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：

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

场论中的核心问题是计算体系的热力学配分函数，即：

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

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：

$$Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\frac{\beta}{M}\hat{H}}\cdots e^{-\frac{\beta}{M}\hat{H}}\right]. \tag{3}$$

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

$$\sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| = \mathbf{1}. \tag{4}$$

这样，配分函数可变为矩阵连乘形式：

$$Z = \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_M} \mathcal{M}_{\alpha_1,\alpha_2}\cdots\mathcal{M}_{\alpha_M,\alpha_1}. \tag{5}$$

其中 $\mathcal{M}$ 的矩阵元为：

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

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：

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

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：

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

对相干态的完备关系为：

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

这组超完备基的积分测度来源于复数高斯积分：

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

由于相干态满足的关系：

$$\hat{c}_i|\phi\rangle = \phi_i|\phi\rangle, \tag{11}$$

上述求迹表达式可插入 M 组完备关系：

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

矩阵元为：

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

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 $\mathcal{M}$：

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

在极限 $M\to\infty$ 下，求和变积分：

$$\frac{\beta}{M}\sum_m \simeq \int_0^\beta d\tau, \tag{15}$$

差分变微分：

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

因此配分函数的表达式为：

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

其中泛函积分测度应理解成极限：

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

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:

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

其中 ψ_i 是 Grassmann 数，相干态之间的内积为:

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

相干态完备关系为:

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

测度来源于 Grassmann 高斯积分:

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

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:

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

不同之处在于泛函积分测度:

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

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:

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

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:

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

自旋相干态的角参数 (θ,ϕ) 是经典角动量方向，满足关系:

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

其中 S 是自旋角动量大小，$\boldsymbol{n}$ 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:

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

其中，含有虚时间的导数项有特殊的几何意义，记为:

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

为此项作用量贡献，首先考虑时间导数：

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

利用自旋算符满足的关系：

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

得到：

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

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：

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

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：

$$|g(\theta,\phi)\rangle = \bigotimes_i |g(\theta_i,\phi_i)\rangle \tag{34}$$

此时 θ,ϕ 是 N^d 个分量的矢量。配分函数为：

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

作用量为：

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

形式与单体情形保持一致，至少相应的单分量函数 $\boldsymbol{n},\theta,\phi$ 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：$a\to 0$ ，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 $f(\boldsymbol{r},\tau)$ 是 $d+1$ 维空间的一个函数，其中 $\boldsymbol{r}$ 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：

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

$$f(\boldsymbol{r},\tau) = \frac{1}{\beta L^d}\sum_q f_qe^{iq\cdot r} \tag{38}$$

其中 4 动量 $q \equiv (\boldsymbol{q}, \omega_n)$，内积 $q \cdot r \equiv \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r} - \omega_n \tau$，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 $L \to \infty$ 时，动量积分会变为一个紧凑的形式：

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

同时，频率求和也往往带上系数 $1/\beta$：

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

场的傅立叶系数

场 $\phi(\boldsymbol{r}, \tau)$ 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：

$$\phi(\boldsymbol{r}, \tau) = \phi(\boldsymbol{r}_i, \tau), \tag{41}$$

其中 i 是格点指标，而场的取值由降算符作用

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

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：

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

而格点升降算符的傅立叶变换的约定为：

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

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

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：

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

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

现在考虑连续模型，这时我们对格点模型做连续近似：

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

$$a^d \sum_i \simeq \int d^d r. \tag{49}$$

其中第一个等式中的归一化由

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

确定，由此连续场的傅立叶变换：

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

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

注意连续极限只改变了场 $\phi(\boldsymbol{r}_i,\tau)$，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：

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

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

在这种规定下，自由粒子作用量

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

的傅立叶变换为：

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

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：

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

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：

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

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

$$\det[\beta\hat{F}]^{-\zeta}. \tag{59}$$

将行列式放到指数上，相当于在作用量上加上：

$$\Delta S = \ln\det\left[\beta\hat{F}\right] = \mathrm{Tr}\ln\left[\beta\hat{F}\right]. \tag{60}$$

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：

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\Delta S = \mathrm{Tr}\left[\hat{F}^{-1}\cdot\frac{\partial\hat{F}}{\partial\alpha}\right]. \tag{61}$$

对于求迹的计算，我们采用正交完备基底：

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

对任意算符 $\hat{F}$，其矩阵元为：

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

比如，对于时空求导算符 ∂_τ,∇，其矩阵元为：

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{p}_1,\omega_n|\partial_\tau|\boldsymbol{p}_2,\omega_m\rangle &= -i\omega_n\delta_{mn}\delta\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2, &(64)\\ \langle\boldsymbol{p}_1,\omega_n|\nabla|\boldsymbol{p}_2,\omega_m\rangle &= i\boldsymbol{p}_1\delta_{mn}\delta\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2. &(65)\end{aligned}$$

而对于函数 $f(\boldsymbol{r},\tau)$，矩阵元为：

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

其中 $f_{\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2,n-m}$ 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。