

路径积分量子化

任杰

路径积分的建立

拆分配分函数

考虑 d 维格电系统，格点数为 N^d ，哈密顿量可表达为格点上升降算符函数：

$$\hat{H} = H(\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j). \quad (1)$$

场论中的核心问题是计算体系的热力学配分函数，即：

$$Z \equiv \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}). \quad (2)$$

以上求迹表达式中，逆温度 β 可拆分为 M 等份，求迹表达式变为：

$$Z = \text{Tr} \left[e^{-\frac{\beta}{M} \hat{H}} \cdots e^{-\frac{\beta}{M} \hat{H}} \right]. \quad (3)$$

求迹过程可引入任意一组完备基底 $|\psi_\alpha\rangle$ ，要求：

$$\sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle \langle \psi_\alpha| = \mathbf{1}. \quad (4)$$

这样，配分函数可变为矩阵连乘形式：

$$Z = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_M} \mathcal{M}_{\alpha_1, \alpha_2} \cdots \mathcal{M}_{\alpha_M, \alpha_1}. \quad (5)$$

其中 \mathcal{M} 的矩阵元为：

$$\mathcal{M}_{\alpha, \beta} \equiv \exp \left[-\frac{\beta}{M} \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\beta \rangle \right] \simeq 1 - \frac{\beta}{M} \langle \psi_\alpha | \hat{H} | \psi_\beta \rangle. \quad (6)$$

路径积分中采用相干态作为(超)完备基底。这里相干态可以指波色相干态、费米相干态以及自旋相干态。它们的性质略有不同，下面分情况讨论。

波色相干态

波色场相干态(未归一化)定义为：

$$|\phi\rangle \equiv \exp \left(\sum_i \phi_i \hat{c}_i^\dagger \right) |0\rangle. \quad (7)$$

这里态的标记 ϕ 是一个 N^d 维矢量，即这个波函数是全部格点相干态的直积。两个相干态内积为：

$$\langle \theta | \phi \rangle = \exp(\bar{\theta} \phi). \quad (8)$$

对相干态的完备关系为：

$$\mathbf{1} = \int e^{-\bar{\phi} \phi} |\phi\rangle \langle \phi| \prod_i \frac{d\bar{\phi}_i d\phi_i}{\pi}. \quad (9)$$

这组超完备基的积分测度来源于复数高斯积分：

$$\int d\bar{\phi} d\phi e^{-\bar{\phi} a \phi} = \frac{\pi}{a}. \quad (10)$$

由于相干态满足的关系：

$$\hat{c}_i |\phi\rangle = \phi_i |\phi\rangle, \quad (11)$$

上述求迹表达式可插入 M 组完备关系：

$$Z = \int e^{-\sum_m \bar{\phi}_m \phi_m} [\mathcal{M}(\phi_1, \phi_M) \cdots \mathcal{M}(\phi_2, \phi_1)] \prod_{m=1}^M \prod_{i_m} \frac{d\bar{\phi}_m^{i_m} d\phi_m^{i_m}}{\pi}. \quad (12)$$

矩阵元为：

$$\begin{aligned} M(\phi_{m+1}, \phi_m) &\simeq \langle \phi_{m+1} | 1 - \frac{\beta}{M} \hat{H}(\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j) | \phi_m \rangle. \\ &= \langle \phi_{m+1} | \phi_m \rangle - \frac{\beta}{M} H(\bar{\phi}_{m+1}, \phi_m) \\ &\simeq 1 + \bar{\phi}_{m+1} \phi_m - \frac{\beta}{M} H(\bar{\phi}_{m+1}, \phi_m) \\ &\simeq \exp \left[\bar{\phi}_{m+1} \phi_m - \frac{\beta}{M} H(\bar{\phi}_{m+1}, \phi_m) \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

其中令 $M+1=1$ ，即 ϕ_m 满足周期边界条件。现在将积分测度项分配给每一个矩阵 \mathcal{M} ：

$$e^{-\bar{\phi}_{m+1} \phi_{m+1}} \mathcal{M}(\phi_{m+1}, \phi_m) \simeq \exp \left[-\bar{\phi}_{m+1} (\phi_{m+1} - \phi_m) - \frac{\beta}{M} H(\bar{\phi}_{m+1}, \phi_m) \right]. \quad (14)$$

在极限 $M \rightarrow \infty$ 下，求和变积分：

$$\frac{\beta}{M} \sum_m \simeq \int_0^\beta d\tau, \quad (15)$$

差分变微分：

$$\phi_{m+1} - \phi_m \simeq \frac{\beta}{M} \partial_\tau \phi(\tau). \quad (16)$$

因此配分函数的表达式为：

$$Z = \int D[\bar{\phi}, \phi] \exp \left[-\bar{\phi} \partial_\tau \phi - H(\bar{\phi}, \phi) \right]. \quad (17)$$

其中泛函积分测度应理解成极限：

$$\int D[\bar{\phi}, \phi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{m=1}^M \prod_{i_m} \frac{d\bar{\phi}_m^{i_m} d\phi_m^{i_m}}{\pi}. \quad (18)$$

注意极限只对虚时间分割做连续化，而实空间指标可以是连续也可以是离散的，取决于哈密顿量是连续模型还是格点模型。我们这里将哈密顿量视作格点模型，但可以取连续极限化为连续模型。

费米相干态

费米子相干态 (未归一化) 定义为:

$$|\psi\rangle \equiv \exp\left(-\sum_i \psi_i \hat{c}_i^\dagger\right) |0\rangle = \bigotimes_i (|0\rangle_i - \psi_i |1\rangle_i). \quad (19)$$

其中 ψ_i 是 Grassmann 数, 相干态之间的内积为:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \exp(\bar{\psi}_1\psi_2). \quad (20)$$

相干态完备关系为:

$$\mathbf{1} = \int e^{-\bar{\psi}\psi} |\psi\rangle\langle\psi| \prod_i d\bar{\psi}_i d\psi_i. \quad (21)$$

测度来源于 Grassmann 高斯积分:

$$\int \exp(-\bar{\psi}a\psi) d\bar{\psi}d\psi = a. \quad (22)$$

同样的方法插入完备关系, 最后配分函数的形式与波色情况相同:

$$Z = \int D[\bar{\psi}, \psi] \exp[-\bar{\psi}\partial_\tau\psi - H(\bar{\psi}, \psi)]. \quad (23)$$

不同之处在于泛函积分测度:

$$\int D[\bar{\psi}, \psi] = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{m=1}^M \prod_{i_m} d\bar{\psi}_m^{i_m} d\psi_m^{i_m}. \quad (24)$$

同时注意, 费米场泛函积分中所取的场满足反周期边界条件。

自旋相干态

我们首先考虑单个自旋相干态, 其定义为:

$$|g(\theta, \phi)\rangle \equiv e^{-i\phi\hat{S}_3} e^{-i\theta\hat{S}_2} |\uparrow\rangle. \quad (25)$$

注意自旋相干态是归一化的。选择 $SU(2)$ 的 Haar 测度 dg , 完备关系为:

$$\mathbf{1} = \int dg |g(\theta, \phi)\rangle\langle g(\theta, \phi)|. \quad (26)$$

自旋相干态的角参数 (θ, ϕ) 是经典角动量方向, 满足关系:

$$\langle g(\theta, \phi) | \hat{\mathbf{S}} | g(\theta, \phi) \rangle = S \mathbf{n}(\theta, \phi) = S(\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta). \quad (27)$$

其中 S 是自旋角动量大小, \mathbf{n} 是自旋对应经典单位矢量。对单体哈密顿量 $\hat{H}(\hat{S}_i)$, 仿照前面的方法, 得到配分函数为:

$$Z = \int dg \exp[-\langle g | \partial_\tau g \rangle - S \cdot H(\mathbf{n})]. \quad (28)$$

其中, 含有虚时间的导数项有特殊的几何意义, 记为:

$$S_{top} = \int_0^\beta \langle g | \partial_\tau g \rangle. \quad (29)$$

为此项作用量贡献，首先考虑时间导数：

$$\partial_\tau |g\rangle = -i\dot{\phi}\hat{S}_3|g\rangle - i\dot{\theta}e^{-i\phi\hat{S}_3}\hat{S}_2e^{i\phi\hat{S}_3}|g\rangle. \quad (30)$$

利用自旋算符满足的关系：

$$e^{-i\phi\hat{S}_i}\hat{S}_je^{i\phi\hat{S}_i} = \hat{S}_j\cos\phi + \epsilon_{ijk}\hat{S}_k\sin\phi. \quad (31)$$

得到：

$$\int_0^\beta d\tau \langle g|\partial_\tau|g\rangle = -iS \int_0^\beta d\tau \dot{\phi}\cos\theta = iS \int_0^\beta d\tau \dot{\phi}(1 - \cos\theta). \quad (32)$$

注意上式中含有 $\dot{\theta}$ 的项互相抵消，第二个等号利用了周期边界条件。因此，作用量写为：

$$S[g] = S \int_0^\beta d\tau [H(\mathbf{n}) + i(1 - \cos\theta)\dot{\phi}]. \quad (33)$$

以上的讨论可完全平行地推广到多自旋体系，相应地自旋多体相干态为单体相干态的直积：

$$|g(\theta, \phi)\rangle = \bigotimes_i |g(\theta_i, \phi_i)\rangle \quad (34)$$

此时 θ, ϕ 是 N^d 个分量的矢量。配分函数为：

$$Z = \int D[g] e^{-S[g]}, \quad (35)$$

作用量为：

$$S[g] = S \int_0^\beta d\tau [H(\mathbf{n}) + i(1 - \cos\theta)\partial_\tau\phi]. \quad (36)$$

形式与单体情形保持一致，至少相应的单分量函数 \mathbf{n}, θ, ϕ 都变为了多分量函数。

时空傅立叶变换

对不显含时间、平移不变的哈密顿量，在动量空间考虑会大大化简问题。这时我们会用到傅立叶变换，然而傅立叶变换前面的归一化系数在不同的地方有着不同的规定。完全不加区分可能在计算过程中算错系数。因此我们在此采用 Atland & Simons, *Condensed Matter Field Theory* 书中的规定。

对于非相对论的多体系统而言，空间分量和时间分量的地位是不同的。特别的，场的时间分量是真正的连续函数，只是在建立路径积分是为了处理方便将其暂时离散化。而空间分量，本质上是离散的格点，当考虑长波低能行为时，将晶格常数视为无穷小量： $a \rightarrow 0$ ，由此将系统连续化。

函数的傅立叶系数

首先考虑函数的傅立叶变换，这里通常考虑的是有限体积内定义的连续函数。设函数 $f(\mathbf{r}, \tau)$ 是 $d+1$ 维空间的一个函数，其中 \mathbf{r} 定义域为 L^d 空间内， τ 定义域为 $[0, \beta]$ ，且函数满足周期边界条件（对费米场，满足反周期边界条件）。因此，其动量-频率空间的分量是离散的。傅立叶变换系数规定为：

$$f_q = \int_0^\beta d\tau \int d^d r f(\mathbf{r}, \tau) e^{-iq \cdot \mathbf{r}}, \quad (37)$$

$$f(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\beta L^d} \sum_q f_q e^{iq \cdot \mathbf{r}} \quad (38)$$

其中 4 动量 $q \equiv (\mathbf{q}, \omega_n)$, 内积 $q \cdot r \equiv \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega_n \tau$, 对 q 求和代表对 4 动量求和。

采用这种规定的一个优势是当取热力学极限 $L \rightarrow \infty$ 时, 动量积分会变为一个紧凑的形式:

$$\frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q}} = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \quad (39)$$

同时, 频率求和也往往带上系数 $1/\beta$:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} h(\omega_n) = \frac{\xi}{2\pi i} \oint dz n_\xi(z) h(-iz). \quad (40)$$

场的傅立叶系数

场 $\phi(\mathbf{r}, \tau)$ 的傅立叶变换系数定义与函数不同。我们将分别考虑空间和时间的傅立叶变换。对于空间变换, 首先重申我们讨论的模型本质是格点模型, 场的“空间”坐标本质上是离散的, 即:

$$\phi(\mathbf{r}, \tau) = \phi(\mathbf{r}_i, \tau), \quad (41)$$

其中 i 是格点指标, 而场的取值由降算符作用

$$\hat{c}_i |\phi(\tau)\rangle = \phi(\mathbf{r}_i, \tau) |\phi(\tau)\rangle \quad (42)$$

来确定。因此场的傅立叶变换可以由算符的傅立叶变换得到:

$$\hat{c}_{\mathbf{p}} |\phi(\tau)\rangle = \phi(\mathbf{p}, \tau) |\phi(\tau)\rangle. \quad (43)$$

而格点升降算符的傅立叶变换的约定为:

$$\hat{c}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{N^{d/2}} \sum_i e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_i} \hat{c}_i, \quad (44)$$

$$\hat{c}_i = \frac{1}{N^{d/2}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_i} \hat{c}_{\mathbf{p}}. \quad (45)$$

这种约定保持了算符的正则对易关系, 因此几乎是一种“canonical”的约定。在这种规定下, 格点场的空间傅立叶变换规定为:

$$\phi_{\mathbf{p}}(\tau) = \frac{1}{N^{d/2}} \sum_i e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_i} \phi(\mathbf{r}_i, \tau), \quad (46)$$

$$\phi(\mathbf{r}_i, \tau) = \frac{1}{N^{d/2}} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_i} \phi_{\mathbf{p}}(\tau). \quad (47)$$

现在考虑连续模型, 这时我们对格点模型做连续近似:

$$\phi(\mathbf{r}, \tau) \simeq \frac{1}{a^{d/2}} \phi(\mathbf{r}_i, \tau), \quad (48)$$

$$a^d \sum_i \simeq \int d^d r. \quad (49)$$

其中第一个等式中的归一化由

$$\sum_i \bar{\phi}(\mathbf{r}_i, \tau) \phi(\mathbf{r}_i, \tau) = \int d^d r \bar{\phi}(\mathbf{r}, \tau) \phi(\mathbf{r}, \tau) \quad (50)$$

确定，由此连续场的傅立叶变换：

$$\phi_{\mathbf{p}}(\tau) = \frac{1}{L^{d/2}} \int d^d r \phi(\mathbf{r}, \tau) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad (51)$$

$$\phi(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{p}} \phi_{\mathbf{p}}(\tau) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}. \quad (52)$$

注意连续极限只改变了场 $\phi(\mathbf{r}_i, \tau)$ ，其傅立叶分量仍然是相同的离散值。

下面考虑频率空间的傅立叶变换。频率空间的傅立叶变换由不同的规定，Atland & Simons 书中规定为：

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^\beta d\tau \phi(\tau) e^{i\omega_n \tau}, \quad (53)$$

$$\phi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n \phi_n e^{-i\omega_n \tau}. \quad (54)$$

在这种规定下，自由粒子作用量

$$S = \int_0^\beta d\tau \bar{\phi}(\tau) (\partial_\tau + \epsilon) \phi(\tau) \quad (55)$$

的傅立叶变换为：

$$S = \sum_n \bar{\phi}_n (-i\omega_n + \epsilon) \phi_n. \quad (56)$$

注意此时傅立叶分量 ϕ_n 带有量纲 $[E^{-1/2}]$ ，高斯积分时需平衡量纲：

$$\int D[\bar{\phi}, \phi] e^{-S[\bar{\phi}, \phi]} \simeq \prod_n [\beta(-i\omega_n + \epsilon)]^{-\zeta}. \quad (57)$$

以上的等价过程中，我们没有仔细考虑积分测度。由于积分测度可以相差任意大的（无量纲）系数。

算符在动量空间求迹

对于多个场的路径积分，有时会将部分高斯型的场积掉，在将结果放到指数上，得到有效作用量。考虑某个高斯型场泛函积分：

$$\int_0^\beta d\tau \int d^d r \bar{\phi}(\mathbf{r}, \tau) \hat{F} \phi(\mathbf{r}, \tau), \quad (58)$$

其中算符 \hat{F} 一般含有其他场。我们可以将这个高斯形的场积掉，结果为

$$\det[\beta \hat{F}]^{-\zeta}. \quad (59)$$

将行列式放到指数上，相当于在作用量上加上：

$$\Delta S = \ln \det [\beta \hat{F}] = \text{Tr} \ln [\beta \hat{F}]. \quad (60)$$

在很多时候，我们都可以省略对数中的 β 项。因为所需计算的量往往都依赖于对数项的导数，如当我们对算符 \hat{F} 中包含的某参数 α 求导：

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \Delta S = \text{Tr} \left[\hat{F}^{-1} \cdot \frac{\partial \hat{F}}{\partial \alpha} \right]. \quad (61)$$

对于求迹的计算，我们采用正交完备基底：

$$|\mathbf{p}, \omega_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta L^d}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - i\omega_n \tau}. \quad (62)$$

对任意算符 \hat{F} ，其矩阵元为：

$$\langle \mathbf{p}_1, \omega_n | \hat{F} | \mathbf{p}_2, \omega_m \rangle = \frac{T}{L^d} \int_0^\beta d\tau \int d^d r \, e^{-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r} + i\omega_n \tau} \hat{F} e^{i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r} - i\omega_m \tau} \quad (63)$$

比如，对于时空求导算符 ∂_τ, ∇ ，其矩阵元为：

$$\langle \mathbf{p}_1, \omega_n | \partial_\tau | \mathbf{p}_2, \omega_m \rangle = -i\omega_n \delta_{mn} \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}, \quad (64)$$

$$\langle \mathbf{p}_1, \omega_n | \nabla | \mathbf{p}_2, \omega_m \rangle = i\mathbf{p}_1 \delta_{mn} \delta_{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}. \quad (65)$$

而对于函数 $f(\mathbf{r}, \tau)$ ，矩阵元为：

$$\langle \mathbf{p}_1, \omega_n | f(\mathbf{r}, \tau) | \mathbf{p}_2, \omega_m \rangle = \frac{T}{L^d} f_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2, n-m}. \quad (66)$$

其中 $f_{\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2, n-m}$ 是前面定义的普通函数的傅立叶分量。写下算符在动量空间中具体矩阵元，就可以将求迹表达式具体写下来。