 \cos(2ka), \quad h_{k,2} = -t_2 \sin(2ka) \quad (20.16)$$

便能打开一道能隙并给出与实际相近的结果. 这一参数设置表明 $i \rightarrow i + 1$ 的跃迁振幅与 $i + 1 \rightarrow i + 2$ 的跃迁振幅不同.

20.3 相变

定义 $\delta t \equiv (t_2 - t_1)/2$, $t = (t_1 + t_2)/2$, δt 的符号标志了 $i \rightarrow i + 1$ 的跃迁振幅与 $i + 1 \rightarrow i + 2$ 的跃迁振幅孰大孰小. 我们现在则要说明在零温, half-filling 以及热力学极限下 $\delta t/t = 0$ 给出了分隔两个 gapped 物相的量子临界点, 即配分函数 $Z(\beta, \delta t/t) = \text{tr} e^{-\beta \hat{H}}$ 在此时奇异, 它给出的关联长度会发散.

21 拓扑序与范畴论导论

本节我们基于 [11] 来对拓扑序与范畴论进行一个简单介绍.

21.1 拓扑序的基本概念

21.1.1 Gapped 量子相

一个量子相是在热力学极限和零温下定义出的量子多体系统的普适类, 我们亦可以在微观上将之定义为格点模型的等价类. 而一个格点模型则由如下几则公理所定义:

- 空间中存在离散的点位, 这些离散点位的数目 k 叫做格点模型的尺寸.
- 每一点 i 都对应一个刻画了局域自由度的局域 Hilbert 空间 \mathcal{H}_i .
- 总 Hilbert 空间为张量积空间 $\mathcal{H} = \bigotimes_i \mathcal{H}_i$.
- 局域性: 定义在 \mathcal{H} 上的 Hamilton 量 \mathcal{H} 是局域相互作用项之和. 一个局域的相互作用项仅在几个空间上局域的点对应的局域 Hilbert 空间的张量积上有非平凡的作用.

热力学极限便对应着极限 $k \rightarrow \infty$. 同时我们只对拥有如下性质的特殊的量子系统感兴趣:

- 存在独立于 k 的固定 $\Delta > 0$ 使得:
 1. $k \rightarrow \infty$ 时 Hamilton 量 $\mathcal{H}^{(k)}$ 在大小为 Δ 的能隙内不存在本征态.
 2. 这一能隙以下的本征态数目在热力学极限下与 k 无关并且保持有限.
 3. 能隙以下本征态的能级劈裂在 $k \rightarrow \infty$ 时为零.

具有这一性质的量子系统叫做 gapped liquid 量子系统, 其中能隙下的本征态张成的子空间叫做基态子空间, 其维数叫做基态简并度 (GSD). 我们可以根据两个 gapped liquid 系统 Hamilton 量是否能通过不闭合能隙且不改变 GSD 的绝热改变互相联系来定义确定量子相所需的等价关系. 如果一个 gapped liquid 不存在对称性, 那么这边叫拓扑序. 我们记 n 维空间中的所有拓扑序为 TO_n , 显然任意维数中都存在平凡拓扑序 $\mathbb{1}_n$. TO_n 在通过堆叠格点模型定义的乘法 \square 下构成了 commutative monoid 范畴, 并且人们相信其低能有效理论对应着一个 TQFT.

21.1.2 \mathbb{R}^n -可观测量

无论系统是否有能隙, 零温下的物理可观测量都是在低能 (长波) 极限下非平凡的量. 因而量子相其实是一个在长波极限下定义的宏观概念并能被长波极限下可能出现的所有非平凡可观测量所刻画. 无能隙量子相中典型的长波可观测量为 QFT 关联函数; 而有能隙时系统的关联函数会指数衰减, 因而我们不能以传统的方式寻找此时的可观测量.

我们还需要讨论一下相的概念. 文献中通常声称应该在一个闭流形上定义一个量子相, 这自然不错; 但是我们不应据此认为一个相是在闭流形上定义的全局概念或全局可观测量. 例如, 我们能够将有着不同亏格的拓扑曲面上的相同 FQH 态视作描述了同一 FQH 相的原因是它们在曲面上的每个开圆盘内都描述了相同的相. 因而, 一个量子相其实是在一个开圆盘上被研究的局域概念. 不过我们使用“局域”一词也是不严谨的, 因为一个开圆盘显然是一个非局域的东西并且它只有在格点数趋于无穷的热力学极限下才能被定义, 而此时它包含无穷多的格点并近似为 \mathbb{R}^n . 因而一个更恰当的称呼为 \mathbb{R}^n -可观测量.

21.1.3 反常自由与反常量子相

我们称一个 n 维量子相反常自由, 如果它能被一个仅包含局域相互作用的 n 维格点模型所实现; 反之我们则称其为反常的. 一个 n 维反常量子相 A_n 只能在格点上被实现为一个更高维格点模型中的缺陷; 并且通过维数约化, 其总能在一个对应了 $(n+1)$ 维反常自由量子相 C_{n+1} 的 $(n+1)$ 维格点模型的边界上被实现. 尽管 A_n 作为缺陷的实现方式不唯一, 但是其在维数约化后对应的 C_{n+1} 是唯一的, 我们记之为 $\text{Bulk}(A_n)$. 这叫做 unique bulk principle. 特别的, 当且仅当 $\text{Bulk}(A_n) = 1_{n+1}$ 时 n 维量子液体 A_n 才是反常自由的.

21.1.4 拓扑缺陷和拓扑骨架

我们前面已经提及 gapped liquid 中的能隙使得系统的零温关联函数指数衰减, 此时系统的长波 \mathbb{R}^n -可观测量由拓扑缺陷给出.

格点模型中的一个缺陷在微观上可以被实现为对格点, 局域 Hilbert 空间或者 Hamilton 量的局域修正. 一个缺陷的存在会破坏量子相的均匀性并在粗粒化后给出一个长波极限下的可观测量. 在一个拓扑序中, 这些可观测量间由系统允许的微扰所定义的等价类叫做拓扑缺陷.

一个高维格点模型中的低维缺陷可以被视为嵌入其中的低维格点模型. 我们将一直假设这一低维格点模型也是有能隙的, 因而在长波极限下一个拓扑序中的拓扑缺陷可以被视为一个低维 (可能存在反常的) 拓扑序.

一个 n 维拓扑序 C_n 中的拓扑缺陷的集合及其中缺陷间的关联形成了叫做拓扑骨架的复杂结构. 我们可以通过粗粒化为拓扑骨架这个集合定义额外的结构: 例如, 两个足够接近的余维数相同的拓扑缺陷在粗粒化后可以被视为单个拓扑缺陷, 进而这定义了拓扑缺陷间的融合 (fusion) 规则. 其中本节的主题便是揭示出拓扑骨架的高阶范畴结构.

21.2 二维拓扑序

1982 年, 实验观测到了分数量子 Hall 效应 (FQHE); 不久后, 人们便意识到了 FQHE 的两个重要特征:

- 在非平凡曲面上定义的分数量子 Hall 态有着非平凡的 GSD, 并且这一基态简并在任意弱扰动下都是 robust 的. 因而这一现象和对称性无关并超出了 Landau 的对称性破缺范式的能力范围.
- 分数量子 Hall 态中的准粒子 (我们称之为任意子) 携带分数荷并有着分数统计甚至非阿贝尔统计, 并且非平凡的 GSD 和任意子的非平凡统计直接相关.

任意子的出现和 GSD 的 robustness 意味着超出 Landau 范式的新序的出现, 这被文小刚命名为拓扑序, 因为其低能有效理论为拓扑量子场论.

任意子其实是我们前面提到的拓扑缺陷的特例. 我们现在便要仔细考察二维拓扑序中的这种类粒子拓扑缺陷, 它们组成了名为幺正模张量范畴的数学结构.

21.2.1 Toric code 模型

我们现在考虑 Kitaev 引入的二维 toric code 模型并计算其 GSD. 在方形格点上的二维 toric code 模型中, 格点的每一边上都有一个 $\frac{1}{2}$ -自旋, 进而每一边上的局域 Hilbert 空间为 \mathbb{C}^2 , 而全局 Hilbert 空间为 $\bigotimes_i \mathbb{C}^2$.

对于一个顶点 v , 我们定义顶点算符

$$A_v = \prod_i \sigma_x^i, \quad (21.1)$$

其中 $i = 1, 2, 3, 4$ 指代与顶点 v 相连接的四条边, 并且

$$\sigma_x^i = \cdots \mathbb{1} \otimes \sigma_x \otimes \mathbb{1} \cdots \quad (21.2)$$

只在 \mathcal{H}_i 上有非平凡的作用. 类似的, 我们就一个 plaquette p 也可以定义算符

$$B_p = \prod_i \sigma_z^i, \quad (21.3)$$

其中 i 遍及组成这个 plaquette 的四条边. Toric code 模型的 Hamilton 量为

$$\mathcal{H} = \sum_v (1 - A_v) + \sum_p (1 - B_p). \quad (21.4)$$

事实上, 我们可以就任意形状的晶格定义 toric code 模型; 由于这个模型是重整化群流的不动点, 故其长波行为与晶格形状的选择无关.

显然 A_v 算符间以及 B_p 算符间均对易; 如果 A_v 和 B_p 不包含公共边, 那么二者亦对易. 如果二者邻接, 那么它们有且只有两个公共边 (我们记为 3,4 边), 并且此时

$$[A_v, B_p] = \sigma_x^1 \sigma_x^2 [\sigma_x^3 \sigma_x^4, \sigma_z^3 \sigma_z^4] \sigma_z^5 \sigma_z^6 = 0. \quad (21.5)$$

因此整个 Hilbert 空间可以被分解为所有 A_v 和 B_p 算符的公共本征空间的直和. 特别的, 基态子空间能量为 0, 并且对应 A_v 和 B_p 的本征值 +1 公共本征空间. 特别的, 第一激发态至少有能量 2, 因而系统是 gapped 的.

基态简并度和基态波函数 我们现在计算定义在亏格 g 的闭表面上的 toric code 模型的 GSD. 记网格有 V 个格点, E 条边与 F 个 plaquettes, 那么 Euler 公式给出

$$V - E + F = 2(1 - g). \quad (21.6)$$

总 Hilbert 空间的维数为 2^E , 基态子空间的约束为 $A_v = 1$ 和 $B_p = 1$. 注意到在闭表面上定义时 A_v 和 B_p 在基态上还满足额外的约束关系

$$\prod_v A_v = \prod_p B_p = 1, \quad (21.7)$$

因而我们共有 $(V + F - 2)$ 个独立约束, 并且每个约束会将 Hilbert 空间的维数减半. 因此

$$\text{GSD} = 2^{E - (V + F - 2)} = 2^{2g}, \quad (21.8)$$

显然这是拓扑不变的.

现在考虑在 $g = 1$ 的环面上计算基态波函数. 记 $|\pm\rangle$ 为 σ_x 本征值 ± 1 的本征态. 我们可以用黑色边代表 $|+\rangle$ 态, 红色边代表 $|-\rangle$ 态, 那么每一个波函数 $|+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle \cdots$ 都能被一幅各边被特定方式染色的图所表示, 并且我们称红边连出的为一条弦. 特别的, 我们在环面上定义模型相当于在两个方向上均选取了周期性边界条件. 我们要求基态 $A_v = 1$ 意

味着此时不能存在开弦, 否则在端点处 $A_v = -1$. 而基态 $B_p = +1$ 意味着如果两个闭弦构型能够通过 B_p 的作用互相形变, 那么两个构型对应的态矢一定以相同的系数线性叠加在同一个本征态里. 进而对本征态的计算便转化为了对环面上不可收缩路径数目的计算, 并且我们会发现四种本征态, 它们对应于环面的 \mathbb{Z}_2 同调类并等于 $H^1(\mathbb{T}^1; \mathbb{Z}_2) \cong \mathbb{Z}_2 \oplus \mathbb{Z}_2$ 的维数. 类似的, 亏格 g 曲面 Σ_g 上 toric code 基态波函数与 $H^1(\Sigma_g; \mathbb{Z}_2) \cong \mathbb{Z}_2^{\oplus 2g}$ 有关. 同时我们通过这个例子可以看到, 基态来自于闭弦的凝聚, 而激发态对应开弦的端点.

21.2.2 类粒子拓扑缺陷的范畴

局域算符和拓扑激发 既然拓扑缺陷是可观测量的长波极限, 那么如何从微观理论出发定义它们自然是一个问题. 显然, 直观上我们需要积出并抹匀微观自由度来做粗粒化, 而在研究拓扑缺陷时我们能将粗粒化的效果描述为被局域算符所屏蔽. 我们称局域算符是在有界区域上定义的算符, 并且它只对这个有界区域内的局域 Hilbert 空间有着非平凡的作用. 任意宏观可观测量都受到局域算符屏蔽作用的影响.

得到缺陷的最简单方式便是往 Hamilton 量里引入局域项. 记 $\delta\mathcal{H}_\xi$ 是作用在 ξ 点附近的局域项, 那么 Hamilton 量 $\mathcal{H} + \delta\mathcal{H}_\xi$ 的基态一般不同于原 Hamilton 量; 并且相对原 Hamilton 量而言新 Hamilton 量的基态看起来就像是在点 ξ 附近的局域激发态并在远离 ξ 的地方和基态无异. 类似的, 任意局域在某点 ξ 的 \mathcal{H} 激发态都应该能被某个缺陷项 $\delta\mathcal{H}_\xi$ 所描述 (我们称 $\delta\mathcal{H}_\xi$ traps 这个态), 因而我们可以通过考察 \mathcal{H} 的激发来研究系统可能存在的缺陷.

如果 $|\psi\rangle$ 是能被 $\delta\mathcal{H}_\xi$ 刻画的激发态而 A 是个局域算符, 那么粗粒化后 $A|\psi\rangle$ 也应该能被 $\delta\mathcal{H}_\xi$ 所刻画. 因而长波极限下 trapped states 组成的子空间在局域算符的作用下不变, 我们称这个子空间为拓扑激发, 并且它刻画了 $\delta\mathcal{H}_\xi$ 对应的拓扑缺陷. 进而给定态 $|\psi\rangle$, 其对应的最小的拓扑激发子空间为

$$\{A|\psi\rangle | A \text{ 是局域算符}\}, \quad (21.9)$$

我们称之为 $|\psi\rangle$ 生成的拓扑激发. 特别的, 基态生成的为平凡拓扑激发 $\mathbb{1}$, 对应着平凡拓扑缺陷. 而一个非平凡的拓扑激发无法通过局域算符的作用从基态产生或被湮灭回基态 (但能通过非局域算符的作用与基态相联系); 向原 Hamilton 量引入 local trap 则等价于在 ξ 的世界线上引入非局域算符.

在单个点 ξ 处的 local trap $\delta\mathcal{H}_\xi$ 诱导的拓扑激发是类粒子的, 并且二维中的这种激发叫做任意子. 我们也可以考虑定义在高维子流形上的 local trap, 而这会给出高维拓扑激发.

Toric code 模型的拓扑激发 我们可以将拓扑激发的概念应用到 toric code 模型中. 既然这个模型中各个局域 Hilbert 子空间的 Hamilton 量互相对易, 那么一个激发态便由参与组成这个 Hamilton 量的所有算符 A_v, B_p 的本征值所确定.

References

- [1] Alexander Altland and Ben D. Simons. “Broken symmetry and collective phenomena”. In: *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2010, pp. 242–359.
- [2] A. Anderson. “Canonical Transformations in Quantum Mechanics”. In: *Annals of Physics* 232.2 (June 1994), pp. 292–331. ISSN: 0003-4916. DOI: [10.1006/aphy.1994.1055](https://doi.org/10.1006/aphy.1994.1055). URL: <http://dx.doi.org/10.1006/aphy.1994.1055>.
- [3] Michael El-Batanouny. *Advanced Quantum Condensed Matter Physics: One-Body, Many-Body, and Topological Perspectives*. Cambridge University Press, 2020.
- [4] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio. *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter*. 1st ed. Heidelberg: Springer Berlin, Dec. 2007. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-32899-5>.
- [5] Murray Gell-Mann and Francis Low. “Bound States in Quantum Field Theory”. In: *Phys. Rev.* 84 (2 Oct. 1951), pp. 350–354. DOI: [10.1103/PhysRev.84.350](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.84.350). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.84.350>.
- [6] F. D. M. Haldane. “Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly” ”. en. In: *Physical Review Letters* 61.18 (Oct. 1988), pp. 2015–2018. ISSN: 0031-9007. DOI: [10.1103/PhysRevLett.61.2015](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015).
- [7] Jorge V. José et al. “Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model”. en. In: *Physical Review B* 16.3 (Aug. 1977), pp. 1217–1241. ISSN: 0556-2805. DOI: [10.1103/PhysRevB.16.1217](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.1217).
- [8] E.O. Kane. “Chapter 3 The $k \cdot p$ Method”. In: *Semiconductors and Semimetals*. Ed. by R.K. Willardson and Albert C. Beer. Vol. 1. Semiconductors and Semimetals. Elsevier, 1966, pp. 75–100. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0080-8784\(08\)62376-5](https://doi.org/10.1016/S0080-8784(08)62376-5). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0080878408623765>.
- [9] Evan O. Kane. “Band structure of indium antimonide”. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 1.4 (1957), pp. 249–261. ISSN: 0022-3697. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(57\)90013-6](https://doi.org/10.1016/0022-3697(57)90013-6). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369757900136>.
- [10] Tosio Kato. “On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics”. In: *Journal of the Physical Society of Japan* 5.6 (1950), pp. 435–439. DOI: [10.1143/JPSJ.5.435](https://doi.org/10.1143/JPSJ.5.435). eprint: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.5.435>. URL: <https://doi.org/10.1143/JPSJ.5.435>.
- [11] Liang Kong and Zhi-Hao Zhang. “An invitation to topological orders and category theory”. en. In: arXiv:2205.05565 (May 2022). arXiv:2205.05565 [cond-mat]. URL: <http://arxiv.org/abs/2205.05565>.

- [12] Arnold D. Levine. “Canonical Transformations in Quantum Mechanics”. In: *American Journal of Physics* 33.9 (Sept. 1965), pp. 728–732. ISSN: 0002-9505. DOI: [10.1119/1.1972198](https://doi.org/10.1119/1.1972198). eprint: https://pubs.aip.org/aapt/ajp/article-pdf/33/9/728/11994328/728_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1119/1.1972198>.
- [13] Per-Olov Löwdin. “A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory”. en. In: *The Journal of Chemical Physics* 19.11 (Nov. 1951), pp. 1396–1401. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.1748067](https://doi.org/10.1063/1.1748067).
- [14] Luca Guido Molinari. “Another Proof of Gell-Mann and Low’s Theorem”. In: *Journal of Mathematical Physics* 48.5 (May 2007). ISSN: 1089-7658. DOI: [10.1063/1.2740469](https://doi.org/10.1063/1.2740469). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.2740469>.
- [15] Wolfgang Nolting and William D. Brewer. *Fundamentals of Many-body Physics*. Springer Berlin Heidelberg, Jan. 2009. DOI: [10.1007/978-3-540-71931-1](https://doi.org/10.1007/978-3-540-71931-1).
- [16] H.T.C. Stoof, D.B.M. Dickerscheid, and K. Gubbels. *Ultracold Quantum Fields*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Netherlands, 2008. ISBN: 9781402087639.
- [17] Kazuo Takayanagi. “Renormalized Unitary Transformation in the Adiabatic Theorem”. In: *Phys. Rev. A* 44 (1 July 1991), pp. 59–64. DOI: [10.1103/PhysRevA.44.59](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.44.59). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.44.59>.
- [18] D. J. Thouless et al. “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential”. In: *Phys. Rev. Lett.* 49 (6 Aug. 1982), pp. 405–408. DOI: [10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>.
- [19] J. Zak. “Magnetic Translation Group”. In: *Phys. Rev.* 134 (6A June 1964), A1602–A1606. DOI: [10.1103/PhysRev.134.A1602](https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A1602). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.134.A1602>.
- [20] J. Zak. “Magnetic Translation Group. II. Irreducible Representations”. In: *Phys. Rev.* 134 (6A June 1964), A1607–A1611. DOI: [10.1103/PhysRev.134.A1607](https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A1607). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.134.A1607>.
- [21] Martin R. Zirnbauer. “Particle-Hole Symmetries in Condensed Matter”. en. In: *Journal of Mathematical Physics* 62.2 (Feb. 2021). arXiv:2004.07107 [math-ph], p. 021101. ISSN: 0022-2488, 1089-7658. DOI: [10.1063/5.0035358](https://doi.org/10.1063/5.0035358).