Z 10.2 The Large S Expansion

自旋相干态路径积分形式, 包括生成泛函(10.10)和格林函数(10.21)是导出半经典近似的方便出发点. 此时坐标是单位矢量, 即经典自旋; 量子效应则通过它们的(实或虚)时间依赖而进入.

半经典生成泛函

$$Z[j] = \oint \mathcal{D}\hat{\Omega}(\tau)\exp(-\tilde{\mathcal{S}}[\hat{\Omega}])$$
$$\tilde{\mathcal{S}}[\hat{\Omega}] = -iS\sum_i \omega\left[\hat{\Omega}_i\right] + \int_0^\beta d\tau H[\hat{\Omega}(\tau)]$$

作用量$\tilde{S}$的第二项是动力学项, 第一项则是几何项, 其中每个自旋贡献的相位因子为

$$\omega = \int_0^\beta d\tau \mathbf{A}(\hat{\Omega})\cdot\dot{\hat{\Omega}}$$

几何项是依赖于积分路径的. 当考虑固定的一条路径, 选择合适的规范(根据路径会经过北极还是南极), 则$\mathbf{A}(\hat{\Omega})$和$H[\hat{\Omega}]$都确定了下来; 但是路径确定了, 还有另一个可调参数就是你在这条路径上"移动的速度", 这会反映到$\dot{\hat{\Omega}}$这里来.

$S\to\infty$ 的经典生成泛函

我们可以令哈密顿量 $H[\hat{\Omega}]$ 的参数与S大小无关, 即使用对应的经典哈密顿量 $H^{cl}[\hat{\Omega}]$ (例如参见式(Assa6.35)和(Assa6.36)). 进而, 通过取 $S\to\infty$, 所有具有 $\dot{\hat{\Omega}}\neq 0$ 的时间依赖路径会因为Berry phase的快速振荡而被抑制. 这就恢复为了经典配分函数

Ⓝ (Assa10.23)

$$\lim_{S\to\infty} Z[j] \sim Z'\int \mathcal{D}\hat{\Omega}\exp\left[-\beta H^{cl}[\hat{\Omega}]\right]$$

其中 Z' 包含了归一化因子和高阶量子修正. RHS的积分则是经典哈密顿量的生成泛函, $\dot{\hat{\Omega}}=0$意味着路径不会动了, 退化为了一个点(自然是满足周期性边界条件的), 原先对τ积分的动力学项退化为了$e^{-\beta H}$, 对各种路径的积分变成了对二维球面积分.

生成泛函的大S展开

下面退一步, 把S作为系统性渐进展开生成泛函和格林函数的控制参数, 这样一个**半经典展开**可以将一些量子修正引入进经典理论. 第一步是将时间变量 rescale

Ⓝ (Assa10.24)

$$\tau\to S\tau = \bar{\tau}$$
$$\beta\to S\beta = \bar{\beta}$$

经典温度倒数 (classical inverse temperature) $\bar{\beta}$ 被认为是与S无关的. 这允许我们将S从作用量中 scale out

$$
Z(\bar{\beta}) = \oint \mathcal{D}\hat{\Omega}(\bar{\tau}) \exp\left(-S\mathcal{S}^{cl}[\hat{\Omega}(\bar{\tau}), \bar{\beta}]\right)
$$

$$
\mathcal{S}^{cl} = \int_0^{\bar{\beta}} d\bar{\tau} \left(i\sum_i \mathbf{A}\cdot\dot{\hat{\Omega}} + H^{cl}[\hat{\Omega}(\bar{\tau})]\right)
$$

- 新变量下的$d\bar{\tau}$和$\dot{\hat{\Omega}} = d\hat{\Omega}/d\bar{\tau}$的$S$互相约掉.
- 从$H \to H^{cl}$, 提取了S^2出来, 一个S贡献到$d\bar{\tau}$里面, 另一个被提取出作用量之外. 似乎和(Assa10.23)中的经典哈密顿量定义不一样.

现在可以将最速下降法 (steepest descents) 应用到 Z 的近似计算之中 (see Appendix E), 将 S 作为大参数. 我们得到一个对鞍点 $\hat{\Omega}^{\mathrm{cl},\alpha}$ 的求和(见式(E.14)):

Ⓝ (Assa10.26)

$$
Z \sim \sum_\alpha \exp\left(-S\mathcal{S}^{cl}\left[\hat{\Omega}^{cl,\alpha}, \bar{\beta}\right]\right) Z'_\alpha
$$

其中各个鞍点满足鞍点方程

Ⓝ (Assa10.27)

$$
\left.\frac{\delta\mathcal{S}^{cl}}{\delta\hat{\Omega}}\right|_{\hat{\Omega}=\hat{\Omega}^{cl,\alpha}} = 0
$$

前置因子 Z'_α 包含了关于S^{-1}的高阶修正, 可以通过展开涨落积分 (fluctuation integrals) 来进行评估

Ⓝ (Assa10.28)

$$
Z'_\alpha = \oint \mathcal{D}\delta\hat{\Omega} \exp\left[-S\left(\mathcal{S}^{cl}[\hat{\Omega}] - \mathcal{S}^{cl}\left[\hat{\Omega}^{cl,\alpha}\right]\right)\right]
$$

其中 $\delta\hat{\Omega} = \hat{\Omega} - \hat{\Omega}^{\mathrm{cl},\boldsymbol{\alpha}}$.

10.2.1 半经典动力学 (semiclassical dynamics)

$$
G(t) = \int_{\hat{\Omega}_0}^{\hat{\Omega}_t} \mathcal{D}\hat{\Omega}\left(t'\right) \exp[i\mathcal{S}[\hat{\Omega}]]
$$

$$
\mathcal{S}[\hat{\Omega}] = \int_0^t dt' \left(S\sum_i \mathbf{A}\cdot\dot{\hat{\Omega}}_i - H\left[\hat{\Omega}\left(t'\right), t'\right]\right)
$$

对格林函数的大S展开要求我们做如下scale

Ⓝ (Assa10.29)

$$
t \to St = \bar{t}
$$

这给出了

$$
\begin{aligned}
G(\bar{t}) &= \int_{\hat{\Omega}_0}^{\hat{\Omega}_{\bar{t}}} \mathcal{D}\hat{\Omega}\left(\bar{t}'\right) \exp\left(iS\mathcal{S}^{cl}[\hat{\Omega}]\right) \\
\mathcal{S}^{cl} &= \int_0^{\bar{t}} d\bar{t}' \left(\sum_i \mathbf{A}\cdot\dot{\hat{\Omega}}_i - H^{cl}\left[\hat{\Omega}\left(\bar{t}'\right)\right]\right).
\end{aligned}
$$

$G(t)$ 是被含时路径 $\hat{\Omega}_{cl}\left(t'\right)$ 主导的, 这一经典路径将作用量最大化了. 下面我们在记号上做替换 $\bar{t}\to t$. 最速下降法给出一个对鞍点的求和 (见式(E.14)):

(Assa10.31)

$$
G\sim\sum_\alpha \exp\left(iS\mathcal{S}\left[\hat{\Omega}^{cl,\alpha},\hat{t}\right]\right)G'_\alpha
$$

其中 $\hat{\Omega}^{cl}\left(t'\right)$ 由鞍点方程所决定

(Assa10.32)

$$
\left.\frac{\delta}{\delta\hat{\Omega}}\mathcal{S}[\hat{\Omega}]\right|_{\hat{\Omega}^{\mathrm{cl},\alpha}}=0
$$

且需要满足如下边界条件 (不动端点泛函极值)

(Assa10.33)

$$
\begin{aligned}
\hat{\Omega}^{cl,\alpha}(0) &= \hat{\Omega}_0 \\
\hat{\Omega}^{cl,\alpha}(t) &= \hat{\Omega}_t
\end{aligned}
$$

不动端点路径上鞍点方程 = Euler-Lagrange 方程

作用量的第一部分——Berry phase部分的变分为(考虑任意一个自旋, 略去i下标; 注意$\mathbf{A}$是生活在"一个"二维球面上的($\hat{\Omega}_i\forall i$而非$\hat{\Omega}$))

(Assa10.34)

$$
\begin{aligned}
\delta\omega[\hat{\Omega}] &= \int_0^t dt'\delta(\mathbf{A}\cdot\dot{\hat{\Omega}}) \\
&= \int_0^t dt'\left[\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat{\Omega}^\beta}\delta\hat{\Omega}^\beta\dot{\hat{\Omega}}^\alpha + A^\alpha\frac{d}{dt}\delta\hat{\Omega}^\alpha\right] \\
&\quad + \left[\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat{\Omega}^\beta}\dot{\hat{\Omega}}^\beta\delta\hat{\Omega}^\alpha - \frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat{\Omega}^\beta}\dot{\hat{\Omega}}^\beta\delta\hat{\Omega}^\alpha\right] \\
&= \int_0^t dt'\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat{\Omega}^\beta}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}(\dot{\hat{\Omega}}\times\delta\hat{\Omega})_\gamma + \int_0^t dt'\frac{d}{dt'}(\mathbf{A}\cdot\delta\hat{\Omega}) \\
&= -\int_0^t dt'\hat{\Omega}\cdot(\dot{\hat{\Omega}}\times\delta\hat{\Omega})
\end{aligned}
$$

- 上式第三个等号第二项是时间全导数积分, 根据端点固定边界条件(Assa10.33)一定是零. 第一项为

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\delta\hat\Omega^\beta\dot{\hat\Omega}^\alpha-\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\dot{\hat\Omega}^\beta\delta\hat\Omega^\alpha\\
=&\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\delta\hat\Omega^\beta\dot{\hat\Omega}^\alpha-\dot{\hat\Omega}^\beta\delta\hat\Omega^\alpha\right)\\
=&\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\left(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega\right)_\gamma\right)=\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\epsilon^{\delta\eta\gamma}\dot{\hat\Omega}^\delta\delta\hat\Omega^\eta\right)\\
=&\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\epsilon^{\gamma\alpha\beta}\epsilon^{\gamma\delta\eta}\dot{\hat\Omega}^\delta\delta\hat\Omega^\eta\right)=\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\left(\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\eta}-\delta_{\alpha\eta}\delta_{\beta\delta}\right)\dot{\hat\Omega}^\delta\delta\hat\Omega^\eta\right)\\
=&\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\left(\dot{\hat\Omega}^\alpha\delta\hat\Omega^\beta-\dot{\hat\Omega}^\beta\delta\hat\Omega^\alpha\right)
\end{aligned}
$$

- 最后一个等号利用了式(10.16), 以及矢量 $\hat\Omega$ 具有常数长度的事实——这给出了

Ⓝ (Assa10.35)

$$
\begin{aligned}
\hat\Omega\cdot\hat\Omega=1\Rightarrow&\delta\hat\Omega\cdot\hat\Omega=\dot{\hat\Omega}\cdot\hat\Omega=0\\
\Rightarrow&\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega\quad\|\quad\hat\Omega.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial A^\alpha}{\partial\hat\Omega^\beta}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega)_\gamma&=-\epsilon^{\alpha\beta\gamma}\frac{\partial A^\beta}{\partial\hat\Omega^\alpha}(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega)_\gamma\\
&=-(\nabla\times\mathbf{A})\cdot(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega)\\
&=-\left[(\nabla\times\mathbf{A})\cdot\hat\Omega\right]\hat\Omega\cdot\left(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega\right)\\
&=-\hat\Omega\cdot\left(\dot{\hat\Omega}\times\delta\hat\Omega\right)
\end{aligned}
$$

将式(Assa10.34)应用到(Assa10.32)就得到了经典的 Euler-Lagrange 运动方程

Ⓝ (Assa10.36)

$$
\begin{aligned}
-\hat\Omega_i^{cl}\times\dot{\hat\Omega}_i^{cl}&=\frac{\partial H\left[\hat\Omega^{cl}\right]}{\partial\hat\Omega_i}\\
\Rightarrow\quad\dot{\hat\Omega}_i^{cl}(t')&=\hat\Omega_i^{cl}(t')\times\left.\frac{\partial H}{\partial\hat\Omega_i(t')}\right|_{\hat\Omega^{cl}}
\end{aligned}
$$

> $$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c})=(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\mathbf{b}-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\mathbf{c}$$

- 上式描述了经典旋转子(rotators)系统的"fast top"极限, 即当 rotators 的内部旋转能量远大于典型的 inter-rotator 相互作用能量的极限.
- 第二行的RHS是作用在 rotator $\hat\Omega_i$ 之上的力矩, 由于力矩总是垂直于自己, 这只能改变rotator的方向而不是幅度.

利用式(10.36)我们可以验证在经典路径上哈密顿量是运动常数

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt} H\left[\hat{\Omega}^{cl}\left(t^{\prime}\right)\right] & =\sum_{i} \frac{\partial H}{\partial \hat{\Omega}_{i}\left(t^{\prime}\right)} \cdot \dot{\hat{\Omega}}_{i}^{cl}\left(t^{\prime}\right) \\
& =\sum_{i} \frac{\partial H}{\partial \hat{\Omega}_{i}\left(t^{\prime}\right)} \cdot\left[\hat{\Omega}_{i}^{cl}\left(t^{\prime}\right) \times \frac{\partial H}{\partial \hat{\Omega}_{i}\left(t^{\prime}\right)}\right] \\
& =0
\end{aligned}
$$

这保证了沿着经典轨迹能量守恒 $H\left[\hat{\Omega}^{cl}(t)\right]=H\left[\hat{\Omega}_{0}\right]$.

> 最后提一下我们遇到的问题: 运动方程(Assa10.36)是关于时间的一阶方程, 但其解必须满足$t^{\prime}=0, t$的两个边界条件 (10.33). 这对几乎所有边界条件都是不可能的 (如当 $H\left[\hat{\Omega}_{t}\right] \neq H\left[\hat{\Omega}_{0}\right]$ 时). Klauder 提出了克服这一问题的方式, 他往经典运动方程中引入了阶数ϵ的瞬变二阶项. 对于二阶微分方程和固定边界条件, 计算经典运动是可以的; 最后再取极限 $\epsilon \rightarrow 0$即可.

10.2.2 半经典能谱 (Semiclassical Spectrum)

依赖能量的格林函数定义为式(Assa10.19)对时间的Fourier变换

Ⓝ (Assa10.38)

$$
G\left(\hat{\Omega}_{0}, \hat{\Omega}_{t} ; E\right)=i \int_{0}^{\infty} d t G\left(\hat{\Omega}_{0}, \hat{\Omega}_{t} ; t\right) e^{i\left(E+i 0^{+}\right) t}
$$

取$\hat{\Omega}_{t}=\hat{\Omega}_{0}$, 然后对二维球面积分得到谱函数 $\Gamma(E)$

Ⓝ (Assa10.39)

$$
\begin{aligned}
\Gamma(E) & =\int d \hat{\Omega}_{0} G\left(\hat{\Omega}_{0}, \hat{\Omega}_{0} ; E\right) \\
& =\sum_{\alpha} \frac{1}{E-E_{\alpha}+i 0^{+}}
\end{aligned}
$$

谱函数 $\Gamma(E)$ 的极点就是哈密顿量的本征能量 $\left\{E_{\alpha}\right\}$.

下面我们试图用经典周期轨道来求得E_{α}在半经典近似下的领头阶, 只概述一下. 用路径积分推导半经典能谱最初由 Gutwiller 给出, 他的公式在"量子化具有混沌经典动力学的哈密顿量"这一研究方向——**量子混沌 (quantum chaos)**上得到了广泛应用.

谱函数 $\Gamma(E)$ 的路径积分表示, 具有额外的 $d \hat{\Omega}_{0}$ 和 $d t$ 积分. Gutzwiller导出的半经典近似中, 设经典路径具有持续时间 (duration) t^{E}, 由dt积分的鞍点近似给出

Ⓝ (Assa10.40)

$$
\left.\frac{\partial \mathcal{S}\left[\hat{\Omega}^{cl}\right]}{\partial t}\right|_{t=t^{E}}+E=0
$$

因为 Berry phase 项 ω 是几何的, 它并不依赖于 t^{E}, 因此有经典轨道的能量

$$H^{cl}\left[\hat{\Omega}^{cl}\right]=E$$

以及如下关系式

(Assa10.42)

$$\mathcal{S}^{cl}\left(t^{E}\right)+Et^{E}=\sum_{i}\omega\left[\hat{\Omega}_{i}\right]$$

考虑一个能量为E的**周期性轨道** $\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}$, 它曾被遍历到了. 正如在 exercises 中看到的, 关于 $\hat{\Omega}_0$ trace 的鞍点近似意味着 $\dot{\hat{\Omega}}(0)=\dot{\hat{\Omega}}\left(t^{E}\right)$. 因此, Γ 是由对所有$\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}$的副本(repetitions, 用指标$n$表示)求和得到的

(Assa10.43)

$$\begin{aligned}\Gamma &\sim \sum_{\alpha}\sum_{n}\exp\left(inS\sum_{i}\omega\left[\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}\right]\right)\\ &=\sum_{\alpha}\frac{\exp\left(iS\sum_{i}\omega\left[\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}\right]\right)}{1-\exp\left(iS\sum_{i}\omega\left[\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}\right]\right)}\end{aligned}$$

对比式(10.39)和(10.43), 半经典能谱可以用式(10.43)的极点 E_α来得到, 而这些极点恰好是由 Bohr-Sommerfeld 量子化条件决定的

(Assa10.44)

$$\sum_{i}\omega\left[\hat{\Omega}_i^{E,\alpha}\right]=2n\pi/S\Rightarrow E_{\alpha}^{sc}$$

我们使用一个复变函数定理: 两个函数如果共享极点和留数, 则它们至多差一个常数. 因此, 对于 order one 的能量 E_α^{sc} (即 $n=\mathcal{O}(S)$), 式(10.44)将量子能谱近似为了

(Assa10.45)

$$E_{\alpha}=E_{\alpha}^{sc}+\mathcal{O}(1/S)$$

- M. C. Gutzwiller, Periodic Orbits and Classical Quantization Conditions. Journal of Mathematical Physics 12, 343–358 (2003). https://doi.org/10.1063/1.1665596
- J. Bolte, “The Gutzwiller Trace Formula for Quantum Systems with Spin” in Advances in Solid State Physics (Springer, Berlin, Heidelberg, 2001; https://link.springer.com/chapter/10.1007/3-540-44946-9_36), pp. 447–458.