多体系统的量子化方案

任杰

对于多体系统，有两种平行的量子化方案：正则量子化和路径积分量子化。相比而言，路径积分有更简洁优雅的形式，而正则量子化有着“更严格”的量子力学结构。本文希望做到两点：

- 更详细地讨论两种框架下定义中一些容易忽略的小细节。
- 将两个框架的计算放在一起，比较它们的相同与不同之处。

1 傅立叶变换

两种框架内处理的模型基本都在实空间定义，但在计算时变换到动量和频率空间。为了不弄乱变换前后的系数，这里总结对场算符和格林函数的傅立叶变换 (它们的系数是不同的!)。大多数多体物理书中都采用以下的系数。

1.1 场算符变换

首先在薛定谔绘景下，场算符不含时，其傅立叶变换采用“开根号”归一化：

$$\hat{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{c}_k, \tag{1}$$

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^d x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{\psi}(\boldsymbol{x}). \tag{2}$$

其中算符 $c_{\boldsymbol{k}}$ 是正则量子化中的 $\boldsymbol{k}$ 动量粒子湮灭算符，满足正则对易关系

$$\left[\hat{c}_{\boldsymbol{k}}, \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right]_{\zeta} = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}. \tag{3}$$

该算符是严格的量子力学算符，场算符 $\psi(\boldsymbol{x})$ 可看出此湮灭算符的傅立叶变换。

引入时间 (虚时间) 演化后，海森堡绘景下场算符定义为

$$\hat{c}_{\boldsymbol{k}}(\tau) = e^{+\hat{H}\tau} \hat{c}_{\boldsymbol{k}} e^{-\hat{H}\tau}, \tag{4}$$

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, \tau) = e^{+\hat{H}\tau} \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) e^{-\hat{H}\tau}. \tag{5}$$

正则量子化下，算符往往只变换到动量空间而非频率空间。而路径积分方案中情况不同，我们会通过相干态表象将场算符变为一个数

$$\hat{\psi}\left(\boldsymbol{x},\tau\right)\left|\psi\right\rangle = \psi\left(\boldsymbol{x},\tau\right)\left|\psi\right\rangle. \tag{6}$$

计算路径积分时我们往往将此数变换到动量、频率空间：

$$\psi\left(\boldsymbol{x},\tau\right) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{n} e^{+ik\cdot x}\psi_{\boldsymbol{k},n}, \tag{7}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k},n} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}}\int_0^\beta d\tau\int d^dx\ e^{-ik\cdot x}\psi\left(\boldsymbol{x},\tau\right). \tag{8}$$

变换归一化系数和算符定义是一样的，只是这里的量均是数而非算符。

1.2 格林函数变换

与场算符不同，函数 (包括格林函数、势函数等) 的傅立叶变换为的归一化为：

$$f\left(\boldsymbol{x}\right) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f_{\boldsymbol{k}}, \tag{9}$$

$$f_{\boldsymbol{k}} = \int d^dx e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f\left(\boldsymbol{x}\right). \tag{10}$$

这样归一化下，热力学极限 (连续极限) 的傅立叶变换变为：

$$f\left(\boldsymbol{x}\right) = \int\frac{d^dk}{\left(2\pi\right)^d} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f_{\boldsymbol{k}}. \tag{11}$$

引入虚时间变量，同时总是假设哈密顿量不含时间，平移不变。此时格林函数为：

$$G\left(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau'\right) = G\left(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}';\tau-\tau'\right). \tag{12}$$

其傅立叶变换为：

$$G\left(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau'\right) = \frac{1}{\beta V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{n} e^{+ik\cdot x} G_{\boldsymbol{k},n}, \tag{13}$$

$$G_{\boldsymbol{k},n} = \int d^dx\int_0^\beta d\tau\ e^{-ik\cdot x} G\left(\boldsymbol{x};\tau\right). \tag{14}$$

2 自由场格林函数

2.1 格林函数定义

无论何种量子化方案下，格林函数定义都可写为：

$$G(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau') = -\left\langle \hat{\psi}(\boldsymbol{x},\tau)\,\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}',\tau')\right\rangle_{\tau}, \tag{15}$$

其中 $\langle\cdots\rangle_{\tau}$ 代表取时序的热力学平均值。这个平均在不同量子化方案下有区别。我们所有的计算都会在动量空间完成，因此目标是得到动量、频率空间的格林函数 $G_{\boldsymbol{k},n}$.

2.1.1 正则量子化

正则量子化方案下：

$$\langle\cdots\rangle_{\tau} := -\frac{1}{\mathcal{Z}}Tr\left[e^{-\beta H}T_{\tau}(\cdots)\right], \tag{16}$$

其中配分函数为:

$$\mathcal{Z} = Tr\left[e^{-\beta H}\right]. \tag{17}$$

空间傅立叶变换在两种方案下是一致的，格林函数定义包含场算符二次型，因此格林函数的傅立叶系数分解成两个“开平方系数”恰好和场算符傅立叶系数相容：

$$G_{\boldsymbol{k}}(\tau-\tau') = -\left\langle \hat{c}_{\boldsymbol{k}}(\tau)\,\hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}(\tau')\right\rangle_{\tau}, \tag{18}$$

频率空间格林函数表达为：

$$G_{\boldsymbol{k},n} = \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n\tau}G_{\boldsymbol{k}}(\tau). \tag{19}$$

2.1.2 路径积分量子化

路径积分量子化下：

$$\langle\cdots\rangle_{\tau} := -\frac{1}{\mathcal{Z}}\int\mathcal{D}\left[\psi^{\dagger},\psi\right]e^{-S\left[\psi^{\dagger},\psi\right]}(\cdots), \tag{20}$$

其中作用量为

$$S\left[\psi^{\dagger},\psi\right] = \int d^dx\int_0^{\beta}\tau\left[\psi^{\dagger}\partial_{\tau}\psi + \hat{H} - \mu\hat{N}\right], \tag{21}$$

配分函数为:

$$\mathcal{Z} = \int\mathcal{D}\left[\psi^{\dagger},\psi\right]e^{-S\left[\psi^{\dagger},\psi\right]}. \tag{22}$$

注意路径积分量子化下，我们会将算符 $\hat{\psi}$ 换为其在相干态下的本征值 ψ, 这是一个交换或反交换 (Grassmann) 数。由于场泛函积分自动是编时的，频率格林函数可以简单写为：

$$G_{\boldsymbol{k},n} = -\left\langle\psi_{\boldsymbol{k},n}\bar{\psi}_{\boldsymbol{k},n}\right\rangle_{\tau} = -\zeta\left\langle\bar{\psi}_{\boldsymbol{k},n}\psi_{\boldsymbol{k},n}\right\rangle_{\tau}. \tag{23}$$

2.2 自由场格林函数计算

首先假定自由场哈密顿量已经对角化为:

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}. \tag{24}$$

此时海森堡绘景下粒子算符的时间演化为:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) &= e^{-(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}, \qquad (25) \\ \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) &= e^{+(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\alpha}. \qquad (26) \end{aligned}$$

而相干态表象下，哈密顿量在场构形 ψ 下的值为:

$$H\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\alpha} \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} \bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha} \psi_{\boldsymbol{k}\alpha}. \tag{27}$$

拉氏量为:

$$S\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\alpha} \sum_{n} \bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n} \left[-i\omega_n + \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} - \mu\right] \psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}. \tag{28}$$

2.2.1 正则量子化

对自由场，格林函数:

$$G_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) = -\theta(\tau) e^{-(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} n_{\zeta}(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}) - \theta(-\tau) e^{+(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} \left(1 - n_{\zeta}(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha})\right). \tag{29}$$

傅立叶变换得到:

$$\begin{aligned} G_{\boldsymbol{k}\alpha,n} &= \int_0^{\beta} d\tau\ e^{i\omega_n\tau} G_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) \\ &= -\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)} - \zeta} \int_0^{\beta} d\tau\ e^{(i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} + \mu)\tau} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} + \mu}. \qquad (30) \end{aligned}$$

2.2.2 路径积分量子化

先计算生成函数:

$$\mathcal{Z}_{\alpha}\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}, J_{\boldsymbol{k},n}\right] = \int d\left(\bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n}, \psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\right) \exp\left[-\bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\left(-i\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} - \mu\right)\psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n} - \bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n} J_{\boldsymbol{k},n} - \bar{J}_{\boldsymbol{k},n} \psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\right]. \tag{31}$$

积分测度由高斯积分

$$\int d\left(\bar{\psi}_n, \psi_n\right) e^{-\bar{\psi}_n \epsilon \psi_n} = \left(\beta\epsilon\right)^{-\zeta}. \tag{32}$$

由此得到生成函数为

$$\mathcal{Z}_\alpha\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}, J_{\boldsymbol{k},n}\right] = \left[\beta\left(-i\omega + \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} - \mu\right)\right]^{-\zeta} \exp\left(-\frac{\bar{J}_{\boldsymbol{k},n} J_{\boldsymbol{k},n}}{i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} + \mu}\right). \tag{33}$$

格林函数为

$$\begin{aligned} G_{\boldsymbol{k}\alpha,n} &= -\frac{1}{\mathcal{Z}\left[0\right]} \left.\frac{\partial^2 \mathcal{Z}\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}, J_{\boldsymbol{k},n}\right]}{\partial \bar{J}_{\boldsymbol{k},n} \partial J_{\boldsymbol{k},n}}\right|_{\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}, J_{\boldsymbol{k},n}=0} \\ &= \frac{1}{i\omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} + \mu}. \end{aligned} \tag{34}$$