



量子多体理论讲义

路径积分方法

作者：张鹏飞

单位：复旦大学物理学系

版本：2025 年 2 月

内容：二次量子化、相干态路径积分、微扰论与平均场、重整化群



2025 年春季学期

目录

第 1 章 二次量子化方法	1
1.1 为什么需要二次量子化?	1
1.2 二次量子化方法简述	2
1.2.1 单一模式的玻色系统	2
1.2.2 普遍理论	3
1.2.2.1 产生湮灭算符	3
1.2.2.2 场算符与少体波函数	4
1.2.2.3 一般算符与哈密顿量	5
1.3 自由费米子系统	7
1.3.1 时域关联函数	7
1.3.2 Friedel 震荡与 RKKY 相互作用	8
1.4 格点系统和费米 Hubbard 模型	10
1.4.1 紧束缚模型	10
1.4.2 费米 Hubbard 模型	11
1.5 Heisenberg 模型	13
1.5.1 铁磁模型	14
1.5.2 反铁磁模型	14
1.5.3 Bogoliubov 变换	15
第 2 章 多体系统的路径积分	17
2.1 为什么需要路径积分?	17
2.2 单粒子路径积分	17
2.2.1 路径积分推导	18
2.2.2 经典量子对应	19
2.2.3 路径积分中的关联函数	21
2.2.4 路径积分与对易关系	22
2.3 相干态路径积分	23
2.3.1 玻色子相干态路径积分	24
2.3.2 费米子相干态路径积分	25
2.3.3 多体系统的关联函数	27
2.4 对称性与守恒律	28
2.5 自由粒子系统	29
2.5.1 配分函数	29
2.5.2 两点关联函数	31
2.5.3 密度-密度关联	32

第 3 章 实验测量与响应函数	34
3.1 多体系统的实验探测	34
3.1.1 热力学量测量	34
3.1.2 线性响应实验	35
3.1.3 谱学实验	35
3.1.4 STM 实验	36
3.2 从虚时间到实时间：频域方法	37
3.2.1 Lehmann 谱表示	38
3.2.2 谱函数与结构因子	40
3.3 从虚时间到实时间：时域方法	42
3.4 电导率的理论计算	43
3.4.1 电导率的 Kubo 公式	43
3.4.2 流-流关联函数	44
第 4 章 微扰论与费曼图	47
4.1 近高斯积分的微扰论	47
4.1.1 单变量积分	47
4.1.2 多变量积分	48
4.1.3 两点函数修正	51
4.1.4 顶角修正	52
4.2 最简单的相互作用场论： ϕ^4 理论	53
4.2.1 场论的正规化	54
4.2.2 场论的重整化	55
4.3 相互作用电子气	57
4.3.1 自由能修正	59
4.3.1.1 直接计算	59
4.3.1.2 有效作用量	61
4.3.2 费米子谱修正	62
第 5 章 平均场方法	65
5.1 鞍点近似与真空值	65
5.2 玻色子的超流理论	67
5.2.1 BEC 与非对角长程序	67
5.2.2 低能激发与超流性	68
5.2.3 热力学量的修正	71
5.2.4 BEC 的流体力学描述	72
5.2.5 低维系统与 Mermin-Wagner 定理	74
5.3 费米子的 BCS 理论	75
5.3.1 电声子相互作用	76
5.3.2 Cooper 不稳定性	77

5.3.3	能隙方程与费米子谱	79
5.3.4	零电阻与 Meissner 效应	80
5.4	电荷密度波与自旋密度波	82
第 6 章	重整化群与临界现象	85
6.1	截断与有效模型的能标	85
6.2	实空间重整化群	85
6.3	动量空间重整化群 - ϕ^4 理论	87
6.3.1	树图贡献	88
6.3.2	圈图修正	89

第 1 章 二次量子化方法

内容提要

- 二次量子化方法
- Friedel 震荡与 RKKY 相互作用
- 半填充费米 Hubbard 模型
- Heisenberg 模型的大 S 极限
- Goldstone 定理
- Bogoliubov 变换

1.1 为什么需要二次量子化?

在我们学习经典力学的时候，物理系统的状态由各个粒子的坐标和动量描述，演化满足牛顿方程。到了量子力学，我们有了全新的理论框架——系统的状态由态矢量描述，演化满足薛定谔方程。在这些课程中，我们主要关注于少体系统的动力学行为，例如简谐振子、中心势场等问题。另一方面，统计物理的课程告诉我们，对于大量粒子构成的系统，如果我们只关心它的宏观性质，就可以利用系综理论进行研究。传统的统计物理课程主要关注于经典统计模型和无相互作用的量子模型，而相互作用量子多体系统的统计行为就是本课程的核心内容。这一课程可以看成量子理论和统计物理的延伸：我们的目的就是应用系综理论研究量子力学框架下的多体系统。

然而，我们在量子力学课程中基于单粒子波函数的方法在研究多体问题时会很繁琐。比如，我们考虑一个量子谐振子，其哈密顿量写作：

$$\hat{h}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 \hat{x}^2. \quad (1.1)$$

这里我们取 $m = 1$ 和 $\hbar = 1$ 。我们知道其本征能 ϵ_n 量和本征态 $|\psi_n\rangle$ 写作

$$\epsilon_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle = C_n H_n(\sqrt{\omega}x) e^{-\frac{\omega x^2}{2}}. \quad (1.2)$$

这里 $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ 。 $H_n(x)$ 是 Hermite 多项式， C_n 是波函数的归一化系数。如果我们进而考虑 $N = 3$ 个全同粒子，哈密顿量变成

$$\hat{H}_0 = \sum_i \hat{h}_{0,i} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{2}\omega^2 \hat{x}_i^2. \quad (1.3)$$

如果粒子是玻色子，多体波函数 $\Psi(x_1, x_2, x_3) = (\langle x_1 | \otimes \langle x_2 | \otimes \langle x_3 |) | \Psi \rangle$ 应该在粒子坐标 $\{x_i\}$ 的交换下对称；如果是费米子，则要求反对称。基于这一原则，我们可以写出哈密顿量一个本征态：

$$|\Psi_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}} (|\psi_{\lambda_1}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_2}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_3}\rangle + |\psi_{\lambda_2}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_3}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_1}\rangle + |\psi_{\lambda_3}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_1}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_2}\rangle \\ + \zeta (|\psi_{\lambda_2}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_1}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_3}\rangle + \zeta (|\psi_{\lambda_3}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_2}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_1}\rangle + \zeta (|\psi_{\lambda_1}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_3}\rangle \otimes |\psi_{\lambda_2}\rangle)). \quad (1.4)$$

这里，我们假设 $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$ 。对于玻色子/费米子，表达式中取 $\zeta = \pm 1$ 。我们看到，这个表达式非常复杂，而且传递的有效信息很少——它描述的无非是在 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 三个单粒子态上分别有一个粒子。而这仅仅是无相互作用的情况。比如我们考虑加入一个粒子间的弱相互作用 $\hat{V} = \sum_{i < j} V(\hat{x}_i - \hat{x}_j)$ 。这时，即使对于最低阶微扰论，

我们也需要计算 \hat{V} 在形如(1.4)的不同本征态下的矩阵元，直接计算会包含很多项。在物理学中，如果发现最简单的计算都很繁琐，常常说明我们绕了弯路——二次量子化正是用来简化多体系统计算的方法。

除了上述原因，基于单粒子态直积的描述假设了系统的粒子数守恒。这是因为在理论中每个粒子有对应的位置算符 x ，哈密顿量演化描述的是这个粒子在空间的运动，粒子不会凭空消失。然而，我们的世界中包含着不同种类粒子相互转换的物理过程。比如多个光子转变为正负电子对、 α 衰变等；在超导体、超流体等物态中集体激发模式并不满足粒子数守恒；此外，在开放系统中，我们也常常要处理系统中粒子数随时间变化的动力学过程。我们将会看到，二次量子化方法可以自然的描述这些系统。

1.2 二次量子化方法简述

二次量子化方法的核心就是改变我们标记态的方法。比起描述每个粒子在哪个态，我们直接对每个态有多少粒子进行计数。由于没有区分“不同”粒子，粒子的全同性将会自动被保证，不再需要（反）对称化操作。事实上，对全同粒子直接对态进行计数这个技巧我们在统计物理课程中已经使用过了：在计算无相互作用系统的巨正则系综的配分函数时，标准的做法是

$$\mathcal{Z} = \sum_N \sum_{E_N} e^{-\beta(E_N - \mu N)} = \prod_i \left(\sum_{n_i} e^{\beta n_i (\mu - \epsilon_i)} \right) = \prod_i (1 - \zeta e^{\beta(\mu - \epsilon_i)})^{-\zeta}. \quad (1.5)$$

这里，在第二个等号中我们将对粒子数 N 和给定粒子数不同本征态 E_N 的求和转换成了对每个单粒子态占据数 n_i 的求和。二次量子化方法也是同样的思路。

1.2.1 单一模式的玻色系统

作为启发，我们先来回顾一下单个谐振子的代数解法。对哈密顿量(1.1)，我们定义降算符 $\hat{a} = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(\hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\omega} \right)$ 以及升算符 $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(\hat{x} - i \frac{\hat{p}}{\omega} \right)$ 。他们满足对易关系 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ 。哈密顿量可以写作

$$\hat{h}_0 = \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right). \quad (1.6)$$

这里 $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ ，其本征值为 $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ ，对应本征态 $|n\rangle$ 与哈密顿量本征态 $|\phi_n\rangle$ 一致。此外，我们通常选取

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (1.7)$$

等式右边相应系数可以通过计算等式左边态与自身的内积验证。特别的，系统基态对应 $n = 0$ ，满足 $\hat{a}|0\rangle = 0$ ；所有本征态可以通过在 $|0\rangle$ 上作用升算符得到

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (1.8)$$

另一方面，我们可以给出哈密顿量(1.6)的另一种诠释。想象存在一种玻色子——通常被称为声子——只能处于某个单粒子态 $|\phi_0\rangle$ ，对应的能量为 ω 。那么，当系统包含 n 个声子，总能量就是 $n\omega$ ，哈密顿量正好也具有式(1.6)的形式（让我们忽略等式右边的常数部分，事实上正好对应系统的真空能）。这时，降算符 \hat{a} 和升算符 \hat{a}^\dagger 对应粒子数减少和增加，通常被称为湮灭算符和产生算符。 $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ 的本征值等于粒子数，被称为粒子

数算符。这就是包含单一模式的自由玻色子系统的二次量子化表示。我们还可以进一步考虑如果声子之间存在相互作用，哈密顿量应该如何改写。假设任意两个声子之间有排斥相互作用 U ，那么系统的总相互作用能应为 $V = Un(n-1)/2$ 。对应哈密顿量

$$\hat{H} = \omega \hat{n} + \frac{U}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{U}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}. \quad (1.9)$$

这便是单格点的玻色 Hubbard 模型。最后一个等式用到了 $[\hat{a}, \hat{n}] = \hat{a}$ 。

1.2.2 普遍理论

下面，我们来把二次量子化方法推广到多个模式的玻色/费米系统中。我们用正整数 i 来标记不同的单粒子态；按照上述思路，多体系统的一组完备基写作 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ ，其中 n_i 是在 i 态上的粒子数。对于玻色子， $n_i \in \{0, 1, 2, \dots\}$ ；对于费米子，泡利不相容原理要求 $n_i \in \{0, 1\}$ 。例如(1.4)，我们有 $n_{\lambda_1} = n_{\lambda_2} = n_{\lambda_3} = 1$ ，而对其余 i 满足 $n_i = 0$ 。一般的多体态可以在这组完备基下进行展开

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} C_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (1.10)$$

1.2.2.1 产生湮灭算符

对于每个模式，我们引入对应的产生湮灭算符 \hat{a}_i^\dagger 和 \hat{a}_i 。受(2.39)的启发，我们定义产生湮灭算符的矩阵元

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \zeta^{\sum_{j<i} n_j} \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle &= \zeta^{\sum_{j<i} n_j} \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (1.11)$$

我们要额外留意费米子系统：首先，对于费米子我们只保留 $n_i \in \{0, 1\}$ 的部分，即对于 $n_i = 1$ 时，等式第一行的右侧为 0。其次， $\zeta^{\sum_{j<i} n_j}$ 的引入规定了不同单粒子模式的次序——这一次序是人为选定的，但是一旦给定一套规定，在计算中不应随意改变。我们将会看到，这一因子的引入保证了费米子的全反对称关系。由于 $\zeta^2 = 1$ ，无论玻色费米子，我们都有

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \quad (1.12)$$

即 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ 是第 i 个态上的粒子数算符。我们将 $n_i = 0$ 的态称为真空态，记作 $|\Omega\rangle$ 。类似(1.8)，(1.11)保证所有态都可以通过在真空态上作用产生算符得到：

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \frac{(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}}{\sqrt{n_3!}} \dots |\Omega\rangle. \quad (1.13)$$

我们可以根据算符的定义(1.11)计算产生湮灭算符间的对易关系。例如, 对于 $j < i$

$$\begin{aligned}
\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger | \dots, n_j, \dots, n_i, \dots \rangle &= \sqrt{n_j + 1} \zeta^{\sum_{k < j} n_k} \hat{a}_i | \dots, n_j + 1, \dots, n_i, \dots \rangle \\
&= \sqrt{n_j + 1} \sqrt{n_i} \zeta^{\sum_{k < j} n_k} \zeta^{(\sum_{k < i} n_k + 1)} | \dots, n_j + 1, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \\
&= \sqrt{n_i} \zeta^{(\sum_{k < i} n_k + 1)} \hat{a}_j^\dagger | \dots, n_j, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \\
&= \zeta \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i | \dots, n_j, \dots, n_i, \dots \rangle.
\end{aligned} \tag{1.14}$$

由于我们证明了 $\hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger = \zeta \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i$ 这一等式对于任意态成立, 这一关系应该被认为是算符等式。依照这一方法, 我们可以得到

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_\zeta = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_\zeta = 0, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_\zeta = 0, \tag{1.15}$$

这里我们引入了 $[A, B]_\zeta = A - \zeta B$ 。对于玻色子系统, 不同湮灭算符相互对易, 说明不同模式间相独立, 各自对应一组谐振子升降算符。对于费米子系统, 不同模式算符反对易——我们可以认为这仅仅说明在费米系统中“独立”有和玻色子系统不同的含义。对于 $i = j$, 费米子算符满足 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger = 1$ 和 $(\hat{a}_i^\dagger)^2 = \hat{a}_i^2 = 0$ 。前者暗示某个模式总粒子数只能是 0 或者 1, 后者暗示泡利不相容原理。

1.2.2.2 场算符与少体波函数

在定义产生湮灭算符的时候, 我们选定了一组单粒子态的基 $\{|i\rangle\}$ 。另一方面, 量子物理的计算应该不依赖于基的选取, 同一个量子态可以在任意基下进行展开。那么, 如果我们选取另一组单粒子态 $\{|\mu\rangle\}$, 引入对应的产生湮灭算符 \hat{a}_μ^\dagger 和 \hat{a}_μ , 那他们和 \hat{a}_i^\dagger 和 \hat{a}_i 的关系是什么? 回答这一问题的最简单办法是先把这些算符和单粒子态联系起来, 利用不同单粒子基之间的变换关系, 推导产生湮灭算符的变换关系。依照定义, 单粒子态就是在真空 $|\Omega\rangle$ 作用一个 a^\dagger 算符得到的

$$|i\rangle = \hat{a}_i^\dagger |\Omega\rangle, \quad |\mu\rangle = \sum_i \langle i|\mu\rangle |i\rangle = \sum_i \langle i|\mu\rangle \hat{a}_i^\dagger |\Omega\rangle = \hat{a}_\mu^\dagger |\Omega\rangle. \tag{1.16}$$

其中我们利用了单粒子态的完备性关系 $|i\rangle\langle i|$ 。因此, 我们得到 $\hat{a}_\mu^\dagger = \sum_i \langle i|\mu\rangle \hat{a}_i^\dagger$ 。对这一关系取厄秘共轭给出 $\hat{a}_\mu = \sum_i \langle \mu|i\rangle \hat{a}_i$ 。

在不同完备基中, 我们经常使用的是坐标空间的完备基 $|x\rangle$ ——这是由于实验测量往往具有局域性, 所测量的物理量常常是局域的粒子密度、自旋密度等。为了简化记号, 这一节我们都以一维系统为例。在这组基下, 湮灭算符被称为场算符 $\hat{\psi}(x)$, 满足连续化版本的对易关系

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\zeta = \delta(x - x'), \quad [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')]_\zeta = 0, \quad [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]_\zeta = 0. \tag{1.17}$$

局域的粒子数密度算符写作 $n(x) = \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)$ 。我们有

$$\hat{\psi}(x) = \sum_i \langle x|i\rangle \hat{a}_i = \sum_i \phi_i(x) \hat{a}_i, \quad \hat{a}_i = \int dx \phi_i(x)^* \hat{\psi}(x). \tag{1.18}$$

其中 $\phi_i(x)$ 便是单粒子的本征态波函数。利用场算符 $\hat{\psi}(x)$, 我们可以将二次量子化中的任意单粒子态 $|\Psi^{(1)}\rangle$ 映

射到一次量子化波函数

$$\phi(x) = \langle \Omega | \hat{\psi}(x) | \Psi^{(1)} \rangle. \quad (1.19)$$

将上式推广，我们可以在任意多体态中定义单粒子约化密度矩阵 $\rho(x, x')$

$$\rho(x, x') = N^{-1} \langle \Psi | \hat{\psi}^\dagger(x') \hat{\psi}(x) | \Psi \rangle. \quad (1.20)$$

其中， N 是多体态 $|\Psi\rangle$ 的总粒子数，引入这一系数的目的是保证归一化条件 $\int dx \rho(x, x) = 1$ 。为什么我们把 $\rho(x, x')$ 称为单粒子约化密度矩阵？对于单体态，容易发现 $\rho(x, x') = \phi(x)\phi(x')^*$ ，这一结果符合对单粒子纯态的预期；对于 $|\Psi\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger \dots a_N^\dagger$ ，计算得到

$$\rho(x, x') = \frac{1}{N} \sum_i \phi_i(x) \phi_i(x')^* = \langle x | \underbrace{\left[N^{-1} \sum_i |i\rangle \langle i| \right]}_{\rho} | x' \rangle. \quad (1.21)$$

我们可以进一步将两粒子态的波函数 $\phi(x_1, x_2)$ 表达成

$$\phi(x_1, x_2) = \langle \Omega | \hat{\psi}(x_1) \hat{\psi}(x_2) | \Psi^{(2)} \rangle / \sqrt{2}. \quad (1.22)$$

这里， $\sqrt{2}$ 保证了波函数的归一化条件 $\int dx_1 dx_2 |\phi(x_1, x_2)|^2 = 1$ 。对于玻色子系统， $[\hat{\psi}(x_1), \hat{\psi}(x_2)] = 0$ ，因此两体波函数关于交换 x_1, x_2 对称；对于费米子系统， $[\hat{\psi}(x_1), \hat{\psi}(x_2)]_- = 0$ ，因此两体波函数关于交换 x_1, x_2 反对称——这就是我们在最初定义(1.11)时引入 ζ 的原因。类似的讨论很容易推广到任意多体波函数中。

👉 **练习 1.1 三体波函数** 按照上述单体、两体波函数定义构造三体波函数，验证结果与式(1.4)吻合。

1.2.2.3 一般算符与哈密顿量

最后，我们需要把哈密顿量用产生湮灭算符表达出来。我们假设哈密顿量只包括二次型动能项、外势能和两体相互作用：

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2} + \sum_{i=1}^N V(\hat{x}_i) + \sum_{i < j} U(\hat{x}_i - \hat{x}_j). \quad (1.23)$$

我们的策略是把每一项在其本征函数对应的产生湮灭算符下先表示出来，然后利用不同表象的变换关系推导出一般情况下的二次量子化算符。对于动能项，假设我们取箱归一化（系统尺寸为 L ），其本征态就是平面波 $\phi_k(x) = e^{ikx}/\sqrt{L}$ ，对应的能量是 $k^2/2$ 。当存在多个粒子，我们期待

$$\sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2} \rightarrow \sum_k \frac{k^2}{2} \hat{n}_k = \frac{1}{2} \int dx \partial_x \hat{\psi}^\dagger(x) \partial_x \hat{\psi}(x) = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \frac{\hat{p}^2}{2} \hat{\psi}(x). \quad (1.24)$$

这里等式右边 $\hat{p} = -i\partial_x$ 。对于势能部分，我们可以直接在实空间将能量写成

$$\sum_{i=1}^N V(\hat{x}_i) \rightarrow \int dx V(x) \hat{n}(x) = \int dx V(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x). \quad (1.25)$$

类似单粒子势能，两体相互作用也在实空间对角。简单起见，我们将空间坐标离散化成格点 $x \in Z$ ，最后再考虑连续极限。对于 x 格点和 y 格点之间的粒子，他们的相互作用能是

$$\sum_{x < y} U(x-y) \hat{n}(x) \hat{n}(y) = \frac{1}{2} \sum_{x \neq y} U(x-y) \hat{n}(x) \hat{n}(y) = \frac{1}{2} \sum_{x \neq y} U(x-y) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x). \quad (1.26)$$

对于同一个格点上的多个（玻色）粒子，结果则类似式(1.9)：

$$\sum_x U(0) \frac{\hat{n}(x)(\hat{n}(x)-1)}{2} = \frac{1}{2} \sum_x U(0) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x). \quad (1.27)$$

把(1.26)和(1.27)相加，我们得到：

$$\sum_{i < j} U(\hat{x}_i - \hat{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} U(x-y) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x) = \frac{1}{2} \int dx dy U(x-y) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x). \quad (1.28)$$

最后，把所有项加在一起，二次量子化下的哈密顿量 H 写作

$$\hat{H} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + V(x) \right) \hat{\psi}(x) + \frac{1}{2} \int dx dy U(x-y) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(y) \hat{\psi}(x). \quad (1.29)$$

练习 1.2 玻色-费米映射 假设 $\hat{\psi}(x)$ 是费米子场算符，对于离散化的一维空间，构造算符

$$\hat{\psi}'(x) = e^{i\pi \sum_{y < x} \hat{\psi}^\dagger(y) \hat{\psi}(y)} \hat{\psi}(x), \quad (1.30)$$

请证明

1. 对于 $x \neq y$ 满足对易关系 $[\hat{\psi}'(x), \hat{\psi}'^\dagger(y)] = 0$, $[\hat{\psi}'(x), \hat{\psi}'(y)] = 0$ 和 $[\hat{\psi}'^\dagger(x), \hat{\psi}'^\dagger(y)] = 0$ ，说明 $\hat{\psi}'(x)$ 是玻色型算符。
2. 场算符 $\hat{\psi}'(x)$ 满足 $[\hat{\psi}'(x), \hat{n}'(x)] = [\hat{\psi}'(x), \hat{\psi}'^\dagger(x) \hat{\psi}'(x)] = \hat{\psi}'(x)$ ，因此 $\hat{\psi}'(x)$ 导致粒子数 $\hat{n}'(x)$ 减小 1，仍然有湮灭算符的物理含义。同时 $\hat{\psi}'(x)^2 = 0$ 说明同一位置不能占据两个玻色子。
3. 验证如果原始哈密顿量只包括近邻相互作用 $V \hat{n}(x) \hat{n}(x+1)$ ，映射到 $\hat{\psi}'(x)$ 后仍只包含近邻相互作用。

这种玻色子被称为硬核 (hard-core) 玻色子，等价于在原始玻色子上加入相同格点的无穷大排斥能 $U(0) = +\infty$ 。该习题说明在一维玻色子和费米子没有本质区别。

1.3 自由费米子系统

从这一节开始，我们用一些例子巩固一下二次量子化方法，同时介绍一些多体物理的基本计算。我们的第一个例子是自由费米子系统，哈密顿量是

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \frac{\nabla\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \cdot \nabla\hat{\psi}(\mathbf{r})}{2} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_k \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (1.31)$$

这里，我们引入了色散 $\epsilon_k = k^2/2$ 。在零温， N 个费米子的多体系统的基态对应费米海，即所有能量小于费米能 $E_F = k_F^2/2$ 的态都被占据，这里 k_F 被称为费米动量。我们主要关注三维情况，费米动量由下式确定

$$N = Vn = V \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{V k_F^3}{6\pi^2}. \quad (1.32)$$

在二次量子化下，我们可以将费米海态 $|\text{FS}\rangle$ 表达成

$$|\text{FS}\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger |\Omega\rangle. \quad (1.33)$$

1.3.1 时域关联函数

作为示例，我们先来计算单粒子密度矩阵

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \text{FS} | \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) | \text{FS} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1 - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_2} \langle \text{FS} | \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} | \text{FS} \rangle. \quad (1.34)$$

容易看出，当 $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ 时， $\hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} | \text{FS} \rangle$ 和没有扰动的费米海态 $|\text{FS}\rangle$ 的占据数肯定不同。因此，只有 $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ 的项才会贡献。这就给出

$$\begin{aligned} C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \langle \text{FS} | \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} | \text{FS} \rangle = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} n_{\mathbf{k}} \\ &= \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} = \frac{\sin(r_{12}k_F) - r_{12}k_F \cos(r_{12}k_F)}{2\pi r_{12}^3}. \end{aligned} \quad (1.35)$$

完成一个计算时我们应该尽可能利用各种极限对结果进行验证。当我们取 $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ 时，结果回到 $n = N/V = k_F^3/6\pi^2$ 。这是因为系统有平移对称性，导致 $\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = V\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = 1$ 。此外，平移对称性加上转动对称性还保证 $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C(r_{12})$ 只是距离的函数。在文献中， $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 也被常称为场算符的等时关联函数。

练习 1.3 $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 的物理含义 假设我们通过实验方法在 \mathbf{r}_2 处湮灭了一个粒子，这时系统的态为 $\hat{\psi}(\mathbf{r}_2)|\text{FS}\rangle/\sqrt{n}$ ，其中 \sqrt{n} 保证了态的归一化。请证明，在这个新的态上粒子密度和没有作用 $\hat{\psi}(\mathbf{r}_2)$ 时的差别为

$$\Delta n(\mathbf{r}_1) = -n^{-1} |C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2. \quad (1.36)$$

这给出了等时关联函数的一个物理含义。此外，计算中我们会发现 $\langle \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_3 \hat{\psi}_4 \rangle = \langle \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_4 \rangle \langle \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_3 \rangle - \langle \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_3 \rangle \langle \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_4 \rangle$ ，

这就是自由粒子的 Wick 定理:

$$\langle \hat{\psi}_{i_n}^\dagger \hat{\psi}_{i_2}^\dagger \hat{\psi}_{i_1}^\dagger \hat{\psi}_{i_1} \hat{\psi}_{i_2} \dots \hat{\psi}_{i_n} \rangle = \sum_P \zeta^{|P|} \langle \hat{\psi}_{i_{P_1}}^\dagger \hat{\psi}_{i_1} \rangle \langle \hat{\psi}_{i_{P_2}}^\dagger \hat{\psi}_{i_2} \rangle \dots \langle \hat{\psi}_{i_{P_n}}^\dagger \hat{\psi}_{i_n} \rangle, \quad (1.37)$$

这里 P 代表 $(1, 2, \dots, n)$ 的一个置换操作, 每个置换都可以用一系列最近邻的交换写出来, $|P|$ 代表对应最近邻交换的数目。例如, 对于 $P(1, 2, 3) = (2, 1, 3)$, 我们只进行了一次 1 和 2 的交换, 对应 $|P| = -1$ 。

接下来, 让我们考虑不同时刻的单粒子关联。Heisenberg 方程告诉我们, t 时刻的算符可以写作

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = e^{i\hat{H}t} \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\hat{H}t} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\hat{H}t} a_{\mathbf{k}} e^{-i\hat{H}t} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\epsilon_{\mathbf{k}}t} \hat{a}_{\mathbf{k}}. \quad (1.38)$$

我们发现在时间演化下, 单个场算符总是有着湮灭算符线性组合的形式, 仍然满足 Wick 定理。这时无相互作用系统的特性, 物理上说明一个粒子不管怎么演化都仍然是一个粒子。对于相互作用系统, 单个粒子可以通过散射产生电子-空穴对, 因此我们预期单个场算符演化后会包含多个产生湮灭算符乘积的贡献。类似之前的等时关联, 我们可以定义不同时刻的两点关联函数

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle \text{FS} | \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0}, 0) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) | \text{FS} \rangle = \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\epsilon_{\mathbf{k}}t} \quad (1.39)$$

这里, 我们已经利用了系统的时间和空间平移不变性。可以认为 $C(\mathbf{r}, t)$ 描述了不同时刻系统的关联性, 我们也可以推广练习 1.3 给 $C(\mathbf{r}, t)$ 一个更明确的物理含义。

1.3.2 Friedel 震荡与 RKKY 相互作用

在之前的练习 1.3 中我们考虑在某一时刻把一个局域的费米子湮灭, 下面我们考虑一个略有不同的情况。我们仍然想象加入一个局域的扰动, 然而这个扰动是直接加在哈密顿量之中的

$$\delta\hat{H} = \lambda \hat{n}(\mathbf{0}) = \lambda \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0}) \hat{\psi}(\mathbf{0}) \quad (1.40)$$

由于 $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0}) \hat{\psi}(\mathbf{0})$ 是密度的量纲 $[x^{-3}]$, 而哈密顿量是能量的量纲 $[x^{-2}]$, 因此 λ 应该是长度量纲 $[x]$ 。我们假设 $\lambda k_F \ll 1$ 。 $\delta\hat{H}$ 对应 $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ 处有一个额外的外势场, 实际系统中可能是由于杂质所引起的。在加入这个扰动后, 基态的改变可以利用微扰论进行分析。一阶微扰论公式写作

$$|n\rangle = |n\rangle_0 + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m | \delta\hat{H} | n \rangle_0}{E_n^0 - E_m^0} |m\rangle_0 \quad (1.41)$$

对于基态 $|\text{FS}\rangle$, 保留到 λk_F 的一阶, 我们得到

$$|\text{G}\rangle = |\text{FS}\rangle + \frac{\lambda}{V} \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \sum_{|\mathbf{q}| < k_F} \frac{\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}}}{\epsilon_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}} |\text{FS}\rangle. \quad (1.42)$$

让我们计算 λ 带来的对费米子密度的修正，容易得到

$$\begin{aligned}\Delta n(\mathbf{r}) &= \frac{\lambda}{V^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{n_F(\epsilon_q)(1 - n_F(\epsilon_k))}{\epsilon_q - \epsilon_k} \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \right) \\ &= \lambda \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\epsilon_{k-q}) - n_F(\epsilon_k)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (1.43)$$

这里我们引入了费米分布 $n_F(\epsilon)$ 。在零温，它正好保证了式(1.42)中的求和限制。首先，对 \mathbf{k} 的积分给出

$$\chi(\mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{n_F(\epsilon_{k-q}) - n_F(\epsilon_k)}{\epsilon_{k-q} - \epsilon_k} = -\frac{k_F}{2\pi^2} \left[\frac{1}{2} + \frac{(1-x^2)}{4x} \ln \left(\frac{1+x}{|1-x|} \right) \right]\quad (1.44)$$

这里，我们引入了 $x = q/2k_F$ 。可以看到，最后实空间的响应函数是 $\chi(\mathbf{q})$ 的傅立叶变换，因此 $\chi(\mathbf{q})$ 就是给定动量的密度波 $n(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ 对外势能的响应。由于扰动也对应密度算符，我们常称之为密度-密度响应。最后，傅立叶变换给出

$$\Delta n(\mathbf{r}) = \lambda \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \chi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \lambda \frac{k_F^4}{2\pi^3} \frac{R \cos R - \sin R}{R^4},\quad (1.45)$$

这里 $R = 2rk_F$ 。首先，容易验证这一表达式量纲正确。在很小的 r ，密度扰动为 $-\lambda k_F^4/6\pi^3 r$ 。直观看来，这是因为外势能是正的，会把原点周围费米子排斥开来。在远处，密度随着距离正负震荡，对应波矢 $(2k_F)^{-1}$ ，这被称为 **Friedel 震荡**。在 **STM** 实验中，常常观测到的杂质周围的环状电子密度条纹正是这个原因，这也是测量费米动量的一个途径。在后续章节，我们将会用场论方法重新推导这一结果。

 **练习 1.4 积分练习** 请推导上述结果(1.44)以及(1.45)，必要时可以借助 **Mathematica** 等数学软件。

Friedel 震荡还在磁性材料的研究中有重要的应用。现在我们考虑费米子携带自旋 $1/2$ 。因此，我们应该对自旋 $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 的费米子分别定义湮灭算符 $\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}$ 或场算符 $\hat{\psi}_\sigma(x)$ 。自由粒子的哈密顿量就是把(1.31)复制两份：

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \frac{\nabla \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \cdot \nabla \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})}{2} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_k \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}.\quad (1.46)$$

我们假设不同自旋的费米能相等，都在 $E_F = k_F^2/2$ 。现在，我们可以考虑在原点处有一个磁性杂质。杂质的磁矩正比于其自旋 \mathbf{S}_1 ，耦合到局域的费米子自旋：

$$\delta \hat{H} = \mu \mathbf{S}_1 \cdot \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{0}) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{0}) \right).\quad (1.47)$$

这里， $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$ 是泡利矩阵。为了简单起见，我们假设自旋是经典的。利用转动对称性，我们总可以把自旋选取在 z 方向。因此

$$\delta \hat{H} = \frac{\mu}{2} S_1^z (\hat{n}_{\uparrow}(\mathbf{0}) - \hat{n}_{\downarrow}(\mathbf{0})).\quad (1.48)$$

这时，可以看到不管在(1.46)中还是围绕哈密顿量中，自旋 \uparrow 和 \downarrow 都没有耦合。因此他们对扰动的响应可以分别

计算，各自对应一个 $\lambda = \pm \frac{\mu}{2} S_1^z$ 的密度扰动。因此，我们可以直接写出 \mathbf{r} 处局域自旋的变化：

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \langle \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{r}) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right\rangle = \frac{\mu}{2} \frac{k_F^4}{2\pi^3} \frac{R \cos R - \sin R}{R^4} S_1^z \hat{z}. \quad (1.49)$$

这时，如果在 \mathbf{r} 处正好有另一个自旋 \mathbf{S}_2 ，我们就发现它和 \mathbf{S}_1 之间产生了等效的相互作用能

$$\delta \hat{H}' = \mu \mathbf{S}_2 \cdot \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right) \approx \frac{\mu^2}{2} \frac{k_F^4}{2\pi^3} \frac{R \cos R - \sin R}{R^4} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1.50)$$

这里，我们把算符近似成了微扰论下的期望值。这一结果表明费米子诱导了两个自旋杂质之间的相互作用——被称为 RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) 相互作用。值得注意，由于系数随着距离 r 震荡，这一项有时倾向于让两个自旋平行来降低系统总能量，对应铁磁型相互作用，有时倾向于让它们反平行，对应反铁磁相互作用。

1.4 格点系统和费米 Hubbard 模型

在固体材料中，电子并非处于自由状态，而是处在原子核以及其他电子所形成的环境之中。首先，库仑相互作用就会贡献一个外势场。我们以一维为例，假设晶格势有完美的周期性，可以近似简单的 \cos 函数：

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int dx \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\nabla^2}{2} - V \cos(2\pi x) \right) \hat{\psi}_{\sigma}(x). \quad (1.51)$$

对于 V 很小的情况，这一模型可以通过（近）简并微扰进行分析，可以参考固体物理教材。

1.4.1 紧束缚模型

这里，我们主要关心 V 很大的极限。量子多体物理研究的对象常常是低温系统，因此我们常常关注于系统在低能下的行为。在目前问题中，最低能量的粒子被局域在势能最低点，即整数 $x = n$ 附近。具体来看，在 $x \approx 0$ ，我们有

$$\hat{H}'_0 \approx \sum_{\sigma} \int dx \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(x) \left(-\frac{\nabla^2}{2} + 2\pi^2 V x^2 \right) \hat{\psi}_{\sigma}(x), \quad (1.52)$$

形式类似于一个谐振子。根据(1.2)，谐振子能量为 $\epsilon_n = 2\pi\sqrt{V}(n + \frac{1}{2})$ 。对于很大的 V ，我们可以只保留 $n = 0$ 部分的贡献。这时，原始模型 \hat{H}_0 中的场算符可以近似成

$$\hat{\psi}_{\sigma}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi_0(x - n) \hat{a}_{n,\sigma}. \quad (1.53)$$

其中 $\phi_0(x - n)$ 是在 $x = n$ 附近的谐振子基态波函数。把(1.53)带入 \hat{H}_0 ，我们就得到了不同位置的谐振子基态湮灭算符 \hat{a}_n 的哈密顿量

$$\hat{H}'_0 = \sum_{\sigma, m, n} \left[\int dx \phi_0(x - m) \left(-\frac{\nabla^2}{2} - V \cos(2\pi x) \right) \phi_0(x - n) \right] a_{m,\sigma}^{\dagger} a_{n,\sigma} \quad (1.54)$$

由于谐振子基态波函数 $\phi_0(x)$ 随着 $|x|$ 增大呈高斯型衰减，宽度大约是 $V^{-1/4}$ 。在 V 很大时，我们忽略所有形如 $\hat{a}_{m,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n,\sigma}$ 的项中 $|m - n| > 1$ 部分的贡献，得到

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -t \sum_{n,\sigma} (\hat{a}_{n,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n+1,\sigma} + \text{H.C.}) + \epsilon_0 \sum_{n,\sigma} \hat{a}_{n,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n,\sigma}. \quad (1.55)$$

其中， ϵ_0 对应单粒子能量的零点，在 V 很大的极限下，我们期待 $\epsilon_0 \approx \pi\sqrt{V}$ 等于谐振子基态能量。由于我们的系统有粒子数守恒，（在正则系综中）这一项只是哈密顿量中一个常数，可以被忽略。

这一有效哈密顿量 \hat{H}_{eff} 可以通过离散傅立叶变换进行求解。我们引入 $\hat{a}_{n,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{|k| < \pi} e^{ikn} \hat{a}_{k,\sigma}$ ，这时

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -2t \sum_{\sigma, |k| < \pi} \cos k \hat{a}_{k,\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,\sigma}. \quad (1.56)$$

这里，我们要求 $|k| < \pi$ 在第一布里渊区。这是由于如果 n 取整数，我们发现 $e^{ikn} = e^{i(k-2\pi)n}$ 。换言之，我们无法区分相差 2π 的动量 k 和 $k - 2\pi$ 。对比之前的式(1.31)，我们发现唯一的区别就是现在 $\epsilon_k = -2t \cos k \in [-2t, 2t]$ ——与自由空间中不同，晶格中的粒子能量存在上界。另一方面，如果我们关注于 $|k| \ll 1$ ，可以作展开 $\epsilon_k \approx tk^2 = k^2/2m_{\text{eff}}$ ，这里有效质量 $m_{\text{eff}} = 1/2t$ 可以和费米子真实质量差很多。

我们这里的推导展示了多体物理中的重要概念——**有效理论**。任何实际系统都是非常复杂的，不论是固体材料、冷原子系统、或者夸克胶子等离子体。我们在试图理解这些系统的特定物理性质（常常是低能性质）的时候，常常首先要理解对这些性质最重要的自由度（常常是低能自由度），分析出只包含这些自由度的哈密顿量，从而进行计算。马上我们会看到有效理论的另一个例子。

1.4.2 费米 Hubbard 模型

下面我们在无相互作用的格点模型(1.56)中加入相互作用。一般说来，相互作用项可以同时包括不同格点的算符

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int dx dy U(x-y) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(x) \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(y) \hat{\psi}_{\sigma}(y) \hat{\psi}_{\sigma'}(x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{n_1, n_2, n_3, n_4} \int dx dy U(x-y) \phi_0(x-n_1) \phi_0(y-n_2) \phi_0(y-n_3) \phi_0(x-n_4) \hat{a}_{n_1,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n_2,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n_3,\sigma} \hat{a}_{n_4,\sigma}. \end{aligned} \quad (1.57)$$

然而，如果假设 $U(x)$ 随着距离 x 衰减的足够快，我们仍然可以类比单粒子部分，假设最重要的贡献来自于 $n_1 = n_2 = n_3 = n_4$ 。同时， $\sigma = \sigma'$ 的部分由于泡利不相容原理 $\hat{a}_{n,\sigma}^2 = 0$ 所以等于 0，我们就得到

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \hat{a}_{n,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{n,\uparrow} \hat{a}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{n,\downarrow} = U \sum_n \hat{n}_{n,\uparrow} \hat{n}_{n,\downarrow}. \quad (1.58)$$

这样最简单的相互作用项被称为 **Hubbard 相互作用**。再加上单粒子跃迁部分，完整的费米 Hubbard 模型就写作

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_n \left[-t \sum_{\sigma} (\hat{a}_{n,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n+1,\sigma} + \text{H.C.}) - \mu \sum_{\sigma} \hat{a}_{n,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n,\sigma} + U \hat{n}_{n,\uparrow} \hat{n}_{n,\downarrow} \right]. \quad (1.59)$$

这里我们加入了化学势 μ 。这一项有什么作用？如果我们只考虑确定的粒子数 N ，化学势的贡献只是一个常数。另一方面，加入化学势允许我们考虑巨正则系综：这个时候我们问系统基态的时候并非限制在某个粒子数的子

空间，而是要对比不同粒子数 N 的子空间之中的基态，选取其中能量最低的一个。而选出的基态是哪个，对应的粒子数 N 是多少，都是通过调节化学势来选择的。

对于费米 Hubbard 模型，每个格点上填充数最大是 2，我们就将每个格点平均填充一个粒子的情况称为半填充，这时总粒子数则等于格点数 L 。在这个练习里，我们将证明半填充严格对应 $\mu = U/2$ ，且这时系统有 $\text{SO}(4)$ 对称性。这一结论适用于任何二分晶格：把所有格点分成 A 、 B 两类，哈密顿量只包含费米子在 A 与 B 之间跃迁的项；对于一维系统，我们可以选取 A 、 B 分别为奇数、偶数格点。

练习 1.5 半填充费米 Hubbard 模型的 $\text{SO}(4)$ 对称性 在这个练习中，我们进一步分析半填充的费米 Hubbard 模型

1. 验证 $\mu = U/2$ 的费米 Hubbard 哈密顿量在粒子-空穴变换 $\hat{a}_{n,\sigma} \rightarrow (-1)^n \hat{a}_{n,\sigma}^\dagger$ 下不变，解释这说明 $\mu = U/2$ 对应系统半填充 $\sum_{n,\sigma} \langle n_{\sigma,n} \rangle = L$ 。
2. 对于任意 μ ，证明费米 Hubbard 模型在 $\text{SU}(2)$ 自旋转动变换下不变，即 $[\hat{\mathbf{S}}, \hat{H}] = 0$ 。这里，我们定义了总自旋算符（即转动变换生成元） $\hat{\mathbf{S}} = \sum_n \hat{\mathbf{s}}(n)$ 。
3. 对于 $\mu = U/2$ 的半填充情况，如果我们只对 \uparrow 做粒子-空穴变换，验证这一变换等价于哈密顿量中 $U \rightarrow -U$ 。容易发现变换后哈密顿量仍然具有 $\text{SU}(2)$ 自旋转动对称性，它们对应于变换前的什么对称性？这些新的对称操作的生成元 $\hat{\eta}$ 是什么？

综合上述所有结果，我们可以得知半填充费米 Hubbard 模型具有 $\text{SU}(2) \times \text{SU}(2) = \text{SO}(4)$ 的对称性，这一对称性对费米 Hubbard 模型的相图有很重要的限制。

现在，我们在半填充下考虑 $U \gg t$ 的极限。当我们忽略 t ，每个格点间解耦合；单个格点上有四个态 $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle = \hat{a}_\uparrow^\dagger |0\rangle, |\downarrow\rangle = \hat{a}_\downarrow^\dagger |0\rangle, |2\rangle = \hat{a}_\uparrow^\dagger \hat{a}_\downarrow^\dagger |0\rangle\}$ ，能量分别是

$$\hat{H}|0\rangle = 0, \quad \hat{H}|\uparrow\rangle = -\frac{U}{2}|\uparrow\rangle, \quad \hat{H}|\downarrow\rangle = -\frac{U}{2}|\downarrow\rangle, \quad \hat{H}|2\rangle = 0. \quad (1.60)$$

类似之前晶格哈密顿量的讨论，在 U 很大的情况下，我们可以假设每个格点只能处于 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$ 上。这样，一个费米子模型的等效自由度就变成了自旋自由度。自旋的哈密顿量是什么？回答这一问题的方式还是利用微扰论方法计算跃迁 t 带来的能量修正。在量子力学课程中的简并微扰论中，我们需要推导简并空间 $\mathcal{S} = \{|i\rangle\}$ 中的有效哈密顿量，在二阶，这是由于空间中的态与其他态的耦合导致的

$$\langle i_1 | \delta \hat{H}_{\text{eff}} | i_2 \rangle = \langle i_1 | \delta \hat{H} | i_2 \rangle + \sum_{a \notin \mathcal{S}} \frac{\langle i_1 | \delta \hat{H} | a \rangle \langle a | \delta \hat{H} | i_2 \rangle}{E_i - E_a}. \quad (1.61)$$

对于我们目前的问题，跃迁 $\delta \hat{H} = -t \sum_{\sigma} (\hat{a}_{n,\sigma}^\dagger \hat{a}_{n+1,\sigma} + \text{H.C.})$ 只耦合相邻格点。因此，我们可以用两个格点 $n = 1, 2$ 作为例子进行计算。其中 $|i\rangle$ 对应每个格点分别取 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$ 的四个直积态。直接计算得到

$$\delta \hat{H}_{\text{eff}} = -\frac{2t^2}{U} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)(\langle\uparrow\downarrow| - \langle\downarrow\uparrow|) = \frac{4t^2}{U} \left(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 - \frac{1}{4} \right) = J \left(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}_2 - \frac{1}{4} \right). \quad (1.62)$$

这里，计算中重要的观察就是只有相邻自旋反平行时跃迁才能发生，导致能量降低。具体推导中需要注意费米子算符交换带来的负号。我们看到跃迁引发了自旋-自旋相互作用，倾向于让相邻自旋反平行——这一现象被称为

为超交换。将所有最近邻的自旋相互作用加起来，除去常数部分，我们得到

$$\hat{H}_{\text{HS}} = J \sum_n \hat{\mathbf{s}}_n \cdot \hat{\mathbf{s}}_{n+1}. \quad (1.63)$$

这一自旋模型被称为 **Heisenberg 模型**，是量子自旋模型研究的基础。我们在费米 **Hubbard 模型** 中得到的是自旋-1/2 的反铁磁 **Heisenberg 模型**，然而一般来说，我们可以考虑任意自旋 S 的铁磁/反铁磁模型。下面的练习给出了铁磁 **Heisenberg 模型** 的一个来源。

练习 1.6 带自旋的玻色 Hubbard 模型 我们假设玻色子系统，每个玻色子也携带等效自旋-1/2 自由度，并且系统在 $\text{SU}(2)$ 自转动下不变。类似费米 **Hubbard 模型**，我们引入带自旋的玻色 **Hubbard 模型**

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_n \left[-t \sum_{\sigma} (\hat{b}_{n,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{n+1,\sigma} + \text{H.C.}) - \mu \sum_{\sigma} \hat{b}_{n,\sigma}^{\dagger} \hat{b}_{n,\sigma} + \frac{U}{2} (\hat{n}_{n,\uparrow} + \hat{n}_{n,\downarrow}) (\hat{n}_{n,\uparrow} + \hat{n}_{n,\downarrow} - 1) \right]. \quad (1.64)$$

为了区分，我们把湮灭算符写作了 $\hat{b}_{n,\sigma}$ 。现在，让我们假设 $t = 0$ 时，我们已经调节 μ 和 U 让系统处于每个格点一个粒子的状态。请证明 $t \ll U$ 时自旋的有效哈密顿量可以用于实现铁磁的 **Heisenberg 模型**。

1.5 Heisenberg 模型

本章的最后，我们以 **Heisenberg 模型** 为例，介绍二次量子化方法在研究自旋模型中的应用。具体来说，我们可以把任意自旋- S 的自旋算 $\{\hat{s}^x, \hat{s}^y, \hat{s}^z\}$ 符用玻色子产生湮灭算符 $\{\hat{b}, \hat{b}^{\dagger}\}$ 表达出来。我们先来回顾自旋算符的非零矩阵元。定义 $\hat{s}^{\pm} = \hat{s}^x \pm i\hat{s}^y$ ，所有非零矩阵元包括

$$\langle m+1 | \hat{s}^+ | m \rangle = \sqrt{(S+m+1)(S-m)}, \quad \langle m | \hat{s}^z | m \rangle = m. \quad (1.65)$$

其中， $m \in \{-S, -S+1, \dots, S\}$ 是磁量子数。为了将自旋空间用粒子数空间表达出来，我们首先定义粒子的真空 $|\Omega\rangle_a = |S\rangle$ 。此外，粒子数的增长对应着自旋的减小，即 $\hat{s}^z = S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}$ 。我们可以将 \hat{s}^+ 的矩阵元重新表达成

$${}_a \langle S-m-1 | \hat{s}^+ | S-m \rangle_a = \sqrt{(S+m+1)(S-m)} = {}_a \langle S-m-1 | \sqrt{2S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}} \hat{b} | S-m \rangle_a \quad (1.66)$$

因此，我们得到完整的对应关系

$$\hat{s}^+ = \sqrt{2S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}} \hat{b}, \quad \hat{s}^- = \hat{b}^{\dagger} \sqrt{2S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}}, \quad \hat{s}^z = S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}. \quad (1.67)$$

对于一般的 S 这个映射高度非线性，导致并不好用。一般我们都用它来处理大 S 的极限。假设粒子数仍然不大，我们有

$$\hat{s}^+ \approx \sqrt{2S} \hat{b}, \quad \hat{s}^- \approx \sqrt{2S} \hat{b}^{\dagger}. \quad (1.68)$$

同时， $\hat{s}^z = S - \hat{b}^{\dagger} \hat{b}$ 告诉我们在这一近似下自旋基本指向 z 方向（处于 $|S\rangle$ 态），只在附近有小涨落。

下面，我们用这一近似来处理 Heisenberg 自旋模型。为了方便，我们假设系统是一维。对于铁磁模型，分析容易推广到任意维度中的任意晶格；对于反铁磁模型，则要求系统晶格可二分，即不存在几何阻错。

1.5.1 铁磁模型

对于铁磁的 Heisenberg 模型，所有自旋指向 z 方向的 $|\mathbf{FM}\rangle = |S\rangle \otimes |S\rangle \otimes \dots \otimes |S\rangle$ 正好是系统严格的基态。这是由于

$$-|J| \sum_n \hat{\mathbf{s}}_n \cdot \hat{\mathbf{s}}_{n+1} = -|J| \sum_n \left(\hat{s}_n^z \hat{s}_{n+1}^z + \frac{1}{2} \hat{s}_n^+ \hat{s}_{n+1}^- + \frac{1}{2} \hat{s}_n^- \hat{s}_{n+1}^+ \right), \quad (1.69)$$

而可能改变自旋构型的后两项作用在 $|\mathbf{FM}\rangle$ 上正好等于 0。因此我们有 $\hat{H}_{\text{HS}}|\mathbf{FM}\rangle = -|J|S^2L|\mathbf{FM}\rangle$ 。因此，直接对每个格点上的自旋算符应用展开式(1.68)就可以很好的描述系统在基态附近的涨落。计算给出

$$\hat{H}_{\text{HS}} = -|J|S^2L + JS \sum_n (\hat{b}_{n+1}^\dagger - \hat{b}_n^\dagger)(\hat{b}_{n+1} - \hat{b}_n). \quad (1.70)$$

傅立叶变换到频率空间，我们得到

$$\hat{H}_{\text{HS}} = -|J|S^2L + 2JS \sum_{|k| < \pi} (1 - \cos k) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \quad (1.71)$$

和之前讨论一致，基态对应的正是玻色子的真空态。在基态上的低能激发态是 \hat{b}_k 粒子的单粒子态，在 $k = 0$ 附近展开给出二次型色散 $\epsilon_k = 2J(1 - \cos k) \approx JSk^2$ 。这些激发被称为磁子 (Magnon)，又被称为自旋波，对应自旋在 z 方向附近的小偏移。

值得注意，在 $k = 0$ 时磁子的激发能为 0。这是由于系统的 $\text{SU}(2)$ 对称性：我们选取的基态 $|\mathbf{FM}\rangle$ 只是指向不同方向的很多基态中的一个，本身不在转动下不变——这被称为对称性自发破缺。因此，如果我们把所有自旋沿着某个方向进行转动，系统能量不变——这正是 $k = 0$ 的自旋波。更一般的来说，如果基态破缺了连续对称性，我们都可以考虑一个作用在系统整体上 ($k = 0$) 的无穷小对称变换，这个变换不改变系统的能量，却对系统的状态进行了微扰。这就说明系统存在某种激发模式，在 $k \rightarrow 0$ 时有 $\epsilon_k \rightarrow 0$ ；这时，我们称系统没有能隙。这一现象被称为 Goldstone 定理，和超流体、超导体、乃至标准模型中给予基本粒子质量的 Higgs 机制都息息相关。另一方面，如果系统破缺的是离散的对称性，我们无法构造无穷小的变换，因此系统不会存在无能隙的激发模式。

1.5.2 反铁磁模型

现在我们考虑反铁磁 Heisenberg 模型。这时我们不能直接在 $\sum_n \hat{\mathbf{s}}_n \cdot \hat{\mathbf{s}}_{n+1}$ 中把所有自旋用(1.68)带入：这是因为反铁磁的基态并非所有自旋指向 z 方向。与之相对的是，我们期待基态可以近似写成 $|\mathbf{AFM}\rangle = |S\rangle \otimes |-S\rangle \otimes \dots \otimes |(-1)^{L-1}S\rangle$ 。值得注意，这并非哈密顿量的严格基态，例如 $\hat{s}_1^- \hat{s}_2^+ |\mathbf{AFM}\rangle \neq 0$ 。即使如此，我们仍然尝试在 $|\mathbf{AFM}\rangle$ 附近进行展开来研究系统的低能性质。

因此，在利用(1.68)把自旋写成玻色子前，我们对所有偶数格点自旋进行一次沿 x 轴的 π 旋转，这一变换使

得 $(\hat{s}^x, \hat{s}^y, \hat{s}^z) \rightarrow (\hat{s}^x, -\hat{s}^y, -\hat{s}^z)$, 从而将反铁磁态 |AFM> 映射成 |FM> 态。这时, 哈密顿量变成

$$\hat{H}_{\text{HS}} = -|J| \sum_n \left(\hat{s}_n^z \hat{s}_{n+1}^z - \frac{1}{2} \hat{s}_n^+ \hat{s}_{n+1}^+ - \frac{1}{2} \hat{s}_n^- \hat{s}_{n+1}^- \right) \quad (1.72)$$

带入(1.68)式, 我们得到

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{HS}} &= -|J|S^2L + |J|S \sum_n \left(2\hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n + \hat{b}_{n+1} \hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_{n+1}^\dagger \right) \\ &= -|J|S^2L - |J|SL + |J|S \sum_k \begin{pmatrix} \hat{b}_k^\dagger & \hat{b}_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \cos k \\ \cos k & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_k \\ \hat{b}_{-k}^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.73)$$

这时, 我们发现系统中出现了两个产生算符相乘的项。这也暗示我们旋起的态并非严格基态, 在这个态上作用哈密顿量会产生激发。这样的哈密顿量在量子多体系统中非常常见, 其求解需要额外的技巧, 被称为 **Bogoliubov** 变换。在后续章节, 我们也会从路径积分的角度再次回顾这一问题。

1.5.3 Bogoliubov 变换

让我们先考虑以下的两模式玻色子模型

$$\hat{H} = \epsilon_1 \hat{b}_1^\dagger \hat{b}_1 + \epsilon_2 \hat{b}_2^\dagger \hat{b}_2 + \lambda (\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2^\dagger + \hat{b}_1 \hat{b}_2) = \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger & \hat{b}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda \\ \lambda & \epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2^\dagger \end{pmatrix} - \epsilon_2. \quad (1.74)$$

我们希望通过把中间的 2×2 矩阵 (记作 h) 对角化, 这样就不再有产生算符相乘的项。为了这一目的, 我们尝试定义

$$\begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2^\dagger \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda \\ \lambda & \epsilon_2 \end{pmatrix} \rightarrow T^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda \\ \lambda & \epsilon_2 \end{pmatrix} T = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (1.75)$$

我们还希望在变换后 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2)$ 仍然是一组玻色子湮灭算符, 这样系统的激发谱就是产生对应的粒子。这就要求变换保持玻色子的对易关系:

$$\sigma^z = \left[\begin{pmatrix} \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{\beta}_1^\dagger & \hat{\beta}_2 \end{pmatrix} \right] = T \left[\begin{pmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2^\dagger \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger & \hat{b}_2 \end{pmatrix} \right] T^\dagger = T \sigma^z T^\dagger \quad (1.76)$$

这可以和我们一般的么正矩阵做一个对比: 对于行列式为 1 的二维么正矩阵 U 满足 $UU^\dagger = UIU^\dagger = I$, 即保持二维单位矩阵不变, 对应的群被称为 **SU(2)**。对于 T 矩阵, 我们则要求变换保持 σ^z 不变, 和单位矩阵相比多了一个负号, 构成的群被称为 **SU(1,1)**。这也非常类似 3+1 维时空洛伦兹群 **SO(3,1)** 和四维空间转动群 **SO(4)** 之间的关系。上式可以写成 $T\sigma^z T^\dagger \sigma^z = I$, 或者 $T^{-1} = \sigma^z T^\dagger \sigma^z$ 。因此, 我们知道

$$T^{-1} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \lambda \\ -\lambda & -\epsilon_2 \end{pmatrix} T = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & -\epsilon_2 \end{pmatrix}, \quad (1.77)$$

因此, $e_1, -e_2$ 可以由 $\sigma^z h$ 的本征值求出。哈密顿量就可以写成

$$\hat{H} = e_1 \hat{\beta}_1^\dagger \hat{\beta}_1 + e_2 \hat{\beta}_2^\dagger \hat{\beta}_2 + e_2 - \epsilon_2. \quad (1.78)$$

即基态能量是 $e_2 - \epsilon_2$, 激发包括能量为 e_1 和 e_2 的两种玻色子模式。上述讨论容易推广到更一般情况。对于费米子系统, 重要区别是(1.76)中我们应该考察反对易子, 这时 σ^z 变成了单位矩阵 I , 导致费米子 Bogoliubov 变换中矩阵 U 就是么正矩阵。

练习 1.7 Bogoliubov 变换下的基态 变换后, 基态 $|G\rangle$ 是 \hat{b} 粒子的真空。但是, 如何在原来 \hat{b} 粒子的基下把 $|G\rangle$ 表达出来? 考虑我们已经求解得到变换关系 $\hat{\beta}_1 = A\hat{b}_1 + B\hat{b}_2^\dagger$, 验证 $\hat{\beta}_1|G\rangle = 0$ 说明

$$|G\rangle \propto e^{-\frac{B}{A}\hat{b}_1^\dagger \hat{b}_2^\dagger} |\Omega\rangle. \quad (1.79)$$

这里 $|\Omega\rangle$ 是 \hat{b} 粒子的真空态, 应用在 Heisenberg 反铁磁中就能给出基态的修正。

把这一方法应用到反铁磁系统中, 我们就得到了最后的结果:

$$\hat{H}_{\text{HS}} = -|J|S^2L - |J|SL + 2|J|S \sum_k |\sin k| \left[\hat{\beta}_k^\dagger \hat{\beta}_k + \frac{1}{2} \right] \quad (1.80)$$

容易看出, 在这一近似下基态的能量修正对应 $|J|S \sum_k (|\sin k| - 1)$, 对应磁子的真空能减去忽略 \hat{b}^2 和 $(\hat{b}^\dagger)^2$ 项时的真空能。类似铁磁模型, 反铁磁模型的色散在 $k \rightarrow 0$ 和 $k \rightarrow \pi$ 都满足 $\epsilon_k \rightarrow 0$ 。这时因为我们曾经对偶数格点做了 x 方向的转动, 导致原始模型中自旋沿 y 轴的均匀转动 ($k \rightarrow 0$) 被映射到了 ($k \rightarrow \pi$)。

我们还发现铁磁和反铁磁色散在 k 很小的行为不同: 反铁磁有两支线性色散 ($\epsilon \sim k$) 的激发, 铁磁只有一只二次型激发 ($\epsilon \sim k^2$)。然而, 铁磁和反铁磁基态都破缺了沿 x 、沿 y 的两个转动对称性。这一结果暗示线性色散激发谱数目 n_1 、二次型激发谱数目 n_2 、破缺对称性数目 n_{ssb} 应该满足

$$n_1 + 2n_2 = n_{\text{ssb}}. \quad (1.81)$$

在高能物理中, 洛伦兹对称性要求所有无能隙粒子都只能是线性色散, 导致 $n_1 = n_{\text{ssb}}$ 。对于凝聚态系统, 则一般不存在这样的对称性要求。

最后, 需要指出这一节的近似是一个非常粗糙的估计, 在低维系统中往往由于量子涨落比较强导致不适用。我们虽然以一维 Heisenberg 反铁磁模型为例, 事实上相关分析对于二维或更高维的基态才是比较准确的。真正理解一维的反铁磁问题需要结合重整化群、场论的拓扑项、和一维严格解这一系列方法。最终结果表明, 一维反铁磁系统的基态性质依赖于自旋 S 是整数还是半整数: 对于整数自旋, 系统基态有能隙, 这一节的分析完全不适用; 只有对于半整数自旋, 系统才没有能隙。

第 2 章 多体系统的路径积分

内容提要

- 单粒子路径积分
- 经典量子对应
- 相干态路径积分
- Noether 定理
- Matsubara 求和

2.1 为什么需要路径积分?

我们在上一章已经把多体系统用二次量子化中的产生湮灭算符表示了出来。下一步，我们其实可以开始学习如何从二次量子化哈密顿量出发，进行我们所关心的物理量的计算——事实上，在上一章的后几节，我们已经给了好几个费米子系统和自旋系统中的例子；很多量子统计、固体理论乃至量子多体物理的课程也确实依照这个思路。然而，在这门课程中，我们要更进一步把二次量子化哈密顿量的统计物理问题改写成路径积分的形式，然后再利用路径积分方法进行物理量的计算。一个自然的问题是，为什么我们需要绕这个弯路？

首先，我们必须承认，对微观模型来说，大部分基于路径积分的计算都可以翻译成二次量子化哈密顿量的计算，反之亦然。很多时候，使用哪种方法进行计算主要取决于个人喜好。这就类似我们在考虑单粒子在势阱中散射问题时，可以使用波函数计算，也可以通过 Lippmann-Schwinger 方程求解。当然，不同方法在处理不同问题上难易程度不同，灵活性的选择使用的方法往往事半功倍。比如，对于自由粒子问题，直接利用算符表示进行计算往往足够简单；而对于微扰论计算，路径积分方法可以方便的把贡献相同的项组织起来，从而节约大量时间。另一方面，由于路径积分方法自然的把（虚）时间和空间放在了平等的地位，能更好的揭示系统的时空对称性，方便的给出系统中的各种恒等式。

此外，正如我们在上一章所提到的，我们对量子多体理论的研究不只局限在微观模型，还需要讨论系统低能下的普适性质。这时，我们需要基于系统对称性，构造描述低能自由度的最一般模型（事实上，粒子物理中的很多研究也是基于同样的思路），并分析哪些项对低能物理有着最重要的贡献。前一步最方便的方法就是把拉氏量密度对量子场进行梯度展开；而后一步正好对应于量子场论中的重整化群——这一方法在研究量子多体理论中取得了巨大的成功，是研究相与相变的基石。另一些成熟的理论工具如副本（Replica）方法、大 N 展开等也可以直接应用在路径积分中，大大扩充了多体物理研究的“工具箱”。

2.2 单粒子路径积分

在量子力学中，我们常常关系系统的动力学演化，因此研究的是如何利用路径积分表达演化算符 $\hat{U} = e^{-i\hat{H}T}$ 。在这门课程，我们最终希望研究量子多体系统的统计性质，因此我们考虑配分函数

$$\mathcal{Z} = \text{tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \right). \quad (2.1)$$

这里，我们可以将 β 看成是把演化算符中的 T 代换成了 $-i\beta$ ，因此我们可以把 $e^{-\beta \hat{H}}$ 称为虚时演化。我们先来回顾单粒子系统的路径积分方法——我们将会看到多体系统的相干态路径积分可以看做单粒子路径积分的直接

推广。单粒子哈密顿量写作

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{x}). \quad (2.2)$$

2.2.1 路径积分推导

路径积分的基本思路是把量子系统的演化表示成对不同经典路径的加权求和。我们将演化算符拆分成

$$e^{-\beta\hat{H}} = e^{-\delta\tau\hat{H}} \dots e^{-\delta\tau\hat{H}} e^{-\delta\tau\hat{H}}. \quad (2.3)$$

这里 $\beta = \delta\tau N$ 。然后，我们就可以通过在不同小段之间插入 \hat{x} 和 \hat{p} 算符的本征态将算符代换成数。为了更好的类比多体系统的相干态路径积分，我们将单位算符表达成

$$\hat{1} = \left(\int dx_n |x_n\rangle\langle x_n| \right) \left(\int dp_n |p_n\rangle\langle p_n| \right) = \int \frac{dx_n dp_n}{\sqrt{2\pi}} e^{ip_n x_n} |x_n\rangle\langle p_n|. \quad (2.4)$$

插入到(2.3)中，我们得到

$$\int \prod_n \left[\frac{dx_n dp_n}{\sqrt{2\pi}} e^{ip_n x_n} \right] e^{-\delta\tau\hat{H}} \dots |x_{n+1}\rangle\langle p_{n+1}| e^{-\delta\tau\hat{H}} |x_n\rangle\langle p_n| \dots e^{-\delta\tau\hat{H}} |x_1\rangle\langle p_1| e^{-\delta\tau\hat{H}} |x_0\rangle\langle p_0|, \quad (2.5)$$

其中

$$\langle p_{n+1}| e^{-\delta\tau\hat{H}} |x_n\rangle \approx \left[1 - \delta\tau \left(\frac{p_{n+1}^2}{2} + V(x_n) \right) \right] \frac{e^{-ip_{n+1}x_n}}{\sqrt{2\pi}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ip_{n+1}x_n - \delta\tau H(p_{n+1}, x_n)}. \quad (2.6)$$

加入哈密顿量中包含更一般的项，如 $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$ ，为了将其用本征值带入，我们就要先利用对易关系把 \hat{p} 移动到 \hat{x} 的最左边，即 $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} = 2\hat{p}\hat{x} + i$ 。然后对应的经典哈密顿量 $H(p, x)$ 应该取成 $2px + i$ 。这种把 \hat{p} 永远放在 \hat{x} 左边的约定被称为正规序 (normal order)。带入到(2.5)中，我们有

$$\mathcal{Z} = \text{tr} \left(e^{-\beta\hat{H}} \right) = \int_{\text{PBC}} \prod_n \left[\frac{dx_n dp_n}{2\pi} \right] \prod_n \left(e^{ip_{n+1}(x_{n+1} - x_n) - \delta\tau H(p_{n+1}, x_n)} \right). \quad (2.7)$$

其中，我们利用 tr 把 $\langle p_0|$ 移动到了最左侧，导致周期性边界条件 $p_{N+1} = p_0$ 。路径积分的最后一步是取连续极限 $N \rightarrow \infty$ 。如果我们假设在极限下 x_n 可以用某个定义在 $\tau \in [0, \beta)$ 的连续函数 $x(\tau)$ 描述，就得到

$$\mathcal{Z} = \int_{\text{PBC}} Dx Dp \exp \left(\int_0^\beta d\tau [ip(\tau)\dot{x}(\tau) - H[p(\tau), x(\tau)]] \right) \equiv \int_{\text{PBC}} Dx Dp \exp(-S[p(\tau), x(\tau)]). \quad (2.8)$$

这里， Dx 和 Dp 是被称为泛函积分，即对 $x(\tau)$ 和 $p(\tau)$ 的函数形式进行求和。对于物理学研究者，我们将其理解成离散积分的极限就足够了。这就是单粒子路径积分的一般形式。

 **练习 2.1 高斯积分公式 A** 高斯积分是路径积分计算的核心，需要不断的熟悉巩固。

1. 对于 $z = x + iy$ 和 $\bar{z} = x - iy$, 证明

$$\int dz d\bar{z} e^{-a\bar{z}z} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx dy e^{-a(x^2+y^2)} = \pi/a, \quad (2.9)$$

这同时也说明 $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2/2} = \sqrt{2\pi/a}$ 。

2. 通过对角化和配方法, 对于 n 个实数变量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 和 $n \times n$ 对称矩阵 $\mathbf{A} = A_{ij}$, 证明有

$$\int \prod_i dx_i e^{-\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} / 2 + \mathbf{J}^T \mathbf{x}} = \sqrt{\frac{(2\pi)^n}{\det|\mathbf{A}|}} e^{\mathbf{J}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{J} / 2}. \quad (2.10)$$

3. 类似的, 证明对于 n 个复变量 $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ 和 $n \times n$ 厄米矩阵 $\mathbf{H} = H_{ij}$, 证明有

$$\int \prod_i dz_i d\bar{z}_i e^{-\bar{\mathbf{z}} \mathbf{H} \mathbf{z} + \bar{\mathbf{u}} \mathbf{z} + \bar{\mathbf{z}} \mathbf{u}} = \frac{\pi^n}{\det|\mathbf{H}|} e^{\bar{\mathbf{u}} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{u}}. \quad (2.11)$$

当应用在量子场论中时, 绝大部分时候我们不需要考虑 2π 或者 π 这些常数因子。

对于式(2.2)中的简单哈密顿量, 其动量依赖形式比较简单。我们可以进一步计算 $p(\tau)$ 的泛函积分。在多体物理的语言中, 这一操作常被称为“把 p 场积掉”。这一积分在离散化 τ 之后可以看成(2.10)的特例, 我们得到

$$\mathcal{Z} = \int_{\text{PBC}} Dx \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \left[\frac{\dot{x}(\tau)^2}{2} + V[x(\tau)] \right] \right) \equiv \int_{\text{PBC}} Dx \exp(-S[x(\tau)]). \quad (2.12)$$

其中 $S[x(\tau)]$ 是系统在虚时间的作用量; 值得注意, 在虚时间作用量中的势能前面是正号。如果我们进行代换 $\tau \rightarrow it$, 上式就回到了实时间的结果

$$-S_\tau = - \int d\tau \left[\frac{\dot{x}(\tau)^2}{2} + V[x(\tau)] \right] = i \int dt \left[\frac{\dot{x}(t)^2}{2} - V[x(t)] \right] = iS_t. \quad (2.13)$$

这里, 我们给作用量加入下标来区分虚时间和实时间情况。

2.2.2 经典量子对应

事实上, 形如(2.12)的模型在经典物理中一样会出现。比如我们考虑一个经典的一维原子链。每个原子处于整数位置 $n \in \mathbb{Z}$ 附近。简单起见, 我们先不考虑原子的动能; 每个原子的能量只依赖于他们相对于整数位置的偏移, 计作 x_n 。每个原子在一个外势场中, 对应势能函数为 $V(x_n)$; 同时, 相邻原子之间存在二次型排斥势能(等效于相邻原子间连着一个弹簧)。这样, 系统的能量可以写作

$$E = \sum_n \left[\frac{k}{2} (x_n - x_{n+1})^2 + V(x_n) \right]. \quad (2.14)$$

我们假设系统包含 L 个格点, 满足周期边界条件, 这个经典系统的配分函数写作

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{n=1}^L dx_n e^{-\beta E(\{x_n\})} = \int \prod_{n=1}^L dx_n e^{-\beta \sum_{n=1}^L \left[\frac{k}{2} (x_n - x_{n+1})^2 + V(x_n) \right]}. \quad (2.15)$$

接下来，我们假设低温极限 $\beta k \gg 1$ ，这时，由于相互作用的限制，相邻原子的位置差别不大。类似之前的讨论，我们引入连续变量 $x(\tau)$ 作为 $\{x_n\}$ 的连续极限。这样，我们得到

$$\mathcal{Z} \approx \int_{\text{PBC}} Dx \exp \left(- \int_0^L d\tau \left[\beta k \frac{\dot{x}(\tau)^2}{2} + \beta V[x(\tau)] \right] \right) \quad (2.16)$$

我们看到，除了一些系数，结果和单粒子路径积分(2.12)一致。如果我们把原子动能的贡献也考虑进来，结果也只需要额外乘以常数 $(\int dp e^{-\beta p^2/2})^L$ 。

这个推导告诉我们，量子力学中单个粒子的配分函数和某个经典原子链的配分函数一致。类似的，我们可以想象如果出发点是一个满足量子力学的一维的原子链，仍然可以按照上一小节的方法推导路径积分表示。如果把空间方向记做 y ，连续化后我们将得到在 (y, τ) 空间上的二维场 $x(y, \tau)$ 的泛函积分，又可以联系到一个二维的经典原子模型。更一般说来，一个 D 维量子系统的配分函数可以联系到一个 $D+1$ 维的经典系统。这就是由于对于量子系统在推导路径积分时我们需要把虚时间演化算符 $e^{-\beta \hat{H}}$ 离散化成很多段，这一离散化引入了新的空间（虚时间）方向 τ ；而对于经典系统，坐标与动量对易，因此可以直接进行泛函积分。

这一关系有深刻的物理结果。我们可以通过对于经典系统的相和相变的理解，直接得到对量子系统相和相变的预言。例如，统计物理的计算指出，经典 Ising 模型在一维不存在相变，然而对于二维 Ising 模型，严格解指出在系统尺寸趋于无穷的热力学极限下存在 Z_2 对称性破缺的相变。我们假设某个量子模型，称为量子 Ising 模型，对应于经典 Ising 模型。一般来说，调节温度对应于调节量子系统哈密顿量参数。这样，我们知道在一维无限长量子 Ising 模型中，基态（对应零温 $\beta = \infty$ ）存在调节哈密顿量参数导致的相变——被称为量子相变。另一方面，如果量子 Ising 处于有限温度， τ 方向的长度 β 是有限的，只有原始的空间方向 y 是无穷大的。值得注意，在讨论相变时，我们要把所有维度都趋于无穷大。因此，一维有限温度的量子 Ising 更类似一个一维的经典模型，故不存在量子相变。这样的讨论也可以适用于连续对称性破缺、格点规范理论……

练习 2.2 量子 Ising 模型 一维经典 Ising 模型的配分函数写作

$$\mathcal{Z} = \prod_n \left(\sum_{\sigma_n = \pm 1} e^{\beta J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}} \right). \quad (2.17)$$

证明它正比于单个量子自旋 $\hat{H} = h \hat{\sigma}^x$ 的配分函数。思路是在离散化(2.3)中插入 z 方向完备基 $I = \sum_{\pm} |\pm 1\rangle \langle \pm 1|$ 。请推导出 βJ 和 $\Delta \tau h$ 间的关系。事实上，这一计算可以推广到任意维度，给出 D 维量子 Ising 模型

$$\hat{H} = -g \sum_{\mathbf{r}} \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}^x - J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \hat{\sigma}_{\mathbf{r}}^z \hat{\sigma}_{\mathbf{r}'}^z. \quad (2.18)$$

这里 $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ 代表 \mathbf{r} 与 \mathbf{r}' 处于最近邻格点。在一般维度，量子模型所对应的经典 Ising 模型在 τ 方向和其他方向相互作用强度是不同的，存在各向异性。

2.2.3 路径积分中的关联函数

除了配分函数，路径积分还能帮助我们计算物理量之间的关联。这一节中我们来讨论路径积分的关联函数如何对应到算符表象下的关联函数。在算符表象中，我们把关联函数定义为

$$\langle \hat{O}_1 \hat{O}_2 \dots \rangle_{\text{Op}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \hat{O}_1 \hat{O}_2 \dots \right). \quad (2.19)$$

这里 Op 代表算符表象，后文中大多时候我们将会省略这一下标；另一方面，在路径积分中，关联函数的定义为

$$\langle O_1(\tau_1) O_2(\tau_2) \dots \rangle_{\text{PI}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int Dx Dp e^{-S[x(\tau), p(\tau)]} O_1(\tau_1) O_2(\tau_2) \dots \quad (2.20)$$

这里 PI 代表路径积分。该定义类似于在概率论中对随机变量求期望值。

首先值得注意的是，在路径积分里 $x(\tau)$ 和 $p(\tau')$ 都是数。因此，它们的位置可以任意交换。例如

$$\langle x(\tau_1) x(\tau_2) p(\tau_3) \rangle_{\text{PI}} = \langle x(\tau_2) x(\tau_1) p(\tau_3) \rangle_{\text{PI}} = \langle x(\tau_2) p(\tau_3) x(\tau_1) \rangle_{\text{PI}} = \dots \quad (2.21)$$

然而，在量子系统的算符表象中，不同算符之间往往不对易，因此一般不允许相互交换 $\langle \hat{O}_1 \hat{O}_2 \rangle_{\text{Op}} \neq \langle \hat{O}_2 \hat{O}_1 \rangle_{\text{Op}}$ 。

那如何把路径积分表示下的关联函数表达成算符的期望值呢？事实上，我们只需要回顾2.2.1小节中路径积分的推导过程。当我们在泛函积分中插入 $x(\tau)$ ，这对应着离散化后在 $n = \tau/\delta\tau$ 处插入了一个额外的 x_n 。类比(2.6)，我们预期

$$x_n e^{-ip_{n+1} x_n - \delta\tau H(p_{n+1}, x_n)} \approx \langle p_{n+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}} \hat{x} | x_n \rangle. \quad (2.22)$$

对 p_n 也可以类似推导。因此，假设 $\tau_1 > \tau_2$ ，路径积分的两点关联函数可以写作

$$\langle x(\tau_1) p(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} \left(e^{-(\beta - \tau_1) \hat{H}} \hat{x} e^{-(\tau_1 - \tau_2) \hat{H}} \hat{p} e^{-\tau_2 \hat{H}} \right) = \langle \hat{x}(\tau_1) \hat{p}(\tau_2) \rangle_{\text{Op}}. \quad (2.23)$$

这里，我们推广了实时间的 Heisenberg 演化

$$\hat{O}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{O} e^{-i\hat{H}t} \quad \rightarrow \quad \hat{O}(\tau) = e^{\hat{H}\tau} \hat{O} e^{-\hat{H}\tau}, \quad \frac{d\hat{O}(\tau)}{d\tau} = [\hat{H}, \hat{O}(\tau)]. \quad (2.24)$$

反之，对于 $\tau_1 < \tau_2$ ，我们则发现

$$\langle x(\tau_1) p(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} \left(e^{-(\beta - \tau_2) \hat{H}} \hat{p} e^{-(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}} \hat{x} e^{-\tau_1 \hat{H}} \right) = \langle \hat{p}(\tau_2) \hat{x}(\tau_1) \rangle_{\text{Op}}. \quad (2.25)$$

对于更一般的情况，我们形式化的引入虚时间的编时算符 \mathcal{T}_τ ，它的作用就是把形如 $\hat{O}_1(\tau_1) \hat{O}_2(\tau_2) \dots$ 的算符相乘中重新按照虚时间顺序把算符进行排列。这样，我们得到

$$\langle O_1(\tau_1) O_2(\tau_2) \dots \rangle_{\text{PI}} = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1) \hat{O}_2(\tau_2) \dots \rangle_{\text{Op}}. \quad (2.26)$$

即路径积分的关联函数总是对应于按照演化次序编时的算符关联函数。此外，我们容易看出，对于同一时刻的算符应当按照正规序进行排列。

2.2.4 路径积分与对易关系

既然我们可以把路径积分的关联函数联系到算符关联函数，那是不是也能在路径积分中看出算符之间的对易关系呢？尤其是，如何在路径积分中得到 $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ ？为了回答这一问题，我们首先要将对易关系写成关联函数的形式：对于任意 τ_0 和算符 $\hat{O}_1(\tau_1)\hat{O}_2(\tau_2)\dots$ ，都应该满足

$$-i\langle \mathcal{T}_\tau [\hat{x}, \hat{p}](\tau_0)\hat{O}_1(\tau_1)\hat{O}_2(\tau_2)\dots \rangle_{\text{Op}} = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1)\hat{O}_2(\tau_2)\dots \rangle_{\text{Op}}. \quad (2.27)$$

方便起见，我们假设只有两个算符 $\hat{O}_1 = \hat{O}_2 = \hat{x}$ ，并且 $\tau_0 \neq \tau_1 \neq \tau_2$ 。我们希望把等式两边写成路径积分关联函数的形式，这时遇到的第一个问题是并不能直接把 $[\hat{x}, \hat{p}](\tau)$ 拆开

$$\langle \mathcal{T}_\tau [\hat{x}, \hat{p}](\tau_0)\hat{x}_1(\tau_1)\hat{x}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}} \neq \langle \mathcal{T}_\tau \hat{x}(\tau_0)\hat{p}(\tau_0)\hat{x}_1(\tau_1)\hat{x}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}} - \langle \mathcal{T}_\tau \hat{p}(\tau_0)\hat{x}(\tau_0)\hat{x}_1(\tau_1)\hat{x}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}} = 0, \quad (2.28)$$

这是由于正规序永远保证在同一时刻算符中 \hat{p} 在 \hat{x} 的左侧。因此，正确的写法应该是

$$\langle \mathcal{T}_\tau \hat{x}(\tau)\hat{p}(\tau_0)\hat{x}_1(\tau_1)\hat{x}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}}|_{\tau \rightarrow \tau_0^+} - \langle \mathcal{T}_\tau \hat{x}(\tau)\hat{p}(\tau_0)\hat{x}_1(\tau_1)\hat{x}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}}|_{\tau \rightarrow \tau_0^-} = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1)\hat{O}_2(\tau_2)\dots \rangle_{\text{Op}}. \quad (2.29)$$

左边对应关联函数在 τ 在 τ_0 附近的不连续性。这时，所有关联函数都已经编时，我们可以把它们写在路径积分中，将结果表示成对 τ 求微分的形式

$$-i \frac{d}{d\tau} \langle x(\tau)p(\tau_0)x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} = \delta(\tau - \tau_0) \langle x(\tau_1)x(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} + \text{Reg}. \quad (2.30)$$

其中 **Reg.** 代表在 $\tau \rightarrow \tau_0$ 附近不会出现奇异行为的部分，类似第一项的贡献这种正比于 $\delta(x)$ 的贡献常常被称作接触项 (**contact term**)。

因此，在路径积分中证明对易关系转变成了对式(2.30)的证明。如何在路径积分中对这样严格的等式关系进行证明？为了解释这里面的技巧，我们先来看一个任意的定积分

$$C_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-S(x)}. \quad (2.31)$$

假设积分有足够好的收敛性，我们可以对 x 做任意的变换，都不应该改变积分的值 C_0 。特别的，我们可以对 x 平移一个常数 a ，这告诉我们

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-S(x)} - \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x+a) e^{-S(x+a)} = 0. \quad (2.32)$$

现在，假设 a 很小。保留到 a 的一阶，我们就得到了恒等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx [\partial_x f(x) - f(x)\partial_x S(x)] e^{-S(x)} = 0. \quad (2.33)$$

将这一推导推广到多变量情况就可以给出(2.30)。在多变量情况下，我们积分的对象是 $p(\tau)$ 和 $x(\tau)$ 的函数形式。因此，对于单变量积分的变量代换 $x \rightarrow x+a$ 现在对应于平移一个函数

$$x(\tau) \rightarrow x(\tau) + \delta x(\tau), \quad p(\tau) \rightarrow p(\tau) + \delta p(\tau). \quad (2.34)$$

值得指出，在平易之后我们还是对 $x(\tau)$ 和 $p(\tau)$ 进行泛函积分， $\delta x(\tau)$ 和 $\delta p(\tau)$ 的部分只是一个常函数。我们也可以把 τ 离散化，这样上式就对应于平移 $x_n \rightarrow x_n + a_n$ 。任意关联函数应该在这一变换下不变。让我们考虑 $\delta x(\tau) = 0$ 的特例，这时

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \int Dx Dp e^{-S} p(\tau_0) x(\tau_1) x(\tau_2) \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int Dx Dp e^{-S} x(\tau_1) x(\tau_2) \left(\int d\tau \delta p(\tau) p(\tau_0) [i\dot{x}(\tau) - p(\tau)] + \delta p(\tau_0) \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int Dx Dp e^{-S} x(\tau_1) x(\tau_2) \int d\tau \delta p(\tau) \left(p(\tau_0) [i\dot{x}(\tau) - p(\tau)] + \delta(\tau - \tau_0) \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

由于上式应对任意函数 $\delta p(\tau)$ 成立，这就要求

$$-i\langle \dot{x}(\tau) p(\tau_0) x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} = \delta(\tau - \tau_0) \langle x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} - \langle p(\tau) p(\tau_0) x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle_{\text{PI}}. \quad (2.36)$$

可以看到，结果正满足我们要求的形式(2.30)。

练习 2.3 编时关联函数的微分 我们同样可以在算符表示中证明(2.36)。

1. 我们先以两点函数为例。由于编时算符的存在，思考如下事实

$$\left\langle \frac{dO_1(\tau_1)}{d\tau_1} O_2(\tau_2) \right\rangle_{\text{PI}} = \frac{d}{d\tau_1} \langle O_1(\tau_1) O_2(\tau_2) \rangle_{\text{PI}} = \frac{d}{d\tau_1} \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1) \hat{O}_2(\tau_2) \rangle_{\text{Op}} \neq \left\langle \mathcal{T}_\tau \frac{d\hat{O}_1(\tau_1)}{d\tau_1} \hat{O}_2(\tau_2) \right\rangle_{\text{Op}}. \quad (2.37)$$

2. 具体来说，请利用编时算符定义证明

$$\frac{d}{d\tau_1} \left\langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1) \hat{O}_2(\tau_2) \right\rangle_{\text{Op}} = \left\langle \mathcal{T}_\tau \frac{d\hat{O}_1(\tau_1)}{d\tau_1} \hat{O}_2(\tau_2) \right\rangle_{\text{Op}} + \delta(\tau_1 - \tau_2) \left\langle \mathcal{T}_\tau [\hat{O}_1, \hat{O}_2](\tau_2) \right\rangle_{\text{Op}}. \quad (2.38)$$

3. 推广上述关系，证明等式(2.36)。

2.3 相干态路径积分

在上一节中我们已经对路径积分有了基本的认识，相关讨论都很容易推广到多体系统中。我们现在就来推导多体系统的路径积分。对于玻色子系统，我们甚至可以猜出最后的答案：我们可以先将空间离散化成格点模型，不同模式的场算符之间满足对易关系 $[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] = \delta_{xy}$ ，我们可以类比 $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ ，把不同位置的 $\hat{\psi}(x)$ 当作一系列广义坐标，把 $i\hat{\psi}^\dagger(x)$ 当成对应的广义动量。假设我们把他们的本征值记做 $\psi(x)$ 和 $\bar{\psi}(x)$ ，带入到(2.8)中，并取连续极限就得到了

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi \exp(-S[\bar{\psi}, \psi]), \quad S = \int_0^\beta d\tau \left[\int dx \bar{\psi} \partial_\tau \psi + H[\bar{\psi}, \psi] \right]. \quad (2.39)$$

$H[\psi, \bar{\psi}]$ 的定义就是在正规序（这里即要求 $\hat{\psi}^\dagger$ 在 $\hat{\psi}$ 的左边）下把形如(2.40)式的哈密顿量中的算符代换成本征值：

$$H[\psi, \bar{\psi}] = \int dx \bar{\psi}(x, \tau) \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + V(x) - \mu \right) \psi(x, \tau) + \frac{1}{2} \int dx dy U(x-y) \bar{\psi}(x, \tau) \bar{\psi}(y, \tau) \psi(y, \tau) \psi(x, \tau). \quad (2.40)$$

其中，我们加入了化学势项。此外，场在虚时间方向满足周期性边界条件

$$\psi(x, \beta) = \psi(x, 0), \quad \bar{\psi}(x, \beta) = \bar{\psi}(x, 0). \quad (2.41)$$

我们下面就来更仔细的证明上面基于类比的结果是正确的。

2.3.1 玻色子相干态路径积分

在上述类比中，不严格的地方就在于没有详细讨论所使用的场算符本征态，验证是否有形如(2.4)的完备性关系和内积 $\langle p|x\rangle = e^{-ipx}$ 。由于玻色子不同模式完全独立，我们这里以单格玻色子模式 \hat{a} 为例。事实上，产生/湮灭算符对应的本征态确实和坐标、动量的本征态有一定区别——它们并非厄米算符，并不一定可以在么正变换下进行对角化；并且对同一算符左本征态和右本征态并不互为共轭。例如，如果我们在粒子数空间写下产生算符 \hat{a}^\dagger 的右本征矢量方程

$$\hat{a}^\dagger \left(\sum_c c_n |n\rangle \right) = \bar{\psi} \left(\sum_c c_n |n\rangle \right), \quad \rightarrow \quad \begin{cases} c_n \sqrt{n+1} = \bar{\psi} c_{n+1} & (n > 0) \\ 0 = c_0 \bar{\psi} \end{cases}. \quad (2.42)$$

容易看出，方程不存在非平庸的解，因此我们无法谈论 \hat{a}^\dagger 的右本征态。另一方面，对湮灭算符 \hat{a} 则有

$$\hat{a} \left(\sum_c c_n |n\rangle \right) = \psi \left(\sum_c c_n |n\rangle \right), \quad \rightarrow \quad \sqrt{n+1} c_{n+1} = \psi c_n. \quad (2.43)$$

这一递推关系的解可以写作

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\psi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{\psi \hat{a}^\dagger} |0\rangle, \quad \hat{a} |\psi\rangle = \psi |\psi\rangle. \quad (2.44)$$

这里，我们没有对 $|\psi\rangle$ 进行归一化， ψ 是任意复数。该本征态 $|\psi\rangle$ 被称为相干态。对上式取厄米共轭，容易验证

$$\langle \bar{\psi} | \hat{a}^\dagger = \langle \bar{\psi} | \bar{\psi}, \quad \langle \bar{\psi} | \psi = e^{\bar{\psi} \psi}. \quad (2.45)$$

这就证明了， $\langle \bar{\psi} | \psi = e^{\bar{\psi} \psi}$ 正好和 $\langle p|x\rangle = e^{-ipx}$ 在带入 $(x, p) = (\psi, i\bar{\psi})$ 后完全一致。类似的，我们可以证明相干态满足完备性关系

$$\frac{1}{\pi} \int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi} \psi} |\psi\rangle \langle \bar{\psi}| = \hat{I}. \quad (2.46)$$

这一等式可以通过将本征值写成 $\psi = r e^{i\theta}$ 来证明

$$\text{L.H.S.} = \frac{1}{\pi} \int r dr d\theta e^{-r^2} \sum_{mn} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} r^{m+n} e^{i(m-n)\theta} |m\rangle \langle n| = \sum_n \frac{1}{n!} \int_0^\infty dr^2 e^{-r^2} r^{2n} |n\rangle \langle n| = \text{R.H.S.} \quad (2.47)$$

和(2.4)相对比，相干态完备关系中只相差一个 π^{-1} 因子，可以吸收到对场的泛函积分测度 $D\psi$ 和 $D\bar{\psi}$ 中——我们并不需要认真讨论这个积分测度的定义，这个常数因子不会改变任何可观测量。因此，当存在多个激发模式，我们对每个模式分别引入相干态，依照2.2.1节的推导，我们就能得到形如(2.39)的结果。

 **练习 2.4 相干态路径积分** 利用上述结果，在包含多个模式的玻色子系统中完成相干态路径积分的完整推导。

2.3.2 费米子相干态路径积分

对于费米子，情况就更加复杂。这是因为即使对于湮灭算符

$$\hat{a}(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) = \phi(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle), \quad \rightarrow \quad c_1|0\rangle = \phi(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \quad (2.48)$$

也不存在非平庸解。事实上，这与不同费米子模式的交换反对称息息相关。假如费米子湮灭算符存在本征态，我们就会发现如下矛盾

$$-\psi_2 \psi_1 |\psi_1, \psi_2\rangle = -\hat{a}_2 \hat{a}_1 |\psi_1, \psi_2\rangle = \hat{a}_1 \hat{a}_2 |\psi_1, \psi_2\rangle = \psi_1 \psi_2 |\psi_1, \psi_2\rangle. \quad (2.49)$$

这说明费米子算符的本征值 ψ 本身不能是通常的数，而应该是满足交换反对称的一种全新的数学结构，被称为 Grassmann 代数；与之相对，我们把传统的数称为 c 数，这里 c 代表对易。

Grassmann 数满足一整套全新的运算规则。首先，Grassmann 数 ψ 和费米子算符一样，满足交换反对称

$$\psi_i \psi_j = -\psi_j \psi_i, \quad \psi_i \hat{a}_j = -\hat{a}_j \psi_i. \quad (2.50)$$

将这一关系应用到 $i = j$ 的情况，我们就发现 $\psi_i^2 = 0$ ，这和 $\hat{a}_i^2 = 0$ 也是一致的。由于这一性质，我们知道任意 Grassmann 数的函数等价于泰勒展开到一阶，例如

$$e^{c_0 \psi_1 \psi_2} = 1 + c_0 \psi_1 \psi_2. \quad (2.51)$$

Grassmann 数的导数和通常的导数规则类似，我们有

$$\partial_\psi 1 = 0, \quad \partial_\psi \psi = 1. \quad (2.52)$$

唯一要注意的是由于 ∂_ψ 改变了 Grassmann 数的数目，它也应该满足和所有 Grassman 场、产生湮灭算符的反对易关系。例如

$$-\psi_2 = -\partial_{\psi_1}(\psi_1 \psi_2) = \partial_{\psi_1}(\psi_2 \psi_1) = -\psi_2 \partial_{\psi_1} \psi_1 = -\psi_2. \quad (2.53)$$

Grassmann 数的积分则和通常很不同，定义是

$$\int d\psi 1 = 0, \quad \int d\psi \psi = 1. \quad (2.54)$$

事实上，容易发现这和导数的定义(2.52)非常相似。例如

$$\int d\psi f(\psi) = \int d\psi [f(0) + f'(0)\psi] = f'(0) = \partial_\psi f(\psi). \quad (2.55)$$

练习 2.5 高斯积分公式 B 在这个练习中，我们来推导 Grassmann 数的高斯积分公式。

1. 对于独立的 Grassmann 变量 ψ 和 $\bar{\psi}$ （他们之间不存在“共轭”关系），证明

$$\int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi} a \psi} = a. \quad (2.56)$$

2. 验证 Grassmann 积分测度在变量变换下满足

$$\begin{aligned} 1). \quad \psi &= \psi' + \psi_0, & d\psi &= d\psi', \\ 2). \quad \psi_i &= \sum_j M_{ij} \psi'_j, & d\psi'_n \dots d\psi'_2 d\psi'_1 &= \det|\mathbf{M}| d\psi_n \dots d\psi_2 d\psi_1. \end{aligned} \quad (2.57)$$

其中 ψ_0 是 Grassmann 常量， M_{ij} 是通常的 c 数。

3. 证明对于多个 Grassmann 变量的高斯积分，满足

$$\int \prod_i (d\bar{\psi}_i d\psi_i) e^{-\bar{\psi} \mathbf{H} \psi + \bar{\psi} \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\eta} \psi} = \det|\mathbf{H}| e^{\boldsymbol{\eta} \mathbf{H}^{-1} \boldsymbol{\eta}}. \quad (2.58)$$

利用 Grassmann 变量 ψ ，我们可以引入费米子湮灭算符的相干态

$$\hat{a}|\psi\rangle = \psi|\psi\rangle, \quad |\psi\rangle = |0\rangle - \psi|1\rangle = e^{-\psi \hat{a}^\dagger} |0\rangle, \quad \langle \bar{\psi} | \psi \rangle = 1 + \bar{\psi} \psi = e^{\bar{\psi} \psi}. \quad (2.59)$$

此外，我们可以证明完备性关系

$$\int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi} \psi} |\psi\rangle \langle \bar{\psi}| = \hat{I}. \quad (2.60)$$

结合(2.59)和(2.60)，我们发现费米子相干态满足和玻色子相同的关系。因此，费米子路径积分的推导中大部分计算都和玻色子系统没有区别。结果我们就再次得到

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi \exp(-S[\bar{\psi}, \psi]), \quad S = \int_0^\beta d\tau \left[\int dx \bar{\psi} \partial_\tau \psi + H[\bar{\psi}, \psi] \right]. \quad (2.61)$$

然而，由于 Grassman 数的特性，费米子路径积分的边界条件与玻色子不同。这是由于

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right) &= \sum_n \langle n | e^{-\beta\hat{H}} | n \rangle = \sum_n \int d\bar{\psi}d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \langle n | \psi \rangle \langle \bar{\psi} | e^{-\beta\hat{H}} | n \rangle \\ &= \sum_n \int d\bar{\psi}d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \langle \bar{\psi} | e^{-\beta\hat{H}} | n \rangle \langle n | -\psi \rangle = \int d\bar{\psi}d\psi e^{-\bar{\psi}\psi} \langle \bar{\psi} | e^{-\beta\hat{H}} | -\psi \rangle\end{aligned}\quad (2.62)$$

在证明这一关系时，我们需要注意到只有在 $|\psi\rangle$ 和 $|\bar{\psi}\rangle$ 都取 $|0\rangle$ 或都取 $|1\rangle$ 的时候，贡献才不为 0。这时，才能利用 Grassmann 变量的反对易性推导出等式第二行。该结果说明，对于费米子场，我们应该选取反周期边界条件

$$\psi(x, \beta) = -\psi(x, 0), \quad \bar{\psi}(x, \beta) = -\bar{\psi}(x, 0). \quad (2.63)$$

2.3.3 多体系统的关联函数

路径积分方法的一个好处就是方法的普适性。我们之前在单粒子路径积分中建立起的理解都可以直接推广到多体系统的相干态路径积分中。例如，路径积分的关联函数与二次量子化算符的关联函数仍然满足

$$\langle \psi(x_1, \tau_1) \psi(x_2, \tau_2) \bar{\psi}(x_3, \tau_3) \bar{\psi}(x_4, \tau_4) \rangle_{\mathrm{PI}} = \langle T_\tau \hat{\psi}(x_1, \tau_1) \hat{\psi}(x_2, \tau_2) \hat{\psi}^\dagger(x_3, \tau_3) \hat{\psi}^\dagger(x_4, \tau_4) \rangle_{\mathrm{OP}}. \quad (2.64)$$

不过，需要注意的是对于费米子，不管是路径积分表象还是算符表象，我们都要记入交换反对易所带来的负号。在路径积分中，这对应

$$\begin{aligned}\langle \psi(x_1, \tau_1) \psi(x_2, \tau_2) \bar{\psi}(x_3, \tau_3) \bar{\psi}(x_4, \tau_4) \rangle_{\mathrm{PI}} &= \zeta \langle \psi(x_2, \tau_2) \psi(x_1, \tau_1) \bar{\psi}(x_3, \tau_3) \bar{\psi}(x_4, \tau_4) \rangle_{\mathrm{PI}} \\ &= \langle \psi(x_2, \tau_2) \bar{\psi}(x_3, \tau_3) \psi(x_1, \tau_1) \bar{\psi}(x_4, \tau_4) \rangle_{\mathrm{PI}} = \zeta \langle \psi(x_2, \tau_2) \bar{\psi}(x_3, \tau_3) \bar{\psi}(x_4, \tau_4) \psi(x_1, \tau_1) \rangle_{\mathrm{PI}} = \dots\end{aligned}\quad (2.65)$$

注意，Grassmann 数也是数，交换只是出一个负号——这和算符不同：费米子算符的反对易关系 $\hat{\psi}(x_1, \tau_1) \hat{\psi}(x_2, \tau_2) = -\hat{\psi}(x_2, \tau_2) \hat{\psi}(x_1, \tau_1)$ 只对 $\tau_1 = \tau_2$ 才成立。对于算符表象，需要注意编时算符在调整算符顺序时也要考虑负号。例如，对于 $\tau_2 > \tau_1$ ，我们有

$$T_\tau \hat{\psi}^\dagger(x_1, \tau_1) \hat{\psi}(x_2, \tau_2) = \zeta \hat{\psi}(x_2, \tau_2) \hat{\psi}^\dagger(x_1, \tau_1). \quad (2.66)$$

由于我们之前证明了 Grassmann 数也可以做变量代换，2.2.4 小节引入的技巧对费米子也同样适用。例如，通过考虑 $\bar{\psi}(x, \tau)$ 的一个扰动，可以证明

$$\begin{aligned}-\partial_\tau \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(x', \tau') \rangle_{\mathrm{PI}} &= -\delta(x - x') \delta(\tau - \tau') - \mu \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(x', \tau') \rangle_{\mathrm{PI}} - \frac{\nabla^2}{2} \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(x', \tau') \rangle_{\mathrm{PI}} \\ &\quad + \int dy U(x - y) \langle \bar{\psi}(y, \tau) \psi(y, \tau) \psi(x, \tau) \bar{\psi}(x', \tau') \rangle_{\mathrm{PI}}.\end{aligned}\quad (2.67)$$

 **练习 2.6 关联函数的严格等式** 请分别按照 2.2.4 小节介绍的路径技巧和练习 2.3 中介绍的算符方法推导上式。

2.4 对称性与守恒律

对称性对量子多体系统的性质有很强的限制。自从本科的理论力学课程，我们就知道量子力学的守恒律来自于系统作用量的对称性——即 Noether 定理。然而，在之前的课程中，我们主要关注满足经典运动方程的系统。现在，利用路径积分表示，我们可以方便的将讨论推广到量子系统中。在量子力学中守恒律是什么？一般来说，通常的守恒律由守恒方程描述 $\partial_\mu \hat{J}^\mu = 0$ ，这里我们引入 $x^\mu = (\tau, x)$ ，而 \hat{J}^μ 是满足 Heisenberg 方程的算符。类比之前对易关系的证明，我们预期在路径积分表示中有

$$\partial_\mu \langle J^\mu(x^\mu) O(x_1^\mu) O(x_2^\mu) \rangle_{\text{PI}} = \delta(x^\mu - x_1^\mu) \langle [J^0, O](x_1^\mu) O(x_2^\mu) \rangle_{\text{PI}} + \delta(x^\mu - x_2^\mu) \langle O(x_1^\mu) [J^0, O](x_2^\mu) \rangle_{\text{PI}} \quad (2.68)$$

这里，等式右边 $[J^0, O]$ 的含义是先把场改写成算符，计算对易子，再变回新算符所对应的场。事实上，这一对易子正是算符 O 在局域对称操作下的变换形式。这种对称性保证的等式被称为 Wald 恒等式，在凝聚态物理的输运问题、高能物理的散射问题中都有重要应用。

作为最简单的例子，让我们考虑接触相互作用的玻色子系统，即 $U(x-y) = U\delta(x-y)$ 。这时有

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi \exp\left(-\int dx^\mu \left[\bar{\psi}(\partial_\tau - \mu)\psi + \frac{1}{2}\partial_x \bar{\psi} \partial_x \psi + \frac{U}{2}\bar{\psi}\psi\psi\psi\right]\right), \quad (2.69)$$

我们看到作用量中每一项都包含相等数目的 ψ 和 $\bar{\psi}$ 。因此，假设我们引入 $\psi(x, \tau) = e^{i\theta}\psi'(x, \tau)$ ，作用量对 $\psi'(x, \tau)$ 依赖形式和原始 $\psi(x, \tau)$ 场的形式一致。这个时候，我们就称这个变换是一个对称性。在这里，由于变换由一个相位 $e^{i\theta}$ 描述，通常被称为 U(1) 对称性。

利用这一对称性，我们可以推导形如(2.68)的恒等式，思路十分类似2.2.4小节，其核心仍然是任何路径积分表达式应该在场的变换下不变。我们将对称变换中的常数 θ 改成一个时空坐标的函数 $\theta(x, \tau)$ ，要求 \mathcal{Z} 在变换 $\psi(x, \tau) = e^{i\theta(x, \tau)}\psi'(x, \tau)$ 下不变。保留到 $\theta(x, \tau)$ 的一阶，我们有

$$\begin{aligned} 0 &= \int D\bar{\psi} D\psi \left(i \int dx^\mu (\partial_\tau \theta) \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2} (\partial_x \theta) \bar{\psi} \partial_x \psi + \frac{1}{2} (\partial_x \theta) \partial_x \bar{\psi} \psi \right) \exp(-S[\psi, \bar{\psi}]) \\ &\equiv \int D\bar{\psi} D\psi \left(-i \int dx^\mu (\partial_\mu \theta) J^\mu \right) \exp(-S[\psi, \bar{\psi}]) = - \int D\bar{\psi} D\psi \left(-i \int dx^\mu \theta \partial_\mu J^\mu \right) \exp(-S[\psi, \bar{\psi}]). \end{aligned} \quad (2.70)$$

这样，利用 $\theta(x, \tau)$ 的任意性，我们就得到了 $\partial_\mu \langle J^\mu \rangle_{\text{PI}} = 0$ 。这里

$$J^\tau = i\bar{\psi}\psi, \quad J^x = -\frac{i}{2}\bar{\psi}\partial_x\psi + \frac{i}{2}\partial_x\bar{\psi}\psi \quad (2.71)$$

在这个推导中，最重要的事实在于当我们将对称性参数 θ 从常数改成场 $\theta(x, \tau)$ ，作用量的变化将只会包含正比于参数导数 $\partial_\mu \theta(x, \tau)$ (或更高阶导数) 的项。这是由于如果存在正比于 $\theta(x, \tau)$ 的部分，当我们假设 $\theta(x, \tau)$ 是常数时，作用量发生了改变，与对称性定义矛盾。如果我们的出发点不是 \mathcal{Z} ，而是类似 $\langle \psi(x_1, \tau_1) \bar{\psi}(x_2, \tau_2) \rangle_{\text{PI}}$ 关联函数，则会多出场 ψ 和 $\bar{\psi}$ 在变换下的贡献，对应部分给出接触项。

在这个例子里，我们只考虑了对场本身的变换，更一般的讨论应该包括场和坐标的同时变化，这对转动、平移这类时空对称性是必不可少的。然而，基本推导思路并没有什么变化。值得指出的是，虽然在大部分情况下我们都不用考察泛函积分测度 $D\bar{\psi}D\psi$ 的变换，在一些特例中他们的贡献非零。对于这类系统，经典运动方程仍然满足守恒律（研究经典方程只需考虑作用量而不存在对场的泛函积分），然而量子力学中守恒律不再成立——这时候我们称对称性出现了量子反常。

2.5 自由粒子系统

我们对路径积分基本框架的介绍到此告一段落。熟悉一个新理论工具的最好方法就是把它用在已经学过的简单系统中，无相互作用系统就是最常用的例子。因此，在进入下一章之前我们来尝试用路径积分方法计算无相互作用系统的配分函数以及单粒子场 ψ 、密度场 $\bar{\psi}\psi$ 的关联函数。

2.5.1 配分函数

我们首先考虑巨正则系统配分函数的计算。假设没有出现玻色-爱因斯坦凝聚，统计物理中的答案是

$$\beta F = -\ln Z = \zeta \sum_k \ln \left(1 - \zeta e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} \right). \quad (2.72)$$

无相互作用系统的作用量 S 是 ψ 的二次型。因此，在路径积分中计算配分函数就是计算高斯积分

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi \exp \left(- \int d\tau dx \left[\bar{\psi} (\partial_\tau - \mu) \psi + \frac{1}{2} \partial_x \bar{\psi} \partial_x \psi \right] \right). \quad (2.73)$$

核心就是利用对高斯积分公式(2.11)和(2.58)取 $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} = 0$ 或 $\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0$ 得到。除去一个常数因子，我们需要计算的都是 $\det[\mathbf{H}] = \det[\partial_\tau - \mu - \partial_x^2/2]$ 。在这样的表达式中，我们定义了算符的行列式。最朴素的理解还是在把时间和空间离散化，这时导数就会变成一个矩阵，可以计算行列式。例如在远离边界处，我们有 $(\partial_\tau)_{ij} = (\delta\tau)^{-1}(\delta_{i,j+1} - \delta_{i,j-1})$ 。在实际计算中，更简单的方法是首先变换到算符的本征函数空间，这时算符就变成了一个数。在自由粒子系统中，作用量具有时间和空间平移对称性，我们可以做傅立叶变换

$$\begin{aligned} \psi(x, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta L}} \sum_k \sum_n \psi_{k, \omega_n} e^{ikx - i\omega_n \tau}, \\ \bar{\psi}(x, \tau) &= \frac{1}{\sqrt{\beta L}} \sum_k \sum_n \bar{\psi}_{k, \omega_n} e^{-ikx + i\omega_n \tau}. \end{aligned} \quad (2.74)$$

值得注意的是频率 ω_n 的取值。对于玻色子系统，周期性边界条件要求

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\beta} n, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.75)$$

对于费米子系统，反周期性边界条件导致

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\beta} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2.76)$$

这样的 ω_n 被称为 Matsubara 频率。在零温极限下， $\beta \rightarrow \infty$ 导致离散频率的间隔为 0， ω_n 的取值布满整个实轴。将(2.74)式带入到(2.73)中，我们就得到

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{k, n} [d\bar{\psi}_{k, \omega_n} d\psi_{k, \omega_n}] \exp \left(- \sum_k \sum_n (-i\omega_n + \epsilon_k - \mu) \bar{\psi}_{k, \omega_n} \psi_{k, \omega_n} \right). \quad (2.77)$$

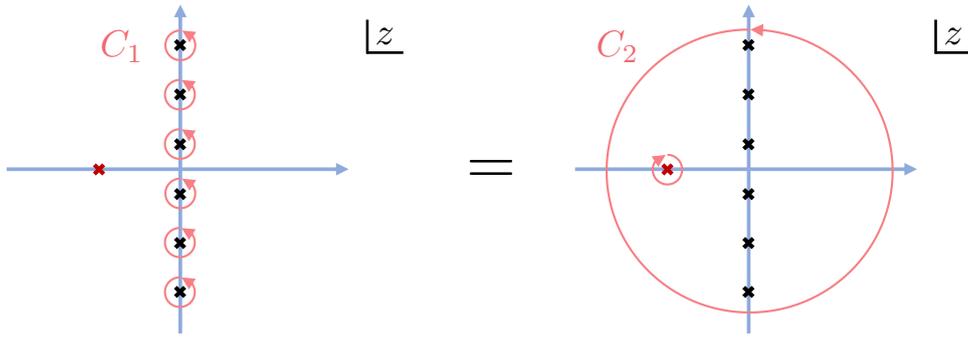


图 2.1: 费米子系统配分函数计算中 Matsubara 频率求和对应围道示意图, 黑色叉对应 $z = i\omega_n$ 位置的极点, 红色对应 $z = \xi$ 处的极点。

我们看到, 在频率空间不同 ω_n, k 的模型相互独立。高斯积分公式给出

$$\beta F = -\ln \mathcal{Z} = \zeta \sum_{k,n} \ln(-i\omega_n + \epsilon_k - \mu) + \text{cons.} \quad (2.78)$$

首先我们尝试利用极限下的已知结果确定常数部分。在 $\mu \rightarrow -\infty$ 时, 系统中不存在任何粒子, 导致巨配分函数 $\mathcal{Z} = 1$ 。因此, 我们可以将上式改写成

$$\beta F = -\zeta \sum_k \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \sum_n \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu'} \equiv -\zeta \sum_k \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \sum_n h(i\omega_n, \epsilon - \mu'). \quad (2.79)$$

接下来, 我们来计算对 n 的求和。不幸的是, 这个求和实际上不收敛, 这是因为级数在 n 很大时按照 $1/n$ 发散。在后续章节我们将会看到在计算相互作用修正中的频率求和时这种发散大都不会出现。出现这个问题的原因主要在于连续极限, 在离散化的路径积分中不会出现。因此, 解决这个问题一个思路是把 $h(z, \xi)$ 先替换成离散化下的 $\tilde{h}(z, \xi)$, 求和后再取 $\delta\tau \rightarrow 0$ 。

练习 2.7 配分函数的正规化 为了让(2.79)中的求和收敛, 我们来计算连续化之前的配分函数表达式。简单起见, 我们假设单个能量为 ϵ 的模式。依照(2.7)式, 我们有

$$S = \sum_n [\bar{\psi}_{n+1}(\psi_{n+1} - \psi_n) + (\epsilon - \mu)\delta\tau \bar{\psi}_{n+1}\psi_n]. \quad (2.80)$$

这里 $\psi_n = \psi(n\delta\tau)$ 是离散化的场。请证明上式对应于

$$\beta F = -\zeta \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \sum_n \frac{1}{(e^{-i\omega_n \delta\tau} - 1)/\delta\tau + \epsilon - \mu'} \equiv -\zeta \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\mu} d\mu' \sum_n \tilde{h}(i\omega_n, \epsilon - \mu'). \quad (2.81)$$

这里, $\tilde{h}(z, \xi)$ 在极限 $z \rightarrow -\infty$ 下指数收敛到 0, 在极限 $z \rightarrow \infty$ 下收敛到 ξ^{-1} 。

接下来，让我们尝试计算

$$I(\xi) = \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} \sum_n \tilde{h}(i\omega_n, \xi). \quad (2.82)$$

这种级数求和常被称为 **Matsubara** 求和，计算通用的思路是把求和转变成复变量 $z = i\omega_n$ 的围道积分

$$I(\xi) = \sum_n \text{Res}[\tilde{h}(z, \xi)g(z)] \Big|_{z=i\omega_n} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1} dz \tilde{h}(z, \xi)g(z), \quad (2.83)$$

这里， C_1 围道逆时针环绕每个 $z = i\omega_n$ 一圈，见图2.1。该等式要求辅助函数 $g(z)$ 在 $i\omega_n$ 处有极点，且对应留数都为 1。除去一个可加常数，解析函数由其所有极点和留数唯一确定。因此，如果我们进一步假设 $g(z)$ 在复平面其他地方都是解析的，就得到：

$$g(z) = \begin{cases} a + \frac{\beta}{e^{\beta z} - 1} & \text{Boson,} \\ a - \frac{\beta}{e^{\beta z} + 1} & \text{Fermion.} \end{cases} \quad (2.84)$$

这里 a 是一个常数，它的选取依赖于 $\tilde{h}(z, \xi)$ 的渐进行为。我们看到这个结果已经和玻色/费米分布非常像了。

为了方便，让我们尝试直接取连续极限 $\delta\tau = 0$ ，这时 $h(z, \xi)$ 只包含一个在 $z = \xi$ 处的极点。因此，为了计算 I ，希望将围道 C_1 连续变化成图2.1中的 C_2 围道，包含一个在 $z = \xi$ 附近的小圆和远处的大圆。我们希望选取 a 使得大圆贡献是 0。对于未正规化的 $h(z, \xi)$ ，这是没法做到的。因为 $h(z, \xi)$ 在很大 z 的极限下正比于 $1/z$ ，而 $g(z)$ 在 $z \rightarrow \pm\infty$ 下分别趋于 a 和 $a - \zeta\beta$ 。因此无论如何选择， $h(z, \xi)g(z)$ 在大 z 下总会呈现 $1/z$ 的行为，导致大圆弧贡献非零。然而，在我们计入离散化的修正之后发现 $\tilde{h}(-\infty, \xi) = 0$ 。因此，我们只需要选取 $g(\infty) = 0$ ，对应 $a = 0$ 。这样我们得到

$$I(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_2} dz \tilde{h}(z, \xi)g(z) = -\text{Res}[\tilde{h}(z, \xi)g(z)] \Big|_{z=\xi} = \zeta \frac{\beta}{e^{\beta\xi} - \zeta}. \quad (2.85)$$

带入(2.79)中进行积分，结果正是

$$\beta F = -\ln Z = \zeta \sum_k \ln \left(1 - \zeta e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} \right). \quad (2.86)$$

2.5.2 两点关联函数

下面我们考虑 ψ 的两点关联函数。对于平移不变的系统，我们引入 $G(x_{12}, \tau_{12}) = \langle \psi(x_1, \tau_1) \bar{\psi}(x_2, \tau_2) \rangle_{\text{PI}}$ (在不同教材和文章中虚时间两点函数定义可能会差一个负号，要额外小心)。由于 $\tau_1, \tau_2 \in [0, \beta]$ ，我们有 $\tau_{12} \in [-\beta, \beta]$ 。转换到算符表示中，该关联函数写作

$$G(x_{12}, \tau_{12}) = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{\psi}(x_1, \tau_1) \hat{\psi}^\dagger(x_2, \tau_2) \rangle_{\text{OP}} = \begin{cases} \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta - \tau_{12}) \hat{H}} \hat{\psi}(x_1) e^{-\tau_{12} \hat{H}} \hat{\psi}^\dagger(x_2) \right) & \tau_{12} > 0, \\ \zeta \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta + \tau_{12}) \hat{H}} \hat{\psi}^\dagger(x_2) e^{\tau_{12} \hat{H}} \hat{\psi}(x_1) \right) & \tau_{12} < 0. \end{cases} \quad (2.87)$$

这一结果表明 $G(\tau) = \zeta G(\beta + \tau)$ ，事实上该关系适用于任意算符的两点函数，被称为 KMS (Kubo-Martin-Schwinger) 条件。进一步，类似(1.39)的计算给出

$$G(x, \tau) = L^{-1} \sum_k e^{ikx - (\epsilon_k - \mu)\tau} (\zeta n(\epsilon_k - \mu) + \theta(\tau)) \quad (2.88)$$

这里 $n(\xi)$ 对应自由粒子的玻色/费米分布 $(e^{\beta\xi} - \zeta)^{-1}$ 。

下面我们尝试在路径积分中重新推导这一结果。在高斯积分中，一般的两点函数可以通过对高斯积分公式(2.11)和(2.58)作用导数算符 $\partial_{\bar{u}_j} \partial_{u_i}$ 或 $\partial_{\bar{\eta}_j} \partial_{\eta_i}$ ，并取 $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} = 0$ 或 $\boldsymbol{\eta} = \bar{\boldsymbol{\eta}} = 0$ 来计算。其结果都会得到

$$\langle z_i \bar{z}_j \rangle = \langle \psi_i \bar{\psi}_j \rangle = H_{ij}^{-1}. \quad (2.89)$$

因此，我们可以把结果形式化的写作

$$G(x_{12}, \tau_{12}) = \langle \psi(x_1, \tau_1) \bar{\psi}(x_2, \tau_2) \rangle_{\text{PI}} = (\partial_\tau - \partial_x^2/2)_{x_1, \tau_1; x_2, \tau_2}^{-1}. \quad (2.90)$$

类似上一小节的计算，等式右边最方便的算法是变换到频率空间再利用(2.89)，结果是

$$G(x, \tau) = \frac{1}{\beta L} \sum_{k, n} e^{ikx - i\omega_n \tau} G(k, \omega_n) = \frac{1}{\beta L} \sum_{k, n} e^{ikx - i\omega_n \tau} \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu}. \quad (2.91)$$

我们再次遇到了形如 $\sum_n h_G(i\omega_n)$ 的求和。和之前不同的是，对于 $\tau \neq 0$ ，求和中多了震荡因子 $e^{-i\omega_n \tau}$ ，因此是收敛的，不需要回到离散化情况（对于 $\tau = 0$ ，结果则类似上一小节）。我们就得到

$$\sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu} = -\text{Res}[h_G(z, \xi)g(z)]|_{z=\xi} = e^{-(\epsilon_k - \mu)\tau} g(\epsilon_k - \mu) \quad (2.92)$$

最后我们需要讨论的是函数 $g(z)$ 中常数 a 的选取。事实上，选取依赖于时间 τ ：对于 $\tau > 0$ ，容易看到 $h_G(z, \xi)$ 在 $z \rightarrow \infty$ 为 0，因此需要选择 $a = \beta$ 让 $g(-\infty) = 0$ 。类似的，对于 $\tau < 0$ ，需要选择 $a = 0$ 。综上所述，我们可以把求和的最终结果写成

$$\sum_n \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu} = \beta e^{-(\epsilon_k - \mu)\tau} (\zeta n(\epsilon_k - \mu) + \theta(\tau)). \quad (2.93)$$

将上式带入到(2.91)中，结果就和(2.88)式一致。

2.5.3 密度-密度关联

最后，我们考虑系统的密度-密度关联函数

$$G_n(x, \tau) = \langle \bar{\psi}(x, \tau) \psi(x, \tau) \bar{\psi}(0, 0) \psi(0, 0) \rangle_{\text{PI}}. \quad (2.94)$$

我们记得在自由粒子系统中，Wick 定理(1.37)保证四点函数可以写成两点函数的组合。在路径表示中，这可以从高斯积分公式(2.11)和(2.58)直接得到。例如

$$\langle z_i \bar{z}_j z_k \bar{z}_l \rangle = \partial_{\bar{u}_i} \partial_{u_j} \partial_{\bar{u}_k} \partial_{u_l} e^{\bar{\mathbf{u}} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}=\mathbf{0}} = H_{ij}^{-1} H_{kl}^{-1} + H_{il}^{-1} H_{kj}^{-1}. \quad (2.95)$$

对于费米子情况，则需要对注意由 Grassmann 变量交换导致的负号，结果正好对应(1.37)式。这样，我们得到

$$G_n(x, \tau) = \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(x, \tau) \rangle_{\text{PI}} \langle \psi(0, 0) \bar{\psi}(0, 0) \rangle_{\text{PI}} + \zeta \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(0, 0) \rangle_{\text{PI}} \langle \psi(0, 0) \bar{\psi}(x, \tau) \rangle_{\text{PI}} \quad (2.96)$$

这里，第一项中不包含不同时刻场之间的关联，被称为非连通部分 (dis-connected part)，其结果等于 n^2 ，这里 n 是系统的密度；第二项则被称为连通项 (connected part)，常常用下标 c 来标注

$$G_n(x, \tau)_c = \langle \bar{\psi}(x, \tau) \psi(x, \tau) \bar{\psi}(0, 0) \psi(0, 0) \rangle_{\text{PI}, c} = \zeta \langle \psi(x, \tau) \bar{\psi}(0, 0) \rangle_{\text{PI}} \langle \psi(0, 0) \bar{\psi}(x, \tau) \rangle_{\text{PI}} \quad (2.97)$$

很多时候，我们更关心的是在动量/频率空间的密度-密度关联。在傅立叶变换下，我们有

$$G_n(q, \omega_n) = \int dx \int_0^\beta d\tau e^{-iqx + i\omega_n \tau} G_n(x, \tau). \quad (2.98)$$

值得注意的是，不论 ψ 是玻色场还是费米场，密度场本身都是玻色型的（如包含两个费米型场的乘积）。因此，密度场满足周期性边界条件，需要选取 $\omega_n = 2\pi n/\beta$ 。对于 $q, \omega_n \neq 0$ ，容易发现非连通部分并不贡献。这时，将 ψ 场也用傅立叶分量展开，我们得到

$$G_n(q, \omega_n) = G_n(q, \omega_n)_c = \frac{\zeta}{L\beta} \sum_{m, k} \langle \psi_{k, \omega_m} \bar{\psi}_{k, \omega_m} \rangle \langle \psi_{k+q, \omega_n + \omega_m} \bar{\psi}_{k+q, \omega_n + \omega_m} \rangle. \quad (2.99)$$

这里 ω_m 对应 ψ 的频率，则需要依照(2.75)和(2.76)区分玻色还是费米子系统。最后的计算请大家在练习中完成，其中我们还将看到最终结果和 Friedel 震荡有直接的关系。

 **练习 2.8 密度关联中的 Matsubara 求和** 我们在这个练习里计算上式中对频率 m 的求和。

$$\sum_m \langle \psi_{k, \omega_m} \bar{\psi}_{k, \omega_m} \rangle \langle \psi_{k+q, \omega_n + \omega_m} \bar{\psi}_{k+q, \omega_n + \omega_m} \rangle = \sum_m \frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu} \frac{1}{-i\omega_m - i\omega_n + \epsilon_{k+q} - \mu} \quad (2.100)$$

1. 直接计算证明结果为

$$\sum_m \frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu} \frac{1}{-i\omega_m - i\omega_n + \epsilon_{k+q} - \mu} = \frac{g(\epsilon_k - \mu) - g(\epsilon_{k+q} - \mu)}{i\omega_n + \epsilon_k - \epsilon_{k+q}} \quad (2.101)$$

验证这里 a 取值任意，并解释其中的理由。

2. 容易看出，如果取 $\omega_n = 0$ ，上述结果对于玻色子系统与(1.43)式一致。这说明 Friedel 震荡计算其实可以转化为零频率的密度-密度关联函数计算。请直接在路径积分框架中解释这一关系（在作用量中加入微扰 $\lambda \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{0}) \hat{\psi}(\mathbf{0})$ 对应的项，计算局域密度发生的变化）。这给出了零频率关联函数连通部分的一个物理解释。

第3章 实验测量与响应函数

内容提要

□ 线性响应理论

□ 涨落耗散定理

□ Lehmann 谱表示

□ 多体系统中的电导

3.1 多体系统的实验探测

在上一章，我们把多体系统的配分函数表达成了路径积分的形式，并计算了路径积分下的关联函数。变换到算符表象下，这些关联函数对应于在虚时间演化 $e^{-\hat{H}\tau}$ 下的多点函数。那么，虚时间格林函数是否存在直接的物理意义呢？事实上，答案是否定的——实际系统的演化对应 $\tau = it$ 的实时间演化 $e^{-i\hat{H}t}$ 。因此，我们应该做的是先在虚时路径积分中计算关联函数，然后通过一定的理论方法，变换出有明确物理意义的实验可测量。这就是这一章中将会介绍的内容。为了这一目的，我们先来介绍一下对于理论物理工作者来说，多体物理的实验到底在测量什么量。

3.1.1 热力学量测量

首先，传统的统计物理实验包含对热力学函数的测量。例如，实验上常常测量系统的比热 $C_V = \partial E / \partial T|_{V,N}$ ，即在温度变化下能量的改变；磁化率 $\chi = \partial M / \partial H|_{T,V}$ ，即在外磁场变化下系统磁化强度的改变；和压缩率 $\kappa = -V^{-1} \partial V / \partial p|_{T,N}$ ，即在压强变化小体积的改变。这些实验都可以用来探测系统的基础性质，例如低温下比热随温度的关系可以揭示多体系统的低能激发是玻色子还是费米子；热力学量随着系统参数的奇异性标志着多体系统发生了相变。

比热 C_V 和磁化率 χ 在理论中的描述比较直接：原则上我们只需要对于给定计算(巨)自由能 $F(V, T, \mu, H) = -T \ln \mathcal{Z}$ ，然后通过对系统参数求导就可以得到它们——这是我们在热力学课程中学过的内容。值得注意的是，一般我们都在保持化学势不变巨正则系综中进行计算，因此当我们在粒子数不变的约束下求导数时，应当先用 $N = -\partial_\mu F$ 求解出 μ 与 N 的关系。对于压缩率 κ ，更常用的方法是利用

$$\kappa = -V^{-1} \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{T,N} = -n \left. \frac{\partial n^{-1}}{\partial p} \right|_T = \left. \frac{\partial n}{\partial \mu} \right|_T \quad (3.1)$$

这里，我们用到了热力学关系 $dp = sdT + nd\mu$ 。上式有很直观的物理意义：压缩率等于巨正则系综中粒子密度随着化学式的变化。

然而，很多时候直接计算自由能不一定是最方便的做法。对于磁化率 χ 和压缩率 κ 这类定义为观测量对哈密顿量参数（磁场或化学势）导数的量，我们也可以将其表达成虚时间的零频关联函数，类似上一章中对密度-密度关联与 RKKY 计算的讨论。假设参数 λ 在哈密顿量中对应 $\delta \hat{H} = \lambda \hat{O}_2$ ，对于 $\partial \langle O_1 \rangle / \partial \lambda$

$$\langle O_1 \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}(\lambda)} \int D\bar{\psi} D\psi O_1(\tau) \exp \left(-S_0 - \lambda \int_0^\beta d\tau' O_2(\tau') \right) \quad (3.2)$$

这里 τ 可以取任意值。值得注意，分母的配分函数 \mathcal{Z} 中也包含 $\delta\hat{H}$ 的项，因而也是 λ 的函数。因此，我们得到

$$\frac{\partial\langle O_1 \rangle}{\partial\lambda} = - \int_0^\beta d\tau' [\langle O_1(\tau)O_2(\tau') \rangle - \langle O_1(\tau) \rangle \langle O_2(\tau') \rangle] = -G_{O_1, O_2}(\omega_n = 0)_c. \quad (3.3)$$

等式右边正好是虚时间零频格林函数的连通部分。

3.1.2 线性响应实验

另一种常见的实验方式是首先制备一个处于平衡态的系统，然后在 $t = 0$ 时刻向系统上加入强度较弱的外场，然后测量系统在外场下的变化。这类测量中最著名的例子是电导率测量：研究系统在外加直流或交流电场下产生的电流大小。类似的实验测量还有热传导系数、自旋扩散系数等等。一般来说，假设外场对应哈密顿量中

$$\delta\hat{H}(t) = \int dx \lambda(x, t) \hat{O}_2(x), \quad (3.4)$$

在 $t \leq 0$ 时，系统处于平衡态，密度矩阵为 $\rho = e^{-\beta\hat{H}}/\mathcal{Z}$ 。在 $t > 0$ ，我们可以在相互作用绘景里把系统密度矩阵的演化表示成

$$\rho(t) = U_I(t) \rho U_I(t)^\dagger, \quad U_I(t) = \mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^t dt' \int dx \lambda(x, t') \hat{O}_2(x, t') \right). \quad (3.5)$$

这里，所有算符按照未加外场的原哈密顿量 \hat{H} 进行演化。这时，我们测量系统中 O_1 算符。保留到 λ 的一阶得到

$$\begin{aligned} \delta\langle O_1(x, t) \rangle &= -i \int_0^t dt' \int dx' \lambda(x', t') \text{tr} \left(\rho \left[\hat{O}_1(x, t), \hat{O}_2(x', t') \right] \right) \\ &\equiv \int_0^t dt' \int dx' G_{O_1, O_2}^R(x - x', t - t') \lambda(x', t'). \end{aligned} \quad (3.6)$$

这里，期望值是对平衡态密度矩阵 ρ 定义的。我们假设系统存在平移对称性，定义了推迟 (retarded) 格林函数 $G_{O_1, O_2}^R(x, t) = -i\theta(t) \left\langle \left[\hat{O}_1(x, t), \hat{O}_2(0, 0) \right] \right\rangle$ 。如果不存在平移对称性，推迟格林函数将是两个时间变量和两个空间变量的函数。 θ 函数的引入预示着系统响应的因果性：在 $t = 0$ 作用的扰动只会影响系统在 $t > 0$ 时候的行为。因此，对于费米子算符，我们应当将对易子改成反对易子。这一将系统响应和推迟格林函数联系起来的结果被称为 Kubo 公式。利用傅立叶变换，我们还可以定义系统对于给定频率、动量外场的响应函数 $G^R(p, \omega)$ ：

$$G^R(p, \omega) = \int dx dt e^{-ipx + i\omega t} G^R(x, t). \quad (3.7)$$

人们常常还会引入提前 (advanced) 格林函数 $G_{O_1, O_2}^A \equiv i\theta(-t) \left\langle \left[\hat{O}_1(x, t), \hat{O}_2(0, 0) \right] \right\rangle$ 。容易看到，组合 $G^R - G^A$ 正好对应于对易子 $\left\langle \left[\hat{O}_1(x, t), \hat{O}_2(0, 0) \right] \right\rangle$ 。

3.1.3 谱学实验

谱学实验也是探测系统激发模式的常用手段：一般会对系统施加光或其它粒子束，然后监测入射粒子和多体系统发生散射的速率，从而推断多体系统性质。理论上，散射发生的速率可以用费米黄金规则近似。我们仍然假设系统初态在平衡态 $\rho = e^{-\beta\hat{H}}/\mathcal{Z}$ ，并将 \hat{H} 本征态记做 $|E_n\rangle$ 。一般来说，发生散射时多体系统的能量、动量会发生变化，我们将对应能量、动量转移记做 ω 、 p 。从算符的角度来说，这说明系统和粒子束发生作用的形

式为

$$\delta\hat{H}(t) = \frac{\lambda}{L} \sum_p \hat{a}_{k-p}^\dagger \hat{a}_k \int dx e^{ipx-i\omega t} \hat{O}^\dagger(x) + \text{H.C.} = \frac{\lambda}{\sqrt{L}} \sum_p \hat{a}_{k-p}^\dagger \hat{a}_k \hat{O}_p^\dagger e^{-i\omega t} + \text{H.C.} \quad (3.8)$$

\hat{a}_k 是粒子束对应的湮灭算符, \hat{O}_p^\dagger 对应某个给定动量的算符 $\hat{O}_p^\dagger = L^{-1/2} \int dx e^{ipx} \hat{O}^\dagger(x)$ 。这样, 假设系统处于能量本征态 $|E_n\rangle$, 动量为 k 的入射粒子被散射到 $k-p$ 动量的速率正比于越迁速率

$$\Gamma_n(p, \omega) = \sum_m 2\pi |\langle E_m | \hat{O}_p^\dagger | E_n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \omega). \quad (3.9)$$

然后, 我们对所有初态 $|E_n\rangle$ 按照对应出现概率 $e^{-\beta E_n}/\mathcal{Z}$ 进行加权, 最后得到热平衡态的跃迁速率

$$S_O(p, \omega) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} 2\pi e^{-\beta E_n} |\langle E_m | \hat{O}_p^\dagger | E_n \rangle|^2 \delta(E_m - E_n - \omega). \quad (3.10)$$

这里 $S(k, \omega)$ 被称为动力学结构因子 (dynamical structure factor), 这便是理论上需要计算的物理量。我们也可以把它写在实空间, 结果得到

$$S_O(x, t) = \frac{1}{L} \sum_p \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{ipx-i\omega t} S_O(p, \omega) = \text{tr} \left(\rho \hat{O}(x, t) \hat{O}^\dagger(0, 0) \right). \quad (3.11)$$

🔥 **练习 3.1 量子气体中的 Bragg 谱** 在超冷原子气体中, 密度算符对应的动力学结构因子可以通过对系统施加两束拉曼激光完成。略去其中的原子物理细节, 我们直接把微扰哈密顿量写成

$$\delta\hat{H} = \lambda e^{-i\omega t} \hat{n}_{-p} + \lambda e^{i\omega t} \hat{n}_p. \quad (3.12)$$

这里, \hat{n}_p 是密度算符的傅立叶变换。冷原子实验上, 可以探测系统的总动量 P 来监测系统越迁的速率。请证明, 对于很小的 λ , 费米黄金规则表明动量 P 满足

$$\frac{dP}{dt} = \lambda^2 p (1 - e^{-\beta\omega}) S_n(p, \omega). \quad (3.13)$$

事实上, 我们将会看到组合 $\rho_O(p, \omega) = (1 - e^{-\beta\omega}) S_O(p, \omega)$ 和推迟格林函数直接相关, 被称为谱函数。

3.1.4 STM 实验

STM, 即扫描隧道显微镜, 是利用电子隧穿现象对固体系统局域电子能态进行探测的方法。我们想象用一个金属探针接近一个材料表面的 x_0 处, 二者间距非常近, 以至于出现了由于电子在探针与材料间跃迁导致的耦合项

$$\delta\hat{H} = - \sum_i \lambda \hat{\psi}^\dagger(x_0) \hat{\psi}_{\text{tip}, i} + \text{H.C.} \quad (3.14)$$

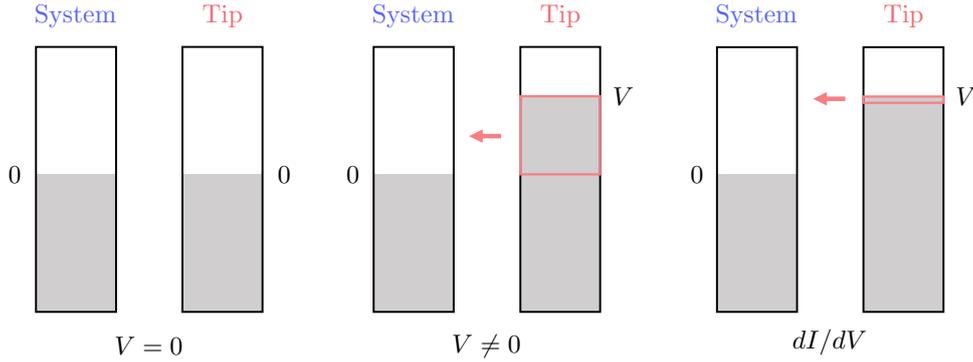


图 3.1: STM 实验对应的理论模型示意图。

这里 $\hat{\psi}_{\text{tip},i}$ 对应探针上模式 i 的湮灭算符。我们考虑低温极限 $\beta \rightarrow \infty$ ，并假设探针上的电子间不存在相互作用，模式 i 的态对应能量即 ϵ_i ，其态密度 $D(\epsilon_i) = D$ 为常数。这时系统和探针上的电子填充如图 3.1 所示。我们可以通过给探针加电压 V 调节探针上的占据数，这时系统和探针存在电压差，产生的电流还是可以用费米黄金规则估计

$$\begin{aligned}
 I &= 2\pi \sum_{\{i|\epsilon_i \in [0, V]\}} \sum_m \lambda^2 |\langle E_m | \hat{\psi}^\dagger(x_0) | G \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 - \epsilon_i) \\
 &= 2\pi \lambda^2 D \int_0^V d\epsilon \sum_m |\langle E_m | \hat{\psi}^\dagger(x_0) | G \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 - \epsilon).
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

这里我们假设 $V > 0$ ， $|E_0\rangle = |G\rangle$ 对应系统基态。对单粒子能量的积分从 0 到 V ，这是由于泡利不相容原理保证只有这部分粒子可以从探针跃迁到系统中。实验上常常关心的是微分电导 dI/dV ，对应

$$\frac{dI}{dV} = 2\pi \lambda^2 D \sum_m |\langle E_m | \hat{\psi}^\dagger(x_0) | G \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 - V). \tag{3.16}$$

类似的，对于 $V < 0$ ，可以计算得到

$$\frac{dI}{dV} = 2\pi \lambda^2 D \sum_m |\langle E_m | \hat{\psi}(x_0) | G \rangle|^2 \delta(E_m - E_0 + V). \tag{3.17}$$

我们可以把等式右边的结果统一记作分段函数 $\lambda^2 D \rho_\psi(V)$ ， $\rho_\psi(V)$ 被称作（零温下的）局域单粒子谱函数。

3.2 从虚时间到实时间：频域方法

在上一节，我们总结了各种多体物理实验的理论描述。其中热力学量实验可以直接联系到虚时间路径积分的计算，而其它实验手段都对应于实时间关联函数，包括推迟格林函数、动力学结构因子和谱函数。下面，我们就介绍如何从虚时间关联函数出发，利用解析延拓的方法得到各种可观测量。事实上，这个问题有两种路径：

1. 从虚时间的时域格林函数出发，傅立叶变换得到频域格林函数，然后解析延拓得到实时间的频域格林函数

$$G(\tau) \rightarrow G(\omega_n) \rightarrow \{G^R(\omega), S(\omega), \rho(\omega)\}. \tag{3.18}$$

2. 从虚时间的时域格林函数出发，解析延拓得到实时间的时域格林函数，然后傅立叶变换

$$G(\tau) \rightarrow G(t) \rightarrow \{G^R(\omega), S(\omega), \rho(\omega)\}, \quad (3.19)$$

在这里最重要的是时间的变换，简单起见我们不再标明算符对应的动量。这一小节中，我们先介绍第一种方法；第二种方法将在下一小节介绍。对于具体的问题，采用哪种方法主要取决于计算的难易程度。值得指出的是，我们也可以直接在实时间将多体系统的演化改写成路径积分的形式，这时则需要用到 Schwinger-Keldysh 围道方法。

3.2.1 Lehmann 谱表示

为了将虚时间格林函数和实时间格林函数联系在一起，我们需要建立它们之间的严格关系。基本思路就是把不同格林函数在本征态下分别进行展开，然后进行对比。我们的出发点是

$$\begin{aligned} G(\tau) &= \text{tr} \left(\rho \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau) \hat{O}_2(0) \right), \\ G^R(t) &= -i\theta(t) \text{tr} \left(\rho [\hat{O}_1(t), \hat{O}_2(0)]_\zeta \right), \\ G^A(t) &= i\theta(-t) \text{tr} \left(\rho [\hat{O}_1(t), \hat{O}_2(0)]_\zeta \right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

这里，当 \hat{O}_1 和 \hat{O}_2 都是玻色/费米型算符，我们取 $\zeta = \pm 1$ 。接下来，我们在算符 \hat{O}_1 左右分别插入哈密顿量 \hat{H} 本征态构成的完备基 $\hat{I} = \sum_n |E_n\rangle\langle E_n|$ 。对于 $\tau > 0$ ，利用 $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ 可以将虚时间格林函数写作

$$G(\tau) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{mn} e^{-\beta E_n} e^{-\tau E_{mn}} \langle E_n | \hat{O}_1 | E_m \rangle \langle E_m | \hat{O}_2 | E_n \rangle. \quad (3.21)$$

这里， $E_{mn} = E_m - E_n$ 。傅立叶变换后，我们得到频域空间的展开结果，即 Lehmann 谱表示：

$$G(\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G(\tau) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{O}_1 | E_m \rangle \langle E_m | \hat{O}_2 | E_n \rangle \frac{e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m}}{-i\omega_n + E_{mn}}. \quad (3.22)$$

接下来，我们考虑实时间格林函数 $G^{R/A}$ 。类似(3.21)式，我们得到

$$G^{R/A}(t) = \mp i\theta(\pm t) \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{mn} \langle E_n | \hat{O}_1 | E_m \rangle \langle E_m | \hat{O}_2 | E_n \rangle e^{-iE_{mn}t} (e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m}). \quad (3.23)$$

我们看到，因子 $(e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m})$ 已经和(3.22)中一致。当我们试图进一步变换到频率空间时，就需要计算形如 e^{-iEt} 函数的傅立叶变换。这里的技巧是给积分加一个无穷小的收敛因子 $e^{-\epsilon|t|}$ ，完成积分后令 $\epsilon \rightarrow 0^+$ 。这样就给出

$$\mp i \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(\pm t) e^{i\omega t} e^{-iEt} = \mp i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(\pm t) e^{i\omega t} e^{-iEt} e^{-\epsilon|t|} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega - E \pm i\epsilon}. \quad (3.24)$$

利用这一结果，我们可以得到实时间格林函数的 Lehmann 谱表示

$$G^{R/A}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{O}_1 | E_m \rangle \langle E_m | \hat{O}_2 | E_n \rangle \frac{e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m}}{\omega - E_{mn} \pm i\epsilon}. \quad (3.25)$$

这里的 ϵ 也常常被直接写成 0^+ 。

练习 3.2 θ 函数的傅立叶变换 请通过对(3.24)式右边进行逆傅立叶变换验证等式成立。

现在，我们就可以对比(3.33)和(3.22)来总结如何从将虚时间格林函数联系到实时间格林函数。结果表明，在计算 $G(\omega_n)$ 后，我们可以定义 $z = i\omega_n$ 将函数解析延拓，再加上一个额外的负号就得到

$$F(z) = -G(-iz) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} \langle E_n | \hat{O}_1 | E_m \rangle \langle E_m | \hat{O}_2 | E_n \rangle \frac{e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m}}{z - E_{mn}}. \quad (3.26)$$

推迟格林函数和提前格林函数分别对应 $F(z)$ 在实轴上方/下方无穷小处的取值，即

$$G^R(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} F(\omega + i\epsilon), \quad G^A(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} F(\omega - i\epsilon). \quad (3.27)$$

实际操作时，我们还需要注意以下两点

1. 严格来说，这里第一步的解析延拓是不唯一的。这是由于数学上解析延拓需要我们已知函数在一个连续区域的行为；然而，在我们的问题中 $G(\omega_n)$ 只定义在离散的 Matsubara 频率上。例如，对于自由费米子，上一章的计算给出

$$G(\omega_n) = \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon - \mu} = \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon - \mu} \frac{f(e^{i\beta\omega_n})}{f(-1)}, \quad (3.28)$$

这里，我们加入了 $-1 = e^{i\beta\omega_n}$ 的任意函数 f 。然而，当我们解析延拓时，我们试图将所有 ω_n 带成 $-iz$ ，这时就多出了 $f(e^{\beta z})/f(-1)$ 的贡献。 f 任意性就说明这一解析延拓方案的实效。为了解决这一问题，很多时候我们可以在进行代换的同时要求在 $|z| \gg 1$ 时满足边界条件 $G(z) \sim -1/z$ 。这样，才能得到正确的自由粒子推迟格林函数

$$G^{R/A}(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon + \mu \pm i0^+}. \quad (3.29)$$

2. 对于 $\omega_n \neq 0$ ，虚时格林函数的展开式(3.22)中分母不会等于 0，因此 $G(\omega_n)$ 不会发散。然而，从解析延拓后的式(3.26)容易看出 $F(z)$ 在实轴上，即 $z = E_{mn}$ 处，存在奇异性——这一奇异性把上半平面和下半平面分割开来，导致 $F(z)$ 在上下半平面可能有不同的表达式。因此，如果我们想要计算的是 G^R ，需要利用 $\omega_n > 0$ 的 $G(\omega_n)$ 进行解析延拓；如果想计算的是 G^A ，则需要利用 $\omega_n < 0$ 的 $G(\omega_n)$ 进行解析延拓。
3. 类似的，利用谱表示容易看出 $G^{R/A}(z)$ 分别在上半平面 $\text{Im}[z] > 0$ 和下半平面 $\text{Im}[z] < 0$ 解析。事实上，这对保证因果性至关重要。以 G^R 为例，我们可以考虑对于 $t < 0$ 计算

$$G^R(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} G^R(\omega) e^{-i\omega t} = \oint_C \frac{dz}{2\pi} G^R(z) e^{-izt}. \quad (3.30)$$

这里 C 包含实轴上和一个沿着上半平面无穷远处的大圆弧。这是由于在 $t < 0$ 时大圆弧出的函数值随着半径增大指数趋于 0。利用 $G^R(z)$ 在上半平面解析的特点，我们才能得到 $G^R(t) = 0$ 。

练习 3.3 有限寿命准粒子的格林函数 为了更好的理解上面的讨论，我们考虑下式所示的虚时间格林函数

$$G(\omega_n) = \frac{1}{-i\omega_n + \xi - i\text{sgn}(\omega_n)\Gamma/2}. \quad (3.31)$$

计算实时间格林函数 $G^R(\omega)$ 和 $G^A(\omega)$ ，并傅立叶变换到时域 t 。验证这时 $|G^R(t)| \sim \theta(t)e^{-\Gamma t/2}$ ，物理上这说明所对应的准粒子寿命为 $1/\Gamma$ 。

练习 3.4 实时间编时格林函数 在粒子物理中，人们常常关心真空（零温下）中散射振幅的计算。这个时候常常用到的是实时间的编时格林函数：

$$G^T(t) = -i\text{tr} \left(\rho \mathcal{T}_t \hat{O}_1(t) \hat{O}_2(0) \right). \quad (3.32)$$

请利用 Lehmann 谱表示将这一关联函数在频率空间表示出来，证明它在零温下对应解析延拓 $i\omega_n \rightarrow \omega + i\text{sgn}(\omega)0^+$ 。对于相对论性系统， ω 常常以平方形式出现，因此我们也可以写作 $\omega^2 + i0^+$ 。例如，Klein-Golden 场的实时间编时格林函数通常写作 $(\omega^2 - p^2 + i0^+)^{-1}$ 。

3.2.2 谱函数与结构因子

描述谱学实验和 STM 实验的可观测量都和费米黄金规则相关，出现的矩阵元都形如 $|\langle E_m | O | E_n \rangle|^2$ ，这就启发我们考虑 $\hat{O}_1 = \hat{O}_2^\dagger = \hat{O}$ 。这时，我们得到

$$G^{R/A}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} |\langle E_n | \hat{O} | E_m \rangle|^2 \frac{e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_m}}{\omega - E_{mn} \pm i\epsilon}. \quad (3.33)$$

容易发现， $G^R(\omega) = G^A(\omega)^*$ 。它们的差给出了 $F(z)$ 在实轴上下岸的不连续性

$$\rho_O(\omega) = i [G^R(\omega) - G^A(\omega)] = -2 \text{Im}[G^R(\omega)] = \frac{2\pi}{\mathcal{Z}} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |\langle E_n | \hat{O} | E_m \rangle|^2 (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) \delta(\omega - E_{mn}). \quad (3.34)$$

这里，我们利用了关系 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} [(x + i\epsilon)^{-1} - (x - i\epsilon)^{-1}] = -2\pi i \delta(x)$ 。事实上， $\rho_O(\omega)$ 就是多体系统中算符 \hat{O} 的谱函数谱函数，大部分时候下标 O 都被省略。如果选取 $\hat{O} = \hat{\psi}(x_0)$ ，并考虑低温极限 $\beta \rightarrow \infty$ ，结果正好与(3.16)和(3.17)一致。同时，对照(3.10)容易发现结构因子 $S_O(\omega)$ 可以写作

$$S_O(\omega) = \frac{\rho_O(\omega)}{1 - \zeta e^{-\beta\omega}}. \quad (3.35)$$

对于玻色子算符 $\zeta = 1$ ，这正是练习3.1中提到的关系。这种关联函数和谱函数间的比例关系有时被称为涨落耗散定理。关联函数自然描述了系统中的涨落，那么为什么谱函数对应耗散呢？这是由于它正好是响应函数的虚部，一般对应系统从外界扰动中提取能量/动量的速度，练习3.1其实已经给出了一个很好的例子。

练习 3.5 单粒子谱函数 在这里我们尝试理解单粒子产生湮灭算符的谱函数

1. 考虑练习 3.3 中单个模式的虚时间格林函数，计算对应的谱函数。结果说明谱函数对应单粒子能量 ξ 附近的一个峰，其宽度为粒子的衰减速率。当粒子寿命趋于无穷时，谱函数的峰趋于 δ 函数。
2. 对于更多模式的情况，则对应不同峰的叠加。请先验证对于 $\hat{O} = \hat{\psi}(x_0)$ 上述谱函数定义在 $\beta \rightarrow \infty$ 下与 (3.16) 和 (3.17) 一致。然后计算模型

$$Z = \int D\bar{\psi}D\psi \exp\left(-\int d\tau dx \left[\bar{\psi}(\partial_\tau - \mu)\psi + \frac{1}{2}\partial_x\bar{\psi}\partial_x\psi\right]\right). \quad (3.36)$$

中的局域谱函数 $\rho_\psi(\omega)$ 。

事实上，我们可以认为谱函数是比格林函数更加基本的量，它描述了作用单个算符 \hat{O} 后系统能量改变的分布函数。对比 (3.34)、(3.22) 和 (3.33)，我们可以把 $G^{R/A}(\omega)$ 和 $G(\omega_n)$ 都用对应算符的 $\rho(\omega)$ 表示出来

$$G(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho(\omega')}{-i\omega_n + \omega'}, \quad G^{R/A}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\rho(\omega')}{\omega - \omega' \pm i\epsilon}. \quad (3.37)$$

有意思的是，这些等式把相互作用的格林函数表达成了类似自由粒子的形式：对于一个能量为 ω' 的自由粒子， $G(\omega_n)$ 或 $G^{R/A}(\omega)$ 恰好就是 $(-i\omega_n + \omega')^{-1}$ 或 $(\omega - \omega' \pm i\epsilon)^{-1}$ 。上式说明一般系统的格林函数可以看成一系列自由粒子的格林函数的叠加，叠加系数就是谱函数 $\rho(\omega)$ 。特别是，对于费米子系统，我们看到谱函数的定义 (3.34) 保证 $\rho(\omega) \geq 0$ 。这时，我们可以把谱函数看成一个经典的概率分布，描述不同能量粒子被激发的概率。对于玻色子系统，对于 $\beta > 0$ 的系统，当 $\omega > 0$ 时有 $\rho(\omega) > 0$ ；而当 $\omega < 0$ 时，则有 $\rho(\omega) < 0$ 。(3.37) 式还常常被用于相互作用系统的格林函数计算，例如，我们可以利用 (2.101) 式得到对于费米子算符的严格表达式

$$\frac{1}{\beta} \sum_m G(\omega_m) G(\omega_n + \omega_m) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \rho(\omega_1) \rho(\omega_2) \frac{n(\omega_1) - n(\omega_2)}{i\omega_n + \omega_1 - \omega_2}. \quad (3.38)$$

这里 $n(\omega)$ 是费米-狄拉克分布函数。

注意到谱函数中的 δ 函数，我们还能通过对谱函数的求和推导出一系列严格等式，这些关系被称为求和定则 (sum rule)。例如，直接对谱函数进行积分，可以得到谱函数的归一化性质

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |\langle E_n | \hat{O} | E_m \rangle|^2 (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) = \text{tr} \left(\rho \left[\hat{O}, \hat{O}^\dagger \right]_\zeta \right). \quad (3.39)$$

特别是，对于产生湮灭算符，我们就得到 $\int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\omega) = 1$ 。事实上，我们还可以考虑计算 ω 的期望值，这时就会得到

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega \rho(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} |\langle E_n | \hat{O} | E_m \rangle|^2 E_{mn} (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) = \text{tr} \left(\rho \left[\hat{O}, \hat{H} \right]_\zeta \right) \quad (3.40)$$

这里，我们利用了关系 $(E_m - E_n) \langle E_n | \hat{O} | E_m \rangle = \langle E_n | [\hat{O}, \hat{H}] | E_m \rangle$ 。我们可以把计算推广成考虑 ω^n 在谱函数下的期望值，结果则对应算符和哈密顿量的 n 阶导数。我们还可以推导与系统密度有关的求和定则，具体参考下面的练习。

练习 3.6 谱函数与粒子数密度 请证明，对于 $\hat{O} = \hat{\psi}(x)$ ，多体系统在 x 处的密度 $n = \langle \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) \rangle$ 可以由谱函数求和定则给出：

$$n = \int \frac{d\omega}{2\pi} \rho(\omega) n(\omega). \quad (3.41)$$

这一结果再次表明利用谱函数我们可以在两点函数层面把系统当作自由粒子系统。

3.3 从虚时间到实时间：时域方法

除了上述方法，我们也可以直接从时域的虚时格林函数 $G(\tau)$ 得到响应函数 $G^{R/A}(t)$ 或者动力学结构因子 $S(t)$ 。首先来回顾 $G(\tau)$ 的算符形式，我们有

$$G(\tau) = \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau) \hat{O}_2(0) \rangle = \begin{cases} \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta-\tau)\hat{H}} \hat{O}_1 e^{-\tau\hat{H}} \hat{O}_2 \right) & \tau > 0, \\ \zeta \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta+\tau)\hat{H}} \hat{O}_2 e^{\tau\hat{H}} \hat{O}_1 \right) & \tau < 0. \end{cases} \quad (3.42)$$

现在，我们试着直接对 τ 进行解析延拓。类似频域格林函数在 $\omega_n > 0$ 和 $\omega_n < 0$ 处可能延拓出不同的结果，我们看到这里 $\tau > 0$ 和 $\tau < 0$ 的表达式也截然不同。在 $\tau > 0$ 处进行解析延拓对应 $\tau \rightarrow \epsilon + it$ ，这时我们得到

$$iG^>(t) = \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta-it)\hat{H}} \hat{O}_1 e^{-i\hat{H}t} \hat{O}_2 \right) = \text{tr} \left(\rho \hat{O}_1(t) \hat{O}_2(0) \right). \quad (3.43)$$

在 $\tau < 0$ 处做解析延拓 $\tau \rightarrow -\epsilon + it$ 则会得到

$$iG^<(t) = \zeta \mathcal{Z}^{-1} \text{tr} \left(e^{-(\beta+it)\hat{H}} \hat{O}_2 e^{i\hat{H}t} \hat{O}_1 \right) = \zeta \text{tr} \left(\rho \hat{O}_2(0) \hat{O}_1(t) \right). \quad (3.44)$$

这里 $G^>(t)$ 和 $G^<(t)$ 是新的实时间格林函数，一般在 Schwinger-Keldysh 方法中比较常用。从(3.11)式容易看出，动力学结构因子正好对应于 $\hat{O}_1 = \hat{O}_2^\dagger = \hat{O}$ 的 $iG^>(t)$ 。我们也可以直接把 $G^{R/A}$ 和 ρ 联系到 $G^>/<$ ，依照定义有

$$G^{R/A}(t) = \mp i\theta(\pm t) \text{tr} \left(\rho [\hat{O}_1(t), \hat{O}_2(0)]_\zeta \right) = \pm \theta(\pm t) (G^>(t) - G^<(t)). \quad (3.45)$$

进而，利用时域版本的(3.34)式，我们就得到

$$\rho(t) = i(G^R(t) - G^A(t)) = i(G^>(t) - G^<(t)). \quad (3.46)$$

练习 3.7 $G^>$ 和 $G^<$ 的谱表示 我们在这里新遇到的实时间格林函数 $G^>$ 和 $G^<$ 也同样可以通过 Lehmann 谱表示联系到对应算符的普函数。请证明

$$iG^>(\omega) = (1 + \zeta n(\omega))\rho(\omega), \quad iG^<(\omega) = \zeta n(\omega)\rho(\omega). \quad (3.47)$$

这里， $n(\omega)$ 是玻色/费米分布函数。

时域方法的最大好处是很容易推广到多点函数：我们只需要先通过调节算符虚时间位置保证算符插入的顺序，然后就可以利用 $\tau = it$ 得到对应的实时间格林函数。例如，当我们想要计算玻色子算符 $\{\hat{O}_j\}$ 的四点函数

$$\langle \hat{O}_1(t_1)\hat{O}_3(t_3)\hat{O}_2(t_2)\hat{O}_4(t_4) \rangle = \text{tr} \left(\rho \hat{O}_1(t_1)\hat{O}_3(t_3)\hat{O}_2(t_2)\hat{O}_4(t_4) \right). \quad (3.48)$$

我们只需要在虚时间首先计算 $F(\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4) \equiv \langle \mathcal{T}_\tau \hat{O}_1(\tau_1)\hat{O}_2(\tau_2)\hat{O}_3(\tau_3)\hat{O}_4(\tau_4) \rangle$ ，然后取 $\tau_1 = it_1 + 3\epsilon, \tau_2 = it_2 + \epsilon, \tau_3 = it_3 + 2\epsilon$ ，以及 $\tau_4 = it_4$ ，最后取极限 $\epsilon \rightarrow 0^+$ 即可。

3.4 电导率的理论计算

在这一章的最后，我们来利用这一章学的知识计算电子系统的电导率。在固体物理中，电导率最简单的图像被称为 **Drude** 模型。我们考虑电子在 x 方向电场中 E 中运动，满足牛顿方程

$$\frac{dv^x}{dt} = E(t) - \frac{v^x}{\tau}. \quad (3.49)$$

这里等式右边第二项表示电子可能受到杂质、相互作用引发的散射从而导致速度的损耗。对于交流电场 $E = E_0 e^{-i\omega t}$ ，方程的解写作

$$v^x = \frac{E_0}{-i\omega + \tau^{-1}} e^{-i\omega t}, \quad J^x = v^x n = \frac{n}{-i\omega + \tau^{-1}} E_0 e^{-i\omega t}. \quad (3.50)$$

利用电导率的定义 $\sigma(\omega) = J^x(\omega)/E(\omega)$ ，我们就得到电导的 **Drude** 公式

$$\sigma(\omega) = \frac{n}{-i\omega + \tau^{-1}} = \frac{n}{-i\omega + \Gamma}. \quad (3.51)$$

在这一节，我们将会利用路径积分方法在量子多体系统中重新推导这一结果。

3.4.1 电导率的 Kubo 公式

在量子力学中，电磁场的作用体现在哈密顿量中的标量势 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 和矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 。在二次量子化中，相应的哈密顿量写作

$$\hat{H}[\mathbf{A}] = \int d\mathbf{r} \frac{1}{2} [(i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})] \cdot [(-i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))\hat{\psi}(\mathbf{r})] + \phi(\mathbf{r}, t)\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (3.52)$$

加入了矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 后，在一次量子化语言中运动学动量对应 $(-i\nabla - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ ，与正则动量 $-i\nabla$ 不同。在二次量子化语言里，这说明流算符(2.71)需要改写为

$$\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})(-i\nabla - \mathbf{A})\hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}(i\nabla - \mathbf{A})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (3.53)$$

这一结果仍然可以按照2.4小节中的方法得到，这里不再赘述。利用这一定义，我们可以将哈密顿量中 \mathbf{A} 的线性项表示成 $\delta\hat{H} = -\int d\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{r})$ 。

我们希望在系统中加入一个沿 x 方向交变电场 $\mathbf{E}(t) = E_0 e^{-i\omega t} \hat{x}$ 。由于规范对称性，存在无穷种等效的标量势 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 和矢量势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 的选取方式。这里，我们选定规范 $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ ，对应矢量势和电导率写作

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t) = \frac{E_0}{i\omega} e^{-i\omega t} \hat{x}, \quad \sigma(\omega) = \frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{E^x(t)} = \frac{1}{i\omega} \frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{A^x(t)}. \quad (3.54)$$

这里 $\langle J^x(\mathbf{r}, t) \rangle$ 就是外电场引发的电流。在3.1.2小节关于线性响应实验的一般讨论中，我们将观测量与扰动的比例（类似 $\frac{\langle J^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{A^x(t)}$ ）连系到了推迟格林函数。然而，值得注意的是我们现在对电导率的计算存在一个新的因素：在加入扰动后不只有哈密顿量发生了变化，算符 \hat{J}^x 本身也发生了改变。因此，结果中出现了额外的贡献：

$$\frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{\mathbf{A}(t)} = -\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle - G_{J^x J^x}^R(\mathbf{0}, \omega) = -n - G_{J^x J^x}^R(\mathbf{0}, \omega). \quad (3.55)$$

这里 $G_{J^x J^x}^R(\mathbf{q}, \omega)$ 是动量/频率空间的流-流推迟格林函数，由于在这里我们只考虑了均匀电场，因此有 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ 。多出来的第一项中的密度 $n = k_F^3/6\pi^2$ 常常被称为抗磁项，数学上来自于 $\delta \hat{J}^x / \delta A^x$ 。由于流算符 \hat{J}^x 可以从哈密顿量对 \mathbf{A} 求导得到，抗磁项可以追溯到哈密顿量中 \mathbf{A}^2 的项。对于满壳层的原子，这一项贡献了原子的抗磁性。

值得指出的是，对于电导率的计算我们也可以采用其它规范。例如，我们可以考虑一个很小的空间动量 $\mathbf{q} = q\hat{x}$ ，把电场对应到 $\mathbf{E} = -\nabla\phi = -i\mathbf{q}\phi$ 。由于标量势耦合到密度 $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$ ，我们需要计算地就不再是流-流关联函数，而是电流-密度关联函数

$$\sigma(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{E^x(t)} = \frac{1}{-iq} \frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{\phi^x(t)} = \frac{1}{-iq} G_{J^x n}^R(\mathbf{q}, \omega) \quad (3.56)$$

这个新的 Kubo 公式和上面用流-流关联函数表示的公式（推广到有限 \mathbf{q} ）是否一致？它们等价要求 $\omega G_{J^x n}^R(\mathbf{q}, \omega) - q G_{J^x J^x}^R(\mathbf{q}, \omega) = qn$ 事实上，这正是我们在上一章中介绍的 Wald 恒等式在频率空间的形式；而抗磁项 qn 则正好对应 Wald 恒等式中的接触项。此外，我们还可以进一步利用 Wald 恒等式把电流-密度关联改写成密度-密度关联函数，这样就再次得到了一个新的电导率公式。当然，由于分母上的因子 q ，计算(3.56)式过程中不能直接取 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ，导致计算更加复杂。方便起见，在这一节中我们还是使用(3.55)式。

3.4.2 流-流关联函数

接下来，我们按照频域方法，先在虚时间计算系统的流-流关联函数，然后解析延拓到推迟格林函数。在虚时间，流-流关联函数写作

$$G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n) = -\frac{1}{4} \int d\mathbf{r} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \left\langle [\bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \partial_x \psi(\mathbf{r}, \tau) - \partial_x \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau)] \right. \\ \left. [\bar{\psi}(\mathbf{0}, 0) \partial_x \psi(\mathbf{0}, 0) - \partial_x \bar{\psi}(\mathbf{0}, 0) \psi(\mathbf{0}, 0)] \right\rangle. \quad (3.57)$$

我们假设电子受到杂质、相互作用引发的散射主要贡献是让电子得到了有限的寿命，导致格林函数有练习3.3中的形式；而在四点函数计算时则仍然可以用 Wick 定理来把它近似成两点函数的乘积。这样，对 $G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n)$ 的

计算其实就和上一章中无相互作用自由粒子的密度-密度关联函数(2.99)类似:

$$\begin{aligned}
G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n) &= -\frac{1}{V\beta} \sum_{m, \mathbf{k}} k_x^2 \langle \psi_{\mathbf{k}, \omega_m} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, \omega_m} \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}, \omega_n + \omega_m} \bar{\psi}_{\mathbf{k}, \omega_n + \omega_m} \rangle \\
&= -\frac{1}{V\beta} \sum_{m, \mathbf{k}} k_x^2 \frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \frac{1}{-i\omega_m - i\omega_n + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m + \omega_n)\Gamma/2} \quad (3.58) \\
&= -\frac{1}{V\beta} \sum_{m, \mathbf{k}} \frac{k^2}{3} \frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \frac{1}{-i\omega_m - i\omega_n + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m + \omega_n)\Gamma/2}.
\end{aligned}$$

这里, 我们利用转动对称性将 $\sum_{\mathbf{k}} k_x^2$ 写成了 $\sum_{\mathbf{k}} k^2/3$ 。

我们首先考虑 $\omega_n = 0$ 的极限。这时, 我们有

$$\begin{aligned}
G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n) &= -\frac{1}{V\beta} \sum_{m, \mathbf{k}} k_x^2 \left[\frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \right]^2 \\
&= \frac{1}{\beta} \sum_m \int \frac{dk_y dk_z}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_x}{2\pi} k_x \partial_{k_x} \left[\frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \right] \quad (3.59) \\
&= -\frac{1}{\beta} \sum_m \int \frac{dk_y dk_z}{(2\pi)^2} \int \frac{dk_x}{2\pi} \left[\frac{1}{-i\omega_m + \epsilon_k - \mu - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \right] = \langle \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = n.
\end{aligned}$$

在第三行, 我们进行了分部积分。回忆起 $G_{J^x J^x}$ 在解析延拓成 $G_{J^x J^x}^R$ 时还要填上一个负号, 我们就发现 $G_{J^x J^x}^R$ 中零频的部分正好与抗磁项抵消。因此, 我们也可以将(3.55)式写成

$$\frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{\mathbf{A}(t)} = G_{J^x J^x}^R(\mathbf{0}, 0) - G_{J^x J^x}^R(\mathbf{0}, \omega). \quad (3.60)$$

接下来, 我们就要计算有限频率 ω 部分的贡献。我们假设低温极限 $\beta E_F \gg 1$, 并且外场频率 $\omega \ll E_F$, 这时主要的响应来自于费米面附近的粒子。因此, 我们将系统中电子的动量在费米面附近展开 $\mathbf{k} = (k_F + \delta k)\hat{n}$, 其中 \hat{n} 为标志动量方向的单位矢量。这样, 对动量的积分转变为

$$\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int d\Omega_{\hat{n}} \int \frac{(k_F + \delta k)^2 dk}{(2\pi)^3} \approx \int d\Omega_{\hat{n}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{k_F^2 d\delta k}{(2\pi)^3}. \quad (3.61)$$

这里 $d\Omega_{\hat{n}}$ 代表对 \hat{n} 方位角的积分, 我们将态密度在费米面附近进行展开, 并把对 δk 的积分延伸到 $-\infty$ 到 ∞ 。在这一近似下, $G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n)$ 可以表达成

$$\delta G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n) = -\frac{k_F^4}{6\pi^2\beta} \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\delta k \frac{1}{-i\omega_m + k_F\delta k - i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2} \frac{1}{-i\omega_m - i\omega_n + k_F\delta k - i\text{sgn}(\omega_m + \omega_n)\Gamma/2}. \quad (3.62)$$

在这一展开中, 我们忽略了远离费米面的贡献——这些贡献会(近似的)给出一个常数部分。好在常数部分的贡献我们已经在上面的计算中确定了, 因此我们这里只关注于 ω 的依赖。在上式中, 对 δk 的积分可以用留数定理计算。被积式包含两个极点, 分别在 $k_F\delta k = i\omega_m + i\text{sgn}(\omega_m)\Gamma/2$ 和 $k_F\delta k = i\omega_m + i\omega_n + i\text{sgn}(\omega_m + \omega_n)\Gamma/2$ 。如果这两个极点都在实轴的同边(假设都在上半平面), 我们可以将积分改写成围绕下半平面的围道积分, 留数定理保证结果为 0; 直接计算也可以得到相同的结果。因此, 不为零的贡献要求两个极点分别在实轴两侧:

$$\omega_m > 0, \omega_n + \omega_m < 0, \quad \text{or} \quad \omega_m < 0, \omega_n + \omega_m > 0. \quad (3.63)$$

为了最终得到推迟格林函数，我们假设 $\omega_n > 0$ 。结果给出

$$\delta G_{J^x J^x}(\mathbf{0}, \omega_n) = -\frac{n}{\beta} \sum_m \theta(-\omega_m) \theta(\omega_n + \omega_m) \frac{2\pi i}{i\omega_n + i\Gamma} = -\frac{n}{\beta} \frac{\omega_n}{2\pi/\beta} \frac{2\pi i}{i\omega_n + i\Gamma} = -n \frac{i\omega_n}{i\omega_n + i\Gamma} \quad (3.64)$$

这里我们用到了求和中正好有 $\omega_n/(2\pi/\beta)$ 项不为零。最后，我们做解析延拓 $i\omega_n \rightarrow \omega$ ，结果得到

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{i\omega} \frac{\langle \hat{J}^x(\mathbf{r}, t) \rangle}{A^x(t)} = \frac{1}{i\omega} (-n) \frac{\omega}{\omega + i\Gamma} = \frac{n}{-i\omega + \Gamma}. \quad (3.65)$$

这正是电导率的 **Drude** 公式。

然而，如果我们更加认真的进行思考，就会发现这个推导中的一个小问题：在准经典方程中， τ^{-1} 对应的其实是动量耗散的速率；然而，在我们刚刚利用格林函数完成的推导中， τ 对应着电子自身的寿命。事实上，这两种时间尺度是不同的，都可以利用玻尔兹曼方程进行估计。那么这两个计算哪个更加准确呢？有趣的是，其实玻尔兹曼方程 + 准经典图像其实更加准确。如果我们不简单假设费米子满足 **Wick** 定理，而是包含更多相互作用的修正项，就可以在路径积分方法中得到和准经典图像相同、乃至超越准经典图像的结果。而如何在量子多体系统中系统性的计入相互作用的修正正是我们下一章的主题。

第 4 章 微扰论与费曼图

内容提要

- 费曼图与费曼规则
- Replica 技巧
- Schwinger-Dyson 方程
- ϕ^4 理论
- 正规化与重整化
- 相互作用费米子

4.1 近高斯积分的微扰论

在明确了要研究的量就是虚时间的配分函数和格林函数之后，我们就来介绍如何在弱相互作用系统里进行微扰计算。回忆起相互作用系统在虚时间路径积分中可以写作

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi}D\psi \exp(-S[\bar{\psi}, \psi]), \quad S = \int_0^\beta d\tau \left[\int dx \bar{\psi} \partial_\tau \psi + H[\bar{\psi}, \psi] \right]. \quad (4.1)$$

其中 $H[\psi, \bar{\psi}]$ 的形式为

$$H[\psi, \bar{\psi}] = \int dx \bar{\psi}(x, \tau) \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + V(x) - \mu \right) \psi(x, \tau) + \frac{1}{2} \int dx dy U(x-y) \bar{\psi}(x, \tau) \bar{\psi}(y, \tau) \psi(y, \tau) \psi(x, \tau). \quad (4.2)$$

我们记得，对于无相互作用体系 $U(x) = 0$ ，这正好是一个高斯积分，所有关联函数都可以通过 **Wick** 定理进行计算。然而，一旦 $U(x) \neq 0$ ，对 ψ 场的积分就不再是高斯的，一般来说无法严格计算。这种时候，第一个想到的办法就是考虑对相互作用的微扰论。正如前文所说，路径积分的一个优势就是给计算微扰论提供了一个系统性方法——这就是这一章要介绍的内容。在这一节中，我们先考虑最简单的例子，即具有近似高斯形式的定积分的微扰论计算。

4.1.1 单变量积分

作为最简单的例子，我们先来考虑定积分

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{g}{4!} x^4} = \sqrt{\frac{3}{2\pi g}} e^{\frac{3}{4g}} K_{\frac{1}{4}} \left(\frac{3}{4g} \right). \quad (4.3)$$

这里，我们已经在等式右边给出了积分的严格结果，其中 $K_n(x)$ 是第二类 **Bessel** 函数。我们下一小节将会看到为什么这里要引入 $4!$ 的系数。现在，我们尝试用微扰方法对 \mathcal{Z} 进行计算，并与严格结果相对照。我们直接将 $e^{-gx^4/4!}$ 对 g 进行泰勒展开，其 n 阶贡献记作

$$\mathcal{Z}_n = \frac{1}{n!} \left(-\frac{g}{4!} \right)^n \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{4n} e^{-\frac{x^2}{2}} \equiv \frac{1}{n!} \left(-\frac{g}{4!} \right)^n \langle x^{4n} \rangle_0. \quad (4.4)$$

这里， $\langle x^{4n} \rangle_0$ 正好对应于单变量高斯积分下的 $4n$ 点关联函数。**Wick** 定理表明结果等于将所有 x 变量两两配对时不同配对方式的个数。我们可以先关注于第一个 x ，选择和它配对的 x 一共有 $4n - 1$ 个选项；在确定这一对之后，剩余的部分对应于 $\langle x^{4n-2} \rangle_0$ 。因此，我们得到 $\langle x^{4n} \rangle_0 = (4n - 1) \langle x^{4n-2} \rangle_0 = (4n - 1)(4n - 3) \dots$ 。这一间距

为 2 的连乘通常记做 $(4n-1)!!$ 。带入到 \mathcal{Z}_n 之中，我们就得到

$$\mathcal{Z} = \sum_n \mathcal{Z}_n = \sum_n \frac{(4n-1)!!}{n!} \left(-\frac{g}{4!}\right)^n. \quad (4.5)$$

可以验证，这与(4.3)中的严格结果在 $g=0$ 附近的展开一致。

如果我们仔细观察 \mathcal{Z}_n ，就会发现级数并不收敛。利用 Stirling 公式 $n! \approx (n/e)^n$ ，我们可以估计

$$|\mathcal{Z}_n| = \frac{(4n-1)!}{n!(4n-2)!!} \left(\frac{g}{24}\right)^n = \frac{(4n-1)!}{n!(2n-1)!2^{2n-1}} \left(\frac{g}{24}\right)^n \approx \left[\left(\frac{4n}{e}\right)^4 \frac{e}{4n} \left(\frac{e}{2n}\right)^2 \frac{g}{24}\right]^n = \left(\frac{2gn}{3e}\right)^n. \quad (4.6)$$

对于任意非零的 g ，结果都在 $n \rightarrow \infty$ 时按照 $n!$ 发散。这样的发散级数在量子体系的微扰中是很常见的，即使是本科量子力学课程中的微扰论，一般也不是收敛的。即便如此，我们看到这个级数还是可以被“求和”成(4.3)式中的第二类 Bessel 函数。为了理解这里如何定义发散级数的和，我们可以把刚刚的推导反过来看：假设我们首先有一个发散级数 \mathcal{Z}_n ，我们可以选择一个辅助分布 $f(x)$ 和对应的 n 阶矩 $\mu_n = \int dx x^n f(x)$ ，使得

$$Z(x) = \sum_n \frac{\mathcal{Z}_n}{\mu_n} x^n, \quad (4.7)$$

收敛。这样，我们就可以把级数的和定义为 $\mathcal{Z} = \int dx f(x)Z(x)$ 。这是对发散级数进行重求和的一个标准方法。然而，上述的重求和需要我们对任意 n 计算出 \mathcal{Z}_n 的表达式，在更复杂的积分中，这是不现实的，我们往往只能得到 n 很小的前几阶结果。出乎意料的是，即使级数不收敛，只保留前几阶的计算仍然能给出不错的近似。这是因为

$$\left| \mathcal{Z} - \sum_{n=0}^{\Lambda} \mathcal{Z}_n \right| \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} \left| e^{-\frac{g}{4!}x^4} - \sum_{n=0}^{\Lambda} \frac{1}{n!} \left(-\frac{gx^4}{4!}\right)^n \right| \leq |\mathcal{Z}_{\Lambda+1}|. \quad (4.8)$$

这里我们用到了 $\left| e^{-\frac{g}{4!}x^4} - \sum_{n=0}^{\Lambda} \frac{1}{n!} \left(-\frac{gx^4}{4!}\right)^n \right| \leq \frac{1}{(\Lambda+1)!} \left(\frac{gx^4}{4!}\right)^{\Lambda+1}$ 。可以发现，对于不是那么小的 $g=0.5$ ，计算到 $\Lambda=1$ 阶剩余的误差已经只有 2%。

4.1.2 多变量积分

接下来，我们考虑一个更复杂的多变量积分

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0^{-1} \int \prod_i dx_i \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i (G_0^{-1})_{ij} x_j - \frac{g}{4!} \sum_i x_i^4 \right). \quad (4.9)$$

这里，我们引入了归一化因子 \mathcal{Z}_0 使得积分在 $g=0$ 时为 1。这个复杂积分无法严格求解，我们来尝试用微扰论将积分计算到 $O(g^2)$ 。首先，在 g^1 ，我们得到

$$\mathcal{Z}_1 = -\frac{g}{4!} \sum_i \langle x_i^4 \rangle_0 = -\frac{g}{4!} \times 3 \times \sum_i \langle x_i^2 \rangle^2 = -\frac{g}{8} \sum_i G_{0,ii}^2. \quad (4.10)$$

这里， $\langle \dots \rangle_0$ 对应在高斯分布 $\mathcal{Z}_0^{-1} e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i (G_0^{-1})_{ij} x_j}$ 下的期望值。这里，我们再次使用了 Wick 定理。类似于上一小节，不同缩并的方式给出因子 3；同时两点关联函数 $\langle x_i x_j \rangle_0 = G_{0,ij}$ 。

为了让微扰计算更加直观,我们常常把上面这样的计算用图示的方式表达出来,即费曼图(Feynman diagram)。我们将期望值内每个变量 x_i 表示成一个点,把每个缩并的两点函数 $G_{0,ij}$ 表示成一根线。例如,

$$\langle x_i x_j \rangle_0 \langle x_k x_l \rangle_0 = \begin{array}{c} i \longrightarrow j \\ k \longrightarrow l \end{array} = G_{0,ij} G_{0,kl}. \quad (4.11)$$

这里,由于 $G_{0,ij} = G_{0,ji}$ 是对称矩阵,我们不需要记录每根线的方向。人们常常形象的将一根连接 x_i 和 x_j 的线解释成有一个“粒子”从 i 点跑到了 j 点,因此两点(格林)函数 $G_{0,ij}$ 也被称为传播子(propagator)。对于泰勒展开给出的 $-\frac{g}{4!}x_i^4$,则会包含 4 个 x_i 变量,可以连出四根传播子。我们将其表示成

$$-\sum_i \frac{g}{4!} x_i^4 \rightarrow \begin{array}{c} \diagup \\ i \\ \diagdown \end{array} \quad (4.12)$$

这样多个线交于一点的图都对应于积分的非高斯部分,也就是相互作用部分,被称为顶角(vertex)。利用这一图示, \mathcal{Z}_1 的计算就对应于一个顶角在高斯积分下的期望值——我们只需要把从顶角延伸出的四条线利用传播子两两相连,就能给出最后的结果

$$\mathcal{Z}_1 = \begin{array}{c} \text{figure-eight} \\ + \\ \text{figure-eight} \\ + \\ \text{figure-eight} \end{array} = -\frac{g}{4!} \times 3 \times \sum_i G_{0,ii}^2 = -\frac{g}{8} \sum_i G_{0,ii}^2 \quad (4.13)$$

这里,我们认为顶角对应系数 $g/4!$,而三种图贡献了因子 3。在图中所有指标 i 自动求和。

然而,容易发现如果我们这样计算,和(4.10)相比并没有带来什么简化。在一般的费曼图计算中,人们常常使用的是另一种思路:我们认为从同一个顶角中伸出的不同的线是等价的。因此,我们只需要找出所有拓扑不等价的费曼图。在这一视角下,上式中三个图其实都是等价的——形象地说,我们可以把它们看成三维空间中的绳结,在保持连接点不变的前提下可以通过连续形变相互转变——我们只取第一个图作为他们的代表。那么,在这一视角下如何得到系数 $g/8$ 呢? 为了解如何正确的得到费曼图的系数,我们先来考虑

$$-\frac{g}{4!} \sum_i \langle x_1 x_2 x_3 x_4 x_i^4 \rangle_{0,fc} = -g \sum_i G_{0,1i} G_{0,2i} G_{0,3i} G_{0,4i} = \begin{array}{c} 1 \bullet \\ \diagdown \\ i \\ \diagup \\ 2 \bullet \end{array} \begin{array}{c} 3 \bullet \\ \diagup \\ i \\ \diagdown \\ 4 \bullet \end{array} \quad (4.14)$$

这里 **fc** 代表全连通部分,即代表 (x_1, x_2, x_3, x_4) 的四个点全都经由传播子连接在了一起的部分;这里我们考虑的图不包含任何闭合的圈,被称为树图。我们看到,在这个计算中所有常数因子都消掉了,这是因为每个 (x_1, x_2, x_3, x_4) 变量都是不同的,当我们把顶角和他们连接时,顶角上 x_i 的选取给出了排列数 $4!$,和分母相消。我们把这样所有跟顶角连线处不等价的情况选为标准,将顶角对应的系数定义成

$$\begin{array}{c} \diagup \\ \bullet \\ \diagdown \end{array} = -g. \quad (4.15)$$

这时,所有额外的数值因子都是来自于有些等价的 x 变量和同一顶角发生了连接。这样的等价性可以从费曼图的对称性看出,导致最后的结果需要除以一个整数因子 S —— S 被称为对称性因子。对于(4.16)中的第一个图,对称性包含左边两根线的交换对称性、右边两根线的交换对称性、以及左右整体的交换对称性。每个交换对应一

个因子 2，因此我们就得到了

$$\mathcal{Z}_1 = \text{figure-eight} = -\frac{g}{8} \sum_i G_{0,ii}^2. \quad (4.16)$$

可以看到，现在我们就通过把不同缩并方式整合在一起的方法简化了这个计算。

接下来，让我们进一步计算 \mathcal{Z}_2 。这时，我们将指数上 g 的部分展开到二阶，对应 $\frac{1}{2!} \frac{g^2}{(4!)^2} x_i^4 x_j^4$ ，其中 $2!$ 来自于指数函数的泰勒展开。在费曼图上，这对应存在两个完全相同的顶角。类似之前的讨论，如果和两个顶角缩并的点没有任何对称性，我们就会得到因子 $2! \times (4!)^2$ 。因此，我们也可以忽略指数函数泰勒展开带来的阶乘，这一点对于更高阶计算也是成立的。通过对两个顶角进行连线游戏，我们就得到三种不等价的图，结果为

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_2 &= \text{figure-eight} + \text{figure-eight} + \text{figure-eight} + \text{figure-eight} \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{Z}_1^2 + \frac{g^2}{2^4} \sum_{ij} G_{0,ii} G_{0,jj} G_{0,ij}^2 + \frac{g^2}{2 \times 4!} \sum_{ij} G_{0,ij}^4 \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{Z}_1^2 + \frac{g^2}{16} \sum_{ij} G_{0,ii} G_{0,jj} G_{0,ij}^2 + \frac{g^2}{48} \sum_{ij} G_{0,ij}^4. \end{aligned} \quad (4.17)$$

在第一个图中两个顶角并没有相连，即非连通，结果正好正比于 \mathcal{Z}_1^2 ；其它两个图则对应于全连通图。

练习 4.1 对称性因子巩固 1 在场论计算中，给出正确的对称性因子是非常重要的步骤，需要多多练习。

1. 请检验(4.17)式中每个图的系数，解释每个对称性因子的来源。
2. 请用类似(4.10)式中直接对算式进行缩并的方法对结果进行验证。

在多体系统中，我们最终关心的物理量其实是自由能或巨热力势，对应于 $\ln \mathcal{Z}$ 。如果将对积分 \mathcal{Z} 的展开转变为对 $\ln \mathcal{Z}$ 的展开，我们就会发现

$$\ln \mathcal{Z} = \ln(1 + \mathcal{Z}_1 + \mathcal{Z}_2 + O(g^3)) = \mathcal{Z}_1 + \left(\mathcal{Z}_2 - \frac{1}{2} \mathcal{Z}_1^2 \right) + O(g^3). \quad (4.18)$$

值得注意，组合 $(\mathcal{Z}_2 - \frac{1}{2} \mathcal{Z}_1^2)$ 正好把 \mathcal{Z}_2 中第一个非连通图的贡献减掉了，只保留了连通图的贡献。可以证明，这个事实对更高阶的贡献也是成立的，因此

$$\ln \mathcal{Z} = \ln \left(\sum_n \mathcal{Z}_n \right) = \sum_n \mathcal{Z}_{n,c}, \quad (4.19)$$

实际计算中，方便起见我们往往直接计算连通部分 $\mathcal{Z}_{n,c}$ 。

练习 4.2 连通集团 (linked cluster) 定理 在这个练习中我们尝试证明上面给出的结论，即 $\ln \mathcal{Z}$ 的展开中只包含连通图的贡献。这里，我们利用的技巧被称为 **Replica** 技巧，常常被应用于无序系统或者熵的计算。

1. 请证明，我们可以把 $\ln \mathcal{Z}$ 表达成 $\ln \mathcal{Z} = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{\mathcal{Z}^R - 1}{R}$ ，其中

$$\mathcal{Z}^R = \mathcal{Z}_0^{-R} \int \prod_{i,n} dx_i^n \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{ij,n} x_i^n (G_0^{-1})_{ij} x_j^n - \frac{g}{4!} \sum_{i,n} (x_i^n)^4 \right). \quad (4.20)$$

这里，类似于 Matsubara 频率的解析延拓，我们先对于所有自然数 R 计算 \mathcal{Z}^R ，然后解析延拓到 $R \rightarrow 0$ 。

2. 请说明：如果对 \mathcal{Z}^R 进行微扰计算，只有连通图的贡献正比于 R ，其余图对应于 R 的高次项。因此，在 $R \rightarrow 0$ 极限下 $\ln \mathcal{Z}$ 只由连通图给出。

4.1.3 两点函数修正

我们接下来考虑关联函数的计算。由于分布函数在 $x_i \rightarrow -x_i$ 下不变，所有 x_i 的奇数阶关联函数都为 0。因此，我们首先考虑两点函数 $G_{ij} = \langle x_i x_j \rangle$ 。其中，不加下标 0 的期望值定义包含着非高斯项 $\frac{g}{4!} \sum_i x_i^4$ ：

$$G_{ij} = \frac{1}{\mathcal{Z} \mathcal{Z}_0} \int \prod_k dx_k x_i x_j \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{kl} x_k (G_0^{-1})_{kl} x_l - \frac{g}{4!} \sum_k x_k^4 \right). \quad (4.21)$$

在无相互作用极限 $g = 0$ ，我们有 $G_{ij} = G_{0,ij}$ 。

我们考虑对 G_{ij} 的微扰计算。值得注意的是，分母的 \mathcal{Z} 中也包含 g ，因此也需要进行展开。事实上，计入分母展开贡献正好对应于要求所有顶角与 (x_i, x_j) 相连通。例如，保留到一阶，我们有

$$G_{ij} = \langle x_i x_j \rangle_0 - \frac{g}{4!} \sum_k (\langle x_i x_j x_k^4 \rangle_0 - \langle x_i x_j \rangle_0 \langle x_k^4 \rangle_0) = \langle x_i x_j \rangle_0 - \frac{g}{4!} \sum_k \langle x_i x_j x_k^4 \rangle_{0,c}. \quad (4.22)$$

事实上，这是连通集团定理的直接推论：我们可以在分布函数 $e^{-\frac{1}{2} \sum_{kl} x_k (G_0^{-1})_{kl} x_l - \frac{g}{4!} \sum_k x_k^4}$ 的指数上引入 $J_i x_i$ 的源项，将对应的积分定义为 $\mathcal{Z}[J]$ 。这样， G_{ij} 就对应于 $\ln \mathcal{Z}$ 的二阶导数。由于 $\ln \mathcal{Z}[J]$ 只包含连通图， G_{ij} 中就也只包含连通图。

下面，我们来具体计算 G_{ij} 。在 $O(g)$ 阶，只存在一个连通图：

$$G_{1,ij} = \text{diagram} = -\frac{g}{2} \sum_k G_{0,ik} G_{0,kk} G_{0,kj}. \quad (4.23)$$

这里，2 来自于中间连成圈的两根线间的交换对称性。值得注意的是，这里我们并不认为 ik 连线和 jk 连线有对称性——他们来自于顶角和外加变量 (x_i, x_j) 的缩并，而外加变量应该被认为是不同的（即使 $i = j$ 也一样）。我们进一步考虑 $O(g^2)$ 的贡献，这时存在三个不同的图：

$$\begin{aligned} G_{2,ij} &= \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \\ &= \frac{g^2}{4} \sum_{kl} G_{0,ik} G_{0,kk} G_{0,kl} G_{0,ll} G_{0,lj} + \frac{g^2}{4} \sum_{km} G_{0,ik} G_{0,mk}^2 G_{0,mm} G_{0,kj} + \frac{g^2}{6} \sum_{kl} G_{0,ik} G_{0,kl}^3 G_{0,lj}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

练习 4.3 对称性因子巩固 2 请验证并说明(4.24)式中所有对称性因子来源。

我们看到，类似 \mathcal{Z} 的计算，在第二阶的图中第一项和一阶计算中的图非常类似。然而，他们都是连通图，都会贡献到 G_{ij} 之中。事实上，可以想像在计算任意阶时，都存在一个图，它来自于将 $G_{1,ij}$ 重复 n 次：

$$i \text{---} \underbrace{\bigcirc \bigcirc \dots \bigcirc}_{n \text{ loops}} \text{---} j \quad (4.25)$$

类似的，我们可以将 $G_{2,ij}$ 中后两个图不断重复，得到一系列高阶的图。我们将形如 $G_{1,ij}$ 或者 $G_{2,ij}$ 中后两个图的，更“基础”的图求和起来，记做

$$i \text{---} \underset{k}{\Sigma} \text{---} \underset{l}{j} = \sum_{kl} G_{0,ik} \Sigma_{kl} G_{0,lj}, \quad \Sigma = \underbrace{\bigcirc}_{\text{self-energy}} + \underbrace{\bigcirc}_{\text{self-energy}} + \underbrace{\bigcirc}_{\text{self-energy}} + O(g^3) \quad (4.26)$$

Σ 被称为格林函数的自能。其中包含的图不能通过剪断一个格林函数被分为两个不连通的部分，这一性质被称为单粒子不可约 (one-particle irreducible)，有时被记做 1PI。自能包含两个指标，上述费曼图等式可以写作表达式：

$$\Sigma_{kl} = -\frac{g}{2} G_{0,kk} \delta_{kl} + \frac{g^2}{4} \sum_m G_{0,mk}^2 G_{0,mm} \delta_{kl} + \frac{g^2}{6} G_{0,kl}^3 + O(g^3). \quad (4.27)$$

系统修正后的格林函数 G_{ij} 可以包含任意个自能 Σ 。用双线代表真实的格林函数，则有

$$\begin{aligned} i \text{---} \text{---} j &= i \text{---} j + i \text{---} \Sigma \text{---} j + i \text{---} \Sigma \text{---} \Sigma \text{---} j + \dots \\ &= i \text{---} j + i \text{---} \text{---} \Sigma \text{---} j \end{aligned} \quad (4.28)$$

将格林函数和自能都表示为矩阵，我们就得到

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G} \cdot \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{G}_0, \quad \rightarrow \quad \mathbf{G} = (\mathbf{G}_0^{-1} - \mathbf{\Sigma})^{-1}. \quad (4.29)$$

这一自能和格林函数间的关系被称为 Schwinger-Dyson 方程。我们发现，即使我们对于 Σ 只算到 g^2 阶，在格林函数 G 中仍然会包含任意高阶的部分贡献。对于费米子系统，频率空间中格林函数 $\mathbf{G}_0^{-1} = -i\omega_n \mathbf{I} + \mathbf{H}$ ，因此，在修正后的格林函数中 $\mathbf{\Sigma}$ 直接和 \mathbf{H} 直接组合在一起，这正是它被称为自能的原因。

4.1.4 顶角修正

最后，我们考虑四点函数 $\langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle$ 的计算。对于无相互作用极限，我们有

$$\langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle_0 = G_{0,12} G_{0,34} + G_{0,13} G_{0,24} + G_{0,14} G_{0,23}. \quad (4.30)$$

加上相互作用之后，关联函数的修正仍然对应连通图。需要注意的是，这里连通只要求相互作用和 (x_1, x_2, x_3, x_4) 中至少一个连接，而非所有点都要连接在一起（即(4.14)中所谓的全联通）。容易看出，非全连通的图正好对应于

将(4.30)中无相互作用格林函数 $G_{0,ij}$ 改成修正后的 G_{ij} 。因此，我们只需要额外计算全联通的部分。我们引入修正后的顶角 Γ

$$\langle x_1 x_2 x_3 x_4 \rangle_{\text{fc}} = \begin{array}{c} \bullet 1 \\ \diagdown \\ \Gamma \\ \diagup \\ \bullet 3 \\ \bullet 2 \\ \diagdown \\ \Gamma \\ \diagup \\ \bullet 4 \end{array} = G_{1i} G_{2j} G_{3k} G_{4l} \Gamma_{ijkl} \quad (4.31)$$

保留到 g 的一阶， Γ 就是原始的相互作用顶角，对应 $\Gamma_{1,ijkl} = -g\delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{kl}$ 。在下一阶，我们则需要用两个顶角和四根不等价的外线相连接，结果包含三个不同的图

$$\begin{aligned} \Gamma_{2,ijkl} &= \begin{array}{c} i \\ \diagdown \\ \Gamma \\ \diagup \\ k \\ \bullet j \\ \diagdown \\ \Gamma \\ \diagup \\ l \end{array} = \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagup \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} + \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagdown \\ \diagup \quad \diagup \end{array} + \begin{array}{c} \diagdown \quad \diagdown \\ \diagup \quad \diagdown \end{array} \\ &= \frac{g^2}{2} (\delta_{ij}\delta_{kl}G_{0,ik}^2 + \delta_{ik}\delta_{jl}G_{0,ij}^2 + \delta_{il}\delta_{jk}G_{0,ij}^2). \end{aligned} \quad (4.32)$$

这里三个图的区别对应哪两个变量先连接到一个顶角，这些不同的过程被称为不同的通道 (**channel**)。在高能物理中，顶角函数正比于粒子间的散射振幅： Γ 可以被解释成一个 x_i 粒子和一个 x_j 粒子散射，产生了一个 x_k 粒子和 x_l 粒子。

4.2 最简单的相互作用场论： ϕ^4 理论

我们可以通过取连续极限，把多变量积分转换成最简单的虚时间量子场论。我们假设指标 i 对应 (\mathbf{x}, τ) ，将变量 x_i 对应到场 $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ ，并考虑自由玻色子格林函数

$$G_{0,ij}^{-1} \rightarrow \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)\delta(\tau_1 - \tau_2)(-\partial_{\tau_2}^2 - \nabla_{\mathbf{x}_2}^2 + r), \quad (4.33)$$

我们假设这里 $r > 0$ 。这样，(4.9)就转化成了路径积分

$$\mathcal{Z} = \int D\phi(\mathbf{x}, \tau) \exp\left(-\int d\mathbf{x}d\tau \left[\frac{1}{2}(\partial_\tau\phi)^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{g}{4!}\phi^4\right]\right). \quad (4.34)$$

在 $g = 0$ 时，如果我们进行代换 $\tau = it$ ，实时间的拉氏量密度正好写作 $\frac{1}{2}[(\partial_t\phi)^2 - (\nabla\phi)^2 - r\phi^2]$ ，对应的运动方程是 $(\partial_t^2 - \nabla^2 + r)\phi = 0$ ——这一方程被称为 **Klein-Gordon** 方程，描述了相对论性的自由标量玻色子（这里标量指的是场 ϕ 不携带任何时空指标，因此不带有自旋），其质量为 $m = \sqrt{r} > 0$ 。因此，这一系统存在能隙。

我们很容易将之前的计算都转化成 ϕ^4 理论的结果。以两点函数为例，(4.34)系统存在平移对称性，因此

$$G_{0,i_1 i_2} \rightarrow G_0(\mathbf{x}_1, \tau_1; \mathbf{x}_2, \tau_2) = G_0(\mathbf{x}_{12}, \tau_{12}). \quad (4.35)$$

其中， $G_0(\mathbf{x}_{12}, \tau_{12})$ 可以表示成

$$G_0(\mathbf{x}, \tau) = \langle \mathbf{x}, \tau | \frac{1}{-\partial_\tau^2 - \nabla^2 + r} | \mathbf{0}, 0 \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - i\omega\tau} \underbrace{\frac{1}{\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + r}}_{G_0(\mathbf{k}, \omega_n)}. \quad (4.36)$$

利用这一代换，我们得到

$$G_1(\mathbf{x}, \tau) = \text{Diagram} = -\frac{g}{2} \int d\tau' d\mathbf{x}' G_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \tau - \tau') G_0(\mathbf{x}', \tau') G_0(\mathbf{0}, 0). \quad (4.37)$$

然而，对照(4.36)容易发现，其中 $G_0(\mathbf{0}, 0)$ 在三维其实在 $k \rightarrow \infty$ 发散的。为了解如何理解这种发散，我们先来思考形如(4.34)这样的理论是如何出现的。

4.2.1 场论的正规化

ϕ^4 理论作为最简单的场论模型，广泛的出现在各种物理问题之中。例如，我们可以构造类似2.2.2小节的谐振子晶格模型：在一个 D 维晶格中，考虑每个格点存在一个量子振子，其广义坐标对应 $\hat{\phi}_{\mathbf{x}}$ 。系统整体的哈密顿量写作

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{x}} \left(\frac{p_{\mathbf{x}}^2}{2} + \frac{1}{2} \omega^2 \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2 + \frac{g}{4!} \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^4 \right) + \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \frac{1}{2} \omega'^2 (\hat{\phi}_{\mathbf{x}} - \hat{\phi}_{\mathbf{y}})^2. \quad (4.38)$$

这里，我们假设每个振子对应的势能包括简谐部分 $\frac{1}{2} \omega^2 \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2$ 及非简谐修正 $\frac{g}{4!} \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^4$ 。哈密顿量最后一项描述了不同振子间的耦合。对哈密顿量 \hat{H} 重复路径积分的推导，我们就得到

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{\mathbf{x}} d\phi_{\mathbf{x}} \exp \left(- \int d\tau \sum_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{2} (\partial_{\tau} \phi_{\mathbf{x}})^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \phi_{\mathbf{x}}^2 + \frac{g}{4!} \phi_{\mathbf{x}}^4 \right) + \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \frac{1}{2} \omega'^2 (\phi_{\mathbf{x}} - \phi_{\mathbf{y}})^2 \right) \quad (4.39)$$

在这一模型中，空间仍然是离散的。容易发现，如果我们取连续极限，就得到了 ϕ^4 理论。需要特别指出的是，在取连续极限前，格林函数 $G_0(\mathbf{x}, \tau)$ 可以写作

$$G_0(\mathbf{x}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int_{\mathbf{k} \in \text{B.Z.}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega\tau} \frac{1}{\omega_n^2 + 2\omega'^2(1 - \cos(ka)) + \omega^2}. \quad (4.40)$$

这里， a 是晶格长度。我们看到对动量的积分限制在了第一布里渊区，因此不会出现任何发散。我们可以把量子振子的格点模型叫做 ϕ^4 理论的一个紫外完备 (UV-complete) 版本。在连续极限下 $a \rightarrow 0$ ，导致我们进行了泰勒展开 $1 - \cos(ka) = k^2 a^2 / 2$ 。然而，这一展开只对于 $k \ll 1/a$ 才是成立的，我们不应该真的认为表达式(4.36)适用于任意大动量 \mathbf{k} ， ϕ^4 理论是一个低能有效场论。因此，在计算有效场论模型时，我们应该对动量取截断 $|\mathbf{k}| < \Lambda$ 。对于从微观晶格模型得到的参数 $r = \omega^2$ 、 g ，我们应该认为截断 $\Lambda \approx 1/a$ 。

这种利用某种技巧将发散积分转变成有限值的做法在场论中被称为正规化 (regularization)。比起动量截断，高能物理中更常使用的是维数正规化——将积分的积分维度 D 进行解析延拓，在实际的整数值附近展开，从而得到有限的结果。这一方法特别适用于处理规范理论，我们这里不再更多讨论。值得指出的是，人们的希望是不同的正规化方案能给出同样的物理结果，然而数学上这并没有什么保障——我们不如把正规化方法当成理论定义的一部分。

 **练习 4.4 Ising 模型与 ϕ^4 理论** 在这个练习中，我们将会看到统计物理的 Ising 模型也可以近似成 ϕ^4 理论。铁磁

Ising 模型的配分函数是

$$Z = \prod_{\mathbf{x}} \sum_{\sigma_{\mathbf{x}} = \pm 1} e^{\sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \beta J \sigma_{\mathbf{x}} \sigma_{\mathbf{y}}} \propto \int \prod_{\mathbf{x}} [d\sigma_{\mathbf{x}} \delta(\sigma_{\mathbf{x}}^2 - 1)] e^{\sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \beta J \sigma_{\mathbf{x}} \sigma_{\mathbf{y}}}. \quad (4.41)$$

这里 \mathbf{x} 是一个 $D + 1$ 维度晶格。在 Ising 模型中， δ 函数要求 σ 的取值只能是 ± 1 。我们用一个场论中常见的技巧，那就是把取值的硬性要求转变成能量的约束 $\delta(\sigma_{\mathbf{x}}^2 - 1) \rightarrow e^{-\frac{\tau}{4}(\sigma_{\mathbf{x}}^2 - 1)^2}$ 。请验证在这一近似后，再取连续极限下就得到了 ϕ^4 理论（这里， τ 对应某个空间方向）。请确定 ϕ^4 理论中各个参数与微观参数的关系。由于 $D + 1$ 维的经典 Ising 模型与 D 维量子 Ising 模型对应，我们也就知道了 ϕ^4 理论也可以描述量子 Ising 模型。

当然，需要指出的是，场论模型更多时候也不是从微观模型“推导”得到的，而是基于对称性分析从直接写出—— ϕ^4 理论具有 $\phi \rightarrow -\phi$ 的 Z_2 对称性，并且包含着在对称性要求下能写出的最简单的相互作用 ϕ^4 ，因此描述了各种具有 Z_2 对称性的系统在相变附近的低能普适性质，包括 Ising 模型。而想要完全理解我们为什么可以只保留最简单的相互作用项则需要用到重整化群的知识，将在课程最后介绍。

4.2.2 场论的重整化

知道了如何处理发散，我们就可以继续进行计算。简单起见，我们关注于 $\beta = \infty$ 的零温极限。这时，频率也变成连续的，我们不再需要区分时间方向和空间方向，我们将它们统一记做一个 $d = D + 1$ 维的矢量 \mathbf{x} 。对于 $d = 4$ ，我们得到

$$G_0(\mathbf{0}) = \int_{k < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + r} = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int \frac{k^{d-1}}{k^2 + r} dk = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{\Lambda^2}{2} + \frac{r}{2} \ln \frac{r}{\Lambda^2} \right) + O(\Lambda^{-2}). \quad (4.42)$$

这里 $\Omega_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ 是 d 维立体角。

为了更好的理解 G_1 对格林函数的修正，我们可以将费曼图的计算变换到动量/频率空间：这时，每根传播子都有确定的动量 \mathbf{k} 。每个顶角处的 $\int d\mathbf{x}$ 则保证了连接到统一顶角的粒子满足动量守恒。以 G_1 为例，结果为

$$G_1(\mathbf{k}) = \text{图} = -\frac{g}{2} G_0(\mathbf{k})^2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} G_0(\mathbf{q}) = -\frac{g}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{\Lambda^2}{2} + \frac{r}{2} \ln \frac{r}{\Lambda^2} \right) G_0(\mathbf{k})^2. \quad (4.43)$$

在这里，任意的动量 \mathbf{q} 都满足动量守恒，因此要对它进行积分 $\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d}$ ；对于更一般的费曼图，自由动量的个数等价于图的圈数，每个自由动量都应该被独立的积分。值得指出，虽然我们为了表明动量的方向标注了箭头， ϕ^4 理论仍然对应实标量场，在计算对称性因子时不应考虑箭头的方向。

$G_1(\mathbf{k})$ 的结果可以对应到 $\Sigma_1(\mathbf{k}) = -\frac{g}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{\Lambda^2}{2} + \frac{r}{2} \ln \frac{r}{\Lambda^2} \right)$ 。利用 Schwinger-Dyson 方程，我们就得到

$$G(\mathbf{k})_{\text{SD},1} = \frac{1}{k^2 + r - \Sigma(\mathbf{k})} = \frac{1}{k^2 + r + \frac{g}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{\Lambda^2}{2} + \frac{r}{2} \ln \frac{r}{\Lambda^2} \right)}. \quad (4.44)$$

容易看出， $\Sigma_1(\mathbf{k})$ 修正就是直接改变了 r 。如果我们重新定义 $r' = r + \frac{g}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left(\frac{\Lambda^2}{2} + \frac{r}{2} \ln \frac{r}{\Lambda^2} \right)$ ，就可以把这一修正，尤其是对截断 Λ 的依赖，吸收到参数 r 的定义之中——这样把截断的信息藏在场论原始参数中的过程被称为重整化 (renormalization)。如果一个理论中所有可观测量都可以利用这一方法消除截断依赖，这个理论就被称为可重整的。如果一个理论可重整，这就说明 Λ 其实是冗余的参数，因为它的依赖总可以被吸收到其他参量中；

另一方面，从微观格点模型的角度来看，一个理论不可重整，无非也就是要保留物理量对参数 Λ 的依赖，也并没有太大问题。

接下来，让我们尝试将 $\Sigma_2(\mathbf{k})$ 表示出来。在动量空间，我们有

$$\Sigma_2(\mathbf{k}) = \underbrace{\int_{\mathbf{q}_1}^{\mathbf{q}_2} \text{loop}}_{\mathbf{k} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2} + \text{circle} = \int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^{2d}} \left[\frac{g^2}{4} G_0(\mathbf{q}_1)^2 G_0(\mathbf{q}_2) + \frac{g^2}{6} G_0(\mathbf{q}_1) G_0(\mathbf{q}_2) G_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \right]. \quad (4.45)$$

这里的积分就更加复杂。我们不再给出积分的严格结果，而是重点讨论可能的发散项。我们可以将结果对 k 进行泰勒展开：

$$\begin{aligned} \Sigma_2(\mathbf{k}) = & \Sigma_2(\mathbf{0}) + \#g^2 \int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{q_1^2 + r} \frac{1}{q_2^2 + r} \frac{1}{[(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)^2 + r]^2} k^2 \\ & + \#g^2 \int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^{2d}} \frac{1}{q_1^2 + r} \frac{1}{q_2^2 + r} \frac{1}{[(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)^2 + r]^3} k^4 + O(k^6). \end{aligned} \quad (4.46)$$

其中， $\Sigma_2(\mathbf{0})$ 的部分即使发散也可以被 r 吸收。如果我们考虑 $d = 4$ ，正比于 k^2 的项被积函数正比于 $[k]^{-8}$ ，而积分也正好为 $[k]^8$ 。因此我们预期会出现 $\ln \Lambda$ 发散；对于更高阶的 k^4 ，被积函数正比于 $[k]^{-10}$ ，因此我们预期积分收敛。这样我们就得到

$$G(\mathbf{k})_{\text{SD},2} = \frac{1}{(1 + \#g^2 \ln \frac{\Lambda^2}{r})k^2 + (r - \Sigma(\mathbf{0})) - \Sigma_2^{\text{finite}}(\mathbf{k}) + O(g^3)}. \quad (4.47)$$

事实上， k^2 系数的发散暗示的是我们在作用量中引入的场 $\phi(\mathbf{x})$ 本身定义就不是有限的。事实上，在路径积分中，我们可以任意对场强定义改变一个因子 $\phi \rightarrow \sqrt{Z}\phi$ ，这样格林函数就同样减小了一个因子 Z^{-1} 。我们可以选取 $Z = 1 - \#g^2 \ln \frac{\Lambda^2}{r}$ ，使得

$$G(\mathbf{k})_{\text{SD},2} \approx \frac{1}{k^2 + (r - \Sigma(\mathbf{0})) - \Sigma_2^{\text{finite}}(\mathbf{k}) + O(g^3)}. \quad (4.48)$$

这样重新定义被积场使得动能项 k^2 系数有限的操作被称为场强重整化。

从这个计算中，我们可以归纳出如何预测可能出现的发散项。我们知道自能 Σ 有 $[k]^2$ 的量纲，这一特性在任意高阶计算中都应该成立。对于一个耦合参量 g ，假设它的量纲是 $[k]^a$ ，在 g^n 阶，除了 g^n 因子之外的部分应该贡献出 $[k]^{2-an}$ 。如果 $2 - an > 0$ ，这就说明在 $\Lambda \rightarrow \infty$ 的极限下可能出现 $\Lambda^{2-an}, \Lambda^{2-an-2}k^2, \Lambda^{2-an-4}k^4 \dots$ 的系列发散。如果 $a \geq 0$ ，我们知道发散最多出现在前两阶，有希望用 r 的重整化和场强重整化吸收。然而如果 $a < 0$ ，在越高阶则会出现越高的发散，场论肯定不可重整——这一讨论适用于任意场论模型。在我们 ϕ^4 理论中， $\phi(x)$ 场对应维度为 $[k]^{(d-2)/2}$ ，导致 g 的维度为 $[k]^{4-d}$ ，因此可重整要求 $d \leq 4$ 。之后，我们还将从重整化群的角度重新理解这一问题，我们会发现，量纲为负的不可重整的相互作用项在低能下不会贡献，因此我们可以从最开始就不写出它们。

最后，让我们考虑 ϕ^4 理论中顶角函数的计算。由于动量守恒，动量空间中的顶角函数由三个动量标记。例如，对于 Γ_1 ，我们有

$$\Gamma_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \begin{array}{c} \mathbf{k}_1 \nearrow \quad \searrow \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_2 \nearrow \quad \searrow \mathbf{k}_4 \end{array} = -g. \quad (4.49)$$

其中 $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3$ 。类似的，我们可以计算它的一圈图修正，由 Γ_2 给出：

$$\begin{aligned} \Gamma_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) &= \text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram} + \text{Diagram} \\ &= \frac{g^2}{2} \left(\int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} G_0(\mathbf{q}) G_0(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}) + \text{permutations} \right). \end{aligned} \quad (4.50)$$

简单起见，我们关注于 $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}$ 且 $d = 4$ 的特例。这时，我们可以得到

$$\begin{aligned} \Gamma_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{k}) &= \frac{g^2}{2} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{q^2 + r} \frac{1}{(2\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 + r} + \frac{2}{(q^2 + r)^2} \right] \\ &= \frac{g^2}{2} \int_0^1 dx \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{[x(2\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 + (1-x)q^2 + r]^2} + \frac{2}{(q^2 + r)^2} \right] \\ &= \frac{g^2}{4} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \left[-1 - \frac{2\sqrt{k^2 + r}}{k} \tanh^{-1} \left(\frac{k}{\sqrt{k^2 + r}} \right) - 3 \ln \left(\frac{r}{\Lambda^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

这里，我们利用了高能物理中圈图计算的常见技巧 $\frac{1}{A_1 A_2} = \int_0^1 dx \frac{1}{[x A_1 + (1-x) A_2]^2}$ 。可以看到，这里结果出现 $\ln \Lambda$ 发散，可以被参数 g 吸收。

4.3 相互作用电子气

接下来，我们转而考虑相互作用电子气的微扰计算。为了方便，我们再次写出其作用量

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi e^{-\int d\tau d\mathbf{x} \bar{\psi}(\mathbf{x}, \tau) (\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu) \psi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int d\tau \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{y} \bar{\psi}(\mathbf{x}, \tau) \psi(\mathbf{x}, \tau) U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \bar{\psi}(\mathbf{y}, \tau) \psi(\mathbf{y}, \tau)}. \quad (4.52)$$

类似之前的多变量积分，我们对四次项泰勒展开来进行微扰计算。相比之下，相互作用电子系统有下述重要区别：1. 包含 ψ 和 $\bar{\psi}$ 两种场，只有它们之间的格林函数 $\langle \psi \bar{\psi} \rangle$ 不为 0；2. 相互作用项不完全在同一空间点；3. 所有场为 Grassmann 变量，交换时会出现额外的因子 (-1)。我们先来介绍这三点区别如何体现在费曼图之中：

1. ψ 和 $\bar{\psi}$ 需要配对缩并物理上对应着系统存在粒子数守恒：我们可以形象地认为每个 $\bar{\psi}$ 产生了一个粒子，在传播一段时间后被 ψ 湮灭。因此，我们在费曼图上加上箭头来标记粒子的传播方向。例如，我们将无相互作用的两点函数表示为

$$G_0(\mathbf{k}, \omega_n) = \langle \psi(\mathbf{k}, \omega_n) \bar{\psi}(\mathbf{k}, \omega_n) \rangle = \text{Diagram} = \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu}. \quad (4.53)$$

2. 由于相互作用顶角包含 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 点处的场，我们将它表示成

$$\text{Diagram} = -U(\mathbf{x}_{12}) \quad \text{Diagram} = -U(\mathbf{k}_{13}) \quad (4.54)$$

这里，波浪线代表 $U(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ ；动量守恒要求 $(\mathbf{k}_1, \omega_{n_1}) + (\mathbf{k}_2, \omega_{n_2}) = (\mathbf{k}_3, \omega_{n_3}) + (\mathbf{k}_4, \omega_{n_4})$ 。我们可以形象的认为 \mathbf{k}_1 动量的电子和 \mathbf{k}_2 动量的电子发生了一次散射，交换了动量 \mathbf{k}_{13} ，对应的概率幅是 $U(\mathbf{k}_{13})$ 。值得注意的是，在这里 \mathbf{x} 处的场和 \mathbf{y} 处的场之间由交换对称性，因此和不等价的算符进行缩并时贡献了额外

的因子 2，导致顶角不包含额外系数。

我们看到波浪线表现的非常像是一个玻色子场，对应的格林函数是 $U(\mathbf{q})$ 。事实上，利用(2.10)，可以证明

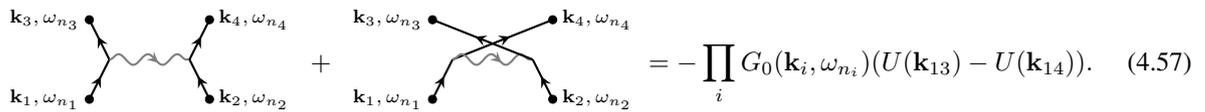
$$e^{-\frac{1}{2} \int \bar{\psi} \psi(\mathbf{x}, \tau) U(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \bar{\psi} \psi(\mathbf{y}, \tau)} = \int D\phi e^{-i \int \bar{\psi} \psi(\mathbf{x}, \tau) \phi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x}, \tau) U^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \tau)}. \quad (4.55)$$

这里，额外的常数因子都被隐藏在 $D\phi$ 的定义之中。 $U^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 是 $U(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 作为 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) 的“矩阵”的逆，而非 $1/U(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 。这样，在动量空间 $U^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 才正好对应于 $1/U(\mathbf{q})$ 。这样通过引入辅助场将四个场算符的相互作用顶角分解的做法被称为 Hubbard-Stratonovich 变换。变换后的配分函数写作

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi D\phi e^{-\int \bar{\psi}(\mathbf{x}, \tau) (\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi(\mathbf{x}, \tau)) \psi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x}, \tau) U^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \tau)}. \quad (4.56)$$

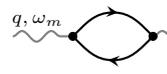
我们将会看到，对于有些计算变换后的形式其实更加直观。

3. 除了上述规则，我们还需要在缩并时考虑费米子交换的符号。事实上，我们很难给出一般添加负号的规则，一般情况最好通过泰勒展开的方法进行核实。这里我们只举两个例子。例如，当我们考虑四点函数的全连接部分，会包含两个图



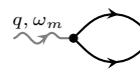
$$= - \prod_i G_0(\mathbf{k}_i, \omega_{n_i}) (U(\mathbf{k}_{13}) - U(\mathbf{k}_{14})). \quad (4.57)$$

这里， $U(\mathbf{k}_{13})$ 和 $U(\mathbf{k}_{14})$ 之间的相对负号来自于费米子的交换。另一方面，考虑辅助场 ϕ 的自能图



$$= (-1)(i)^2 \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^D} G_0(\mathbf{p}, \omega_n) G_0(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \omega_n + \omega_m). \quad (4.58)$$

这里的 (-1) 也来自于费米子交换的负号。我们看到这个费曼图中存在一个费米子构成的圈，因此这个计算常被解释成每个费米子圈对应一个负号。事实上，这里要特别注意费米子圈中箭头的方向。只有在圈中箭头指向连续时，对应的图才会出现 (-1) 的因子。假设存在形如 $e^{-(\bar{\Delta}\psi_1\psi_2 + \Delta\bar{\psi}_2\bar{\psi}_1)}$ 的相互作用， Δ 场的自能图



$$= \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^D} G_0(\mathbf{p}, \omega_n) G_0(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, -\omega_n + \omega_m). \quad (4.59)$$

则不会存在额外的因子 (-1) 。此外，当存在 Δ 这种场时，有些不包含费米子圈的图也会出现额外的因子 (-1) ，需要特别小心。

练习 4.5 费米子的负号 请通过对相互作用顶角进行泰勒展开直接验证上述所有图中是否存在费米子场交换导致的负号。

4.3.1 自由能修正

我们先来考虑相互作用对系统自由能的修正。我们在2.5节已经利用场论方法计算了无相互作用极限 $U = 0$ 的自由能，结果为

$$F_0 = -\beta^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left(1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})} \right) \rightarrow -\frac{2N\mu}{5}. \quad (\beta \rightarrow \infty) \quad (4.60)$$

4.3.1.1 直接计算

我们首先考虑相互作用的一阶修正，连线后得到下面两个图

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta V} \delta_1 \ln \mathcal{Z} &= \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \\ &= -\frac{1}{2\beta^2} \sum_{n, n'} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^D} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} [U(\mathbf{0}) - U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] G_0(\mathbf{k}, \omega_n) G_0(\mathbf{k}', \omega_{n'}). \end{aligned} \quad (4.61)$$

这里，等式左边的 $1/\beta V$ 保证了自由能是广延量； $U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ 的额外负号就是来自于费米子圈；对称性因子 2 分布来自于左图的左右交换对称性和右图沿中心转动 π 角的对称性。类似2.5中对自由粒子自由能的计算，在引入正确的正规化后可以得到

$$\frac{1}{\beta} \sum_n G_0(\mathbf{k}, \omega_n) = -n(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \quad (4.62)$$

其中 $n(x) = (e^x + 1)^{-1}$ 是费米-狄拉克分布。因此，我们得到

$$F_1 = \frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^D} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} [U(\mathbf{0}) - U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] n(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) n(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu). \quad (4.63)$$

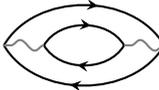
这就是 **Hatree-Fock** 近似的结果。第一项被称为 **Hatree** 项，其结果等于 $\frac{VU(\mathbf{0})n^2}{2}$ ，描述了密度为 n 的系统的直接相互作用能；第二项被称为 **Fock** 项，描述了费米子的交换相互作用。我们看到，和 ϕ^4 理论不同的是，我们这里的相互作用电子气模型计算并不会出现发散（只要 $U(\mathbf{k})$ 有足够好的性质），这是因为与在低能极限下才得到的有效模型不同，我们这里的模型可以看出一个微观模型，本身就有良好定义的。

接下来，我们考虑计算到二阶的结果。在第二阶，其实存在 5 个不同的图。这里，我们主要关注：

$$\frac{1}{\beta V} \delta_2 \ln \mathcal{Z} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots \quad (4.64)$$

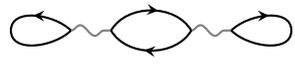
其中，

$$\begin{aligned} \text{Diagram 1} &= -\frac{1}{4\beta^3} \sum_{n, m_1, m_2} \int \frac{d\mathbf{k} d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2}{(2\pi)^{3D}} U(\mathbf{q}_1) U(\mathbf{q}_2) G_0(\mathbf{k}, \omega_n) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1, \omega_n + \omega_{m_1}) \\ &\quad \times G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \omega_n + \omega_{m_1} + \omega_{m_2}) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2, \omega_n + \omega_{m_2}). \end{aligned} \quad (4.65)$$



$$= \frac{1}{4\beta^3} \sum_{m, n_1 n_2} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{q}}{(2\pi)^{3D}} U(\mathbf{q})^2 G_0(\mathbf{k}_1, \omega_{n_1}) G_0(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \omega_{n_1} + \omega_m) \quad (4.66)$$

$$\times G_0(\mathbf{k}_2, \omega_{n_2}) G_0(\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}, \omega_{n_2} + \omega_m).$$



$$= -\frac{1}{2\beta^3} \sum_{n_1 n_2 n_3} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_3}{(2\pi)^{3D}} U(\mathbf{0})^2 G_0(\mathbf{k}_1, \omega_{n_1}) G_0(\mathbf{k}_3, \omega_{n_3}) G_0(\mathbf{k}_2, \omega_{n_2})^2. \quad (4.67)$$

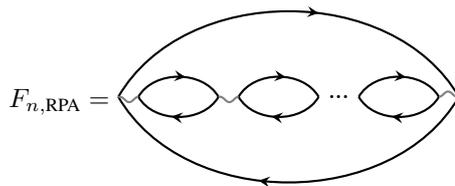
这里，第一个图包含费米子圈，给出一个负号 (-1)；同时 C_4 转动对称性给出对称性因子 4。对于第二个图，包含两个费米子圈；有整体的转动对称性和内外圈的交换对称性，因此对称性因子也是 4；对于图三，则只有左右交换的对称性因子 2。

我们先来比较前两个图的贡献。事实上，我们可以说明在密度较大的极限下，第二个图贡献大于第一个图。这是由于(4.53)式表明最主要的贡献来自费米子动量 $|\mathbf{k}| \approx k_F$ 的区域：对于图一，这就要求 $|\mathbf{q}_1|$ 和 $|\mathbf{q}_2|$ 都远小于 k_F ，同时动量 $|\mathbf{k}|$ 在费米面附近；对于图二，我们只需要 $|\mathbf{q}|$ 远小于 k_F ，而动量 $|\mathbf{k}_1|$ 、 $|\mathbf{k}_2|$ 则可以在费米面附近独立求和。因此，图二相比图一多了一个对费米面的求和，在大动量下起主导作用。容易发现，图二的贡献可以写成

$$F_{2,\text{RPA}} = -\frac{V}{4\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} U(\mathbf{q})^2 \underbrace{\left[\frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} G_0(\mathbf{k}, \omega_n) G_0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega_n + \omega_m) \right]^2}_{\Pi(\mathbf{q}, \omega_m)} \quad (4.68)$$

$$= -\frac{V}{4\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} U(\mathbf{q})^2 \Pi(\mathbf{q}, \omega_m)^2.$$

这里 $\Pi(\mathbf{q}, \omega_m)$ 其实就正比我们曾经计算过的密度-密度关联函数的连通部分。有趣的是，我们也可以把 Fock 项表示成 $F_{1,\text{RPA}} = -\frac{V}{2\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} U(\mathbf{q}) \Pi(\mathbf{q}, \omega_m)$ 。事实上，在任意高阶都存在类似的贡献



$$F_{n,\text{RPA}} = \dots = -\frac{V}{2n\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} [U(\mathbf{q}) \Pi(\mathbf{q}, \omega_m)]^n. \quad (4.69)$$

这里，对称性因子贡献了系数 $1/2n$ ，其中 n 对应 n 个费米子圈间的轮换对称性。只保留这些项的近似被称为 RPA (random phase approximation)，将它们求和我们就得到

$$F_{\text{RPA}} = \sum_n F_{n,\text{RPA}} = \frac{V}{2\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \ln \left(1 - U(\mathbf{q}) \Pi(\mathbf{q}, \omega_m) \right). \quad (4.70)$$

最后，我们讨论第三个图。利用引入的 $\Pi(\mathbf{q}, \omega_n)$ ，我们可以将其表示成

$$F_{2,D} = \frac{VU(\mathbf{0})^2 n^2}{2} \Pi(\mathbf{0}, 0) = \frac{VU(\mathbf{0}) n^2}{2} U(\mathbf{0}) \Pi(\mathbf{0}, 0). \quad (4.71)$$

事实上，类似于 RPA 近似，我们也有无穷多个类似的图

$$F_{n,D} = \text{[Diagram: n loops connected in a chain]} = \frac{VU(\mathbf{0})n^2}{2} [U(\mathbf{0})\Pi(\mathbf{0},0)]^n. \quad (4.72)$$

这里，零阶的图就是 **Hatree** 项。将他们全部求和起来，我们就得到修正了的 **Hatree** 能量

$$F_D = \sum_n F_{n,D} = \frac{Vn^2}{2} \frac{U(\mathbf{0})}{1 - U(\mathbf{0})\Pi(\mathbf{0},0)} = \frac{Vn^2}{2} \frac{1}{U(\mathbf{0})^{-1} - \Pi(\mathbf{0},0)}. \quad (4.73)$$

4.3.1.2 有效作用量

现在，让我们换一个新的观点来计算自由能的修正。我们现在从(4.74)出发考虑相互作用对自由能的修正。为了方便，我们将它复制过来

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi D\phi e^{-\int \bar{\psi}(\mathbf{x},\tau) \left(\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi(\mathbf{x},\tau) \right) \psi(\mathbf{x},\tau) - \frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x},\tau) U^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y},\tau)}. \quad (4.74)$$

值得注意的是，在引入 ϕ 场后，作用量对于 ψ 和 $\bar{\psi}$ 的依赖变成了二次的，因此可以形式化的用高斯积分公式把费米子“积掉”，结果写作

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int D\phi \det \left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi(\mathbf{x},\tau) \right] e^{-\frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x},\tau) U^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y},\tau)} \\ &= \int D\phi e^{\ln \det \left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi \right] - \frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x},\tau) U^{-1}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y},\tau)} \equiv \int D\phi e^{-S_\phi}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

这样，我们就把原始的 ψ 和 $\bar{\psi}$ 的路径积分改写成了只对 ϕ 的路径积分，代价就是对 ϕ 来说作用量 S_ϕ 形式非常复杂——我们通常把 S_ϕ 称为系统的有效作用量。

当然，即使进行了这个变化，我们还是不会严格计算 ϕ 的积分——我们会算的总是高斯积分以及附近的微扰论。那么，我们不如就把 S_ϕ 也写成类似(4.52)中二次项加上高次项的形式，然后对高次项进行微扰。我们将 $\ln \det$ 的项对 ϕ 进行展开，得到：

$$\begin{aligned} \delta S_\phi &= -\ln \det \left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi \right] = -\text{tr} \ln \left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu + i\phi \right] \\ &= -\text{tr} \ln \left[\partial_\tau - \frac{\nabla^2}{2} - \mu \right] - \text{tr} \ln [1 + iG_0 \cdot \phi] \end{aligned} \quad (4.76)$$

进行这些推导时，最方便的方式就是把算符当作矩阵，并利用矩阵关系 $\text{tr} \ln A = \log \det A$ ，可以通过将矩阵对角化证明。第一项正好对应无相互作用的自由能 F_0 ，我们主要关注包含 ϕ 的部分。利用 ϕ 在 \mathbf{x}, τ 空间对角的性质，我们有

$$\begin{aligned} \delta S_\phi &= -\text{tr} \ln [1 + iG_0 \cdot \phi] = -i \text{tr} [G_0 \cdot \phi] - \frac{1}{2} \text{tr} [G_0 \cdot \phi \cdot G_0 \cdot \phi] + \dots = -i \int d\tau d\mathbf{x} \langle \mathbf{x}, \tau | G_0 | \mathbf{x}, \tau \rangle \phi(\mathbf{x}, \tau) \\ &\quad - \frac{1}{2} \int d\tau_1 d\mathbf{x}_1 d\tau_2 d\mathbf{x}_2 \phi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \langle \mathbf{x}_1, \tau_1 | G_0 | \mathbf{x}_2, \tau_2 \rangle \phi(\mathbf{x}_2, \tau_2) \langle \mathbf{x}_2, \tau_2 | G_0 | \mathbf{x}_1, \tau_1 \rangle + \dots \\ &= i \int d\tau d\mathbf{x} n\phi(\mathbf{x}, \tau) - \frac{1}{2} \int d\tau_1 d\mathbf{x}_1 d\tau_2 d\mathbf{x}_2 \phi(\mathbf{x}_1, \tau_1) \Pi(\mathbf{x}_{12}, \tau_{12}) \phi(\mathbf{x}_2, \tau_2) + \dots \end{aligned} \quad (4.77)$$

这里，我们利用了实空间中 $G(\mathbf{x}_{12}, \tau_{12})G(\mathbf{x}_{21}, \tau_{21}) = \Pi(\mathbf{x}_{12}, \tau_{12})$ 。事实上，我们也可以通过费曼图方法得到同

样的结果。我们只需要在积分 ψ 时对 ψ 和 ϕ 的相互作用顶点进行微扰展开，并假装 ϕ 是一个时空的函数而不进行积分。我们保留的这两个贡献则对应于


(4.78)

这些图中都包含费米子圈，因此会有额外的 (-1) 。在之前的推导中，这就对应于我们对 Grassman 变量积分得到的是 \det 而非 c 数高斯积分的 \det^{-1} 。

将 δS_ϕ 的贡献和 $\frac{1}{2} \int \phi(\mathbf{x}, \tau) U^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \tau)$ 相加，我们看到 Π 正好和 U^{-1} 组合成了 $U^{-1} - \Pi$ 。由于 U 就是 ϕ 场的自由格林函数， Π 正好对应于 ϕ 的自能部分；同样的结论也可以直接从费曼图中得出。物理上，这对应着由于激发电子空穴对产生的屏蔽效应：例如，如果我们考虑库仑势，则有 $U(\mathbf{q}) = 4\pi e^2/q^2$ 。在考虑电子空穴对的贡献之后，修正的相互作用顶点变成

$$\frac{1}{U(\mathbf{q})^{-1} - \Pi(\mathbf{q}, \omega_n)} \approx \frac{1}{U(\mathbf{q})^{-1} - \Pi(0, 0)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2}. \quad (4.79)$$

这里，我们只保留了自能中不依赖于动量和频率的部分。 κ 的具体取值其实可以在(1.44)中取 $x = 0$ 得到。傅立叶变换回实空间，我们发现势能从长程的 e^2/r 变成了短程的 $e^2 e^{-\kappa r}/r$ 。

最后，我们利用保留到 ϕ 二次方的有效作用量计算自由能的修正。利用高斯积分公式容易得到

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \int D\phi e^{-in \int \phi - \frac{1}{2} \int \phi (U^{-1} - \Pi) \phi} = \mathcal{Z}_0 \sqrt{\frac{\det(U^{-1})}{\det(U^{-1} - \Pi)}} e^{-\frac{V\beta n^2}{2} \frac{1}{U^{-1} - \Pi}}. \quad (4.80)$$

我们手动加入了常数 $\sqrt{\det(U^{-1})}$ 来保证相互作用趋于 0 时结果只包含无相互作用部分 \mathcal{Z}_0 ；我们也可以从引入变换(4.55)时就保留这个因子。这一结果恰恰等价于

$$F = F_0 + \frac{V}{2\beta} \sum_m \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \ln \left(1 - U(\mathbf{q}) \Pi(\mathbf{q}, \omega_m) \right) + \frac{Vn^2}{2} \frac{1}{U(0)^{-1} - \Pi(0, 0)} = F_0 + F_{\text{RPA}} + F_D. \quad (4.81)$$

这里，我们用到了

$$\text{tr} \ln(U^{-1} - \Pi) = \sum_{\mathbf{q}} \sum_n \ln \left(U^{-1}(\mathbf{q}) - \Pi(\mathbf{q}, \omega_n) \right) = V \sum_n \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^D} \ln \left(U^{-1}(\mathbf{q}) - \Pi(\mathbf{q}, \omega_n) \right). \quad (4.82)$$

4.3.2 费米子谱修正

对于无相互作用费米子，虚时间格林函数已经在(4.53)给出。正如我们上一章介绍的，相关的实验可观测量其实是推迟格林函数，对应虚时间格林函数的解析延拓

$$G_0^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k + \mu + i0^+} \approx \frac{1}{\omega - v_F \delta k + i0^+}. \quad (4.83)$$

这里，由于在多体系统中低能响应主要来自费米面附近的贡献（例如上一章计算的电导率），我们将色散 ϵ_k 在费米面附近进行展开 $k = k_F + \delta k$ ，其中 $v_F = k_F/m$ 为自由粒子的费米速度。

接下来，我们考虑相互作用对费米子格林函数的修正。在相互作用的一阶，自能包含

$$\begin{aligned}\Sigma_1(\mathbf{k}, \omega_n) &= \text{diagram} + \text{diagram} = \frac{1}{\beta} \sum_{n'} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^D} [U(\mathbf{0}) - U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] G_0(\mathbf{k}', \omega_{n'}) \\ &= - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^D} [U(\mathbf{0}) - U(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] n(\epsilon_{k'} - \mu) \equiv -\delta\epsilon_k.\end{aligned}\quad (4.84)$$

对于球对称的势能 $U(\mathbf{r})$ ，结果是一个实数，并且不依赖于频率 ω 。我们将其记做 $\delta\epsilon_k$ 。容易看出，我们有 $\delta\epsilon_k = \delta F_1 / \delta n_k$ 。物理上，这说明由于 **Hartree-Fock** 能的存在，增加一个新的粒子会由于它与周围粒子的相互作用导致色散关系 ϵ_k 受到修正——修正的格林函数写作

$$G(\mathbf{k}, \omega_n)_{\text{SD},1} = \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k + \delta\epsilon_k - \mu}, \quad G^R(\mathbf{k}, \omega)_{\text{SD},1} = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \delta\epsilon_k + \mu + i0^+} = \frac{1}{\omega - v_F^* \delta k + i0^+}. \quad (4.85)$$

即相互作用修正了费米速度 v_F 。

如果我们算到更高阶，一般 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)$ 一般既是动量 \mathbf{k} ，也是频率 ω_n 的函数。这时，推迟格林函数的结果可以形式化写成

$$G^R(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{\omega - \epsilon_k - \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (4.86)$$

这里， $\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega) = -\Sigma(\mathbf{k}, -i\omega + 0^+)$ 是推迟格林函数的自能。我们一般不需要再写出 $i0^+$ ，这是由于 $\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 通常有不为零的虚部（事实上，**Lehmann** 表示保证其虚部小于 0）。让我们首先将 $\Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)$ 的虚部和实部分离，并在费米面附近展开。这样，我们就得到

$$\begin{aligned}G^R(\mathbf{k}, \omega) &\approx \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_k - \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0) - \omega \partial_\omega \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0) - i \text{Im } \Sigma^R(\mathbf{k}, \omega)} + \dots \\ &\approx \frac{Z}{\omega - \tilde{\xi}_k + i \Gamma_k / 2} + \dots \approx \frac{Z}{\omega - v_F^* \delta k + i \Gamma_k / 2} + \dots\end{aligned}\quad (4.87)$$

由于我们仍然主要关系费米面附近的性质，在第一行我们将自能实部在 $\omega = 0$ 附近进行了展开，其中 ... 包含的是单粒子激发之外的贡献，如多个电子和空穴的部分，常被称为非相干（**incoherent**）部分。然后，我们引入了

$$Z = \frac{1}{1 - \partial_\omega \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)}, \quad \tilde{\xi}_k = \frac{\epsilon_k - \mu + \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)}{1 - \partial_\omega \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)}, \quad \Gamma_k = -\frac{2 \text{Im } \Sigma^R(\mathbf{k}, \tilde{\xi}_k)}{1 - \partial_\omega \text{Re } \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)} \quad (4.88)$$

这里，由于自能虚部只在 $\omega = \tilde{\xi}_k$ 时有重要贡献，我们将 $\text{Im } \Sigma^R$ 中频率带成 $\omega = \tilde{\xi}_k$ 。我们看到在费米面 $\tilde{\xi}_k = 0$ 附近，系统推迟格林函数的行为非常类似自由费米子——有这样费米子格林函数的理论被称为费米液体理论，其中 Z 被称为准粒子留数（**quasi-particle residue**），它描述了零温下费米子占据数在费米面处的跳变：我们可以将(4.87)对应到虚时间格林函数 $G(\mathbf{k}, \omega_n)$ （类似(3.3)式），并计算零温下的占据数：

$$n_k = \langle \bar{\psi}(\mathbf{k}, 0^+) \psi(\mathbf{k}, 0) \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(\mathbf{k}, \omega) e^{i\omega 0^+} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[\frac{Z}{i\omega - \tilde{\xi}_k + i \Gamma_k \text{sgn}(\omega) / 2} + \dots \right] e^{i\omega 0^+} \quad (4.89)$$

这里，因子 $e^{i\omega 0^+}$ 要求在将实轴积分改成围道积分式，我们应该添加的是上半平面无穷远处的大圆弧。这样，我

们只需要计入上半平面内的极点——因此，括号内第一项只在 $\tilde{\xi}_k < 0$ 的时候才有贡献。结果就给出

$$n_k = Z \theta(-\tilde{\xi}_k) + \text{reg.} \quad (4.90)$$

其中，我们假设 ... 的贡献在 $\tilde{\xi}_k = 0$ 附近不会出现奇异性。这一结果就表明在零温下费米液体存在类似自由费米子的费米面。

另一方面， Γ_k 对应准粒子的衰变速率，其结果正比于自能的虚部——这一关系被称为光学定理 (optical theorem)，我们在量子力学课程中的散射理论里也接触过类似的关系。如果要把 Γ_k 计算到微扰论最低阶，我们需要把自能函数计算到相互作用的二阶，同时可以忽略分母中的 $\partial_\omega \text{Re} \Sigma^R(\mathbf{k}, 0)$ 。这个计算我们留到练习中完成，其结果正好对应于费米黄金规则

$$\begin{aligned} \Gamma_k = & \frac{1}{2} \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^{2D}} |\mathcal{M}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)|^2 2\pi \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - \epsilon_{k_3}) \\ & \times [n(\epsilon_{k_1} - \mu)(1 - n(\epsilon_{k_2} - \mu))(1 - n(\epsilon_{k_3} - \mu)) + (1 - n(\epsilon_{k_1} - \mu))n(\epsilon_{k_2} - \mu)n(\epsilon_{k_3} - \mu)]. \end{aligned} \quad (4.91)$$

这里我们考虑的是动量为 \mathbf{k} 的电子和 \mathbf{k}_1 动量电子散射成 \mathbf{k}_2 和 \mathbf{k}_3 电子的过程，以及这一过程的逆过程。我们引入了散射的顶角/散射振幅 $\mathcal{M}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ 。方括号中第一项的 $n(\epsilon_{k_1} - \mu)$ 说明发生散射要求存在一个 \mathbf{k}_1 动量的电子，同时 $(1 - n(\epsilon_{k_2} - \mu))(1 - n(\epsilon_{k_3} - \mu))$ 要求 \mathbf{k}_2 和 \mathbf{k}_3 动量上没有电子占据。类似的，方括号中第二项则描述了产生 \mathbf{k} 动量电子的逆过程。系数 $1/2$ 来自于末态相空间的全同性。

在零温极限下，我们可以估计 Γ_k 在费米面附近的行为：考虑 $\epsilon_k - \mu > 0$ 且很小，这时如果希望散射过程能够发生，首先 \mathbf{k}_1 必须被占据，因此要在费米面以下；其次， \mathbf{k}_1 对应的能量不能太负，否则散射之后我们无法产生两个在费米面以上的电子 ϵ_{k_2} 和 ϵ_{k_3} 。因此，我们要求 $\epsilon_k - \mu > |\epsilon_{k_1} - \mu|$ 。这时，散射末态 ϵ_{k_2} 也应当满足 $\epsilon_k - \mu > |\epsilon_{k_2} - \mu|$ 。因此，我们发现在(4.91)中的所有积分都被限制在了 $\epsilon_k - \mu$ 宽的球壳中，导致积分结果正比于 $|\epsilon_k - \mu| = \delta k^2$ 。特别是，这就导致衰变速率在费米面上趋于 0——零温下费米液体中费米面上的准粒子激发有无穷长的寿命！如果考虑有限温度，类似的分析就会给出在费米面上 $\Gamma_k \sim T^2$ 。回忆起电导率的公式(3.65)，这说明低温下费米子的相互作用会贡献之流电阻率 $\rho \propto T^2$ 。

练习 4.6 费米子自能的两圈图修正 请画出相互作用 U 对费米子自能 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega_n)$ 二阶贡献的所有费曼图，区分哪些图包含频率 ω_n 的依赖；对于包含频率依赖的图，完成其中的 Matsubara 频率求和，证明 $\Sigma^R(\mathbf{k}, \epsilon_k - \mu)$ 的虚部和费米黄金规则给出的结果一致。

第5章 平均场方法

内容提要

- 鞍点近似
- 1/N 展开
- 玻色子超流
- Mermin-Wagner 定理
- BCS 理论
- Higgs 机制
- 电荷/自旋密度波
- 费米面嵌套

5.1 鞍点近似与真空值

在上一章,我们介绍了对相互作用项进行微扰展开,从而计算多体系统性质的方法。最简答的例子就是4.1.1小节中考虑的单变量积分

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-r\frac{x^2}{2} - \frac{g}{4!}x^4}. \quad (5.1)$$

在当时,我们假设了二次项系数 $r > 0$ 。那么,当二次项系数小于零,我们又该怎么求解呢? 容易发现我们现在不能再直接把 gx^4 进行泰勒展开, 否则

$$\mathcal{Z}_n \propto g^n \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{4n} e^{-r\frac{x^2}{2}} \rightarrow \infty. \quad (5.2)$$

当我们对 x 作展开的时候,我们默认了对积分贡献较大的部分来自于 $x = 0$ 附近。当 $r < 0$, 这一假设不再正确,我们应该先研究到底应该在哪个点 x_0 附近进行展开。一个粗略的估计就是考虑指数上函数的极值:

$$\frac{\partial}{\partial x_0} \left(\frac{r}{2}x_0^2 + \frac{g}{4!}x_0^4 \right) = rx_0 + \frac{g}{6}x_0^3 = 0. \quad (5.3)$$

对于 $r < 0$, 我们可以解出 $x_{0,\pm} = \pm\sqrt{-6r/g}$ 。为了计算 x 在 $x_{0,\pm}$ 附近涨落的贡献,我们引入 $x = x_{0,\pm} + \delta x$, 并对 δx 进行展开:

$$S_{\pm} = \frac{r}{2}(x_{0,\pm} + \delta x)^2 + \frac{g}{4!}(x_{0,\pm} + \delta x)^4 = -\frac{3r^2}{2g} - r\delta x^2 \pm \sqrt{\frac{-gr}{6}}\delta x^3 + \frac{g}{24}\delta x^4. \quad (5.4)$$

因此,原始积分可以被近似成近似成在 $x_{0,\pm}$ 处贡献之和

$$\mathcal{Z} \approx \sum_{\pm} \int_{-\infty}^{\infty} d\delta x e^{-S_{\pm}} \Big|_{\text{finite order}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\delta x e^{-S_+} \Big|_{\text{finite order}}. \quad (5.5)$$

这里,我们对于在 δx 的涨落只计算到前几阶,第二个等号利用了原始积分在 $x \rightarrow -x$ 的反射对称性。在最低阶,我们忽略所有展开后的非高斯项。对于 $r = -1$, $g = 0.5$, 近似解取值为 $2\sqrt{\pi/|r|}e^{3r^2/2g} \approx 71.2$, 而严格结果给出 78.0。我们看到,这简单的零阶近似就对 \mathcal{Z} 给出了还不错的估计。事实上,在 $g \rightarrow 0$ 的极限下,(5.5)式会

变成严格的：我们可以令 $x \rightarrow x/\sqrt{g}$ ，这样

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{\sqrt{g}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{g}(r\frac{x^2}{2} + \frac{1}{4!}x^4)}. \quad (5.6)$$

在 $g \rightarrow 0$ 的极限下，远离极值点的贡献受到指数压制 $e^{-\# / g}$ ，因此上述展开可以适用。

我们可以从上面的分析总结出近似求解一大类积分的方法，被称为鞍点近似 (saddle point approximation) 或者最速下降法 (steepest descents)。考虑一个有如下形式的积分

$$\mathcal{Z} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dx_i e^{-NV(x_i)}. \quad (5.7)$$

我们假设积分有足够好的收敛性质，并尝试估计结果在 $N \rightarrow \infty$ 极限下的值。在上面的例子中， $1/g$ 便充当了这里参数 N 的角色，大 N 极限则对应于弱相互作用极限 $g \rightarrow 0$ 。类似之前的讨论，积分主要的贡献来自于 $V(x_i)$ 的极小值。我们需要求解极值方程

$$\partial_{x_i} V(x_{0,i}) = 0, \quad (5.8)$$

这组方程可能有多个解，我们将其记为 $x_{0,i}^{(k)}$ ， $k = 1, 2, \dots, n$ 。我们进而可以计算 $V(x_{0,i}^{(k)})$ ，从而挑选出其中真正的最小值。就像之前的例子一样，取得最小值的解可能不止一个——具体问题中往往和原始积分的对称性有关。但简单起见，在这里假设最小值对应于单个解 $k = 1$ 。依照之前的讨论，我们进而引入展开 $x_i = x_{0,i}^{(1)} + \delta x_i$ ：

$$V(x_i) = V(x_{0,i}^{(1)}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} A_{ij} \delta x_i \delta x_j + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} S_{ijk} \delta x_i \delta x_j \delta x_k + \dots \quad (5.9)$$

其中， $x_{0,i}^{(k)}$ 处取得局域极小值保证矩阵 A_{ij} 正定。积分 \mathcal{Z} 就可以近似为

$$\mathcal{Z} \approx \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i d\delta x_i e^{-N(V(x_{0,i}^{(1)}) + \frac{1}{2} \sum_{ij} A_{ij} \delta x_i \delta x_j + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} S_{ijk} \delta x_i \delta x_j \delta x_k + \dots)}. \quad (5.10)$$

接下来，我们就可以利用上一章介绍为微扰论方法对 $\ln \mathcal{Z}$ 进行计算。首先，容易看出极值 $V(x_{0,i}^{(1)})$ 贡献了正比于 N 的部分 $-NV(x_{0,i}^{(1)})$ ；依照(2.11)式，二次型的高斯积分则贡献了 N^0 的部分 $-\frac{1}{2} \ln \det \mathbf{A}$ 。有趣的是，如果我们进而考虑高阶的相互作用下对 $\ln \mathcal{Z}$ 的修正，可以证明 $1/N$ 的展开正好等价于费曼图圈数的展开。例如，三阶顶角 S_{ijk} 带来的最低阶的贡献形如

$$\text{Diagram} \propto N^2 \times \left(\frac{1}{N}\right)^3 = \frac{1}{N} = N^{1-L}. \quad (5.11)$$

这里每个传播子贡献因子 $1/N$ ，每个顶角贡献因子 N ； $L = 2$ 对应费曼图的圈数。我们可以将这一计数规则推广到任意圈图，我们知道一个图的 N 的幂次正好等于顶角数目 V 减去传播子数目 E ——这里我们不需要区分使用的是哪个顶角，因为在(5.10)中 δx 的任意阶顶角都正比于 N 。为了进一步将 $V - E$ 和 L 联系起来，让我们想象费曼图来自一个有平移对称性的量子系统的路径积分。这时，圈数 L 正好对应于被独立积分的自由动量的数目。另一方面，我们可以先把所有传播子给定一个动量 p_i ，然后在每个顶角处要求动量守恒。由于整体动量为 0 ，总有一个动量守恒条件是冗余的，因此有效的约束个数是 $V - 1$ ，导致自由的积分个数 $L = E - (V - 1)$ 。这样，我们就证明了任意费曼图对 $\ln \mathcal{Z}$ 的贡献正比于 N^{1-L} 。这一结果表明，不考虑任意相互作用的贡献就已

经给出了精确到 N^0 的结果。类似的，我们也可以考虑两点函数的展开：保留到 N^{-1} 阶，我们得到

$$\langle x_i x_j \rangle = \langle (x_{0,i}^{(1)} + \delta x_i)(x_{0,j}^{(1)} + \delta x_j) \rangle \approx x_{0,i}^{(1)} x_{0,j}^{(1)} + \frac{1}{N} (A^{-1})_{ij}. \quad (5.12)$$

我们这一章的核心内容就是如何把上面的方法应用到虚时间场论中。对于一个被积分的玻色场 $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ ，将其类比于多变量积分，我们就知道对于有些作用量，配分函数的主要贡献可能不来自于 $\phi(\mathbf{x}, \tau) = 0$ 附近，而是来自于 $\phi(\mathbf{x}, \tau) = \phi_0$ 。这时，我们将 ϕ_0 称为 $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ 的真空值，对应于不考虑涨落时场的取值。这种将场代替成常数 ϕ_0 的近似方法一般被称为平均场方法。接下来，我们将以弱相互作用的玻色子和费米子为例，介绍平均场方法的代表性应用——玻色超流和 BCS 超导理论。

练习 5.1 鞍点近似的应用 鞍点近似常常被应用于求解特殊函数的渐进行为。这里，让我们考虑 Gamma 函数

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty dx x^n e^{-x}. \quad (5.13)$$

在 $n \rightarrow \infty$ 的极限下请利用鞍点近似证明斯特林公式 $\Gamma(n+1) \rightarrow \sqrt{2\pi n} (n/e)^n$ 。

5.2 玻色子的超流理论

我们先来考虑弱相互作用的玻色子系统。假设玻色子之间存在接触相互作用 $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = U\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ，且相互作用是排斥的 $U > 0$ 。这时

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi} D\psi \exp \left(- \int d\tau d\mathbf{r} \left[\bar{\psi}(\partial_\tau - \mu)\psi + \frac{1}{2} \nabla \bar{\psi} \nabla \psi + \frac{U}{2} \bar{\psi} \psi \psi \psi \right] \right). \quad (5.14)$$

我们主要关心系统在零温 $\beta \rightarrow \infty$ 下的基态与基态附近的低能激发。首先需要指出，当我们取定接触相互作用，模型已经不再是一个微观模型：物理上，我们知道实际系统的相互作用都是有一定力程的，不可能真的具有 delta 函数的形式。数学上，三维空间的 delta 势垒也不是良好定义的——假设我们考虑有限深度 U_0 的球方势垒，力程为 r_0 ；delta 函数极限要求 $U_0 r_0^3$ 在 $r_0 \rightarrow 0$ 极限下保持不变，然而波函数的相因子积累对应组合 $\sqrt{U_0} r_0$ ——我们看到它们并不相融。因此，在考虑相互作用效应后，计算中会涉及到正规化与重整化。

5.2.1 BEC 与非对角长程序

我们首先来考虑无相互作用极限，玻色分布写作

$$N_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1}. \quad (5.15)$$

在高温极限下，化学势 $\mu < 0$ ，分母不会出现奇异性。当我们降低温度， μ 逐渐增大，最终在某个临界温度 T_c 时取得 $\mu = 0$ ，这时系统在零动量出现宏观占据数 N_0 ，被称为发生玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC)：

$$N = N_0 + V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - 1}. \quad (5.16)$$

进一步降温到 $\beta \rightarrow \infty$ 的基态后，所有粒子动量都为零：

$$|\text{BEC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{a}_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^\dagger)^N |\Omega\rangle. \quad (5.17)$$

我们可以看到，无相互作用 BEC 的定义和单粒子态占据数息息相关。为了将这一定义推广到相互作用系统，我们考虑在 1.2.2.2 小节引入的单粒子密度矩阵 $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 。对于无相互作用系统，直接计算给出：

$$N\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle = N_0\phi_0(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}')^* + \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\mathbf{k}}} - 1}. \quad (5.18)$$

这里， $\phi_0(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{V}$ 对应动量为 0 的单粒子波函数。和费米子基态上的结果(1.3.1)对比，我们发现这里最重要的区别在于 $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 在 \mathbf{r} 和 \mathbf{r}' 距离趋于无穷时等于 N_0/V ，并不会衰减到 0。这是一个很重要的现象： $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 描述了系统在两个空间位置处的关联，不随 $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ 衰减说明系统关联是无穷长程的，类似于（反）铁磁系统中的自旋关联。我们可以将 \mathbf{r} 和 \mathbf{r}' 离散化，当成 ρ 矩阵的行和列指标，这样 $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$ 的部分就对应矩阵的非对角元。因此，这一长程关联被称为非对角长程序。

我们可以这样定义相互作用系统中的玻色-爱因斯坦凝聚：首先，我们把“矩阵” $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 对角化，得到

$$N\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_i N_i \phi_i(\mathbf{r})\phi_i(\mathbf{r}')^*. \quad (5.19)$$

这里， N_i 可以看出矩阵的本征值， $\phi_i(\mathbf{r})$ 对应不同基之间的变换。我们取定归一化条件 $\int d\mathbf{r} \phi_i(\mathbf{r})\phi_j(\mathbf{r})^* = \delta_{ij}$ 。对于无相互作用体系， $\phi_i(\mathbf{r})$ 和 N_i 就对应于单粒子波函数和对应态的占据数。在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下，这组本征值有以下几种可能：

1. 所有本征值 N_i 全部 $O(1)$ ，我们称系统未发生玻色-爱因斯坦凝聚。
2. 存在一个 N_0 在热力学极限下 $O(N)$ ，这时我们称系统发生了简单（simple）玻色-爱因斯坦凝聚。
3. 存在多个 N_i ($i = 1, 2, \dots$) 在热力学极限下 $O(N)$ ，这时我们称系统发生了碎片化（fragmented）玻色-爱因斯坦凝聚。

对于情况 2 和 3，系统都存在非对角长程序。其中，情况 3 常常出现在多个内态的玻色子系统中。在这一节中，我们所考虑的系统(5.14)不包含多个内态，在弱相互作用下其基态由简单玻色-爱因斯坦凝聚体所描述。这时，我们期待单粒子密度矩阵可以写作

$$\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle = N\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx N_0\phi_0(\mathbf{r})\phi_0(\mathbf{r}')^* + f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = n_0 + f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (5.20)$$

这里，我们引入了 $n_0 = N_0/V$ 。类似自由粒子情形，我们可以把 N_0 看成是发散凝聚的玻色子的数目。函数 $f(x)$ 描述了未发生凝聚的模式对关联函数的贡献，我们期待有 $f(\infty) = 0$ 。在弱相互作用极限下，我们预期 $f(x) \ll n_0$ ，即大部分原子处于凝聚状态。

5.2.2 低能激发与超流性

为什么相互作用玻色子系统会出现玻色-爱因斯坦凝聚？对比(5.12)，我们发现从路径积分的角度(5.20)式暗示玻色子场 $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ 出现了非零的真空值 $\sqrt{n_0}$ 。在这一视角下， n_0 部分的贡献来自于常数部分，而 $f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ 来

自于 ψ 场在 $\sqrt{n_0}$ 附近的涨落 $\delta\psi$:

$$\langle \bar{\psi}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') \rangle = \langle [\sqrt{n_0} + \delta\bar{\psi}(\mathbf{r})][\sqrt{n_0} + \delta\psi(\mathbf{r}')] \rangle = n_0 + \langle \delta\bar{\psi}(\mathbf{r})\delta\psi(\mathbf{r}') \rangle = n_0 + f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (5.21)$$

而类似上一节的分析, ψ 场出现非零的真空期望值是由于作用量在 $\psi \neq 0$ 处取到了极小值。对于(5.14), 这就说明

$$\partial_{\bar{\psi}} \left(-\mu\bar{\psi}\psi + \frac{U}{2}\bar{\psi}\bar{\psi}\psi\psi \right) \Big|_{\psi=\bar{\psi}=\sqrt{n}} = 0. \quad (5.22)$$

这就得到关系 $\mu = Un_0 > 0$ 。可以看到, 弱相互作用玻色子路径积分的形式和(5.1)式高度类似: 作用量都包含一个负的二次项, 导致极小值处的 ψ 非零。类似(5.1), 玻色子的平均场理论可以看成对相互作用 U 的展开。同时, 我们也发现 $U > 0$ 是系统稳定的关键——对于 $U < 0$, 能量在大 ψ 处以四次方趋于负无穷, 导致系统不存在稳定的基态。另一方面, 玻色子路径积分和(5.1)有一个重要的区别, 那就是对称性不同。(5.1)式变量 x 为实数, 因此只具有 $x \rightarrow -x$ 的 Z_2 对称性; 玻色子路径积分中场 ψ 是复数, 存在连续的 $U(1)$ 对称性 $\psi \rightarrow e^{i\theta}\psi$ 。容易发现, 我们所选取的 $\langle \psi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \sqrt{n_0}$ 破坏了这一对称性, 说明在玻色-爱因斯坦凝聚时多体系统发生了连续对称性的自发破缺。

练习 5.2 Gross-Pitaevskii 方程 如果玻色子系统处于外势能 $V(\mathbf{r})$ 中, 作用量取得极小值的 ψ 就不再是均匀 $\sqrt{n_0}$, 而是某个时空的函数 $\psi = \varphi_0(\mathbf{r})$ 。

1. 请证明 $\varphi_0(\mathbf{r})$ 的极值方程对应于非线性方程

$$\mu\varphi_0(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla^2}{2}\varphi_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi_0(\mathbf{r}) + U|\varphi_0(\mathbf{r})|^2\varphi_0(\mathbf{r}). \quad (5.23)$$

一般被称为静态 Gross-Pitaevskii 方程。

2. 从任意一个初始函数 $\varphi(\mathbf{r})$ 出发, 我们作 τ 方向的演化

$$-\partial_\tau\varphi_0(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \mu + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_0(\mathbf{r}) + U|\varphi_0(\mathbf{r})|^2\varphi_0(\mathbf{r}). \quad (5.24)$$

请证明这一虚时间 Gross-Pitaevskii 方程恰好对应于梯度下降法求解系统能量极小值。这就是数值上求解 BEC 平均场基态的标准算法。如果我们进而作解析延拓 $\tau \rightarrow it$, 就得到了 BEC 在实时间的演化方程, 可以用来研究 BEC 的动力学行为。

我们将作用量对于 $\delta\psi$ 展开来考虑系统在基态附近的涨落。在弱相互作用极限, 我们可以只保留到涨落的平方阶, 结果得到

$$S = \int d\tau d\mathbf{r} \left[-\frac{\mu^2}{2U} + \delta\bar{\psi}(\partial_\tau - \nabla^2/2 + Un_0)\delta\psi + \frac{Un_0}{2}(\delta\bar{\psi}\delta\bar{\psi} + \delta\psi\delta\psi) \right]. \quad (5.25)$$

这里，第一项对应于鞍点处的极值，贡献了自由能的最低阶：

$$F = -\beta^{-1} \ln \mathcal{Z} = -\frac{\mu^2 V}{2U}. \quad N = -\partial_\mu F = N_0. \quad (5.26)$$

结果表明，在最低阶所有粒子全部发生了玻色-爱因斯坦凝聚，总粒子数 N 等于凝聚体中的粒子数 N_0 ——这与无相互作用系统的结果一致。接下来，我们将涨落项写到动量空间中

$$\delta S = \frac{1}{2} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \delta\bar{\psi}(\mathbf{k}, \omega_n) & \delta\psi(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_k + Un_0 & Un_0 \\ Un_0 & i\omega_n + \epsilon_k + Un_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\psi(\mathbf{k}, \omega_n) \\ \delta\bar{\psi}(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

值得注意的是，这里频率项形式为 $-i\omega_n \sigma^z$ ——这是因为在计算中我们进行了分部积分，导致出现了额外的负号。这其实对应于玻色子 Bogliubov 变换中需要引入的 σ^z 。由于 $\sqrt{n_0}$ 不依赖于时空坐标，只要 ω_n 和 \mathbf{k} 不全为 0，我们就有 $\delta\psi(\mathbf{k}, \omega_n) = \psi(\mathbf{k}, \omega_n)$ 。通过将矩阵求逆，我们可以计算出两点函数

$$\langle \psi(\mathbf{k}, \omega_n) \bar{\psi}(\mathbf{k}, \omega_n) \rangle = \frac{i\omega_n + \epsilon_k + Un_0}{\omega_n^2 + \epsilon_k(\epsilon_k + 2Un_0)}, \quad \langle \psi(\mathbf{k}, \omega_n) \psi(-\mathbf{k}, -\omega_n) \rangle = \frac{-Un_0}{\omega_n^2 + \epsilon_k(\epsilon_k + 2Un_0)}. \quad (5.28)$$

我们可以将虚时间两点函数 $\langle \psi(\mathbf{k}, \omega_n) \bar{\psi}(\mathbf{k}, \omega_n) \rangle$ 解析延拓 $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ 得到推迟格林函数，其虚部为单粒子谱函数。结果得到

$$\rho(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi \left[\delta(\omega - \xi_k) \frac{\xi_k + \epsilon_k + Un_0}{2\xi_k} - \delta(\omega + \xi_k) \frac{-\xi_k + \epsilon_k + Un_0}{2\xi_k} \right]. \quad (5.29)$$

这里，我们引入了 $\xi_k = \sqrt{\epsilon_k(\epsilon_k + 2Un_0)}$ 。谱函数是 $\omega = \pm\xi_k$ 处的 δ 函数，说明系统中存在色散关系为 ξ_k 的准粒子。在小动量极限下 $k \rightarrow 0$ ，我们有 $\xi_k \approx \sqrt{Un_0}k \equiv ck$ ——系统存在无能隙的激发模式，对应速度为 c 。类似于第一章中对铁磁/反铁磁链的讨论，这一无能隙的激发模式来自于 $U(1)$ 对称性的自发破缺，受到 Goldstone 定理的保护。Goldstone 定理暗示这一模式对应于 $\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{n(\mathbf{r}, \tau)} e^{i\theta(\mathbf{r}, \tau)}$ 中相位 θ 发生一个均匀的转动。在下面的练习中，我们进一步说明 Goldstone 模式同时也耦合到系统密度 n 的涨落之中，因此一般被称为声子，而速度 c 被称为 BEC 中的声速。在后面的小节，我们将看到 Goldstone 模型同时对应到相位和密度的涨落是非相对论系统的特性。我们还可以将作用量保留到 $\delta\psi$ 的更高阶，这就给出了声子之间的相互作用顶角。通过计算自能的圈图修正我们可以得到相互作用导致的声子衰变速率。在零温下，低能极限 $k \rightarrow 0$ 结果对应于 $\Gamma_k \sim k^5$ ，被称为 Beliaev 耗散。

🔴 **练习 5.3 玻色-爱因斯坦凝聚体的 Bragg 谱** 在原子气体中，人们常常通过 Bragg 谱测量准粒子的色散关系 ξ_k ——在这个练习中我们就来推导这一关系。请将密度场 $n(\mathbf{r}, \tau) = \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau)\psi(\mathbf{r}, \tau)$ 展开到 $\delta\psi$ 的一阶，并计算密度场对应的动力学结构因子 $S_O(\mathbf{p}, \omega)$ 。这一结果说明，Goldstone 模式不只对应于相位的涨落，也对应于密度 n 的涨落。

🔴 **练习 5.4 算符表象分析 BEC** 我们同样可以通过算符表象分析出 BEC 的低能激发谱。(5.14)式对应于哈密顿量

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\psi}^\dagger \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \mu \right) \hat{\psi} + \frac{U}{2} \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi} \hat{\psi}. \quad (5.30)$$

请将算符 $\hat{\psi}(x)$ 做展开 $\hat{\psi}(x) = \sqrt{n_0} + \delta\hat{\psi}(x)$ 并保留到涨落的二阶，并利用 Bogliubov 变换计算系统的激发谱。

低能下系统能谱是线性的有深刻的物理结果——它说明具有排斥相互作用的 BEC 是一个超流体。这一论证首先由著名理论物理学家 **Laudau** 给出，被称为 **Laudau 判据**。我们考虑系统中有一个经典的宏观物体，其动量满足标准的色散关系 $E = p^2/2m$ 。问题是这个小物体是否会通过和 BEC 发生能量交换而导致速度降低。我们考虑最简单的情况，分析小物体是否能通过激发一个声子从而减速。能量守恒给出

$$\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} = \frac{(\mathbf{p}_i - \mathbf{q})^2}{2m} + \xi_{\mathbf{q}}. \quad (5.31)$$

这里 \mathbf{p}_i 是物体的初始动量，引入 $\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m}$ 并化简得到

$$\frac{\mathbf{q}^2}{2m} = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{q} - \xi_{\mathbf{q}} \leq \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{q} - c|\mathbf{q}|. \quad (5.32)$$

因此，这一过程能发生要求 $|\mathbf{v}_i| > c$ ，即物体运动速度超过超流体中的声速。对于低速运动的物体，发射声子无法满足能量守恒，其运动速度不会变化——这就是超流性。上面的分析也可以推广到发射多个声子的情况。我们只需要引入总动量为 \mathbf{q} 的多个声子的总能量 $\mathcal{E}_{\mathbf{q}}$ （当然，这里总能量不止是 \mathbf{q} 的函数，但是我们简单起见省略其它动量依赖）。这时，上面等式中 $\xi_{\mathbf{q}}$ 被替换为 $\mathcal{E}_{\mathbf{q}}$ 。然而，即使对于多个声子，我们仍然有 $\mathcal{E}_{\mathbf{q}} \geq c|\mathbf{q}|$ ——这是由于对于给定的总动量，能量最低的情况恰好对应所有声子的动量都沿着同一个方向。因此，动量耗散过程能发生仍然要求 $|\mathbf{v}_i| > c$ 。

5.2.3 热力学的修正

有了(5.27)，我们就可以进一步计算相互作用对自由能的最低阶修正。类似于(5.10)的讨论，这一修正来自于高斯积分给出的 $\ln \det$ 项。在零温极限 $\beta \rightarrow \infty$ 下，我们得到

$$\begin{aligned} \delta E &= \frac{1}{2\beta} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} \ln \det \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}} + Un_0 & Un_0 \\ Un_0 & i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}} + Un_0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln(\omega^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2). \end{aligned} \quad (5.33)$$

容易看出，这里对积分是发散的。这个发散就类似于无相互作用粒子自由能的发散。我们可以再次回到时间方向离散化的表达式，保留无穷小的相因子让积分收敛。这里，我们用一个更简单的办法：假设(5.27)的矩阵不包含非对角项，这时 $\delta\psi$ 就是系统的激发模式（而非 $\delta\psi$ 和 $\delta\bar{\psi}$ 的组合）——基态对应所有 $\delta\psi$ 粒子不被占据，因此 δS 对应的涨落项不会产生能量的修正。因此，我们可以将被积函数减去忽略非对角项的表达式来对系统进行正规化，这样就得到

$$\delta E = \frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln \left(\frac{\omega^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}{\omega^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} + Un_0)^2} \right). \quad (5.34)$$

这样，被积函数在 $\omega \rightarrow \infty$ 下按照 $1/\omega^2$ 趋于 0，积分收敛。通过分部积分，容易得到结果

$$\delta E = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2} - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} + Un_0}{2} \right) = -\frac{V}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{(Un_0)^2}{\xi_{\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{k}} + Un_0}. \quad (5.35)$$

这一表达式有明确的物理意义： $\frac{\xi_k}{2}$ 对应于能量为 ξ_k 的玻色子激发的真空能，它与不存在非对角项情况下真空能 $\frac{\epsilon_k + Un_0}{2}$ 的差就是对基态能量的修正。这与反铁磁系统基态能量的修正(1.80)是一致的，这一结果同样可以用 Bogliubov 变换方法得到。

然而，如果我们想继续计算对动量 \mathbf{k} 的积分，就会发现表达式仍然是发散的。这就是由于我们假设了势能是 δ 函数的形式，对于任意高能的状态有着同样的散射效果；与之相对，物理的势能总有有限深度和有限力程，对足够高能的状态扰动很小。这就表明，这里的发散是因为我们采用了有效理论。我们考虑截断：

$$\delta E = -\frac{V}{2} \int_{k < \Lambda} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{(Un_0)^2}{\xi_k + \epsilon_k + Un_0} = -V(Un_0)^2 \frac{\Lambda}{4\pi^2} + V(Un_0)^{\frac{5}{2}} \frac{8}{15\pi^2}. \quad (5.36)$$

Λ 的物理含义可以对应到微观势能的力程。这里的第一项正比于 n_0^2 ，我们可以将它与零阶项 $E_0 = \frac{Un_0^2}{2}$ 组合起来，定义重整化关系

$$U_r = U - \frac{U^2\Lambda}{2\pi^2} + \dots \quad \text{or} \quad U = U_r + \frac{U_r^2\Lambda}{2\pi^2} + \dots \quad (5.37)$$

这里 ... 代表 U 或者 U_r 更高幂次的贡献。对于实际系统，我们应该认为 U_r 才是有限大的物理参数。这样，我们就得到了保留到 $U_r^{5/2}$ 后 BEC 的基态能量

$$E = E_0 + \delta E = \frac{VU_r n^2}{2} + V(U_r n)^{\frac{5}{2}} \frac{8}{15\pi^2}. \quad (5.38)$$

这里，第二项被称为 Lee-Huang-Yang 修正，这一修正在冷原子系统中已经被验证。

接下来，我们考虑相互作用对粒子分布函数的修正。在无相互作用极限，所有 $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ 的态都不被占据。引入相互作用后，动量为 $\mathbf{0}$ 的粒子可以发生散射越迁到动量非零的态，导致有限动量态被占据。我们可以利用格林函数(5.28)计算占据数：

$$N_{\mathbf{k}} = \langle \bar{\psi}(\mathbf{k}, 0^+) \psi(\mathbf{k}, 0) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{i\omega + \epsilon_k + Un_0}{\omega^2 + \xi_k^2} e^{i\omega 0^+} = \frac{\epsilon_k + Un_0 - \xi_k}{2\xi_k}. \quad (5.39)$$

这里我们通过加入一个上半平面的大圆弧将实轴上的积分转化为围道积分，结果由 $\omega = i\xi_k$ 的极点贡献。我们可以进而计算出所有 $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$ 处的粒子数

$$\delta N = \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} = V \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\epsilon_k + Un_0 - \xi_k}{2\xi_k} = \frac{V}{3\pi^2} (Un_0)^{\frac{3}{2}}. \quad (5.40)$$

这些有限动量的粒子占据被称为量子损耗 (quantum depletion)。在弱相互作用极限，容易验证 $\delta N/N_0 \ll 1$ ，几乎全部粒子都在凝聚体中，这与我们的预期一致。

5.2.4 BEC 的流体力学描述

除了直接对 ψ 场进行展开，我们也可以先变换到有更加直观物理含义的相位场和密度场：

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{n(\mathbf{r}, \tau)} e^{i\theta(\mathbf{r}, \tau)}, \quad \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{n(\mathbf{r}, \tau)} e^{-i\theta(\mathbf{r}, \tau)}. \quad (5.41)$$

直接计算可以得到

$$\begin{aligned} S &= \int d\tau d\mathbf{r} \left[\bar{\psi}(\partial_\tau - \mu)\psi + \frac{1}{2}\nabla\bar{\psi}\nabla\psi + V(\mathbf{r})\bar{\psi}\psi + \frac{U}{2}\bar{\psi}\bar{\psi}\psi\psi \right] \\ &= \int d\tau d\mathbf{r} \left[in\partial_\tau\theta + (V - \mu)n + \frac{U}{2}n^2 + \frac{n}{2}(\nabla\theta)^2 + \frac{1}{8n}(\nabla n)^2 \right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

这里我们忽略了全导数项，并保留了可能出现的势能项 $V(\mathbf{r})$ 。平均场近似仍然对应于寻找场 θ 和 n 的极值，通过对作用量变分，我们就得到了平均场下的极值方程/运动方程

$$i\partial_\tau n + \nabla \cdot (n\nabla\theta) = 0, \quad i\partial_\tau\theta = - \left(Un + V - \mu + \frac{1}{2}(\nabla\theta)^2 - \frac{1}{2\sqrt{n}}\nabla^2\sqrt{n} \right). \quad (5.43)$$

在解析延拓到实时间 $\tau \rightarrow it$ 后，容易看出第一个方程对应于系统的粒子数守恒。引入系统的粒子流场 $\mathbf{J} = n\mathbf{v}_s = n\nabla\theta$ ，就可以把它写作 $\partial_t n + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ 的连续性方程。其中 \mathbf{v}_s 对应于超流体的流速场。

练习 5.5 Noether 定理推导粒子流 请对作用量(5.42)应用 Noether 定理直接推导出粒子流场表达式 $\mathbf{J} = n\nabla\theta$ 。

对于第二个方程，我们可以在等式两边作用梯度算符 ∇ ，这就给出

$$\partial_t \mathbf{v}_s = -\nabla \left(Un + V - \mu + \frac{v_s^2}{2} - \frac{1}{2\sqrt{n}}\nabla^2\sqrt{n} \right). \quad (5.44)$$

这正好对应无旋的流体力学方程中的牛顿方程——等式右边括号里的项包括势能 V ，流速场的动能 $v_s^2/2$ ，相互作用能 Un ；括号里最后一项被称为量子压强 (quantum pressure)，其贡献通常可以忽略。在经典物理中，流体力学行为需要系统能够达到局域热平衡，因此通常出现在强相互作用系统中，例如液体。这里的推导说明对于弱相互作用系统，如果发散玻色-爱因斯坦凝聚，也同样可以用流体力学描述。在冷原子系统中，观测到流体力学行为是实验上暗示系统发生凝聚的手段之一。

接下来，让我们回到均匀系统的情况 $V(\mathbf{r}) = 0$ 。这时极值方程的解对应

$$n(\mathbf{r}, \tau) = n_0, \quad \theta(\mathbf{r}, \tau) = 0 \quad (5.45)$$

将场在极值附近展开到二阶，我们得到

$$S = \int d\tau d\mathbf{r} \left[i\delta n\partial_\tau\theta + \frac{U}{2}\delta n^2 + \frac{n}{2}(\nabla\theta)^2 + \frac{1}{8n_0}(\nabla\delta n)^2 \right]. \quad (5.46)$$

相比 $\frac{U}{2}\delta n^2$ 的部分，最后一项 $\frac{1}{8n_0}(\nabla\delta n)^2$ 包含了额外的空间导数，因此在低能下其贡献被 k^2 压制。当我们只关注于低能行为，就可以将其忽略。将 δn 积掉后就得到描述相位涨落的有效作用量

$$S_{\text{eff}} = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2} [U^{-1}(\partial_\tau\theta)^2 + n(\nabla\theta)^2] = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2U} [(\partial_\tau\theta)^2 + c^2(\nabla\theta)^2]. \quad (5.47)$$

这一有效作用量类似于 Klein-Golden 方程，展现出演生的洛伦兹对称性。另一方面，我们还可以把模型看出格点 XY 模型 $H = -J \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{x}} - \theta_{\mathbf{y}})$ 的连续极限。类似玻色子模型，XY 模型也有 $U(1)$ 对称性，对应于变

量 $\theta_{\mathbf{x}}$ 的平移。因此，超流系统中的相变与 XY 模型中的相变紧密相关。例如，在 D 维系统中，调节温度导致的超流-正常流体转变就对应于 D 维 XY 模型中的有序-无序相变；如果考虑格点系统的 Bose-Hubbard 模型，我们还可以在零温下调节相互作用参数引发超流-绝缘体相变，这就对应于 $D + 1$ 维 XY 模型中的有序-无序相变。

练习 5.6 相对论性系统的自发破缺 非相对论性玻色原子的作用量(5.46)中第一项表明， δn 的涨落直接耦合到了相位场 θ 的涨落，因此也是无能隙的。在这个练习中，我们将发现这与相对论性系统存在着定性的差别。我们考虑二次项系数小于零的复数场 ϕ^4 理论：

$$\mathcal{Z} = \int D\phi(\mathbf{x}, \tau)^* D\phi(\mathbf{x}, \tau) \exp\left(-\int d\mathbf{x}d\tau \left[|\partial_\tau\phi|^2 + |\nabla\phi|^2 - r|\phi|^2 + \frac{g}{4}|\phi|^4\right]\right). \quad (5.48)$$

这里 $r > 0$ 且 $g > 0$ ， $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ 是复数场。类似(5.41)，我们将 $\phi(\mathbf{x}, \tau)$ 展开成

$$\phi(\mathbf{r}, \tau) = \sqrt{n(\mathbf{r}, \tau)}e^{i\theta(\mathbf{r}, \tau)}, \quad \phi(\mathbf{r}, \tau)^* = \sqrt{n(\mathbf{r}, \tau)}e^{-i\theta(\mathbf{r}, \tau)}. \quad (5.49)$$

请按照处理非相对论系统的流程，推导出涨落场 δn 与 θ 的二次型作用量。证明 θ 仍然没有能隙，对应于 Goldstone 粒子；而 δn 与 θ 场独立，并且激发谱存在能隙。 δn 通常被称为 Higgs 场，在标准模型中有着重要地位。

5.2.5 低维系统与 Mermin-Wagner 定理

最后，我们来考虑低维度的玻色子系统。在无相互作用系统中，当维度 $D \leq 2$ 时有限温度下的玻色子不会发生 BEC。然而，平均场展开(5.25)并不依赖于维度，总是导致对称性自发破缺，预言无能隙的 Goldstone 粒子的出现。这是否说明相互作用玻色子系统在任意维度都能通过对称性自发破缺形成 BEC 呢？

答案是否定的。事实上，低维系统存在很强的涨落，导致系统重新找回了对称性，因而长程序被破坏。简单起见，让我们关注于玻色场的相位涨落并忽略密度涨落，这时有 $\psi(\mathbf{x}, \tau) = \sqrt{n_0}e^{i\theta(\mathbf{x}, \tau)}$ 。我们来分析对称性自发破缺的鞍点是否自治：发生对称性自发破缺要求 $\psi(\mathbf{x}, \tau)$ 存在非零的真空期望值；这时，系统的低能激发就会形如(5.47)。在二次型近似下，计算给出

$$\langle\psi(\mathbf{x}, \tau)\rangle \approx \sqrt{n_0}\langle e^{i\theta(\mathbf{x}, \tau)}\rangle \approx \sqrt{n_0} \exp(-\langle\theta(\mathbf{x}, \tau)\theta(\mathbf{x}, \tau)\rangle/2) = \sqrt{n_0}e^{-\frac{1}{2}G(\mathbf{0}, 0)}. \quad (5.50)$$

这里，我们利用了(2.10)的一个特例 $\langle e^{ix}\rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle x^2\rangle}$ 。在任意维度 D ，我们有

$$G(\mathbf{0}, 0) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{\omega_n^2 + c^2k^2}. \quad (5.51)$$

1. 首先，对于零温极限， ω_n 的求和转变为积分。这时我们可以把 $(\omega, c\mathbf{k})$ 组合成一个 $D + 1$ 维度的矢量

$$G(\mathbf{0}, 0) \propto \int \frac{d^{D+1}\mathbf{k}}{(2\pi)^{D+1}} \frac{1}{k^2} \quad (5.52)$$

对于 $D \leq 1$ ，积分在 $k \approx 0$ 附近发散；对于 $D \geq 1$ ，积分在 $k \approx \infty$ 附近发散。由于我们的模型是一个低能有效理论，在 $k \approx \infty$ 处的发散不需要担心——我们只需要添加一个大动量处的截断 Λ ；然而在 $k \rightarrow 0$

附近的发散是一个低能下的发散——被称为红外发散——需要被保留。 $G(\mathbf{0}, 0)$ 发散就导致 $\langle \psi(\mathbf{x}, \tau) \rangle = 0$, 说明涨落使得破缺的对称性被找回—— $D \leq 1$ 的系统在零温并不会发生 $U(1)$ 对称性的自发破缺, 不会具有长程序。

2. 类似的, 我们可以考虑在有限温度下积分是否在小动量下发散。这时, 我们需要进行求和 $\omega_n = 2\pi n/\beta$ 。对于 $n \neq 0$ 的部分, 被积函数在 $k \rightarrow 0$ 不存在奇异性, 因此我们只需要考虑 $n = 0$ 的贡献:

$$G(\mathbf{0}, 0) \propto \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{k^2}. \quad (5.53)$$

我们看到, 现在系统在 $D \leq 2$ 都会存在红外发散。因此, 在有限温度下 $D \leq 2$ 的系统不会发生 $U(1)$ 对称性的自发破缺, 不会具有长程序。

这一结果可以拓展到一般的 Goldstone 模式呈现线性色散的体系中, 被称为 Mermin-Wagner 定理。定理保证有限温度 $D \leq 2$ 或零温下 $D \leq 1$ 不存在连续对称性破缺。需要补充的是: 首先虽然二维有限温系统不存在对称性自发破缺/长程序, 但是仍然可以存在超流体 (只需要系统在低能下色散为线性!)。此外, 对于非线性色散的系统, 例如铁磁系统, 相应分析需要修改, 这就导致一维系统在零温可以展现出铁磁性。

5.3 费米子的 BCS 理论

在上一节, 我们看到玻色子系统的平均场理论就是考虑玻色场 $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ 出现了非零的期望值 $\langle \psi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \varphi_0(\mathbf{r})$ 。接下来, 我们考虑如何把平均场方法应用到费米子系统。首先需要注意的是, 费米子的场 $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ 并不是传统意义上的数, 而是一个 Grassmann 变量。由于一般的量子系统哈密顿量中并不包含任何 Grassmann 参量, 费米子场本身是无法出现真空期望值的, 总满足 $\langle \psi(\mathbf{r}, \tau) \rangle = 0$ 。从算符的角度来说, 这是由于系统的密度矩阵 $\rho = e^{-\beta \hat{H}} / \mathcal{Z}$ 包含偶数个费米子算符, 所以总满足 $\text{tr}[\rho \hat{\psi}(\mathbf{r})] = 0$ 。

因此, 当我们想把平均场理论应用在费米子系统中的时, 我们仍然应该考虑系统中某些玻色型算符出现了非零期望值。而具体应该选取哪个玻色型算符就成了最重要的问题。最直接的想法就是考虑费米子场的二次型。例如, 我们可以考虑两个湮灭算符的乘积

$$\bar{\Delta}_f(\mathbf{q}, \tau) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma\sigma'} f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) \bar{\psi}_\sigma\left(\frac{\mathbf{q}}{2} - \mathbf{k}, \tau\right) \bar{\psi}_{\sigma'}\left(\frac{\mathbf{q}}{2} + \mathbf{k}, \tau\right). \quad (5.54)$$

物理上, $\bar{\Delta}_f$ 产生了一个由两个费米子组成的“分子”, 常被称为配对场。费米子的相对动量为 \mathbf{k} , 总动量为 \mathbf{q} , $f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k})$ 就是费米子的两体波函数。如果分子获得了非零的期望值 (被“凝聚”), 整个系统就发生了 $U(1)$ 对称性的破缺, 导致会出现丰富的物理现象——事实上, 这就是费米子超导的来源。利用费米子场的反对称性, 我们知道 $f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = -f_{\sigma'\sigma}(-\mathbf{k})$ 。我们可以进一步将两个费米子的自旋波函数合成为单态或者三重态。如果是自旋单态, 我们知道

$$f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\sigma\sigma'} g(\mathbf{k}), \quad g(\mathbf{k}) = g(-\mathbf{k}). \quad (5.55)$$

这里, $\epsilon = i\sigma_y$ 是全反对称性张量 (矩阵)。 $g(\mathbf{k}) = g(-\mathbf{k})$ 要求费米子相对角动量应该是偶数, 对于给定的总角

我们可以进一步计算出 s 波相互作用的强度：

$$\begin{aligned} H_U &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} U(\mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma'} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}, \mathbf{k}'} U(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \hat{a}_{\frac{\mathbf{q}'}{2} - \mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\frac{\mathbf{q}'}{2} + \mathbf{k}', \sigma}^\dagger \hat{a}_{\frac{\mathbf{q}'}{2} + \mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\frac{\mathbf{q}'}{2} - \mathbf{k}, \sigma'}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

对于 s 波相互作用，波函数不依赖于相对动量 \mathbf{k} 或者 \mathbf{k}' 的波函数。因此，我们可以将 $U(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ 对于动量的方向进行平均。在费米面附近我们就得到

$$\int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}}}{4\pi} U(k_F \hat{\mathbf{k}} - k_F \hat{\mathbf{z}}) = -\frac{\gamma^2 k_F^2}{\omega_D^2} \frac{1}{2 - 2 \cos \theta} = -\frac{2\gamma^2 k_F^2}{\omega_D^2} \equiv -g. \quad (5.62)$$

如果我们预测到系统主要由费米面附近的 s 波相互作用主导，就可以写出接触相互作用的有效模型

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi}_\sigma D\psi_\sigma \exp \left(- \int d\tau d\mathbf{r} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma (\partial_\tau + \hat{\epsilon}_k - \mu) \psi_\sigma - g \bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow \psi_\downarrow \psi_\uparrow \right] \right). \quad (5.63)$$

5.3.2 Cooper 不稳定性

我们接下来就要计算费米子作用量(5.63)。首先我们先来考虑对 $g = 0$ 的无相互作用极限的微扰论，结果会表明在低温极限下系统会存在不稳定性，导致对称性自发破缺的发生。类似上一章中对弱相互作用电子气的讨论，我们利用 Hubbard-Stratonovich 变换将费米子的相互作用改写成费米子与配对场 $\Delta(\mathbf{r}, \tau)$, $\bar{\Delta}(\mathbf{r}, \tau)$ 的相互作用：

$$\mathcal{Z} = \int D\bar{\psi}_\sigma D\psi_\sigma D\Delta D\bar{\Delta} \exp \left(- \int d\tau d\mathbf{r} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma (\partial_\tau + \hat{\epsilon}_k - \mu) \psi_\sigma - \bar{\Delta} \psi_\downarrow \psi_\uparrow - \Delta \bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow + \frac{|\Delta|^2}{g} \right] \right). \quad (5.64)$$

在引入配对场后，原始模型中电荷 $U(1)$ 对称性 $(\psi_\sigma, \bar{\psi}_\sigma) \rightarrow (e^{i\theta} \psi_\sigma, e^{-i\theta} \bar{\psi}_\sigma)$ ，需要加上 $(\Delta, \bar{\Delta}) \rightarrow (e^{2i\theta} \Delta, e^{-2i\theta} \bar{\Delta})$ 。物理上，这是由于 $U(1)$ 变换对应于粒子数守恒，由于配对场包含两个电子组成的“分子”，因此电荷数为 2，需要以 $e^{2i\theta}$ 进行变换。除了电荷的 $U(1)$ 对称性外，系统还存在自旋 $U(1)$ 对称性 $(\psi_\sigma, \bar{\psi}_\sigma) \rightarrow (e^{i\sigma\theta} \psi_\sigma, e^{-i\sigma\theta} \bar{\psi}_\sigma)$ 。由于配对场总自旋为 0，这一对称性变换不包含配对场 Δ 。

有趣的是，如果我们回顾上一节的推导会发现：我们从一个声子和费米子相互作用的模型出发，积掉声子后得到了费米子的相互作用；然后又变换回了一个配对场与费米子相互作用的形式。声子场 \mathbf{u} 是直接和密度相耦合的，可以看成激发了一个电子和空穴对；而配对场和 $\psi_\downarrow \psi_\uparrow$ 耦合，对应两个自旋相反的费米子组成的“分子”。要从原始的声子场变换成配对场的原因是我们期待对于吸引相互作用系统会出现配对，引入配对场后可以更方便的进行描述系统的状态。

为了看出系统的不稳定性，我们推导配对场的有效作用量。类似玻色子的(5.27)式，作用量可以写成：

$$S = \sum_{n, \mathbf{k}} \begin{pmatrix} \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) & \psi_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_k - \mu & \Delta \\ \bar{\Delta} & -i\omega_n - \epsilon_k + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) \\ \bar{\psi}_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix} + \int d\tau d\mathbf{r} \frac{|\Delta|^2}{g}. \quad (5.65)$$

值得注意，和(5.27)式对比，右下角的项又一个额外的负号，这是由于费米子场的交换反对易性。这恰好对应于费米子 Bogliubov 变换中需要的并非是 $SU(1,1)$ 矩阵，而是传统的 $SU(2)$ 矩阵。

练习 5.7 费米子的 Bogliubov 变换 让我们先考虑以下的两模式费米子模型

$$\hat{H} = \epsilon_1 \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_1 + \epsilon_2 \hat{\psi}_2^\dagger \hat{\psi}_2 + \Delta \hat{\psi}_2 \hat{\psi}_1 + \bar{\Delta} \hat{\psi}_1^\dagger \hat{\psi}_2^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{\psi}_1^\dagger & \hat{\psi}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \bar{\Delta} \\ \Delta & -\epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\psi}_1 \\ \hat{\psi}_2^\dagger \end{pmatrix} + \epsilon_2. \quad (5.66)$$

请将 $\hat{\psi}_1$ 和 $\hat{\psi}_2^\dagger$ 重新组合成费米子算符 $\hat{\eta}_1$ 和 $\hat{\eta}_2^\dagger$:

$$\begin{pmatrix} \hat{\psi}_1 \\ \hat{\psi}_2^\dagger \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \hat{\eta}_1 \\ \hat{\eta}_2^\dagger \end{pmatrix}. \quad (5.67)$$

请说明这时我们只要求矩阵 T 是么正矩阵即可保证 $\hat{\eta}_1$ 和 $\hat{\eta}_2$ 的对易关系, 计算系统的激发谱和基态能量。这是由于对于费米子算符, 泡利不相容原理保证粒子数只能为 0 或 1, 因此产生算符和湮灭算符没有本质区别——这是与玻色子系统的最大区别。

我们进而利用 Grassmann 积分(2.58)式将费米子积掉, 就得到了有效作用量

$$S_{\text{eff}} = - \sum_{n, \mathbf{k}} \ln \det \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_k - \mu & \Delta(\mathbf{r}, \tau) \\ \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \tau) & -i\omega_n - \epsilon_k + \mu \end{pmatrix} + \int d\tau d\mathbf{r} \frac{|\Delta|^2}{g}. \quad (5.68)$$

我们希望知道无相互作用费米子的基态是否在微扰下稳定。如果将作用量对配对场进行展开, 其一般形式是:

$$S_{\text{eff}} = \int d\mathbf{r} d\tau \left[a |\Delta(\mathbf{r}, \tau)|^2 + b |\Delta(\mathbf{r}, \tau)|^4 + c |\nabla \Delta(\mathbf{r}, \tau)|^2 + d \bar{\Delta}(\mathbf{r}, \tau) \partial_\tau \Delta(\mathbf{r}, \tau) + e |\partial_\tau \Delta(\mathbf{r}, \tau)|^2 + \dots \right]. \quad (5.69)$$

这里各项的参数都可以通过对(5.68)进行展开得到, 而 ... 代表更高阶导数项或者 Δ 的更高次项。这一保留到四次项和最低阶导数项的作用量被称为 Ginzberg-Landau 作用量, 对应的运动方程非常类似于玻色子的非线性薛定谔方程, 常用于超导物理中的唯象计算。如果系统具有粒子-空穴对称性, 作用量在 $\Delta \leftrightarrow \bar{\Delta}$ 下不变, 因此有 $d = 0$, 预示着系统在低能极限下有演生的洛伦兹对称性。按照之前对单变量积分或者弱相互作用玻色子的经验 (假设平移对称性不破缺), 我们需要计算的就是作用量中 $|\Delta|^2$ 项的系数 a 。如果 $a > 0$, 就说明 $\Delta_0 = \langle \Delta(\mathbf{r}, \tau) \rangle = 0$ 是稳定的基态; 如果 $a < 0$, 说明系统会出现对称性自发破缺, 基态出现非零的 $\Delta_0 = \langle \Delta(\mathbf{r}, \tau) \rangle$ 。为了确定 a , 我们只需要假设 $\Delta(\mathbf{r}, \tau)$ 是一个常数, 并对 $\ln \det$ 进行展开:

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}^{(2)} &= - \sum_{n, \mathbf{k}} \ln \det \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_k - \mu & \Delta \\ \bar{\Delta} & -i\omega_n - \epsilon_k + \mu \end{pmatrix} \Big|_{O(|\Delta|^2)} + V\beta \frac{|\Delta|^2}{g}. \\ &= V\beta |\Delta|^2 \left(\frac{1}{g} + \frac{1}{V\beta} \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{1}{-i\omega_n + \epsilon_k - \mu} \frac{1}{-i\omega_n - \epsilon_k + \mu} \right) \end{aligned} \quad (5.70)$$

这里对 n 的求和非常类似密度-密度关联函数中的计算。利用 Matsubara 求和技巧, 容易得到

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}^{(2)} &= V\beta |\Delta|^2 \left(\frac{1}{g} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - 2n_F(\epsilon_k - \mu)}{2(\epsilon_k - \mu)} \right) \approx V\beta |\Delta|^2 \left(\frac{1}{g} - \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\epsilon \nu \frac{1 - 2n_F(\epsilon)}{2\epsilon} \right) \\ &\approx V\beta |\Delta|^2 \left(\frac{1}{g} - \int_T^{\omega_D} d\epsilon \nu \frac{1}{\epsilon} \right) = V\beta \left(\frac{1}{g} - \nu \log(\beta\omega_D) \right) |\Delta|^2. \end{aligned} \quad (5.71)$$

这里，在第一个约等号中我们回忆起模型(5.63)是个低能理论，因此将对动量的积分改写成在费米面附近的能量积分，引入费米面附近的态密度 ν 和截断 ω_D ，这一近似使得系统出现了粒子-空穴对称性。在第二个约等号中，我们观察到 $1 - 2n_F(\epsilon)$ 在 $\epsilon \gg T$ 处约等于 1；在 $\epsilon \ll T$ 处约等于 0，因此可以看出对积分在小 ϵ 的截断。计算最后给出 $a = \frac{1}{g} - \nu \log(\beta\omega_D)$ 。这一 Δ 场二次型项的修正也可以利用自能的费曼图计算得到：

$$\text{费曼图} = \frac{1}{\beta V} \sum_{n, \mathbf{k}} G_0(\mathbf{p}, \omega_n) G_0(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, -\omega_n + \omega_m). \quad (5.72)$$

将 ω_m 和 \mathbf{q} 设为 0，我们就得到了(5.70)中的第二项。

我们看到，在低温极限 $\beta \rightarrow \infty$ 下，有 $a < 0$ ，预示配对场出现非零的真空值，系统发生对称性自发破缺。我们可以利用 $a = 0$ 确定发生超导相变的临界温度 T_c ，结果为

$$T_c = \omega_D \exp\left(-\frac{1}{g\nu}\right). \quad (5.73)$$

有趣的是，结果表明对于任意小的 g ，系统都可以在足够低温下进入超导态。物理上，这是由于无相互作用的费米面对于吸引相互作用有不稳定性——被称为 **Cooper** 不稳定性。回顾我们在量子力学课程中的知识，我们知道在三维，在球势阱中的粒子 ($\epsilon_k = k^2/2$) 存在束缚态需要势阱深度超过一个临界值，然而在二维任意小的吸引势都存在束缚态。这是由于在三维系统的态密度为 $\sqrt{\epsilon}$ ，在低能极限下趋于 0；而在二维，态密度为常数。如果我们转而考虑在费米面上加入两个粒子，让他们形成束缚态，这时粒子的动量都应该大于 k_F ，因此低能下态密度近似为 ν ，类似于二维系统的情况。因此，对于任意弱的吸引相互作用，费米面上的两个粒子可以形成束缚态来降低系统能量——系统基态则存在大量的束缚态“分子”。

练习 5.8 Cooper 问题 我们可以利用变分波函数方法直接估计费米面上一个电子对的基态。考虑波函数

$$|\text{Cooper}\rangle = \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \varphi_{|\mathbf{k}|} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger |\text{FS}\rangle. \quad (5.74)$$

利用变分法求解(5.63)式对应哈密顿量的本征态。证明系统对于任意小 g 都存在束缚态。

5.3.3 能隙方程与费米子谱

在平均场的最低阶，我们忽略配对场的涨落部分。这样，我们就可以通过对(5.68)求导计算出 Δ 场的真空期望值 Δ_0 。极值方程给出

$$0 = \left. \frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta \Delta} \right|_{\Delta = \Delta_0} \rightarrow \frac{1}{\beta V} \sum_{n, \mathbf{k}} \frac{\Delta_0}{\omega_n^2 + (\epsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_0|^2} = \frac{\Delta_0}{g}. \quad (5.75)$$

我们将会看到， Δ_0 对应与费米子激发谱的能隙，因此这一方程被称为能隙方程 (gap equation)。我们引入 $\lambda_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + |\Delta_0|^2}$ ，利用 Matsubara 求和技巧，上述方程可以写成 $\Delta_0 = 0$ 或者

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - 2n_F(\lambda_k)}{2\lambda_k} \approx \nu \int_0^{\omega_D} d\epsilon \frac{\tanh(\beta\lambda(\epsilon)/2)}{\lambda(\epsilon)}. \quad (5.76)$$

我们以零温极限为例，这时有 $\tanh(\beta\lambda(\epsilon)/2) = 1$ 。直接积分容易得到

$$\frac{1}{g\nu} = |\Delta_0| \sinh^{-1}(\omega_D/|\Delta_0|). \quad (5.77)$$

在 $g \ll 1$ 的极限下，我们就得到

$$|\Delta_0| = \frac{\omega_D}{\sinh(1/g\nu)} \approx 2\omega_D \exp\left(-\frac{1}{g\nu}\right). \quad (5.78)$$

和临界温度(5.73)进行对比，我们就得到 BCS 理论中零温下能隙与临界温度的关系 $|\Delta_0(T=0)| = 2T_c$ 。这一关系可以用来确定超导体是 BCS 超导体。

在确定系统的能隙 Δ_0 之后，我们可以研究配对后费米子的能谱性质。我们选取 $\Delta_0 > 0$ ，费米子的二次型哈密顿量写成

$$S = \sum_{n,\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) & \psi_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\omega_n + \epsilon_k - \mu & \Delta_0 \\ \Delta_0 & -i\omega_n - \epsilon_k + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) \\ \bar{\psi}_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (5.79)$$

将矩阵求逆，我们就得到频率空间的格林函数矩阵

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}, \omega_n) &= \left\langle \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) & \psi_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) \psi_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \\ \bar{\psi}_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \bar{\psi}_\uparrow(\mathbf{k}, \omega_n) & \bar{\psi}_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \psi_\downarrow(-\mathbf{k}, -\omega_n) \end{pmatrix} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\omega_n^2 + \lambda_k^2} \begin{pmatrix} -i\omega_n - \epsilon_k + \mu & -\Delta_0 \\ -\Delta_0 & -i\omega_n + \epsilon_k - \mu \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.80)$$

容易看到，格林函数在 $i\omega_n = \pm\lambda_k$ 处存在极点，因此 $\lambda_k = \sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta_0^2}$ 正是系统的激发能。在远离费米面处 $|\epsilon_k - \mu| \gg \Delta_0$ ，这一激发能趋近于无相互作用费米面的粒子/空穴激发；激发能在费米面上达到最小值 $\lambda_k = \Delta_0 > 0$ ，因此系统的费米子激发存在能隙。当然，因为系统发生了对称性自发破缺，我们知道 Goldstone 定理保证系统的激发本身不该存在能隙（不考虑电磁场的部分），这一无能隙的激发存在于 Δ 场的涨落中，不能由费米子算符直接激发。

我们还可以计算发生凝聚后费米子的占据数。利用虚时间格林函数，我们有

$$n_k = -\frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n 0^+} G_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_k - \mu}{\lambda_k} \right) + \frac{1}{e^{\beta\lambda} + 1} \frac{\epsilon_k - \mu}{\lambda_k}. \quad (5.81)$$

首先我们容易验证这一结果在 $\Delta_0 \rightarrow 0$ 时回到标准的费米分布 $n_F(\epsilon_k - \mu)$ ——这是由于这一极限下 $\lambda_k = |\epsilon_k - \mu|$ 。有限的配对导致费米子占据数被展宽，即使在零温 $\beta \rightarrow \infty$ 系统也不存在费米面，因此不是费米液体。在零温下，费米子的分布函数宽度为 $\Delta_0(T=0)$ ，其形状类似于相变温度附近费米子的有限温分布函数。

5.3.4 零电阻与 Meissner 效应

到目前为止，我们还没看出发生配对后的系统是一个超导体。超导体有两个最重要的判据：零电阻和 Meissner 效应——这一小节中，我们就来验证系统具有这些性质。我们已经知道费米子部分有能隙，因此系统的低能性质应该主要来自于配对场的涨落。因此，我们应该首先讨论其有效作用量的形式。

由于系统出现了对称性自发破缺，我们知道最重要的激发就是 Goldstone 模式，对应于配对场相位的涨落 $\Delta(\mathbf{r}, \tau) = \Delta_0 e^{2i\theta(\mathbf{r}, \tau)}$ 。我们有很多方式可以确定 $\theta(\mathbf{r}, \tau)$ 对应的有效作用量的形式，最简单的就是通过(5.69)式与玻色子作用量(5.42)或者(5.48)的类比，猜测出相位场涨落应该对应作用量

$$S_{\text{eff}} = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2} [c_1 (\partial_\tau \theta)^2 + c_2 (\nabla \theta)^2]. \quad (5.82)$$

事实上，假设系统具有平移对称性，这也是包含相位场 $\theta(\mathbf{r}, \tau)$ 最低阶导数的作用量的一般形式。这里， $(\nabla \theta)^2$ 描述了相位的非均匀性对系统能量的修正，其系数 c_2 一般被称为超流密度 ρ_s 。另一方面，参考(2.70)式，我们发现相位涨落的时间导数 ∂_τ 与化学势 μ 有着相似的地位，都直接耦合到系统的粒子数。因此， $(\partial_\tau \theta)^2$ 的一项可以看成是 $\delta F = -c_1 \delta \mu^2 / 2$ ，暗示 c_1 对应系统的压缩率 $\kappa = \partial_\mu n$ 。

零电阻与 Meissner 效应都是系统对于电磁场的相应。因此，我们需要在(5.82)中引入额外的电磁场矢势 \mathbf{A} 。在原始作用量中，这就对应于将正则动量 $-i\nabla$ 带换为运动学动量 $-i\nabla - \mathbf{A}$ ：

$$\mathcal{Z} = \int D\psi \exp \left(- \int d\tau d\mathbf{r} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma (\partial_\tau - \mu - i\phi) \psi_\sigma + \frac{(i\nabla - \mathbf{A}) \bar{\psi}_\sigma (-i\nabla - \mathbf{A}) \psi_\sigma}{2} - g \bar{\psi}_\uparrow \bar{\psi}_\downarrow \psi_\downarrow \psi_\uparrow \right] \right). \quad (5.83)$$

这样，系统具有规范对称性 $\psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \rightarrow e^{i\Lambda(\mathbf{r}, \tau)} \psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau)$ ， $\mathbf{A}(\mathbf{r}, \tau) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}, \tau) + \nabla \Lambda(\mathbf{r}, \tau)$ 且 $\phi(\mathbf{r}, \tau) \rightarrow \phi(\mathbf{r}, \tau) + \partial_\tau \Lambda(\mathbf{r}, \tau)$ 。在利用 Hubbard-Stratonovich 变换引入配对场之后，规范对称性还要求 $\Delta(\mathbf{r}, \tau) \rightarrow e^{2i\Lambda(\mathbf{r}, \tau)} \Delta(\mathbf{r}, \tau)$ 。利用相位场，我们可以将这一规范变换写作 $\theta(\mathbf{r}, \tau) \rightarrow \theta(\mathbf{r}, \tau) + \Lambda(\mathbf{r}, \tau)$ 。要求有效作用量和规范对称性一致，我们就得到

$$S_{\text{eff}}[A] = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2} [\kappa (\partial_\tau \theta - \phi)^2 + \rho_s (\nabla \theta - \mathbf{A})^2]. \quad (5.84)$$

首先我们按照3.4.1节中的方法计算系统的电导率。我们仍然首先在虚时间中进行计算，然后解析延拓到实时间。我们选取 $\phi = 0$ 的规范，系统的电流对应于

$$\langle J^x \rangle = - \frac{\delta S}{\delta A^x} = \rho_s (\langle \partial_x \theta \rangle_{A^x} - A^x). \quad (5.85)$$

进一步对 A^x 求导，我们就得到频率空间的表达式

$$\frac{\langle J^x(\mathbf{q}, \omega_n) \rangle}{A^x(\mathbf{q}, \omega_n)} = \rho_s^2 \langle \partial_x \theta(\mathbf{q}, \omega_n) \partial_x \theta(-\mathbf{q}, -\omega_n) \rangle - \rho_s = \frac{\rho_s^2 \mathbf{q}^2}{\kappa \omega_n^2 + \rho_s \mathbf{q}^2} - \rho_s. \quad (5.86)$$

容易验证，对于任意 \mathbf{q} ，都有 $\langle J^x(\mathbf{q}, 0) \rangle = 0$ 。这是由于流守恒的 Wald 恒等式要求 $q_x \langle J^x(\mathbf{q}, \omega_n) \rangle = i\omega_n \langle n(\mathbf{q}, \omega_n) \rangle$ 。我们关心的是直流电导，在解析延拓后得到

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{i\omega} \frac{\langle \hat{J}^x(\omega) \rangle}{A^x(\omega)} = i \frac{\rho_s}{\omega + i0^+}, \quad \text{Re}[\sigma(\omega)] = \rho_s \delta(\omega). \quad (5.87)$$

我们看到在零频率极限下系统的电导率发散，对应电阻率为零——这就说明了系统出现了零电阻现象。和 Drude 公式对比，我们也可以看到结果正好对应于衰变速率 $\Gamma \rightarrow 0$ 的极限。

我们接下来解释系统的 Meissner 效应。为了方便，我们选取另一个常用的规范：对于每个 $\theta(\mathbf{r}, \tau)$ 的构型，我

们通过规范变换 $\Lambda(\mathbf{r}, \tau) = \theta(\mathbf{r}, \tau)$, 使得 θ 的项完全被削掉。这时, 我们就得到

$$S_{\text{eff}}[A] = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2} [\kappa\phi^2 + \rho_s \mathbf{A}^2]. \quad (5.88)$$

这一变换有深刻的物理结果: 1. θ 场可以通过规范变换消掉表明它是冗余的, 并非是一个物理自由度; 因此, 在我们考虑将系统耦合到电磁场后, **Goldstone** 粒子不再存在; 2. $S_{\text{eff}}[A]$ 现在变成了电磁场势函数的二次型, 对照传统的 **Klein-Gordan** 方程, 这一项说明在超导体内部电磁场/光子获得了质量。这一现象被称为 **Higgs** 机制, 也是标准模型中质量的来源。一般来说, 在有平移对称性的系统中, 运动方程的解为平面波。例如对于 **Klein-Gordan** 方程 $\partial_t^2 \phi - \nabla^2 \phi + m^2 \phi = 0$, 解为

$$\phi(x, t) = e^{ikx - i\omega_k t}, \quad \omega_k = \sqrt{k^2 + m^2} \geq m. \quad (5.89)$$

另一方面, 假设我们要考虑零频率的解, 由于它不能满足色散关系, 因此解对应于指数增大或减小:

$$\phi(x, t) = A_1 e^{-\kappa x} + A_2 e^{\kappa x}, \quad \kappa = m. \quad (5.90)$$

这正是超导体中 **Meissner** 效应的来源: 我们考虑一个在 $x > 0$ 处半无穷大的超导体, $x < 0$ 处则对应真空。考虑在 $x < 0$ 加上一个均匀的静磁场 $\mathbf{B}(x < 0) = B\hat{y}$, 这就对应于真空中 $k = 0$ 的平面波解。另一方面, 在 $x > 0$ 电磁场获得质量, 不存在零频率的平面波。因此我们预计 $\mathbf{B}(x > 0) = B\hat{y}e^{-\kappa x}$, 其中 $\kappa = \sqrt{\rho_s}$ 由质量所决定。因此, 远离边界后, 超导体内部磁场为零, 超导体具有完全抗磁性, 即 **Meissner** 效应。

🔥 **练习 5.9 Meissner 效应** 加入原始的 **Maxwell** 项后, 电磁场的完整作用量写作

$$S[A] = \int d\tau d\mathbf{r} \frac{1}{2} [\kappa\phi^2 + \rho_s \mathbf{A}^2] + \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (5.91)$$

请对这一作用量进行变分, 推导出 \mathbf{A} 满足的运动方程, 直接计算验证上述 **Meissner** 效应。

5.4 电荷密度波与自旋密度波

除了超导/超流, 实际系统还会出现其他各种新奇的长程序。在本章的最后, 我们介绍一下固体材料和原子气体中都经常出现的电荷/自旋密度波。我们考虑电荷场与自旋场

$$n(\mathbf{r}, \tau) = \sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau), \quad \mathbf{s}(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \bar{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}, \tau). \quad (5.92)$$

当系统具有平移不变性, 密度场的期望值应为常数。如果在计算中发现

$$\langle n(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \text{Re} [c_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}] \quad (5.93)$$

我们则称系统出现了电荷密度波 (CDW)，平移对称性被破缺。对于通常的格点模型，系统哈密顿量只有离散的平移对称性，因此不会出现 Goldstone 模式。我们也可以在动量空间将电荷密度波的出现条件表示成对于某个非零的 \mathbf{q} 有 $\langle n(\mathbf{q}, \tau) \rangle \neq 0$ 。类似于超导序参量可以看成两个电子的束缚态，电荷密度波的序参量可以看成总动量非零的电子空穴对的束缚态。对于自旋密度波 (SDW)，我们有

$$\langle \mathbf{s}(\mathbf{r}, \tau) \rangle = \text{Re} [s_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}]. \quad (5.94)$$

如果系统具有 $SU(2)$ 的自旋转动对称性，自旋波破缺了自旋转动对称性和平移对称性，因此会存在自旋对应的 Goldstone 模式。我们也可以将这个条件写成 $\langle \mathbf{s}(\mathbf{q}, \tau) \rangle \neq 0$ 。事实上，也有一些系统，配对场 $\Delta(\mathbf{r}, \tau)$ 出现空间方向的周期震荡，这时我们称系统出现了配对密度波 (PDW)。

我们以 Hubbard 模型为例讨论 CDW 和 SDW 如何出现。对于 Hubbard 的相互作用，我们可以将其分解成

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r},\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{r},\downarrow} = \sum_{\mathbf{r}} \frac{U}{4} n_{\mathbf{r}}^2 - U (\hat{s}_{\mathbf{r}}^z)^2. \quad (5.95)$$

对于 $U > 0$ ，我们看到第二项的希望通过 $\langle \hat{s}_{\mathbf{r}}^z \rangle \neq 0$ 使系统能量降低，说明同一格点上的排斥相互作用希望系统出现磁性序——SDW。类似的，第一项说明电荷的涨落在 $U < 0$ 可以带来能量的降低：例如在半填充下，均匀分布对应的相互作用能为 $NU/4$ ；而如果系统一半格点占据数为 $1/2 + \delta$ ，另一半占据数为 $1/2 - \delta$ ，相互作用能则变成 $NU/4 + NU\delta^2$ 。因此同一格点上的吸引相互作用倾向于形成 CDW。

我们同样可以用路径积分的方法得到相同的结果。以 $U > 0$ 为例，按照对于超导问题的讨论，我们利用 Hubbard-Stratonovich 变换引入辅助场

$$\mathcal{Z} = \int D\psi Ds Dc \exp \left(- \int d\tau \sum_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\sigma} (\partial_{\tau} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mu) \psi_{\sigma} - ic_{\mathbf{r}} \bar{\psi}_{\mathbf{r},\sigma} \psi_{\mathbf{r},\sigma} - s_{\mathbf{r}} \sigma \bar{\psi}_{\mathbf{r},\sigma} \psi_{\mathbf{r},\sigma} + \frac{c_{\mathbf{r}}^2}{U} + \frac{s_{\mathbf{r}}^2}{U} \right] \right). \quad (5.96)$$

我们将费米子积掉，就可以得到对 $c_{\mathbf{r}}$ 和 $s_{\mathbf{r}}$ 二次型部分的修正。类似 4.3.1.2 小节中的讨论，修正对应的项正是密度-密度关联函数，结果可以写作

$$S_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \sum_{m, \mathbf{q}} \left(\left[\frac{1}{U} + 2\Pi(\mathbf{q}, \omega_m) \right] c(\mathbf{q}, \omega_m) c(-\mathbf{q}, -\omega_m) + \left[\frac{1}{U} - 2\Pi(\mathbf{q}, \omega_m) \right] s(\mathbf{q}, \omega_m) s(-\mathbf{q}, -\omega_m) \right). \quad (5.97)$$

这里，我们引入了

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega_m) = -\frac{1}{\beta V} \sum_n \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \omega_n) G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega_n + \omega_m) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - n_F(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mu)}{i\omega_m + \epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}. \quad (5.98)$$

假设系统会出现电荷/自旋密度波，按照之前的讨论，我们将二次型的系数 $\frac{1}{U} \pm 2\Pi(\mathbf{q}, \omega_m)$ 在 $\omega_m = 0$ 附近展开，其零阶项的符号决定是否出现对应的长程序。容易看出，

$$\Pi(\mathbf{q}, 0) = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - n_F(\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mu)}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} > 0. \quad (5.99)$$

因此，对于 $U > 0$ ，密度场 c 的二次型系数总是正的，系统不会出现电荷密度波；而自旋场 s 的二次型系数可正可负，可能会出现自旋密度波。一般来说，系统的序往往会出现在系数 $1/U - 2\Pi(\mathbf{q}, 0)$ 最小的动量 \mathbf{q} 上，具体取值依赖于填充数。有趣的是，低极限下，极小化 $1/U - 2\Pi(\mathbf{q}, 0)$ 的过程可以有一个几何图像：如果我们希望

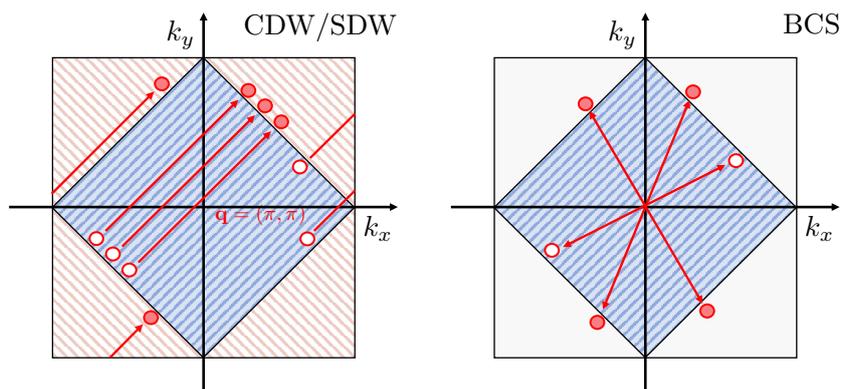


图 5.1: 半填充费米 Hubbard 模型中的费米面嵌套: 左图对应 CDW/SDW, 蓝色区域为原始被填充区域, 红色为平移 $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ 后在第一布里渊区内的被填充区域, 平移前后费米面完全重合; 右图对应配对动量为零的 BCS 超导。

$\Pi(\mathbf{q}, 0)$ 尽可能大, 就需要分母的 $\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ 尽可能小, 即 \mathbf{k} 处单粒子能量和 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 处单粒子能量很接近; 同时分子要求 \mathbf{k} 和 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ 中只有一个态被占据。因此, 我们可以先在布里渊区中画出费米面的形状, 将其平移 \mathbf{q} 矢量后与原始图形画在一起, 并调节 \mathbf{q} 使得新的费米面与原来的费米面有尽量大的重叠, 同时新费米面与旧费米面“内”“外”相交换。作为一个极限情况, 平移某个 \mathbf{q} 后新的费米面可能和旧的费米面完全重合, 这时我们称系统出现了费米面嵌套 (nesting)。

发生费米面嵌套后, 响应函数 $\Pi(\mathbf{q}, 0)$ 在零温下会发生对数发散, 导致任意小的 U 都能引发 SDW。以二维正方晶格半填充情况为例, 色散关系为 $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2 \cos k_x - 2 \cos k_y$, 如图 5.1 所示, 系统在半填充极限 $\mu = 0$ 时会发生动量为 $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ 的费米面嵌套。我们将对动量 \mathbf{k} 的积分改写成费米面附近对能量的积分, 就得到

$$\Pi(\mathbf{q}, 0) \approx \nu \int_{-\Lambda}^{\Lambda} d\epsilon \frac{\tanh(\beta\epsilon/2)}{2\epsilon} \approx \nu \log(\beta\Lambda). \quad (5.100)$$

这里 $\Lambda \sim O(1)$ 来自于我们将态密度近似成了常数。这与 (5.71) 式中的结果很接近, 因此, 发生费米面嵌套的系统在相互作用下是不稳定的——无穷小的相互作用就能让系统出现 SDW 序。事实上, BCS 超导理论也可以看出一种费米面嵌套: 超导中发生的是两个粒子配对, 和 CDW/SDW 相比差一个粒子-空穴变换。因此我们希望的是发生配对的两个粒子具有相同的能量。对于有时间反演对称性的系统, \mathbf{k} 动量的粒子与 $-\mathbf{k}$ 动量的粒子能量总是一致的, 因此总动量为 0 的配对总会发生费米面嵌套 (nesting)。

还需要指出的是, 假设系统中有多个序都可能出现, 我们则需要考虑所有可能的序参量, 推导耦合着的能隙方程, 自洽求解从而确定能量最低的态。当然, 由于忽略了量子涨落, 平均场的结果并不总是正确的。例如: 在二维有限温度的系统中, Mermin-Wagner 定理保证 SU(2) 自旋对称性不会破缺, 而平均场方法在有限温度仍然会预言有限温度存在反铁磁相。因此, 我们对于平均场预测的相图应该额外小心, 最好还是与更加严格的数值模拟相互佐证。最后, 费米子系统中还存在着自旋液体、分数量子霍尔效应等等更加新奇的相, 这些新奇相仍然可以用平均场方法给出一定的理解, 然而这时我们需要先对费米子算符进行一些变换, 然后再用本章中介绍的方法进行处理, 有兴趣的同学请参考 Fradkin 的教材。

练习 5.10 半填充 Hubbard 模型的反铁磁 请依照对 BCS 理论的分析推导排斥相互作用 Hubbard 模型中的能隙方程, 并确定平均场理论中发生反铁磁相变的临界温度。

第 6 章 重整化群与临界现象

内容提要

- 实空间重整化群
- 动量空间重整化群
- 临界指数
- 非线性 sigma 模型

6.1 截断与有效模型的能标

在之前的两章中,我们已经熟悉了量子场论中的微扰计算,现在我们来回顾一下微扰修正的基本形式。在(4.51)式中我们计算了散射顶点的修正。简单起见,让我们关注于其动量依赖,顶点函数的修正形如

$$\Gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{k}) = -g + \#g^2 \ln\left(\frac{4k^2}{\Lambda^2}\right) + o(g^2). \quad (6.1)$$

这个结果说明假如我们关心的是 $|\mathbf{k}| \ll \Lambda$ 的低能散射,圈图修正的贡献中包含一个巨大的因子 $\ln(k/\Lambda)$, 因此是十分重要的。反之,如果我们关心的是 $k \sim \Lambda$ 的散射过程,这一因子是一个 $O(1)$ 的系数,导致圈图的贡献很小。基于这一观察,我们可以将 Λ 看成有效理论的能标——理论中的原始参数 g 描述的是动量大约为 Λ 的粒子之间的散射振幅。类似的结果也出现在我们对超导问题的计算中: 在(5.71)式中我们发现配对场的二次项系数收到修正后变为

$$a = \frac{1}{g} - \nu \log\left(\frac{\omega_D}{T}\right). \quad (6.2)$$

我们可以将第二项看成对相互作用参数 $1/g$ 的修正, ω_D 对应于截断 Λ 。这一结果说明在温度 $T \sim \Lambda$ 时,吸引相互作用的强度为原始参数 g ; 当降低温度 $T \ll \Lambda$ 的时候,相互作用需要进行修正,等效的吸引相互作用变成 $g' = a^{-1}$, 远大于高温下的吸引相互作用强度,因此系统会被相互作用主导,导致形成配对。

在我们之前计算中,我们给定了一个很大的截断 Λ , 并通过圈图计算低能下修正后的散射振幅。上述讨论启发我们考虑另一个方法: 我们也可以直接在感兴趣的能量尺度(往往是低能极限)下写出系统的有效理论,这时哈密顿量中的参数已经正确的描述了在相应能标下的散射振幅; 然后我们试图建立低能下的有效理论和原始理论中参数的联系——这便是重整化群方法。

6.2 实空间重整化群

我们现以一维经典 Ising 模型为例介绍重整化群方法的思路。其配分函数如(2.17)式:

$$\mathcal{Z} = \prod_n \left(\sum_{\sigma_n = \pm 1} e^{\beta J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}} \right). \quad (6.3)$$

在练习2.2中我们已经知道了周期边界条件的一维经典 Ising 模型可以写成单个量子自旋的配分函数，因此是严格可解的。这里我们先给出这一严格结果：我们可以将配分函数形式化的写成矩阵的乘积：

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \prod_n \left(\sum_{\sigma_n = \pm 1} \right) \dots e^{\beta J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}} e^{\beta J \sum_n \sigma_{n+1} \sigma_{n+2}} \dots \\ &= \prod_n \left(\sum_{\sigma_n = \pm 1} \right) \dots T_{\sigma_n \sigma_{n+1}} T_{\sigma_{n+1} \sigma_{n+2}} \dots = \text{tr}[T^N]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

这里，我们定义了转移矩阵 $T_{\sigma_n \sigma_{n+1}} = e^{\beta J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}}$ 。引入 $u = e^{-\beta J}$ ，转移矩阵可以显式表达成

$$T = \begin{pmatrix} u^{-1} & u \\ u & u^{-1} \end{pmatrix}, \quad (6.5)$$

其本征值为 $\lambda_{\pm} = u^{-1} \pm u$ 。因此，容易得出 $\mathcal{Z} = \lambda_+^N + \lambda_-^N$ ；在热力学极限下第二项可以被忽略，因此得到 $\mathcal{Z} = \lambda_+^N$ ，对应自由能为

$$F = -\beta^{-1} \ln \mathcal{Z} = -N\beta^{-1} \ln(u + u^{-1}) = -N\beta^{-1} \ln(2 \cosh(\beta J)) \quad (6.6)$$

容易看出，这一自由能是 β 的解析函数，因此系统在有限温度不发生热力学相变，总处于顺磁相。

接下来，我们试着用重整化群的方法重新得到这一结论。原始的微观模型描述的是每个格点之间的相互作用，而我们希望得到的是系统在低能极限/大尺度下的等效相互作用强度。由于 Ising 模型在实空间易于求解，我们采用实空间的自旋集团 (block spin) 重整化方法。在这一方法中，我们在每一步将相邻的几个自旋打包成一个大自旋，然后推导出大自旋间的等效相互作用强度。这样，模型对应的空间尺度就增大了两倍；不断重复这一步骤我们就得到的大尺度下系统的等效相互作用强度。类似的实空间重整化群方法还被用于多体局域化 (MBL) 问题。对于我们考虑的经典 Ising 模型，这一过程非常简单：将两个自旋打包就是在计算 T^N 时将转移矩阵两两相乘，即定义

$$T' = T^2 = \begin{pmatrix} u^2 + u^{-2} & 2 \\ 2 & u^2 + u^{-2} \end{pmatrix} \equiv C(u) \begin{pmatrix} u'^{-1} & u' \\ u' & u'^{-1} \end{pmatrix}, \quad u' = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{u^2 + u^{-2}}}. \quad (6.7)$$

这时，我们有 $\mathcal{Z} = \text{tr}[T'^{\frac{N}{2}}]$ 。 $C(u)$ 是一个整体的因子，不对应于系统的耦合强度，因此并不重要。新的耦合强度 J' 的信息包含在 u' 之中。如果我们将这一变换继续下去，对应的就是不断对 u 变量进行函数变换 $f(u) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{u^2 + u^{-2}}}$ 。因此，系统的性质就取决于函数 $f(u)$ 的性质。在进行无穷多步的变换后，有效模型中的 u 常常趋于函数 $f(u)$ 的不动点 u^* ，满足 $u^* = f(u^*)$ 。函数包含两个不动点，分别在 $u^* = 0$ 和 $u^* = 1$ 。 $u^* = 0$ 的极限对应零温 $\beta J \rightarrow \infty$ ，系统严格处于铁磁态； $u^* = 1$ 的极限对应于无穷高温 $\beta J = 0$ ，系统处于顺磁态。

如果我们从某个有限温度的微观模型出发，初始值 $0 < u < 1$ 。这时，需要研究系统在函数变换下如何演化。我们可以研究两个不动点附近的行为：在 $u^* = 0$ 附近，我们可以把函数对 u 泰勒展开，结果得到

$$u' = f(u) \approx \sqrt{2}u. \quad (6.8)$$

因此，在 n 次变换后 u 的取值按照 $2^{n/2}$ 指数增大，不断远离不动点——我们将这样的不动点称为排斥的。与之

相对，如果我们在 $u = 1$ 附近进行泰勒展开，就得到

$$1 - u' = (1 - u)^2. \quad (6.9)$$

在多次变换下， u 逐渐接近 $u^* = 1$ ，不动点是吸引的。因此，对于任意初始条件在 $0 < u < 1$ 的有限温 Ising 模型，我们预期在不断向低能变换的过程中，有效模型的参数逐渐趋于 $u^* = 1$ ，对应相互作用强度 $\beta J_{\text{eff}} = 0$ 。因此系统总是处于顺磁相，这与严格解的结论是一致的。

6.3 动量空间重整化群 - ϕ^4 理论

对于格点模型，实空间重整化群的思想非常直观；然而对于连续极限下的场论模型，在动量空间进行计算更加方便。在这一节，我们就来介绍动量空间的重整化群方法。我们考虑的例子还是最简单的 ϕ^4 模型：

$$\mathcal{Z} = \int D\phi e^{-S_\Lambda[\phi]} = \int D\phi \exp\left(-\int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{g}{4!}\phi^4\right]\right). \quad (6.10)$$

这里我们考虑 d 维空间——物理上这一模型对应 d 维经典 Ising 模型的有限温配分函数，或是 $d - 1$ 维的量子 Ising 模型的零温配分函数。最初，模型定义在某个截断 Λ 处，即系统中所有粒子的动量不能超过 Λ 。按照重整化群的思想，我们需要推导出截断为 $\Lambda' < \Lambda$ 的有效作用量，从而推断系统的低能性质。事实上，这一过程和辅助场有效作用量的推导(5.68)非常类似：对 ϕ 场的泛函积分可以写作

$$\int D\phi = \int \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} d\phi_{\mathbf{k}} = \int \left(\prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} d\phi_{\mathbf{k}} \right) \left(\prod_{\Lambda' < |\mathbf{k}| < \Lambda} d\phi_{\mathbf{k}} \right), \quad (6.11)$$

因此，定义在 Λ' 能量处的有效作用量 $S_{\Lambda'}[\phi]$ 可以通过积掉动量大于 Λ' 的模式得到

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda} d\phi_{\mathbf{k}} \left[\int \prod_{\Lambda' < |\mathbf{k}| < \Lambda} d\phi_{\mathbf{k}} e^{-S_\Lambda[\phi]} \right] = \int \prod_{|\mathbf{k}| < \Lambda'} d\phi_{\mathbf{k}} e^{-S_{\Lambda'}[\phi]}. \quad (6.12)$$

然后我们就可以对比 $S_{\Lambda'}[\phi]$ 和 $S_\Lambda[\phi]$ 中各项的系数推导出类似(6.7)的参数变换关系，从而分析系统的低能性质。方便起见，我们可以引入快变场 $\phi_f(\mathbf{x})$ 和慢变场 $\phi_s(\mathbf{x})$ ，分别包含 $\Lambda' < |\mathbf{k}| < \Lambda$ 和 $|\mathbf{k}| < \Lambda'$ 的模式。原始的标量场可以表示成 $\phi(\mathbf{x}) = \phi_f(\mathbf{x}) + \phi_s(\mathbf{x})$ 。这时，我们可以将原始作用量写作

$$S_\Lambda[\phi] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi_s)^2 + \frac{r}{2}\phi_s^2 + \frac{1}{2}(\nabla\phi_f)^2 + \frac{r}{2}\phi_f^2 + \frac{g}{4!}(\phi_s + \phi_f)^4 \right]. \quad (6.13)$$

这里，我们利用了 ϕ_s 和 ϕ_f 动量不同的事实从而扔掉了形如 $\phi_s\phi_f$ 的项。接下来，我们就能利用费曼图的方法将 ϕ_f 场积掉，从而得到 ϕ_s 场的有效作用量。

6.3.1 树图贡献

在最低阶，我们可以忽略在相互作用中 ϕ_s 和 ϕ_f 的耦合。在这一近似下，将 ϕ_f 积掉等价于直接忽略作用量中 ϕ_f 的项。我们就得到零阶的有效作用量

$$S_{\Lambda'}[\phi] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi_s)^2 + \frac{r}{2}\phi_s^2 + \frac{g}{4!}\phi_s^4 \right]. \quad (6.14)$$

这一计算是不是就说明系统的相互作用强度并没有发生改变呢？答案是否定的，我们其实应该先将作用量中的参数组合成无量纲的量。例如，当我们问相互作用是变强还是变弱的时候，我们其实应该问相互作用能相对于动能有没有变得更大。在 $S_{\Lambda}[\phi]$ 中，系统的能标是 Λ ，因此无量纲的耦合参数写作

$$\tilde{r}(\Lambda) = \frac{r}{\Lambda^2}, \quad \tilde{g}(\Lambda) = \frac{g}{\Lambda^{4-d}}. \quad (6.15)$$

这里，我们利用了 g 的量纲为 $[k]^{\Delta_g} = [k]^{4-d}$ 。类似的，我们可以定义在 Λ' 处的无量纲参数 $\tilde{r}(\Lambda')$ 和 $\tilde{g}(\Lambda')$ 。由于 r 和 g 没有发生变换，我们就得到

$$\tilde{r}(\Lambda') = \frac{\Lambda^2}{\Lambda'^2} \tilde{r}(\Lambda), \quad \tilde{g}(\Lambda') = \frac{\Lambda^{\Delta_g}}{\Lambda'^{\Delta_g}} \tilde{g}(\Lambda). \quad (6.16)$$

首先，在我们降低系统能标的同时，质量项 $\tilde{r}(\Lambda)$ 随着 Λ 减小逐渐增大。这和我们的直观理解是一致的：在自由格林函数的形式为 $(k^2 + r)^{-1}$ ，当动量 k 减小可以看成 r 在增大。另一方面，我们发现对于一般的相互作用参数，在重整化群的演化下如何变化依赖于参数的维度 Δ_g ：当 $\Delta_g > 0$ ， $\tilde{g}(\Lambda)$ 随着 Λ 的减小逐渐增大，我们称作用量中对应的项是 **relevant** 的，这些项在低能下非常重要；当 $\Delta_g < 0$ ， $\tilde{g}(\Lambda)$ 随着 Λ 的减小而减小，我们称作用量中对应的项是 **irrelevant** 的，这些项在低能下可以忽略；如果我们恰好有 $\Delta_g = 0$ ，则称对应的项是 **marginal** 的——确定这些项在重整化群下的行为有时需要考虑更高阶圈图的修正。我们还可以通过考虑无穷小的动量壳 $\Lambda' = \Lambda - d\Lambda$ 把上述关系写成微分方程的形式，这就给出：

$$\frac{d\tilde{r}}{d \ln \Lambda} = -2\tilde{r}, \quad \frac{d\tilde{g}}{d \ln \Lambda} = -\Delta_g \tilde{g}. \quad (6.17)$$

对照4.2.2小节中的讨论，我们发现 **irrelevant** 的项正好对应于不可重整的项。因此，如果我们希望写出低能下的理论，我们总可以只保留 $\Delta_g \geq 0$ 的 **relevant** 的项，这时模型正好是可重整的。事实上，这就是我们写出有效理论的一般原则：我们首先确定系统的低能自由度和对应的对称性，然后写出满足对称性要求的所有 **relevant/marginal** 项，然后对理论进行分析。对于 **Ising** 模型，我们假设它具有 Z_2 对称性 $\phi \rightarrow -\phi$ ，可空间转动对称性，这时在 $d = 4$ ， ϕ^4 理论就包括所有低能下重要的项。这一讨论同时说明了低能物理的“普适性” (**universality**)，系统的低能性质往往只依赖于系统的对称性。

这一小节的分析忽略了不同动量模式的相互作用，因此只有当相互作用 g 时 **irrelevant** 的时候才是成立的。这就要求 $\Delta_g < 0$ ，即 $d > 4$ 。在下一小节我们将会看到，在 $d = 4$ 的时候圈图修正导致相互作用 \tilde{g} 也变成 **irrelevant** 的，因此 $d \geq 4$ 都有类似的物理现象。这时，系统中最重要参量只有 \tilde{r} ，当我们不断通过重整化群降低 Λ 时，如果初始的 $\tilde{r} > 0$ ，在低能下则会流向 $\tilde{r} \rightarrow \infty$ ，对应顺磁相；如果初始 $\tilde{r} < 0$ ，在低能下则会流向 $\tilde{r} \rightarrow -\infty$ ，系统出现对称性自发破缺，为铁磁相； $\tilde{r} = 0$ 对应一个不稳定的不动点，被称为高斯不动点。不论在哪个相，系统

都存在能隙，其大小正比于 $|\sqrt{r}|$ (对于 $\tilde{r} < 0$ ，可以参考(5.4))，因此实空间关联函数的形式可以近似为

$$G(\mathbf{x}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \frac{1}{k^2 + c|r|} \propto e^{-\sqrt{c|r|}|\mathbf{x}|} \equiv e^{-|\mathbf{x}|/\xi}. \quad (6.18)$$

我们称 $\xi \propto 1/\sqrt{|r|} \propto 1/\sqrt{|\tilde{r}|}$ 为系统的关联长度。发生二级相变处 $\tilde{r} = 0$ ，对应的关联长度发散。更一般的来说，在二级相变附近会有 $\xi \propto |\tilde{r}|^{-\nu}$ ，其中 ν 被称为临界指数，这里取值为 $\nu = 1/2$ 。事实上， ξ 和 \tilde{r} 的关系可以直接从重整化群方程(6.17)中看出。由于只有 \tilde{r} 是低能下重要的参数，利用量纲分析可以将关联函数写成

$$G(\mathbf{x}) = \frac{1}{\mathbf{x}^{d-2}} f(\tilde{r}(\Lambda), \mathbf{x}\Lambda). \quad (6.19)$$

另一方面，定义在 Λ' 的理论应该给出相同的结果。因此，我们知道 $f(\tilde{r}(\Lambda), \mathbf{x}\Lambda) = f(\tilde{r}(\Lambda'), \mathbf{x}\Lambda')$ ，暗示

$$\left(\frac{\partial}{\partial \ln \Lambda} + \frac{d\tilde{r}}{d \ln \Lambda} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \right) f(\tilde{r}, \mathbf{x}\Lambda) = 0, \quad f(\tilde{r}, \mathbf{x}\Lambda) = g(\tilde{r}\Lambda^2 x^2). \quad (6.20)$$

因此，系统的关联长度正比于 $1/\sqrt{|\tilde{r}|}$ 。形如上式的重整化群方程被称为 Callan-Symanzik 方程。

除了联系参数与关联长度的 ν 之外，人们还定义了一系列其他的临界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ 。这些临界指数都可以利用 relevant 的耦合参数在重整化群下的行为得到，我们再来看一个例子：我们可以计算系统的比热 $C_V = T\partial_T^2 F$ 。在二级相变附近，这一二阶导数会出现奇异行为 $C_V \sim |T - T_c|^{-\alpha}$ 。为了计算 α ，我们考虑无量纲化的自由能 $\beta F = \Lambda^D u(\tilde{r}(\Lambda))$ 。这时，再次利用不同能标下自由能的自洽性，我们就得到 $\beta F = C_0 \tilde{r}^{d/2} \Lambda^d$ 。我们应该认为在相变点附近 r 就对应于 $T - T_c$ ，因此求导得到 $C_v \propto \tilde{r}^{d/2-2}$ ，即 $\alpha = 2 - d/2 = 2 - \nu d$ 。这一联系 α 与 ν 的等式被称为 Josephson 关系。

练习 6.1 重整化群的另一种等价表述 在得到(6.14)后，我们不直接将其与 $S_{\Lambda'}[\phi]$ 对比的原因也可以解释成：由于两个理论有不同的截断，因此无法直接对比出哪个理论有更强的相互作用。因此，动量空间重整化群也可以采用另一种方案：我们将(6.14)式进行坐标变换， $\mathbf{x} \rightarrow \Lambda \mathbf{x}'/\Lambda'$ ，这样对应动量的变换为 $\mathbf{k} \rightarrow \Lambda' \mathbf{k}'/\Lambda$ ，导致新的动量截断又回到 Λ 处。请推导：

1. 为了保持动能项 $(\nabla\phi)^2$ 系数不变，我们需要对 ϕ 场也引入变换。请给出这一变换的形式。
2. 请验证变换后作用量中各项系数与(6.16)式一致——我们用不同的方法得到了相同结果。

6.3.2 圈图修正

对于 $d < 3$ ，随着能量降低相互作用逐渐增强，因此我们不应该忽略相互作用的贡献。这一小节中我们利用圈图计算计入相互作用对重整化群流的修正。在(6.13)中积掉 ϕ_f 带来的就是对 ϕ_s 场散射顶点的修正 $\delta\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ 和自能贡献 $\Sigma(\mathbf{k})$ 。一般说来，我们可以将结果形式化的写成

$$S_{\Lambda'}[\phi_s] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2} [1 - \Sigma''(\mathbf{0})] (\nabla\phi_s)^2 + \frac{1}{2} [\tilde{r}(\Lambda)\Lambda^2 - \Sigma(\mathbf{0})] \phi_s^2 + \frac{1}{4!} (\tilde{g}(\Lambda)\Lambda^{\Delta_g} - \delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})) \phi_s^4 \right] \quad (6.21)$$

这里，只保留了所有 relevant 或者 marginal 的项：例如对于散射顶点的修正 $\delta\Gamma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3)$ ，我们将其对于动量 \mathbf{k}_i 进行泰勒展开，展开的高阶项则对应形如 $(\nabla\phi)^2 \phi^2$ 的 irrelevant 项。因此我们只保留了 $\delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$ 的贡献。我

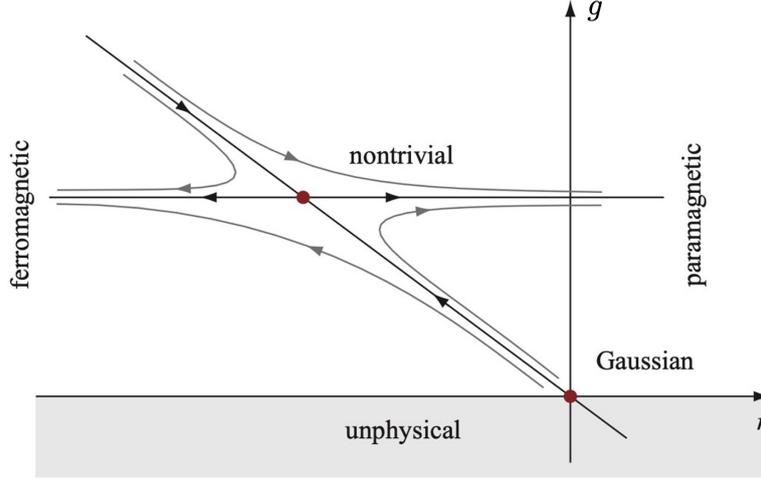


图 6.1: ϕ^4 理论在 $d < 4$ 的重整化群流示意图, 摘自教材 [Condensed Matter Field Theory]。

们将这一结果和定义在 Λ' 能量的有效模型进行对比

$$S_{\Lambda'}[\phi] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{\tilde{r}(\Lambda')\Lambda'^2}{2}\phi^2 + \frac{\tilde{g}(\Lambda')\Lambda'^{\Delta_g}}{4!}\phi^4 \right]. \quad (6.22)$$

首先我们看到动能项 $(\nabla\phi)^2$ 的系数就是不同的——这源于我们曾经见过的场强重整化, 它说明在 Λ 能标下引入的 ϕ_s 和在 Λ' 下的有效模型中的场还差一个比例系数。因此, 我们先对(6.23)作变换 $\phi_s = \phi/\sqrt{1 - \Sigma''(\mathbf{0})}$:

$$S_{\Lambda'}[\phi] = \int d\mathbf{x} \left[\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2} \frac{\tilde{r}(\Lambda)\Lambda^2 - \Sigma(\mathbf{0})}{1 - \Sigma''(\mathbf{0})} \phi^2 + \frac{1}{4!} \frac{\tilde{g}(\Lambda)\Lambda^{\Delta_g} - \delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})}{(1 - \Sigma''(\mathbf{0}))^2} \phi^4 \right]. \quad (6.23)$$

这样, 我们就得到了圈图修正后的重整化关系

$$\tilde{r}(\Lambda')\Lambda'^2 = \frac{\tilde{r}(\Lambda)\Lambda^2 - \Sigma(\mathbf{0})}{1 - \Sigma''(\mathbf{0})}, \quad \tilde{g}(\Lambda')\Lambda'^{\Delta_g} = \frac{\tilde{g}(\Lambda)\Lambda^{\Delta_g} - \delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})}{(1 - \Sigma''(\mathbf{0}))^2}. \quad (6.24)$$

一般来说, 比较方便的方式是考虑 $\Lambda' = \Lambda - d\Lambda$ 。引入无量纲的圈图贡献 $\Sigma(\mathbf{0}) = \Lambda^2\sigma_0 d \ln \Lambda$, $\Sigma''(\mathbf{0}) = \sigma_1 d \ln \Lambda$, 和 $\delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}) = g_1 \Lambda^{\Delta_g} d \ln \Lambda$, 我们就得到(6.17)式的相互作用修正

$$\frac{d\tilde{r}}{d \ln \Lambda} = -2\tilde{r} - \sigma_1 \tilde{r} + \sigma_0, \quad \frac{d\tilde{g}}{d \ln \Lambda} = -\Delta_g \tilde{g} - 2\sigma_1 \tilde{g} + g_1. \quad (6.25)$$

接下来, 我们直接计算 ϕ^4 理论的一圈图修正。事实上, 相关的图已经在4.2.2小节给出。这里, 所有内线来自于 ϕ_f , 因此动量在无穷小的球壳上, 导致计算会变得非常简单。对于自能部分, 我们有

$$\Sigma(\mathbf{k}) = \frac{\text{loop}}{\mathbf{k}} = -\frac{g}{2} \int_{d\Lambda} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} = -\frac{\tilde{g}\Lambda^{4-d}}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-1} d\Lambda}{\Lambda^2(1 + \tilde{r})} \approx -\frac{\tilde{g}}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} (1 - \tilde{r}) \Lambda^2 d \ln \Lambda. \quad (6.26)$$

这里, 我们假设所有耦合参数都很小, 保留到了参数的平方阶。结果给出

$$\sigma_1 = 0, \quad \sigma_0 = -\frac{\tilde{g}}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} (1 - \tilde{r}). \quad (6.27)$$

接下来，我们考虑相互作用顶点的修正。由于我们只关心 $\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$ ，我们直接将所有外动量设为零，结果为

$$\delta\Gamma(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} = \frac{3g^2}{2} \int_{d\Lambda} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + r)^2} \approx \frac{3\tilde{g}^2}{2} \Lambda^{\Delta_g} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} d\ln \Lambda. \quad (6.28)$$

这一计算给出

$$g_1 = \frac{3\tilde{g}^2}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d}. \quad (6.29)$$

将结果带入到(6.25)中得到

$$\frac{d\tilde{r}}{d\ln \Lambda} = -2\tilde{r} - \frac{1}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} (1 - \tilde{r})\tilde{g}, \quad \frac{d\tilde{g}}{d\ln \Lambda} = -\Delta_g \tilde{g} + \frac{3}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \tilde{g}^2. \quad (6.30)$$

这一微分方程可以用图示的方法来理解：我们将每个点上的梯度 $(-d\tilde{r}/d\ln \Lambda, -d\tilde{g}/d\ln \Lambda)$ 用一个矢量表示出来，就可以通过箭头方向判断参数在重整化群下的变化。结果如图6.1所示，共包含两个不动点。我们看到在 $\tilde{r}^* = 0$, $\tilde{g}^* = 0$ 处的不动点是排斥的，这与上一小节的分析相吻合。容易计算得到另一个不动点在 $\tilde{r}^* = \Delta_g/(\Delta_g - 6)$, $\tilde{g}^* = 2\Delta_g(2\pi)^d/3\Omega_d$ 处，这个新的不动点非常类似 $d \geq 4$ 的高斯不动点：对于一个方向是吸引的，对于另一个方向是排斥的——这正好对应于二阶相变的行为。如果系统在低能下有效模型参数流动到 $\tilde{r} = \pm\infty$ ，系统就处于顺磁/铁磁相。值得注意的是，在考虑了相互作用的修正后，顺磁/铁磁相并不对应于原始模型中 $r > 0$ 或者 $r < 0$ ，而是需要由 r 和 g 的取值共同确定。例如，对于 $r < 0$ ，只要 g 足够大，系统仍然处于顺磁相。

最后，我们来确定系统中的临界指数 ν 。我们将(6.30)式在 \tilde{r}^* 和 \tilde{g}^* 附近进行展开，结果为

$$\frac{d}{d\ln \Lambda} \begin{pmatrix} \delta\tilde{r} \\ \delta\tilde{g} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 + \frac{\Delta_g}{3} & \frac{3}{\Delta_g - 6} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \\ 0 & \Delta_g \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\tilde{r} \\ \delta\tilde{g} \end{pmatrix}. \quad (6.31)$$

这一矩阵的本征值即为对角元 $-2 + \frac{\Delta_g}{3}$ 和 Δ_g 。在 $d < 4$ ，只有第一个本征值为负数，在低能下决定了系统的相。因此，按照上一小节的思路，容易计算得到：

$$\nu = \frac{1}{2 - \Delta_g/3}, \quad \alpha = 2 + \frac{3d}{6 - \Delta_g}, \quad (1\text{-loop}). \quad (6.32)$$