

无杂质 Peierls 相变温度的多体理论计算

squid

2022 年 1 月 23 日

摘要

低温时, 在一维体系中可以发生特殊的相变, Peierls 相变。这是一种金属绝缘体相变, 源自电声相互作用导致的晶格畸变。我们同时在温度高于相变温度和低于相变温度的情况下研究了这一过程, 分别用声子谱的方法和反常格林函数的方法计算了相变温度。最后在补充证明中, 我们提供了 Matsubara 自能傅里叶变化和虚频率求和的计算细节, 以及最终求解相变温度所需要的特殊函数知识。

目录

1	概述	2
1.1	Peierls 相变简介	2
1.2	$2p_F$ 声子	2
1.3	声子频率与晶格稳定性	3
1.4	相变温度以下的反常格林函数	3
2	高于相变温度的计算	5
2.1	单圈自能函数的计算	5
2.2	计算相变温度	6
3	低于相变温度的计算	7
3.1	计算 $F(i\epsilon_p, p)$	7
3.2	导出自洽方程	8
4	补充证明	9
4.1	(23)式的证明	9
4.2	(28)式与(49)式的证明	10
4.3	(32)式的证明	10

1 概述

1.1 Peierls 相变简介

Peierls 相变是一类特殊的金属绝缘体相变，出现于一维晶格中。在能带论框架下，考虑晶格常数为 a 的一维原子链，每个原子带一个价电子。电子能态占据为半满，如图 1(a) 所示，第一布里渊区范围为 $[-\pi/a, \pi/a]$ ，电子占据范围为 $[-p_F, p_F]$ 。

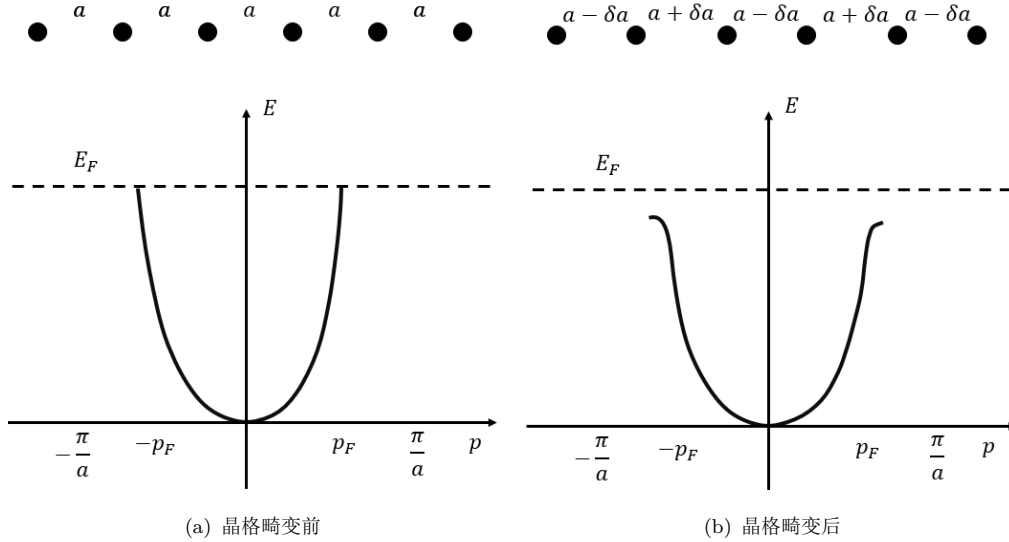


图 1: 单价电子一维原子链中的 Peierls 相变

现考虑一晶格畸变，即，相邻原子间距变为 $a - \delta a$ 和 $a + \delta a$ ，原先的等距原子链二聚化，每个原胞里有两个电子，晶格常数为 $2a$ 。此时，第一布里渊区范围为 $[-\pi/2a, \pi/2a]$ ，电子占据为满带。由布里渊区边界的简并微扰，靠近费米面处电子能量将会下降，如图 1(b) 所示。

若晶格畸变所需的能量小于电子能量下降所释放的能量，上述过程就会发生，体系从金属变为绝缘体。这称为 Peierls 相变。上面的例子中相变前能带占据为半满，但这不是必须的。对于任意占据状况 $[-p_F, p_F]$ ，相变后晶格常数变为 π/p_F ，电子占据变为满带。

由于温度较高时，晶格振动剧烈，稳定畸变难以产生；而零温时，因为上述讨论中的 δa 可以任意小，所以电子能量下降占主导，晶格畸变可以发生。于是 Peierls 相变应存在一临界温度。

在后面的内容中，利用多体理论方法，我们将从在高于相变温度的区域以及低于相变温度的区域求出相变温度。不过在此之前，我们需要进一步考察晶格畸变前后系统发生的变化。

由于电子自旋在这个问题中无明显作用，故以下讨论中不考虑电子自旋。

1.2 $2p_F$ 声子

晶体的物性主要由费米面附近的电子决定。考虑电子微小的激发，对于晶格畸变前的情况，由于费米面在第一布里渊区之内，这部分激发分布在费米面附近的薄球壳（小区间）内；晶格畸变之后，因为此时费米面位置正好就是第一布里渊区边界，所以超出这一边界的激发将经由 Umklapp 过程平移若干个倒格矢回到第一布里渊区。

对于微小的激发，只需平移一个倒格矢，即 $2p_F$ 。而这意味着电子被一个动量为 $2p_F$ 的声子散射。由于晶格畸变后，第一布里渊区内能态被填满，故相比于晶格畸变前，这种 Umklapp 过程将非常频繁。

这告诉我们 $2p_F$ 声子与电子之间的相互作用是引发 Peierls 相变的重要原因。后面的分析中将会额外关注动量为 $2p_F$ 的声子。

1.3 声子频率与晶格稳定性

Peierls 相变中涉及晶格畸变，我们需要一个参数来描述晶格的稳定性。高于相变温度时，声子频率可以作为这一参数。

在晶格振动的量子化中，频率为 ω 的声子，对应着频率为 ω 的格波的能量量子

$$u_n = A e^{i(\omega(k)t - kx_n)} \quad (1)$$

$\omega(k)$ 代表色散关系， k 是波矢。通常而言， ω 为实数，这样(1)式代表格点的集体振动， u_n 在一个周期内取平均为 0。但当 ω 为虚数时，(1)式中的指数项将随时间趋于无穷或趋于 0，即，此时晶格不再稳定。 ω 为虚数对应着 $\omega^2 < 0$ ，所以要判断晶格畸变是否发生，只需要检查 ω^2 的正负。

注意到自由声子的格林函数为

$$D_0(\omega, k) = \frac{1}{\omega - \omega(k) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega(k) - i\delta} = \frac{2\omega(k)}{\omega^2 - \omega^2(k)} \quad (2)$$

将其取倒数并令其为 0 得

$$D_0^{-1}(\omega, k) = \frac{\omega^2 - \omega^2(k)}{2\omega(k)} = 0 \quad (3)$$

$$\omega^2 = \omega^2(k) \quad (4)$$

于是，令自由声子格林函数倒数为 0，即可得到自由声子的色散关系。现在考虑电子对声子的作用。在温度高于相变温度时，在微扰论框架下讨论，声子的传播子满足 Dyson 方程

$$D^{-1}(i\omega_m, k) = D_0^{-1}(i\omega_m, k) - \Pi(i\omega_m, k) \quad (5)$$

其中 $\Pi(i\omega_m, k)$ 为声子自能修正， $\omega_m = 2m\pi kT$ 为 Matsubara 虚频率， m 为整数。按照 $i\omega_m \rightarrow \omega \pm i\delta$ 进行替换，模仿自由声子的情形，容易想到，从 $D^{-1}(\omega, k) = 0$ 中可以解出有电声相互作用时声子的色散关系。

设想温度不断下降，降至 T_{p0} 时， $\omega^2(k, T_{p0})$ 出现除 $k = 0$ 之外的零点。由 1.2 结中对 $2p_F$ 声子的分析可知，这个零点的位置应为 $k = 2p_F$ 。如果要求 $\omega^2(2p_F, T_{p0}) = 0$ ，那么我们将得到一个 T_{p0} 的方程。由于替换规则为 $i\omega_m \rightarrow \omega$ ，我们可以直接令(5)式为 0 并取 $\omega_m = 0, k = 2p_F$ ，从中可以解出 T_{p0}

$$D_0^{-1}(0, 2p_F, T_{p0}) = \Pi(0, 2p_F, T_{p0}) \quad (6)$$

1.4 相变温度以下的反常格林函数

在找到相变温度以下可以用来描述相变的特征参数之前，先研究一下系统状态。在相变温度以下，晶格畸变，但相变前后系统的哈密顿量并没有改变，只是本征态发生改变。电声相互作用哈密顿量为

$$H = \sum_p \xi_p a_p^\dagger a_p + \sum_{k \neq 0} \omega_k b_k^\dagger b_k + \sum_{k \neq 0, p} g_k a_{p+k}^\dagger a_p (b_k + b_{-k}^\dagger), \quad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu, g_k = g \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \quad (7)$$

其中 a_p^\dagger, a_p 为电子产生湮灭算符， b_k^\dagger, b_k 为声子产生湮灭算符， g 为电声相互作用耦合常数。电声相互作用通常写为正比于 $\sqrt{\frac{1}{2M\omega}}$ 的形式，而对简谐振动 $\omega^2 \propto \frac{1}{M}$ ，故将 g_k 写为如上形式。 g 与原子核质量无关。

为研究相变前后系统的变化, 考虑电子的“格林函数” $G(t, p) = -i \langle T a_p(t) a_p^\dagger(0) \rangle$ 。注意, 这里的处理有别于微扰论, 并不考虑绝热地加上相互作用。也就是说, 本征态热力学平均中所用的本征态在整个时间轴上都是(7)式所示哈密顿量的本征态。所以与微扰论不同, $a_p^\dagger(-\infty)$ 作用到 $t = -\infty$ 本征态上并不仅仅是增加了一个动量为 p 的单电子态。于是此处定义的 G 与以往有所不同。求 G 的演化。在海森堡绘景下, 从湮灭算符的演化方程

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_p(t) = [a_p, H] = \xi_p a_p + \sum_{k \neq 0} g_k a_{p-k} (b_k + b_{-k}^\dagger) \quad (8)$$

我们可以得到 $t \neq 0$ 时, 格林函数的时间导数

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G(t, p) &= -i \langle T i \frac{\partial}{\partial t} a_p(t) a_p^\dagger(0) \rangle \\ &= -i \xi_p \langle T a_p(t) a_p^\dagger(0) \rangle - i \sum_{k \neq 0} \langle T a_{p-k}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \langle g_k (b_k(t) + b_{-k}^\dagger(t)) \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

正常情况下, (9)式的最后一项为 0 (粒子数守恒)。但在低于相变温度时, 系统本征态性质改变, 这一项应当保留, 作为和正常状况的区别。不过(9)式不是完整的时间导数, 因为 $t = 0$ 时, 导数有奇异性, 因为反对易关系 $\{a_p(0), a_p^\dagger(0)\} = 1$ 。由格林函数导数在 $t = 0$ 附近的积分可得

$$\begin{aligned} \int_{0-}^{0+} i \frac{\partial}{\partial t} G(t, p) &= iG(0+, p) - iG(0-, p) \\ &= \langle a_p(0) a_p^\dagger(0) \rangle + \langle a_p^\dagger(0) a_p(0) \rangle \\ &= 1 \end{aligned} \quad (10)$$

从而格林函数的完整时间导数应为

$$i \frac{\partial}{\partial t} G(t, p) = \xi_p G(t, p) - i \sum_{k \neq 0} \langle T a_{p-k}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \langle g_k (b_k(t) + b_{-k}^\dagger(t)) \rangle + \delta(t) \quad (11)$$

考虑到 1.2 节中 $2p_F$ 声子的特殊性, 在(11)式中近似只保留动量为 $2p_F$ 的声子。于是

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G(t, p) &= \xi_p G(t, p) - i \langle T a_{p-2p_F}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \langle g_{2p_F} (b_{2p_F}(t) + b_{-2p_F}^\dagger(t)) \rangle + \delta(t) \\ &= \xi_p G(t, p) + \Delta F(t, p) + \delta(t) \end{aligned} \quad (12)$$

其中定义了

$$\Delta = g_{2p_F} \langle b_{2p_F}(t) + b_{-2p_F}^\dagger(t) \rangle = g_{2p_F} \langle b_{2p_F}(0) + b_{-2p_F}^\dagger(0) \rangle = \text{Const} \quad (13)$$

$$F(t, p) = -i \langle T a_{p-2p_F}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \quad (14)$$

$F(t, p)$ 称为反常格林函数。从定义中可以看出, 它描述的是 Umklapp 过程。 Δ 是常数的原因是, 本征态热力学平均后时间相位因子相消。

进一步计算反常格林函数的时间导数, 将其与格林函数满足的方程一起变为虚时演化方程, 作傅里叶变化, 可以得到

$$(i\epsilon_n - \xi_p) G(i\epsilon_n, p) - \Delta F(i\epsilon_n, p) = 1 \quad (15)$$

$$(i\epsilon_n - \xi_{p-2p_F}) F(i\epsilon_n, p) - \Delta^* G(i\epsilon_n, p) = 0 \quad (16)$$

其中 $\epsilon_n = (2n+1)\pi kT$, n 为整数。从中可以解出

$$F(i\epsilon_n, p) = \frac{\Delta^*}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (17)$$

可以发现, 反常格林函数由 Δ 决定, 当 Δ 为 0 时, $F(i\epsilon_n, p)$ 也等于 0。由于 $F(i\epsilon_n, p)$ 描述的是 Umklapp 过程的影响, 这意味着 Δ 是否为 0 代表了 Umklapp 过程是否参与。系统处于相变温度时, Δ 应为 0。

由 Δ 的定义, 从算符的演化方程可以导出 Δ 满足的另一个关系, 作虚时替换后为

$$\Delta = -g^2 \sum_p F^*(\tau = 0, p) = -g^2 kT \sum_{n,p} F^*(-i\epsilon_n, p) = -g^2 kT \sum_{n,p} \frac{\Delta}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (18)$$

从中便得到温度满足的方程

$$1 = -g^2 kT \sum_{n,p} \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta(T)|^2} \quad (19)$$

相变时 $\Delta = 0$, 我们从中可以解出相变温度。

2 高于相变温度的计算

2.1 单圈自能函数的计算

温度高于相变温度时, 使用微扰论来研究, 即绝热地加上相互作用。声子的 Matsubara 格林函数为 $\mathcal{D}(\tau, k) = -\langle T_\tau A_k(\tau) A_{-k}(\tau) \rangle$, $A_k = (b_k + b_{-k}^\dagger)$, 其中的算符是海森堡绘景下的算符。切换至相互作用绘景, 微扰论告诉我们

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\tau, k) &= -\frac{\langle T_\tau \hat{A}_k(\tau) e^{-\int_0^\beta d\tau \hat{V}(\tau)} \hat{A}_{-k}(0) \rangle_0}{\langle T_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau \hat{V}(\tau)} \rangle_0} \\ &= \frac{\sum_{n=0}^\infty \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \langle T_\tau \hat{A}_k(\tau) \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \cdots \hat{V}(\tau_n) \hat{A}_{-k}(0) \rangle_0}{\sum_{n=0}^\infty \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n \frac{(-1)^n}{n!} \langle T_\tau \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \cdots \hat{V}(\tau_n) \rangle_0} \\ &= \sum_{n=0}^\infty \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_n \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \frac{\langle T_\tau \hat{A}_k(\tau) \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \cdots \hat{V}(\tau_n) \hat{A}_{-k}(0) \rangle_0}{e^{-\beta\Omega}} \end{aligned} \quad (20)$$

\hat{V} 是电声相互作用微扰项, 为 $\hat{V} = \sum_{k \neq 0, p} g_k \hat{a}_{p+k}^\dagger \hat{a}_p \hat{A}_k$ 。(20)式中不同的 n 代表不同阶数的微扰。要计算多个(电子或声子)算符乘积的平均, Wick 定理允许我们只考虑所有可能的(电子或声子)算符配对平均再求和, 不同的配对对应于不同的 Feynman 图。因为 \hat{V} 中有一个声子算符 \hat{A}_k , 所以 n 为奇数时, 相应微扰项为对奇数个声子算符求平均。显然此时声子算符无法两两配对, n 为奇数项微扰为 0。于是 n 为偶数时才有贡献。注意到分母的存在, 抵消定理告诉我们只需要考虑拓扑不同的图。此时(20)式化为

$$\mathcal{D}(\tau, k) = \sum_{i=0}^\infty (-1)^{2i+1} \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \cdots d\tau_{2i} \langle T_\tau \hat{A}_k(\tau) \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \cdots \hat{V}(\tau_{2i}) \hat{A}_{-k}(0) \rangle_0 \quad (21)$$

(sum over topologically different diagrams)

近似仅考虑截止 $n = 2$ 的修正 ($i = 0, 1$), 即单圈修正

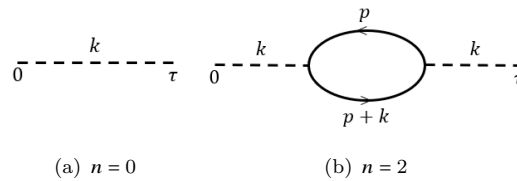


图 2: 微扰保留至 $n = 2$ 的费曼图

写出图对应的表达式

$$\mathcal{D}(\tau, k) = \mathcal{D}_0(\tau, k) + \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 g_k^2 \sum_p \mathcal{D}_0(\tau_1, k) \mathcal{G}_0(\tau_1 - \tau_2, p) \mathcal{G}_0(\tau_2 - \tau_1, p + k) \mathcal{D}_0(\tau - \tau_2, k) \quad (22)$$

第二项符号为正是因为费米子算符换序（存在一个费米子圈）。对(22)式作傅里叶变化得到（见补充证明）

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(i\omega_m, k) &= \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) + \sum_n g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta} \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) \mathcal{G}_0(i\epsilon_n, p) \mathcal{G}_0(i\epsilon_n + i\omega_m, p + k) \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) \\ &= \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) + \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) \Pi(i\omega_m, k) \mathcal{D}_0(i\omega_m, k) \end{aligned} \quad (23)$$

于是得到单圈自能为

$$\Pi(i\omega_m, k) = kT \sum_p \sum_n g_k^2 \mathcal{G}_0(i\epsilon_n, p) \mathcal{G}_0(i\epsilon_n + i\omega_m, p + k) \quad (24)$$

2.2 计算相变温度

先计算自能的具体表达式。

$$\begin{aligned} \Pi(i\omega_m, k) &= kT g_k^2 \sum_p \sum_n \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\epsilon_n + i\omega_m - \xi_{p+k}} \\ &= 2kT g_k^2 \int_{-E_F}^0 d\xi_p N(\xi_p) \sum_n \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\epsilon_n + i\omega_m - \xi_{p+k}} \end{aligned} \quad (25)$$

其中已经将动量求和变为了能量积分, N 为态密度。系数 2 的出现是因为 $\xi_p = -\xi_p$ 。物理上, 系统的性质主要由费米面的性质决定。故近似使用线性能谱来替代真正的能谱 $\xi_p = v_F(p - p_F)$, N 为常数 $N(E_F)$ 。对于费米面附近的电子, 费米面附近的简并微扰使得

$$\xi_p = -\xi_{p-2p_F}, \quad \xi_p = \frac{p^2}{2m} - \mu = \frac{p^2}{2m} - E_F \quad (26)$$

相变时取 $\omega_m = 0, k = 2p_F$, 利用(26), 自能写为

$$\begin{aligned} \Pi(0, 2p_F) &= 2kT_{p0} g_{2p_F}^2 N(E_F) \int_{-E_F}^0 d\xi_p \sum_n \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\epsilon_n + \xi_p} \\ &= 2kT_{p0} g_{2p_F}^2 N(E_F) \int_{-E_F}^0 d\xi_p \sum_n \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2} \\ &= \omega_{2p_F} kT_{p0} g^2 N(E_F) \int_0^{E_F} d\xi_p \sum_n \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2} \end{aligned} \quad (27)$$

对 n 求和可得（见补充证明）

$$\Pi(0, 2p_F) = -\omega_{2p_F} g^2 N(E_F) \int_0^{E_F} d\xi_p \frac{1}{2|\xi_p|} \text{th} \frac{|\xi_p|}{2kT_{p0}} \quad (28)$$

代入(6)式得到

$$-\frac{\omega_{2p_F}}{2} = -\omega_{2p_F} g^2 N(E_F) \int_0^{E_F} d\xi_p \frac{1}{2|\xi_p|} \text{th} \frac{|\xi_p|}{2kT_{p0}} \quad (29)$$

化简即得

$$1 = g^2 N(E_F) \int_0^{E_F} d\epsilon \frac{1}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2kT_{p0}} = \lambda \int_0^{E_F} d\epsilon \frac{1}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2kT_{p0}} \quad (30)$$

其中定义了 $\lambda = g^2 N(E_F)$ 。这就是相变温度满足的自洽方程。

一般来说 $E_F \gg kT_{p0}$ ，故近似将(30)式写为

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{E_F/2kT_{p0}} dx \frac{1}{x} \text{th}x \approx \int_0^\infty dx \frac{1}{x} \text{th}x \approx \text{th}x \ln x \Big|_0^{E_F/2kT_{p0}} - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\text{ch}^2 x} = \ln \frac{E_F}{2kT_{p0}} - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\text{ch}^2 x} \quad (31)$$

(31)式最后一项的结果是（见补充证明）

$$\int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\text{ch}^2 x} = \ln \frac{\pi}{4e^\gamma} \quad (32)$$

其中， γ 为欧拉常数。于是得到相变温度

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{2e^\gamma E_F}{\pi k T_{p0}} \quad (33)$$

$$T_{p0} = \frac{2e^\gamma}{\pi k} E_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (34)$$

3 低于相变温度的计算

3.1 计算 $F(i\epsilon_p, p)$

低于相变温度时求解的要点是通过 Δ 得到相变温度的自洽方程。将(12)式变为虚时演化，作傅里叶变化，得到

$$(i\epsilon_n - \xi_p)G(i\epsilon_n, p) - \Delta F(i\epsilon_n, p) = 1 \quad (35)$$

可以发现，正常过程 $G(i\epsilon_n, p)$ 和 Umklapp 过程 $F(i\epsilon_n, p)$ 耦合在一起。现在再对 $F(t, p)$ 求时间导数

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} F(t, p) &= -i \langle T i \frac{\partial}{\partial t} a_{p-2p_F}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \\ &= -i \xi_{p-2p_F} \langle T a_{p-2p_F}(t) a_p^\dagger(0) \rangle - i \sum_{k \neq 0} \langle T a_{p-2p_F-k}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \langle g_k(b_k(t) + b_{-k}^\dagger(t)) \rangle \\ &= \xi_{p-2p_F} F(t, p) - i \sum_{k \neq 0} \langle T a_{p-2p_F-k}(t) a_p^\dagger(0) \rangle \langle g_k(b_k(t) + b_{-k}^\dagger(t)) \rangle \end{aligned} \quad (36)$$

类似对(11)式的处理，我们希望在(36)式中近似只保留动量为 $2p_F$ 的声子，然而求和限定了 $k \neq 0$ ，所以这一项没有贡献。但 $k = -2p_F$ 时，有格林函数 G 的出现，故近似只保留这一项，得到

$$i \frac{\partial}{\partial t} F(t, p) = \xi_{p-2p_F} F(t, p) + g_{-2p_F} \langle b_{-2p_F}(t) + b_{2p_F}^\dagger(t) \rangle G(t, p) = \xi_{p-2p_F} F(t, p) + \Delta^* G(t, p) \quad (37)$$

要注意的是，这时 $t = 0$ 没有奇异性，因为 $\{a_{p-2p_F}(0), a_p^\dagger(0)\} = 0$ 。将(37)式变为虚时演化，作傅里叶变化可得

$$(i\epsilon_n - \xi_{p-2p_F})F(i\epsilon_n, p) - \Delta^* G(i\epsilon_n, p) = 0 \quad (38)$$

与(26)类似，由于 Umklapp 过程主要发生在费米面附近，我们考虑 $\xi_p = -\xi_{p-2p_F}$ ，于是我们得到

$$(i\epsilon_n + \xi_p)F(i\epsilon_n, p) - \Delta^* G(i\epsilon_n, p) = 0 \quad (39)$$

结合(35)式和(39)式，可以解出 $F(i\epsilon_n, p)$ 与 Δ 满足的一个关系

$$F(i\epsilon_n, p) = \frac{\Delta^*}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (40)$$

3.2 导出自洽方程

现在考察 Δ 的定义来得到另一个关系。由 $\omega_{-2p_F} = \omega_{2p_F}$ (从而 $g_{-2p_F} = g_{2p_F}$) 可知

$$i \frac{\partial}{\partial t} b_{2p_F}(t) = [b_{2p_F}, H] = \omega_{2p_F} b_{2p_F} + \sum_p g_{2p_F} a_{p-2p_F}^\dagger a_p \quad (41)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} b_{-2p_F}^\dagger(t) = [b_{-2p_F}^\dagger, H] = -\omega_{2p_F} b_{-2p_F}^\dagger - \sum_p g_{2p_F} a_{p-2p_F}^\dagger a_p \quad (42)$$

(41)式(42)式相加相减可得

$$i \frac{\partial}{\partial t} (b_{2p_F}(t) + b_{-2p_F}^\dagger(t)) = \omega_{2p_F} (b_{2p_F} - b_{-2p_F}^\dagger) \quad (43)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} (b_{2p_F}(t) - b_{-2p_F}^\dagger(t)) = \omega_{2p_F} (b_{-2p_F}^\dagger + b_{-2p_F}^\dagger) + 2 \sum_p g_{2p_F} a_{p-2p_F}^\dagger a_p \quad (44)$$

对(43)式求导并代入(44)式取平均可得

$$0 = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Delta = \omega_{2p_F}^2 \Delta + 2\omega_{2p_F} \sum_p g_{2p_F}^2 \langle a_{p-2p_F}^\dagger(t) a_p(t) \rangle = \omega_{2p_F}^2 \Delta + 2g_{2p_F}^2 \omega_{2p_F} \sum_p iF^*(t=0, p) \quad (45)$$

$$\Delta = -2 \frac{g_{2p_F}^2}{\omega_{2p_F}} \sum_p iF^*(t=0, p) = -g^2 \sum_p iF^*(t=0, p) \quad (46)$$

将(46)变为虚时演化并展开为傅里叶级数

$$\Delta = -g^2 \sum_p F^*(\tau=0, p) = -g^2 kT \sum_{n,p} F^*(-i\epsilon_n, p) = -g^2 kT \sum_{n,p} \frac{\Delta}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta|^2} \quad (47)$$

得到相变温度满足的自洽方程

$$1 = -g^2 kT_{p0} \sum_{n,p} \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - |\Delta(T_{p0})|^2} = -g^2 kT_{p0} \sum_{n,p} \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2} \quad (48)$$

其中利用了相变时, $\Delta = 0$ 。

与之前相同, 将(48)式中的动量求和变为能量积分, 并对 n 求和, 得到

$$1 = \int_{-E_F}^0 d\xi_p N(\xi_p) g^2 \frac{1}{|\xi_p|} \text{th} \frac{|\xi_p|}{2kT_{p0}} = \int_0^{E_F} d\epsilon N(E_F - \epsilon) g^2 \frac{1}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2kT_{p0}} \quad (49)$$

其中 N 为态密度。同样使用线性能谱来替代真正的能谱 $\xi_p = v_F(p - p_F)$ 。(49)式近似为

$$1 = g^2 N(E_F) \int_0^{E_F} d\epsilon \frac{1}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2kT_{p0}} = \lambda \int_0^{E_F} d\epsilon \frac{1}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2kT_{p0}} \quad (50)$$

在温度低于相变温度时, 这个近似还有另一个合理性: 由于费米面就是第一布里渊区边界, 所以费米面态密度有较高的奇性, 对(49)式贡献大, 积分结果主要由 $N(E_F)$ 决定。

显然, 以上过程得到的自洽方程(50)式与(30)式相同, 可以解出

$$T_{p0} = \frac{2e^\gamma}{\pi k} E_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (51)$$

4 补充证明

4.1 (23)式的证明

写出电子和声子 Matsubara 格林函数的傅里叶展开式

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_0(\tau, p) &= \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\epsilon_n \tau} \mathcal{G}(i\epsilon_n, p), \quad \epsilon_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \\ \mathcal{D}_0(\tau, k) &= \frac{1}{\beta} \sum_m e^{-i\omega_m \tau} \mathcal{D}(i\omega_m, k), \quad \omega_m = \frac{2m\pi}{\beta}\end{aligned}\tag{52}$$

将其代入(22)的第二项

$$\begin{aligned}& \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 g_k^2 \sum_p \mathcal{D}_0(\tau_1, k) \mathcal{G}_0(\tau_1 - \tau_2, p) \mathcal{G}_0(\tau_2 - \tau_1, p + k) \mathcal{D}_0(\tau - \tau_2, k) \\ &= g_k^2 \sum_p \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \frac{1}{\beta^4} \sum_{n1, n2, m1, m2} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1}, p) \mathcal{G}(i\epsilon_{n2}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m2}, k) \\ &\quad e^{-i\omega_{m1}\tau_1} e^{-i\epsilon_{n1}(\tau_1 - \tau_2)} e^{-i\epsilon_{n2}(\tau_2 - \tau_1)} e^{-i\omega_{m2}(\tau - \tau_2)} \\ &= g_k^2 \sum_p \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 \frac{1}{\beta^4} \sum_{n1, n2, m1, m2} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1}, p) \mathcal{G}(i\epsilon_{n2}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m2}, k) \\ &\quad e^{-i(\omega_{m1} + \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2})\tau_1} e^{-i(-\epsilon_{n1} + \epsilon_{n2} - \omega_{m2})\tau_2} e^{-i\omega_{m2}\tau}\end{aligned}\tag{53}$$

对 τ_1, τ_2 积分可得

$$\int_0^\beta d\tau_1 \frac{1}{\beta} e^{-i(\omega_{m1} + \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2})\tau_1} = \delta_{0, \omega_{m1} + \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2}}\tag{54}$$

$$\int_0^\beta d\tau_2 \frac{1}{\beta} e^{-i(-\epsilon_{n1} + \epsilon_{n2} - \omega_{m2})\tau_2} = \delta_{0, \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2} + \omega_{m2}}\tag{55}$$

于是进一步化简为

$$\begin{aligned}& g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta^2} \sum_{n1, n2, m1, m2} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1}, p) \mathcal{G}(i\epsilon_{n2}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m2}, k) \delta_{0, \omega_{m1} + \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2}} \delta_{0, \epsilon_{n1} - \epsilon_{n2} + \omega_{m2}} e^{-i\omega_{m2}\tau} \\ &= g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta^2} \sum_{n1, m1, m2} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1}, p) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1} + i\omega_{m1}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m2}, k) \delta_{0, -\omega_{m1} + \omega_{m2}} e^{-i\omega_{m2}\tau} \\ &= g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta^2} \sum_{n1, m1} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1}, p) \mathcal{G}(i\epsilon_{n1} + i\omega_{m1}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) e^{-i\omega_{m1}\tau} \\ &= g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta^2} \sum_{n, m1} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_n, p) \mathcal{G}(i\epsilon_n + i\omega_{m1}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) e^{-i\omega_{m1}\tau}\end{aligned}\tag{56}$$

对(56)作傅里叶变化, 得

$$\begin{aligned}& \frac{1}{2} \int_{-\beta}^\beta d\tau e^{i\omega_m \tau} g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta^2} \sum_{n, m1} \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) \mathcal{G}(i\epsilon_n, p) \mathcal{G}(i\epsilon_n + i\omega_{m1}, p + k) \mathcal{D}(i\omega_{m1}, k) e^{-i\omega_{m1}\tau} \\ &= \sum_n g_k^2 \sum_p \frac{1}{\beta} \mathcal{D}(i\omega_m, k) \mathcal{G}(i\epsilon_n, p) \mathcal{G}(i\epsilon_n + i\omega_m, p + k) \mathcal{D}(i\omega_m, k)\end{aligned}\tag{57}$$

这就是(23)式的第二项。

4.2 (28)式与(49)式的证明

构造在复平面上半径 $R \rightarrow \infty$ 的圆上的环路积分积分

$$I = \lim_{R \rightarrow \infty} \oint_R \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z^2 - \xi_p^2} \quad (58)$$

由于分母随着 R 增加得更快, 所以应有 $I = 0$ 。另一方面容易发现, 被积函数的极点是 $z = \pm|\xi_p|, i\epsilon_n$, 且均为一级极点。于是由留数定理

$$0 = I = \sum_n -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(i(2n+1)\pi k T_{p0})^2 - \xi_p^2} + \frac{1}{e^{\beta|\xi_p|} + 1} \frac{1}{2|\xi_p|} + \frac{1}{e^{-\beta|\xi_p|} + 1} \frac{1}{-2|\xi_p|} \quad (59)$$

化简得到

$$\sum_n \frac{1}{\beta} \frac{1}{((2n+1)\pi k T_{p0})^2 + \xi_p^2} = -\frac{1}{e^{\beta|\xi_p|} + 1} \frac{1}{2|\xi_p|} + \frac{e^{\beta|\xi_p|}}{e^{\beta|\xi_p|} + 1} \frac{1}{2|\xi_p|} = \frac{1}{2|\xi_p|} \text{th} \frac{|\xi_p|}{2k T_{p0}} \quad (60)$$

从而我们得到

$$-g^2 k T_{p0} \sum_n \frac{1}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2} = g^2 k T_{p0} \sum_n \frac{1}{(2n+1)^2 \pi^2 k^2 T_{p0}^2 + \xi_p^2} = g^2 \frac{1}{2|\xi_p|} \text{th} \frac{|\xi_p|}{2k T_{p0}} \quad (61)$$

4.3 (32)式的证明

先计算如下积分

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{\text{ch}^2 x} &= \int_0^\infty dx \frac{4x^{s-1}}{(e^x + e^{-x})^2} \\ &= \int_0^\infty dx \frac{4x^{s-1} e^{-2x}}{(1 + e^{-2x})^2} \\ &= 2^{2-s} \int_0^\infty d(2x) \frac{(2x)^{s-1} e^{-2x}}{(1 + e^{-2x})^2} \\ &= 2^{2-s} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1} e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} \end{aligned} \quad (62)$$

将被积函数中的 e 指数部分展开

$$\begin{aligned} \frac{e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} &= e^{-x} \sum_{n=0}^\infty (-1)^n e^{-nx} \sum_{m=0}^\infty (-1)^m e^{-mx} \\ &= e^{-x} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} n e^{-(n-1)x} \\ &= \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} n e^{-nx} \end{aligned} \quad (63)$$

代入(62)中得到

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{\text{ch}^2 x} &= 2^{2-s} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} n \int_0^\infty dx x^{s-1} e^{-nx} \\ &= 2^{2-s} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} \frac{1}{n^{s-1}} \int_0^\infty dx x^{s-1} e^{-x} \\ &= \Gamma(s) 2^{2-s} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} \frac{1}{n^{s-1}} \end{aligned} \quad (64)$$

其中使用了 Γ 函数

$$\int_0^\infty dx x^{s-1} e^{-x} = \Gamma(s) \quad (65)$$

现对(64)式中的 n 求和, 它显然等于

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n-1} \frac{1}{n^{s-1}} &= \sum_{n=\text{odd}} \frac{1}{n^{s-1}} - \sum_{n=\text{even}} \frac{1}{n^{s-1}} \\ &= \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^{s-1}} - 2 \sum_{n=\text{even}} \frac{1}{n^{s-1}} \\ &= (1 - 2^{2-s}) \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^{s-1}} \\ &= (1 - 2^{2-s}) \zeta(s-1) \end{aligned} \quad (66)$$

其中使用了 ζ 函数

$$\sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^s} = \zeta(s) \quad (67)$$

代入(64)式可得

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{\text{ch}^2 x} = (2^{2-s} - 4^{2-s}) \Gamma(s) \zeta(s-1) \quad (68)$$

注意到

$$\frac{d}{ds} \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1}}{\text{ch}^2 x} \Big|_{s=1} = \int_0^\infty dx \frac{x^{s-1} \ln x}{\text{ch}^2 x} \Big|_{s=1} = \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\text{ch}^2 x} \quad (69)$$

所以问题归结为求(68)右边在 $s=1$ 时的导数

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\text{ch}^2 x} &= (2-4) \Gamma(1) \zeta'(0) + (2-4) \Gamma'(1) \zeta(0) + (4 \ln 4 - 2 \ln 2) \Gamma(1) \zeta(0) \\ &= -2 \Gamma(1) \zeta'(0) - 2 \Gamma'(1) \zeta(0) + 6 \ln 2 \Gamma(1) \zeta(0) \end{aligned} \quad (70)$$

$\Gamma(1) = 1$ 。先计算 $\Gamma'(1)$ 。由于

$$\begin{aligned} \Gamma(s) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^n \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n t^{s-1} dt \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^s \int_0^1 (1-\tau)^n \tau^{s-1} d\tau \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^s \left[\frac{\tau^s}{s} (1-\tau)^n \right]_0^1 + \frac{n^s \cdot n}{s} \int_0^1 (1-\tau)^{n-1} \tau^s d\tau \\ &= \cdots = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n^s n(n-1) \cdots 2 \cdot 1}{s(s+1) \cdots (s+n-1)} \int_0^1 \tau^{s+n-1} d\tau \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1 \cdot 2 \cdots n}{s(s+1) \cdots (s+n)} n^s, \end{aligned} \quad (71)$$

于是我们有

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Gamma(s)} &= \lim_{n \rightarrow \infty} s n^{-s} (1+s) \left(1 + \frac{s}{2}\right) \cdots \left(1 + \frac{s}{n}\right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} s e^{s \sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - s \ln n} (1+s) e^{-s} \left(1 + \frac{s}{2}\right) e^{-\frac{s}{2}} \cdots \left(1 + \frac{s}{n}\right) e^{-\frac{s}{n}} \\ &= s e^{\gamma s} \prod_{n=1}^\infty \left(1 + \frac{s}{n}\right) e^{-\frac{s}{n}} \end{aligned} \quad (72)$$

其中 γ 为欧拉常数

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{m=1}^n \frac{1}{m} - \ln n \quad (73)$$

对(72)式取对数即得

$$-\ln \Gamma(s) = \ln s + \gamma s + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\ln \left(1 + \frac{s}{n} \right) - \frac{s}{n} \right) \quad (74)$$

求其在 $s = 1$ 处的导数

$$\begin{aligned} \Gamma'(1) &= \frac{\Gamma'(1)}{\Gamma(1)} = -\gamma - 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n(1 + \frac{1}{n})} \right) \\ &= -\gamma - 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{(1+n)} \right) \\ &= -\gamma + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n} \right) \\ &= -\gamma \end{aligned} \quad (75)$$

现在考察 ζ 函数。在(67)式的定义中, $s > 1$ 。解析延拓后, 可以定义在除了 $s = 1$ 的复平面上。由欧拉常数 γ 考察 ζ 函数在 $s = 1$ 附近的奇性

$$\begin{aligned} \gamma &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \int_1^n \frac{dx}{x} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{s \rightarrow 1^+} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k^s} - \int_1^n \frac{dx}{x^s} \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{s \rightarrow 1^+} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k^s} - \frac{n^{1-s} - 1}{1-s} \right) \\ &= \lim_{s \rightarrow 1^+} \left[\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^s} - \frac{1}{s-1} \right] \\ &= \lim_{s \rightarrow 1^+} \left[\zeta(s) - \frac{1}{s-1} \right] \end{aligned} \quad (76)$$

于是 ζ 可写为

$$\zeta(s) = -\frac{1}{1-s} + \gamma + O(s-1) \quad (77)$$

注意到解析延拓后 ζ 函数有如下函数方程成立 (见《特殊函数概论》)

$$\zeta(s) = 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(1-s) \zeta(1-s) \quad (78)$$

取 $s \rightarrow 0$ 极限, 我们得到

$$\begin{aligned} \zeta(0) &= \lim_{s \rightarrow 0} 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(1-s) \zeta(1-s) \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{s \rightarrow 0} \left(\frac{\pi s}{2} + O(s^3) \right) \left(-\frac{1}{s} + O(1) \right) \\ &= -\frac{1}{2} \end{aligned} \quad (79)$$

最后, 我们求 $\zeta'(0)$ 。由(78)式的函数方程知

$$\begin{aligned} (1-s)\zeta(s) &= 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) (1-s) \Gamma(1-s) \zeta(1-s) \\ &= 2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(2-s) \zeta(1-s) \end{aligned} \quad (80)$$

取对数求 $s = 1$ 附近的导数，左边等于

$$\begin{aligned}
 \lim_{s \rightarrow 1} \frac{d}{ds} \ln[(1-s)\zeta(s)] &= \lim_{s \rightarrow 1} \frac{d}{ds} \ln[-1 + \gamma(1-s) + O((1-s)^2)] \\
 &= \lim_{s \rightarrow 1} \frac{d}{ds} \ln[-1 + \gamma(1-s) + O((1-s)^2)] \\
 &= \lim_{s \rightarrow 1} \frac{-\gamma}{-1 + \gamma(1-s) + O((1-s)^2)} \\
 &= \gamma
 \end{aligned} \tag{81}$$

右边等于

$$\begin{aligned}
 \lim_{s \rightarrow 1} \frac{d}{ds} \ln[2^s \pi^{s-1} \sin\left(\frac{\pi s}{2}\right) \Gamma(2-s) \zeta(1-s)] &= \ln 2\pi + \frac{\pi \cos\left(\frac{\pi}{2}\right)}{2 \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)} - \frac{\Gamma'(1)}{\Gamma(1)} - \frac{\zeta'(0)}{\zeta(0)} \\
 &= \ln 2\pi + \gamma - \frac{\zeta'(0)}{\zeta(0)}
 \end{aligned} \tag{82}$$

左右两边相等，利用 $\zeta(0)$ ，我们得到

$$\zeta'(0) = \zeta(0) \ln 2\pi = -\frac{1}{2} \ln 2\pi \tag{83}$$

将 $\Gamma(1), \Gamma'(1), \zeta(0), \zeta'(0)$ 的值代入(70)式即得

$$\int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\operatorname{ch}^2 x} = \ln \frac{\pi}{4e^\gamma} \tag{84}$$