多体系统的路径积分量子化

任杰

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。

函数的傅立叶系数

首先考虑函数的傅立叶变换，设函数 $f(\boldsymbol{r},\tau)$ 是 $d+1$ 维空间的一个函数。其傅立叶变换规定为：

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

$$f_q = \int_0^\beta d\tau \int d^d r\ f(\boldsymbol{r},\tau) e^{-iq\cdot r}. \tag{2}$$

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.

场的傅立叶系数

对场 $\phi(\boldsymbol{r},\tau)$ 的傅立叶变换，采用另一套系数：

$$\psi(\boldsymbol{r},\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta L^d}}\sum_p \psi_p e^{iq\cdot r}, \tag{3}$$

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{\beta L^d}}\int_0^\beta d\tau \int d^d r\ \psi(\boldsymbol{r},\tau) e^{-iq\cdot r}. \tag{4}$$

傅立叶变换性质

考虑自由场的作用量：

$$S[\bar\psi,\psi] = \int_0^\beta d\tau \int d^d r \bar\psi(\boldsymbol{r},\tau)\left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) - \mu\right)\psi(\boldsymbol{r},\tau). \tag{5}$$

简单的量纲分析可知场的量纲为 $[L^{-d}]$

0.1 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：

$$\hat{\psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{c}_k, \tag{6}$$

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^d x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{\psi}(\boldsymbol{x}). \tag{7}$$

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

$$\left[\hat{c}_{\boldsymbol{k}}, \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}\right]_{\zeta} = \delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}. \tag{8}$$

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

$$\hat{c}_{\boldsymbol{k}}(\tau) = e^{+\hat{H}\tau} \hat{c}_{\boldsymbol{k}} e^{-\hat{H}\tau}, \tag{9}$$

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, \tau) = e^{+\hat{H}\tau} \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) e^{-\hat{H}\tau}. \tag{10}$$

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

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, \tau) |\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{x}, \tau) |\psi\rangle. \tag{11}$$

计算路径积分时我们往往将此数变换到动量、频率空间：

$$\psi(\boldsymbol{x}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{n} e^{+ik\cdot x} \psi_{\boldsymbol{k},n}, \tag{12}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k},n} = \frac{1}{\sqrt{\beta V}} \int_0^{\beta} d\tau \int d^d x \; e^{-ik\cdot x} \psi(\boldsymbol{x}, \tau). \tag{13}$$

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。

0.2 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：

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f_{\boldsymbol{k}}, \tag{14}$$

$$f_{\boldsymbol{k}} = \int d^d x e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}). \tag{15}$$

这样归一化下，热力学极限 (连续极限) 的傅立叶变换变为：

$$f(\boldsymbol{x}) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f_{\boldsymbol{k}}. \tag{16}$$

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：

$$G(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau') = G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}';\tau-\tau'). \tag{17}$$

其傅立叶变换为：

$$G(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau') = \frac{1}{\beta V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{n} e^{+ik\cdot x} G_{\boldsymbol{k},n}, \tag{18}$$

$$G_{\boldsymbol{k},n} = \int d^d x \int_0^\beta d\tau\ e^{-ik\cdot x} G(\boldsymbol{x};\tau). \tag{19}$$

1 自由场格林函数

1.1 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：

$$G(\boldsymbol{x},\tau;\boldsymbol{x}',\tau') = -\left\langle \hat{\psi}(\boldsymbol{x},\tau)\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',\tau')\right\rangle_\tau, \tag{20}$$

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 $G_{\boldsymbol{k},n}$.

1.1.1 正则量子化

正则量子化方案下：

$$\langle\cdots\rangle_\tau := -\frac{1}{\mathcal{Z}} Tr\left[e^{-\beta H} T_\tau(\cdots)\right], \tag{21}$$

其中配分函数为:

$$\mathcal{Z} = Tr\left[e^{-\beta H}\right]. \tag{22}$$

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：

$$G_{\boldsymbol{k}}(\tau-\tau') = -\left\langle \hat{c}_{\boldsymbol{k}}(\tau)\,\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}}(\tau')\right\rangle_\tau, \tag{23}$$

频率空间格林函数表达为:

$$G_{\boldsymbol{k},n} = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} G_{\boldsymbol{k}}(\tau). \tag{24}$$

1.1.2 路径积分量子化

路径积分量子化下：

$$\left\langle \cdots \right\rangle_\tau := -\frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\left[\psi^\dagger, \psi\right] e^{-S\left[\psi^\dagger,\psi\right]} \left(\cdots\right), \tag{25}$$

其中作用量为

$$S\left[\psi^\dagger, \psi\right] = \int d^d x \int_0^\beta \tau \left[\psi^\dagger \partial_\tau \psi + \hat{H} - \mu \hat{N}\right], \tag{26}$$

配分函数为:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\left[\psi^\dagger, \psi\right] e^{-S\left[\psi^\dagger,\psi\right]}. \tag{27}$$

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：

$$G_{\boldsymbol{k},n} = -\left\langle \psi_{\boldsymbol{k},n} \bar{\psi}_{\boldsymbol{k},n} \right\rangle_\tau = -\zeta \left\langle \bar{\psi}_{\boldsymbol{k},n} \psi_{\boldsymbol{k},n} \right\rangle_\tau. \tag{28}$$

1.2 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：

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_\alpha \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}. \tag{29}$$

此时海森堡绘景下粒子算符的时间演化为：

$$\hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) = e^{-(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\alpha}, \tag{30}$$

$$\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}(\tau) = e^{+(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu)\tau} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\alpha}. \tag{31}$$

而相干态表象下，哈密顿量在场构形 ψ 下的值为:

$$H\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_\alpha \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} \bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha} \psi_{\boldsymbol{k}\alpha}. \tag{32}$$

拉氏量为：

$$S\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_\alpha \sum_n \bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n} \left[-i\omega_n + \epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha} - \mu\right] \psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}. \tag{33}$$

1.2.1 正则量子化

对自由场，格林函数:

$$G_{\boldsymbol{k}\alpha}\left(\tau\right)=-\theta\left(\tau\right)e^{-\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu\right)\tau}n_{\zeta}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}\right)-\theta\left(-\tau\right)e^{+\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu\right)\tau}\left(1-n_{\zeta}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}\right)\right). \tag{34}$$

傅立叶变换得到:

$$\begin{aligned} G_{\boldsymbol{k}\alpha,n} &= \int_0^\beta d\tau\ e^{i\omega_n\tau}G_{\boldsymbol{k}\alpha}\left(\tau\right) \\ &= -\frac{1}{e^{\beta\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu\right)}-\zeta}\int_0^\beta d\tau\ e^{\left(i\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}+\mu\right)\tau} \\ &= \frac{1}{i\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}+\mu}. \end{aligned} \tag{35}$$

1.2.2 路径积分量子化

先计算生成函数:

$$\mathcal{Z}_\alpha\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n},J_{\boldsymbol{k},n}\right]=\int d\left(\bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n},\psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\right)\exp\left[-\bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\left(-i\omega+\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu\right)\psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}-\bar{\psi}_{\boldsymbol{k}\alpha,n}J_{\boldsymbol{k},n}-\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}\psi_{\boldsymbol{k}\alpha,n}\right]. \tag{36}$$

积分测度由高斯积分

$$\int d\left(\bar{\psi}_n,\psi_n\right)e^{-\bar{\psi}_n\epsilon\psi_n}=\left(\beta\epsilon\right)^{-\zeta}. \tag{37}$$

由此得到生成函数为

$$\mathcal{Z}_\alpha\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n},J_{\boldsymbol{k},n}\right]=\left[\beta\left(-i\omega+\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}-\mu\right)\right]^{-\zeta}\exp\left(-\frac{\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}J_{\boldsymbol{k},n}}{i\omega-\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}+\mu}\right). \tag{38}$$

格林函数为

$$\begin{aligned} G_{\boldsymbol{k}\alpha,n} &= -\frac{1}{\mathcal{Z}\left[0\right]}\left.\frac{\partial^2\mathcal{Z}\left[\bar{J}_{\boldsymbol{k},n},J_{\boldsymbol{k},n}\right]}{\partial\bar{J}_{\boldsymbol{k},n}\partial J_{\boldsymbol{k},n}}\right|_{\bar{J}_{\boldsymbol{k},n},J_{\boldsymbol{k},n}=0} \\ &= \frac{1}{i\omega-\epsilon_{\boldsymbol{k}\alpha}+\mu}. \end{aligned} \tag{39}$$